

Formulação do MEC 2D para Análise de Propriedades de Materiais Compósitos

Barbirato, João Carlos Cordeiro¹, Souza, Vandeyberg Nogueira¹, Melo, Cássia Vanessa Albuquerque de¹

¹Centro de Tecnologia/Universidade Federal de Alagoas, Campus A.C. Simões – Av. Lourival de Melo Mota, S/N, 57072-900, Cidade Universitária, Maceió, Alagoas, Brasil. jccb@lccv.ufal.br, vandeyberg.souza@gmail.com, cassiamelo@ctec.ufal.br

Resumo. Os materiais compósitos são amplamente conhecidos, com advento desde meados do século XX, sendo uma classe de materiais capaz de combinar propriedades específicas em virtude da variedade de materiais combinados em compósitos multifásicos engenheirados. Na atualidade, cada vez mais pesquisas são amplamente desenvolvidas nas áreas experimental e computacional. Assim, havendo a união de dois ou mais constituintes que apresentam características mecânicas distintas em cada uma das fases, os materiais compósitos podem promover melhores propriedades para o produto final, seja resistência, flexibilidade ou durabilidade. Dentre esses materiais, destacam-se os concretos autoadensáveis e os reforçados por fibras, ambos, basicamente, constituído por duas fases: a matriz (contínua) e a fase dispersa (características geométricas das partículas ou fibras). Neste contexto, o presente trabalho apresenta uma formulação usando o Método dos Elementos de Contorno 2D (MEC) com as adequações pertinentes à análise de propriedades efetivas de materiais com inclusões em diferentes fases. O domínio é subdividido em regiões com propriedades físicas diferentes, compartilhando, em suas interfaces, deslocamentos e tensões. A formulação permite a definição de inclusões em um elemento representativo de volume, de maneira a observar o comportamento da peça estrutural. A utilização destes procedimentos proporciona a análise de materiais compósitos a fim de estabelecer propriedades físicas efetivas. O código computacional foi elaborado na plataforma OCTAVE de código aberto, com discretizações feitas por elemento linear descontínuo. Exemplos são apresentados para demonstrar a adequação da formulação e do código propostos.

Palavras chaves: Método dos Elementos de Contorno; Material Cimentício com Inclusões de Fibra; Análise 2D de Propriedades Efetivas de Compósito.

1. Introdução

As propriedades dos materiais podem ser determinadas através de métodos analíticos, experimentais ou computacionais. Entretanto, os métodos analíticos são limitados por materiais com microestrutura simplificada e com baixa densidade de heterogeneidade (Milton [1]). Desta forma, nesses problemas, recorre-se a métodos experimentais ou computacionais para obtenção de soluções aproximadas. Entre os métodos numéricos de análise mais populares estão o Método dos Elementos Finitos (MEF), Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Elementos de Contorno (MEC), Fedelinski *et al.* [2].

O Método dos Elementos de Contorno (MEC) foi apresentado como alternativa aos métodos de discretização do domínio. Sua formulação permite que o problema seja resolvido discretizando-se apenas o contorno da região estudada, Brebbia [3]. Do emprego do MEC, as equações diferenciais que regem o problema físico são transformadas em equações integrais de contorno, levadas, portanto, para a superfície do problema. Essas integrais são resolvidas em pontos específicos dos elementos discretizados no contorno. Para tanto, o MEC se utiliza de função de peso, conhecida como solução fundamental, que deve atender à equação diferencial do problema, mas

com condições de contorno bem particulares que tornam a sua obtenção possível. A formulação tradicional do MEC permite a discretização do domínio em sub-regiões que podem ser, portanto, compostas de materiais com características físicas diferentes. Outras técnicas foram estudadas em Eischen e Torquato [4], Liu [5] e Gurram *et al.* [6]

Dentro da visão de empregar o método em materiais com mais de uma fase (sub-regiões), é possível trabalhar com elementos representativos de volume de materiais, por assim dizer, compósitos. Um deles, bastante utilizado nas estruturas civis é o concreto, que será utilizado neste trabalho em exemplos a serem processados.

Para tanto, faz-se necessário compreender os parâmetros físicos que regem o desempenho do concreto, sendo um material compósito com partículas grandes. Por isso, a dosagem dos componentes desse tipo de material é imprescindível de ser considerada. A fase matriz (cimento, areia e água), geralmente contínua, trata-se de um material cerâmico que envolve a fase dispersa, bastante influenciada pela relação água/cimento. A matriz interfere na trabalhabilidade do material, influenciando na viscosidade e na resistência à compressão axial, devendo ser dada atenção ao controle desse parâmetro para que forneça a trabalhabilidade necessária e a resistência requerida em projeto, Sedran [7]. A fase dispersa refere-se à composição granulométrica, cuja condição de dispersão granulométrica das partículas de agregados tem de ser controlada, justamente pelo papel importante dos distintos tamanhos dos grãos. Em um sentido amplo e macroscópico, a interligação dessas duas fases de naturezas distintas deve promover o atendimento das propriedades de espalhamento (repercutindo na estabilidade da mistura e no bombeamento) e nas propriedades mecânicas (resistência (f_{ck}) e módulo de elasticidade estático do concreto). O comportamento mecânico e a durabilidade do concreto são influenciados não apenas pela afinidade dos agregados e a matriz de argamassa de cimento, mas também pela zona de transição entre essas duas fases (MEHTA; MONTEIRO [8]). Ensaios de resistência à compressão e determinação do módulo de elasticidade estático do concreto são importantes para a garantia dos requisitos de projeto, devendo os materiais atuarem em conjunto para responder aos esforços físicos do meio. A determinação dessa última propriedade pode ser medida experimentalmente, em função de f_{ck} dos corpos-de-prova, ou estimada a partir de valores estabelecidos pela NBR 6118 (ABNT [9]).

Nesse contexto, o presente trabalho tem o objetivo de desenvolver uma rotina computacional para a análise de propriedades de materiais compósitos, por meio do Método dos Elementos de Contorno, em sua formulação bidimensional para materiais elástico-lineares e com discretização do contorno por elementos lineares descontínuos. Para isto, é utilizado um Elemento de Volume Representativo (EVR), variando-se a fração de volume de inclusões dentro da matriz e verificando-se as deformações e tensões em uma seção de topo do compósito. Os resultados obtidos são comparados com os resultados publicados na literatura especializada.

2. Formulação do MEC para problemas elásticos lineares 2D

2.1 Equação diferencial que rege o problema em estudo

Os materiais utilizados em engenharia deformam-se com a atuação de agentes externos, como carregamentos, pressão, efeito do tempo e de curta de duração. É de grande interesse da engenharia estrutural o estudo de uma variedade de materiais quanto à resistência, fratura e fadiga, assim como suas relações de comportamento sob esses efeitos. Para solução de problemas de mecânica dos sólidos, faz-se necessário conhecer as equações de equilíbrio de forças, equações constitutivas e de compatibilidade de deslocamentos.

Considere-se um sólido elástico-linear bidimensional, homogêneo e isotrópico, definido pelo domínio Ω e seu contorno Γ , e suas equações diferenciais de equilíbrio ou equações de equilíbrio de forças do problema elástico, conforme eq. (1).

$$\sigma_{j,i,j} + b_i = 0, j = 1..2 \quad (1)$$

Considere-se, ainda, as condições de contorno para o problema elástico, escritas em função dos deslocamentos u e das forças de superfície p , conforme apresentado nas expressões (2).

$$\begin{aligned} u &= \bar{u}, \text{ em } \Gamma_1 \quad \text{e} \\ p &= \sigma \cdot n = \bar{p}, \text{ em } \Gamma_2. \end{aligned} \quad (2)$$

2.2 Equações Básicas

Para que as formulações do MEC fiquem completamente definidas, torna-se necessário o conhecimento prévio da solução de um problema padrão da área que se deseja analisar. A este problema dá-se o nome de "problema fundamental". Para a definição desse problema, considere-se Ω^* um domínio infinito cujo contorno é denotado por Γ^* . Na formulação apresentada a seguir, utiliza-se a solução fundamental de Kelvin, considerada a mais difundida e utilizada pelo meio técnico. As expressões de deslocamentos e forças de superfície para o problema de Kelvin são mostradas nas eq. (3) e eq. (4), respectivamente.

$$u_{ij}^* = \frac{1}{8\pi G(1-\nu)} \left[(3-4\nu) \ln\left(\frac{1}{r}\right) \delta_{ij} + r_{,i} r_{,j} \right]; \quad (3)$$

$$p_{ij}^* = -\frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left\{ \frac{\partial r}{\partial n} [(1-2\nu)\delta_{ij} + 2r_{,i} r_{,j}] + (1-2\nu)(n_i r_{,j} - n_j r_{,i}) \right\}, \quad (4)$$

nas quais, G é o módulo de elasticidade transversal e ν é coeficiente de Poisson. Ainda, δ_{ij} é a função delta de Kronecker, $r = \sqrt{r_i * r_i}$; $r_i = X_i(q) - X_i(s)$; $r_{,i} = \frac{r_i}{r}$.

A equação integral que rege o problema, portanto, passa a ser representada conforme a eq. (5).

$$c_{ij}(S)u_j(S) = - \int_{\Gamma} p_{ij}^*(S, Q) \cdot u_j(Q) \cdot d\Gamma(Q) \quad (5)$$

$$+ \int_{\Gamma} u_{ij}^*(S, Q) \cdot p_j(Q) \cdot d\Gamma(Q) + \int_{\Omega} u_{ij}^*(S, q) \cdot b_j(q) \cdot d\Omega(q).$$

3. Implementação numérica

Para a integração dos elementos de contorno, adota-se uma função de interpolação linear posicionada no interior do elemento. Neste trabalho, a aproximação escolhida foi a linear descontínua. A integração ocorre no próprio elemento, cujos parâmetros nodais são aproximados por duas funções lineares. É possível escrever as equações que determinam as variáveis incógnitas de deslocamento u_x e u_y e das forças P_x e P_y por meio da função de forma e das variáveis prescritas, conforme mostrado nas eq. (6) e eq. (7), respectivamente.

$$\begin{Bmatrix} u_1^1 \\ u_2^1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 & 0 & \phi_2 & 0 \\ 0 & \phi_1 & 0 & \phi_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U_1^1 \\ U_2^1 \\ U_1^2 \\ U_2^2 \end{Bmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{Bmatrix} p_1^1 \\ p_2^1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 & 0 & \phi_2 & 0 \\ 0 & \phi_1 & 0 & \phi_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} P_1^1 \\ P_2^1 \\ P_1^2 \\ P_2^2 \end{Bmatrix}. \quad (6 \text{ e } 7)$$

A posição dos nós dos elementos de contorno define se eles são contínuos, descontínuos ou mistos. As funções aproximadoras estão diretamente relacionadas com a posição dos pontos nodais do elemento. O elemento linear descontínuo, utilizado neste estudo, é aquele que considera os nós funcionais deslocados para o interior do mesmo, a partir do nó geométrico (nas extremidades do elemento). Assim, para dois elementos adjacentes, no mesmo nó geométrico, é possível a introdução do nó duplo para permitir a descontinuidade do valor de uma das variáveis entre os elementos.

A eq. (5) pode ser reescrita conforme apresentado na eq. (8), em função de valores nodais, definidos na discretização do contorno.

$$c_{lk}^i u_{lk}^i + \left(\int_{\Gamma} p_{lk}^* \cdot \phi \, d\Gamma \right) \cdot u_k^j = \left(\int_{\Gamma} u_{lk}^* \cdot \phi \, d\Gamma \right) \cdot p_k^j. \quad (8)$$

A eq. (8) pode, ainda, ser representada matricialmente na forma da eq. (9)

$$\mathbf{HU} = \mathbf{GP}. \quad (9)$$

Ao determinar os deslocamentos e forças para cada nó, nas duas direções, determinam-se as matrizes globais \mathbf{G} e \mathbf{H} que contém o núcleo das integrais p_{lk}^* e u_{lk}^* . Com as matrizes supracitadas e o vetor de valores prescritos, forma-se um sistema de equações lineares com variáveis incógnitas e prescritas. Ao resolver o sistema linear, determinam-se os valores incógnitos do contorno do problema, com os quais se pode determinar deslocamentos e

tensões em pontos internos no corpo. A aplicação das condições de contorno fornece o sistema de equações lineares conforme apresentado na eq. (10)

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B}. \quad (10)$$

O sistema da eq. (10), para elementos lineares descontínuos, possui $4n$ equações (n representando o número de elementos) e sua solução fornece os valores incógnitos de forças de superfície e deslocamentos.

Em casos em que o domínio é composto por vários subdomínios de materiais que apresentam características diferentes, a utilização de sub-regiões proporciona maior precisão a análise (WUTZOW [10]). Para tanto, é realizada a discretização do contorno de cada subdomínio homogêneo e, o equacionamento das ligações entre eles é imposto pelo equilíbrio de forças e pela compatibilidade de deslocamentos em todos os pontos de interface entre as sub-regiões, conforme se apresenta nas eq. (11) e eq. (12).

$$\{P\}^{1i} + \{P\}^{2i} = 0, \quad (11)$$

$$\{U\}^{1i} = \{U\}^{2i}. \quad (12)$$

Inicialmente, são geradas as matrizes $[G]$ e $[H]$, representativas de cada domínio independentemente, eq.(13).

$$\begin{bmatrix} [H]_{11} & [H]_{1i} \\ [H]_{i1} & [H]_{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{u\}^1 \\ \{u\}^{1i} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} [G]_{11} & [G]_{1i} \\ [G]_{i1} & [G]_{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{P\}^1 \\ \{P\}^{1i} \end{Bmatrix}. \quad (13)$$

Juntando-se os dois sistemas em um só e aplicando as condições de equilíbrio, de compatibilidade e as condições de contorno, é obtido um sistema geral para as duas sub-regiões analisadas, conforme está indicado na eq. (14).

$$\begin{bmatrix} [H]_{11}^1 & [H]_{1i}^1 & -[G]_{1j}^1 & [0] \\ [H]_{i1}^1 & [H]_{ii}^1 & -[G]_{ii}^1 & [0] \\ [0] & [H]_{ii}^2 & [G]_{ii}^2 & [H]_{i2}^2 \\ [0] & [H]_{2i}^2 & [G]_{2i}^2 & [H]_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{u\}^1 \\ \{u\}^{1i} \\ \{P\}^{1i} \\ \{u\}^2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} [G]_{11}^1 & [0] \\ [G]_{i1}^1 & [0] \\ [0] & [G]_{i2}^2 \\ [0] & [G]_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{P\}^1 \\ \{P\}^2 \end{Bmatrix}. \quad (14)$$

Para a eq. (14), pressupõe-se que as variáveis referentes à força e deslocamento nas interfaces são incógnitas. Portanto, reescrevendo-se o sistema de forma mais simplificada, obtém-se um sistema linear de equações, eq. (15), na qual $\{X\}$ representa o vetor de incógnitas.

$$[A]\{X\} = \{B\} \quad (15)$$

O procedimento supracitado pode ser executado para cada duas sub-regiões, sempre considerando como incógnitas as variáveis de forças e deslocamentos nas interfaces.

4. Aplicação

A seção transversal de um Elemento de Volume Representativo (EVR) de material compósito foi modelada. Na Tabela 1 estão apresentadas as propriedades da matriz e da inclusão do compósito.

Propriedade	Matriz	Inclusão
Coefficiente de Poisson	0,21	0,30
Módulo de Elasticidade (GPa)	26	207

Matriz e inclusões possuem seções transversais quadradas com cinco unidades e uma unidade comprimento, respectivamente. Cargas estáticas unitárias são aplicadas nas duas faces externas da matriz, na direção horizontal. A fração de inclusões dentro da matriz foi alterada conforme é apresentado na Fig. 1, verificando-se as tensões e deformações geradas no compósito em cada caso.

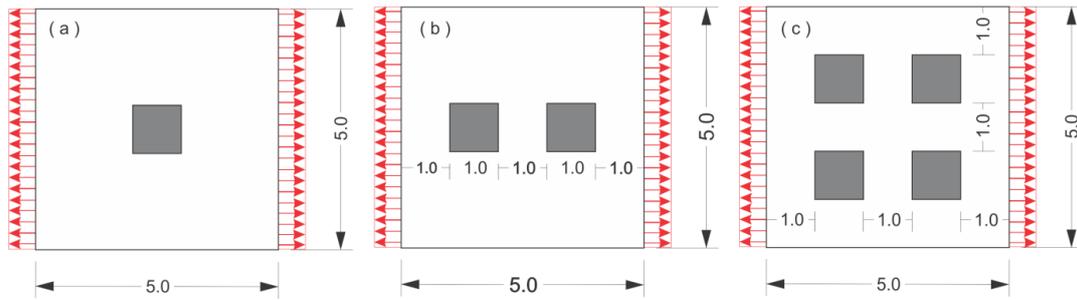


Figura 1. Seções transversais de compósito com fração de inclusão igual a: (a) 0,04, (b) 0,08 e (c) 0,16

Os resultados obtidos são apresentados na Fig. (2), para uma fração de inclusão de 0,04; na Fig. (3), para fração de 0,08; e, na Fig. (4), para a fração de 0,16.

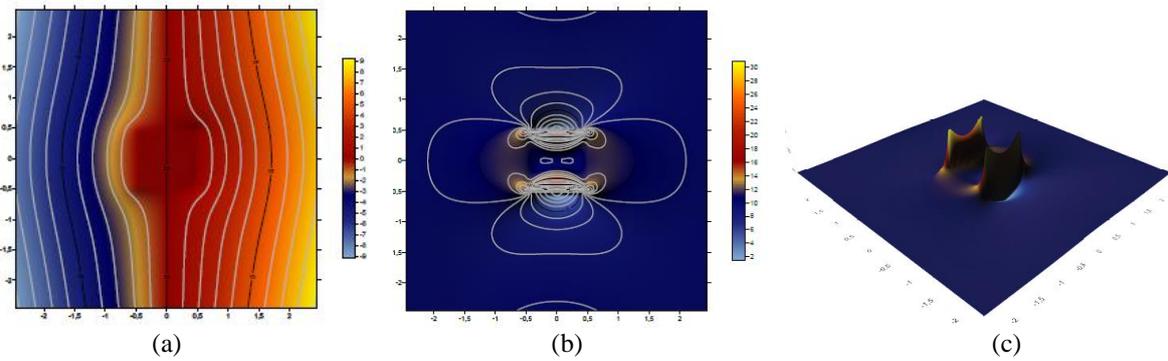


Figura 2. Compósito com 0,04 de fração de inclusão: (a) deformações; (b) tensões; e (c) superfície de tensões

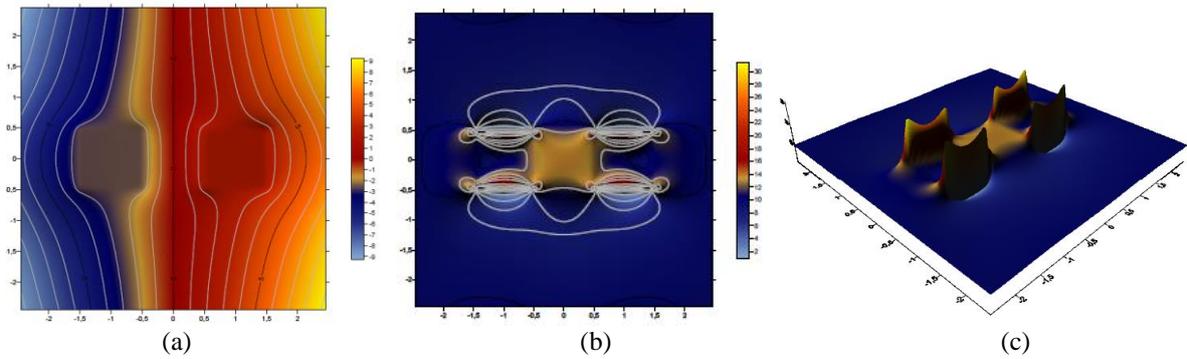


Figura 3. Compósito com 0,08 de fração de inclusão: (a) deformações; (b) tensões; e (c) superfície de tensões

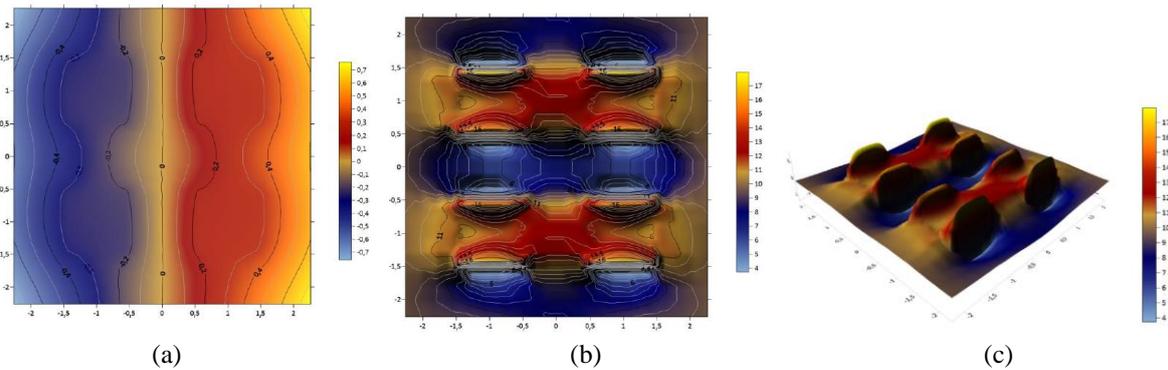


Figura 4. Compósito com 0,16 de fração de inclusão: (a) deformações; (b) tensões; e (c) superfície de tensões

Com os resultados obtidos para tensões e deformações nas seções transversais, calculou-se o módulo de elasticidade equivalente do material compósito, através da equação constitutiva da teoria da elasticidade, para cada fração de volume de inclusões. Os resultados foram comparados com os valores obtidos por meio do modelo analítico de Reuss e o modelo semi-empírico de Halpin-Tsai, encontrado em Ptaszny e Fedelinski [11]. O modelo de Reuss, baseado na regra das misturas, na qual os componentes sofrem a mesma tensão ($\sigma_{eq} = \sigma_m = \sigma_f$), determina o Módulo de Elasticidade Equivalente do compósito por meio da eq. (16).

$$E_{eq} = \frac{E_f E_m}{V_f E_m + (1 - V_f) E_f} \tag{16}$$

na qual, V_f : Fração volumétrica de inclusões; E_f : Módulo de elasticidade de inclusões; E_m : Módulo de elasticidade da matriz.

O modelo semi-empírico de Halpin-Tsai foi utilizado por Ptaszny e Fedelinski [11] para predição do módulo de elasticidade de compósito com diferentes frações de inclusões. A equação de Halpin-Tsai é apresentada na eq. (17).

$$E_{eq} = E_m \frac{1 + \zeta \eta V_f}{1 - \eta V_f} \tag{17}$$

na qual, $\zeta = 2 + 40V_f^{10}$ e $\eta = \frac{\frac{E_f}{E_m} - 1}{\frac{E_f}{E_m} + \zeta}$.

Os valores obtidos para o Módulo de Elasticidade Equivalente, por meio da formulação do MEC, do modelo analítico de Reuss e do modelo semi-empírico de Halpin-Tsai, são apresentados na Tab. 2 e plotados na Fig. 5, para melhor visualização e análise.

Tabela 2. Módulo de elasticidade equivalente (GPa) obtido por diferentes métodos

Fração de inclusões (V_f)	Analítico (Reuss)	Semi-Empírico (Halpin-Tsai)	MEC
0,04	26,94	28,24	27,80
0,08	27,95	30,62	30,58
0,16	30,23	35,82	34,21

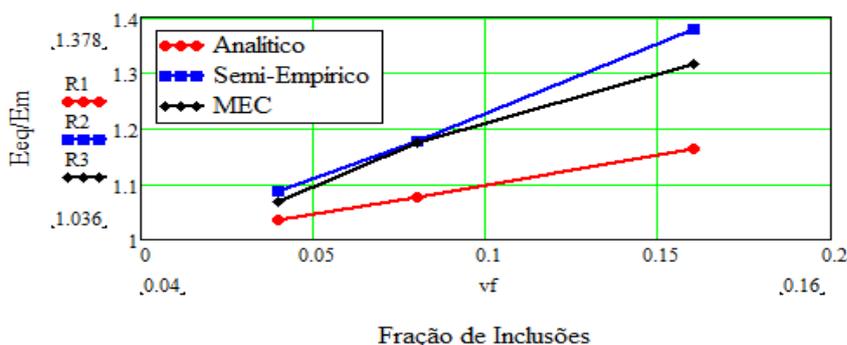


Figura 5. Módulo de elasticidade equivalente obtido por diferentes métodos

5. Conclusões

Os resultados mostram que cada fase constituinte do compósito contribui para as propriedades efetivas do compósito, sendo essa contribuição dependente das propriedades de cada fase e da fração volumétrica dos constituintes. Como esperado, o módulo de elasticidade equivalente do compósito apresentou um aumento expressivo com o aumento da fração de inclusões na matriz, visto que a inclusão possui módulo de elasticidade maior do que a matriz, absorvendo parte considerável da tensão aplicada. Os valores obtidos por meio da formulação proposta neste trabalho, apresentaram um erro de apenas 2% quando comparados com os valores obtidos através do modelo semi-empírico de Halpin-Tsai e um erro máximo de 15% quando comparado com o modelo analítico de Reuss. O Método dos Elementos de Contorno, em sua formulação clássica de subdomínios,

mostrou-se adequado para análise de materiais compósitos com fases distintas, no processamento de EVR. A ideia de setores das interfaces abrirem fratura pode ser considerada, acoplando-se ao algoritmo presente as rotinas para análise incremental e iterativa com dipolos de tensões, em continuação ao presente estudo.

Agradecimentos

Os autores agradecem a bolsa de iniciação científica, ofertada pelo Laboratório de Computação Científica e Visualização (LCCV/CTEC), fundamental como estímulo à introdução à pesquisa em engenharia. Igualmente, estende-se para a infraestrutura disponibilizada pelo LCCV/CTEC.

Declaração de autoria

Os autores confirmam que são os únicos responsáveis pela autoria deste trabalho, e que todo o material incluso é propriedade (e autoria) dos autores, ou tem a permissão dos proprietários para ser incluído.

Referências

- [1] G. W. Milton. 2004. *The theory of composites*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [2] P. Fedelinski; R. Gorski; T. Czyz; G. Dziatkiewicz; J. Ptaszny. Analysis of effective properties of materials by using the boundary element method. *Archives of Mechanics*. Warszawa, V. 66, n. 1, pp. 19-35. 2014.
- [3] C. A. Brebbia. *The boundary element method for engineers*, London, Pentech Press, 1978.
- [4] J. W. Eischen; S. Torquato. Determining elastic behavior of composites by the boundary element method. *J. App. Physic*, 7 (1), July 1993.
- [5] Y. J. Liu. A fast multipole boundary element method for 2D multi-domain elastostatic problems based on a dual BIE formulation. *Comput. Mech*, 42: 761-773. 2008.
- [6] S. P. Gurrum; J. H. Zhao; D. R. Edwards. Inclusion interaction and effective material properties in a particle-felled composite material system. *J. Mater. Sciences*, 46:101-107, 2011.
- [7] T. Sedran; F. De Larrard.; Optimization of self-compacting concrete thanks to packing model. *First international RILEM symposium on self-compacting concrete*, Rilem Publications, s.a.r.l., 1999: 321-332.
- [8] P. K. Mehta; P. J. M. Monteiro. *Concreto: microestrutura, propriedades e materiais*. 2ª edição. São Paulo, Instituto Brasileiro do Concreto (IBRACON), 2014, 751p.
- [9] ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *NBR 6118. Projetos de Estrutura de Concretos – Procedimentos*. São Paulo, 2014.
- [10] W. W. Wutzow. *Formulação do Método dos Elementos de Contorno para Análise de Chapas com Enrijecedores*. São Carlos, São Paulo: Universidade de São Paulo, 2003.
- [11] J. Ptaszny; P. Fedelinski. Numerical homogenization by using the fast multipole boundary element method. *Archives of civil and mechanical engineering*. Gliwice, V. 11, n. 1, p. 182-193. 2011.