



UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA – DEM CURSO DE BACHARELADO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

MODELAGEM NUMÉRICA PARA DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS DE MATERIAIS COMPÓSITOS INTELIGENTES CONSIDERANDO CONTATO IMPERFEITO

JOSÉ LUIS MEDEIROS THIESEN

JOINVILLE, SC 2018

JOSÉ LUÍS MEDEIROS THIESEN

MODELAGEM NUMÉRICA PARA DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS DE MATERIAIS COMPÓSITOS INTELIGENTES CONSIDERANDO CONTATO IMPERFEITO

Trabalho de conclusão apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica do Centro de Ciências Tecnológicas, da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo de Medeiros

JOINVILLE, SC 2018

JOSÉ LUÍS MEDEIROS THIESEN

MODELAGEM NUMÉRICA PARA DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS DE MATERIAIS COMPÓSITOS INTELIGENTES CONSIDERANDO CONTATO IMPERFEITO

Trabalho de conclusão de curso apresentado à disciplina Trabalho de Conclusão de Curso (TCC0001) do Curso de Engenharia Mecânica, do Centro de Ciências Tecnológicas, da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Banca Examinadora:			
Orientador: Reque Mula Prof. Dr. Ricardo de Medeiros UDESC/CCT			
Membros:			
Prof. Dr. Eduardo Lenz Cardoso			
UDESC/CCT			
Me. Luiz Fernando dos Santos Sotizà UDESC/CCT			

Joinville, 22 de junho de 2018.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Ricardo de Medeiros, pelo grande exemplo, por ter me concedido diversas oportunidades durante a graduação e pelos anos de orientação e discussão que me introduziram ao mundo acadêmico e a este trabalho.

Ao Professor Joel Martins Crichigno Filho pela licença do ABAQUSTM.

Aos meus amigos Matheus e Yuri, pela amizade que me proporcionou anos de alegria e descontração.

Em especial ao Matheus pelo companheirismo e motivação.

Aos demais colegas do Departamento de Engenharia Mecânica (UDESC/Joinville).

A Sandy, minha namorada, pela atenção e o amor que encantaram os meus dias nestes últimos anos, e pelos momentos que passamos juntos.

Ao Luiz Marcos, pelas críticas que me fizeram crescer, e por me apoiar.

Ao meu irmão Israel, que mesmo tendo saído mais cedo desta breve dimensão esteve sempre ao meu lado.

A minha irmã Indiara, que está sempre em meus pensamentos e me ensinou a viver.

Aos meus pais, José e Rita, por ser a fonte de amor e motivação que me mantiveram firme em meu caminho.

Aos Espíritos de Luz que estiveram sempre ao meu lado.

A Deus, por tudo.

RESUMO

Este trabalho visa empregar uma metodologia numérica para determinação das propriedades efetivas de materiais compósitos piezelétricos com interface imperfeita. Inicialmente, os conceitos de homogeneização de meios heterogêneos periódicos são descritos para a definição de um Volume Elementar Representativo (VER). Sendo que, VER representa a menor porção do domínio que representa as propriedades de cada fase do material. Desta forma, pode-se obter as propriedades efetivas do meio homogeneizado. Além disso, a hipótese de um contato perfeito entre as fases pode não aproximar o problema real de fabricação dos materiais compósitos reforçados por fibras ativas, onde encontram-se imperfeições químicas e físicas. Portanto, surge a necessidade de uma metodologia que estude a influência destas imperfeições nas propriedades efetivas do compósito em questão. Para isto, desenvolveu-se um modelo computacional via Método dos Elementos Finitos (MEF), cuja interface fibra-matriz é definida através de uma terceira fase. Degradando-se as propriedades desta fase, tem-se o comportamento do compósito sob contato imperfeito. Assim, através do MEF em conjunto com o conceito de célula unitária (VER) periódica, utilizou-se a Teoria de Homogeneização de Meios Periódicos para calcular as propriedades efetivas elásticas, dielétricas e piezelétricas do compósito. Resultados mostrando a influência da fração volumétrica de fibra, geometria da fibra e do contato imperfeito entre as regiões são discutidos e comparados com trabalhos da literatura. Assim, conclui-se que a metodologia numérica não é somente uma boa alternativa para o cálculo de coeficientes efetivos de compósitos com fibras ativas, mas também uma ferramenta para o projeto de estruturas com comportamento inteligente monitoradas por materiais piezelétricos.

Palavras-Chave: Compósitos piezelétricos, Coeficientes efetivos, Volume elementar representativo, Contato imperfeito, Modelagem por Elementos Finitos.

ABSTRACT

This work proposes a computational modeling to determine the effective properties of piezoelectric composite materials with an imperfect interface. Concepts of homogenization of periodic heterogeneous media are described to define a Representative Volume Element (RVE), the minor portion of the domain representing the properties of each phase of the whole material. The hypothesis of a perfect contact between phases may not describe the real problem of active fiber-reinforced composite material (AFC) manufacturing, where there are chemical and physical imperfection. This needs a methodology that helps researches to predict the influence of these imperfections on the elastic, piezoelectric and dielectric composite properties. For this, a computational model via Finite Element Method (FEM) is developed. Also, the fiber-matrix interface, a third phase, is defined. Degrading the interphase properties, the composite behavior under imperfect contact is studied. Using FEM with the concepts of a periodic RVE, Homogenization Theory of the Periodic Media is introduced, allowing to calculate elastic, dielectric and piezoelectric composite properties. Results showing the influence of volumetric fraction of fiber, fiber geometry and imperfect level of contact between phases are discussed and compared with literature. Therefore, the numerical methodology is not only a good alternative to evaluate the effective coefficients of active fiber composites but also a tool for the design of structures with smart behavior monitored by piezoelectric materials.

Keywords: Active fiber composite, Effective coefficients, Representative volume element, Imperfect contact, Finite Element Modeling.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Diferença de uma estrutura (a) centrossimétrica e (b) não centrossimétrica2
Figura 2.2 – Esquema ilustrando a dependência da simetria dos compósitos ativos com os grau
de anisotropia da matriz e da fibra2
Figura 2.3 – Amplificação da escala de uma célula base
Figura 2.4 – Volume Elementar Representativo
Figura 2.5 – Representação esquemática das fases do VER4
Figura 2.6 – Designação das faces do VER4
Figura 2.7 – Nomenclaturas encontradas na literatura para o sistema local de coordenadas en
materiais compósitos com fibras piezelétricas4
Figura 2.8 – Condições de contorno periódicas para o caso de cisalhamento puro no plano XX
4
Figura 3.1 – Fluxograma representando a metodologia científica utilizada4
Figura 3.2 – Modelo de célula unitária com arranjo quadrado com fibras de seção circular
quadrada4
Figura 3.3 – Problema local da primeira análise
Figura 3.4 – Problema local da segunda análise5
Figura 3.5 – Problema local da terceira análise
Figura 3.6 – Problema local da quarta análise
Figura 3.7 – Problema local da quinta análise5
Figura 3.8 – Problema local da sexta análise
Figura 3.9 – Células unitárias sujeitas a restrições adicionais5
Figura 4.1 – Análise de Convergência para o valor do módulo volumétrico
Figura 4.2 – Modelo em Elementos Finitos do Volume Elementar Representativo utilizado 6
Figura 4.3 – Resultados das análises para $c11eff$ e $c12eff$, para baixos ($Gi = 103Pa$)
intermediários ($Gi = 107Pa$) e altos ($Gi = 109Pa$) valores de rigidez d
interface
Figura 4.4 – Resultados das análises para $c44eff$, para baixos ($Gi = 103Pa$), intermediário
(Gi = 107Pa) e altos $(Gi = 109Pa)$ valores de rigidez da interface
Figura 4.5 – Módulo volumétrico transversal normalizado
Figura 4.6 – Módulo de Cisalhamento longitudinal normalizado

Figura 4.7 – Frações volumétricas de fibra utilizadas: 10%, 20%, 30%, 40%, 50% e 60%	69
Figura 4.8 – Resultados obtidos para segunda e sexta análise	70
Figura 4.9 – Comportamento de C11eff normalizado	71
Figura 4.10 – Comportamento de <i>C</i> 12 <i>eff</i> normalizado	71
Figura 4.11 – Comportamento de C13eff normalizado.	72
Figura 4.12 – Comportamento de <i>C</i> 33 <i>eff</i> normalizado	72
Figura 4.13 – Comportamento de C44 <i>eff</i> normalizado	73
Figura 4.14 – Comportamento de C66 <i>eff</i> normalizado	73
Figura 4.15 – Comportamento de <i>e</i> 15 <i>eff</i>	74
Figura 4.16 – Comportamento de <i>e</i> 13 <i>eff</i>	74
Figura 4.17 – Comportamento de e33eff.	75
Figura 4.18 – Comportamento de $\varepsilon 11 eff$ normalizado	75
Figura 4.19 – Comportamento de ε 33 <i>eff</i> normalizado	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Classes de simetria cristalina centrossimétricas e não-centrossimétricas prese	entes
na natureza	27
Tabela 3.1 – Condições de contorno e carregamentos adotados nas análises	59
Tabela 4.1 – Propriedades dos materiais da Matriz e da Fibra	62
Tabela 4.2 – Valores para zonas de estabilização, Presente Trabalho x Hashin (2002)	67
Tabela 4.3 – Parâmetros do material compósito utilizado	68

SUMÁRIO

1	INTRODU	ſÇÃO	
	1.1 MO	TIVAÇÃO	19
	1.2 OB.	ETIVOS	21
	1.3 EST	RUTURA DO TRABALHO	21
2	FUNDAM	ENTAÇÃO TEÓRICA	23
	2.1 PIE	ZELETRICIDADE	23
	2.1.1	Abordagem Termodinâmica	24
	2.1.2	Simetria Cristalina e Relação Constitutiva	27
	2.2 TEC	DRIA DA HOMOGENEIZAÇÃO	29
	2.3 FOF	RMULAÇÃO DO PROBLEMA	
	2.4 MÉ	TODO DOS ELEMENTOS FINÍTOS	
	2.4.1	Formulação Piezelétrica	
	2.4.2	Teorema das Médias	
	2.5 DET	FERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES EFETIVOS	
	2.5.1	Teorema das Médias	
	2.6 CO	NDIÇÕES DE CONTORNO APLICADAS AO VER	41
	2.7 AB	ORDAGENS CONSIDERANDO INTERFACE MATRIZ-FIBRA	44
3	METODO	LOGIA	47
	3.1 ME	TODOLOGIA CIENTÍFICA	47
	3.2 MO	DELAGEM COMPUTACIONAL	48
	3.2.1	Primeira Análise	49
	3.2.2	Segunda Análise	51
	3.2.3	Terceira Análise	52
	3.2.4	Quarta Análise	54
	3.2.5	Quinta Análise	55
	3.2.6	Sexta Análise	56
	3.2.7	Considerações Adicionais Acerca da Modelagem	58
4	APLICAÇ	ÕES E POTENCIALIDADES DA METODOLOGIA	61
	4.1 EST	UDO DE CASO I (VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA)	61
	4.1.1	Parâmetros Associados ao Material	62
	4.1.2	Modelo em Elementos Finitos	62

4.2 ESTUDO DE CASO II			
	4.2.1	Dados do Material	
	4.2.2	Modelo em Elementos Finitos	69
5 CONCLUSÕES			
6	5 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Com o desenvolvimento da engenharia mecânica, somado a necessidade de fabricação de componentes cada vez mais vantajosos, entre as décadas de 40 e 60 surgem os estudos relacionados a materiais compósitos. Constituídos por duas ou mais fases não miscíveis e com propriedades distintas, a manufatura destes materiais têm como objetivo sintetizar uma propriedade global a partir da combinação das propriedades de cada fase. Isto pode conferir aos materiais compósitos características adaptadas para cada tipo de aplicação. Por exemplo, em estruturas aeronáuticas, é desejada uma elevada resistência específica do material utilizado (relação peso x resistência). Na indústria naval, estruturas fabricadas em material compósito possuem as vantagens de não sofrerem corrosão, bom isolamento térmico e baixa frequência de manutenção (DANIEL; ISHAI, 2006).

Além de serem amplamente utilizados pelas suas propriedades estruturais em busca de alta performance, alguns materiais compósitos podem ser utilizados como parte de estruturas inteligentes. Ao sentir um estímulo externo de carga ou do próprio ambiente, são capazes de responder da maneira adequada. Um exemplo comum de materiais com esta possibilidade (*Smart Materials*) são os metais com memória de forma. No ano de 1932, o físico sueco Arno Ölander observou que uma liga de Ouro-Cádmio (AuCd), previamente deformada retornava a sua posição original quando submetida a uma elevação de temperatura (ÖLANDER, 1932). Porém apenas em 1971, no laboratório de artilharia naval nos EUA foram percebidas grandes recuperações de deformação em ligas de Níquel-Titânio (NiTi) (SHIMIZU; TADAKI, 1987).

Outro tipo comum de materiais com resposta inteligente são os piezelétricos, descobertos previamente, porém demonstrados pelos irmãos Jacques e Pierre Curie em 1880 (DROSSEL *et al.*, 2015). São conhecidos por terem um acoplamento eletromecânico, recebendo um estímulo elétrico como campo de entrada e uma deformação como campo de saída. Mais tarde foi descoberto o efeito piezelétrico inverso. Um exemplo de estrutura inteligente são os sistemas cromogênicos, que recebem um estímulo elétrico, óptico ou térmico, e respondem com uma mudança de cor (LAMPERT, 2004).

A utilização de estruturas de material compósito com fibras piezelétricas possibilita que a o conjunto possa sentir os esforços, amplificar e processar os dados a partir de algoritmos de controle, produzindo uma resposta adequada para a situação. Estes materiais vêm sendo amplamente utilizados em monitoramento de integridade estrutural em aeronaves, sendo utilizados para detecção de dano e supressão de vibrações, permitindo uma utilização otimizada da estrutura (DE MEDEIROS, 2012).

Em princípio, as propriedades mecânicas dos materiais compósitos eram definidas pelos métodos convencionais utilizados por materiais assumidos como lineares, elásticos, isotrópicos e homogêneos, tais como os metais. Logo, percebeu-se que deveriam receber considerações especiais por serem materiais fortemente heterogêneos e anisotrópicos. Devido a estas considerações especiais, metodologias foram estudadas ao longo das ultimas décadas para a determinação das propriedades elásticas de compósitos. Uma das abordagens é a chamada "Regra das Misturas", que define as propriedades do material a partir das propriedades e proporções da matriz e da fibra (KAW, 2006). Embora para alguns casos esta abordagem seja simples, não considera a hipótese de dano na interface fibra-matriz e a microestrutura do material estudado.

A partir da década de 70 foram desenvolvidos métodos de homogeneização capazes de prever as propriedades médias de meios contínuos, heterogêneos e periódicos, levando em conta a microestrutura do material (CASTILLERO *et al.*, 1998). Através deste método em conjunto com o método dos elementos finitos (MEF), pode-se modelar uma célula unitária periódica, representando as propriedades das n-fases do material composto, incluindo a interface. Desta forma, aplicando as condições de contorno adequadas é possível a determinação das propriedades efetivas do meio homogeneizado.

Na última década, pesquisadores desenvolveram métodos analíticos e numéricos para predizer o comportamento de materiais compósitos inteligentes com interface perfeita. Porém, através de experimentos é possível perceber que a hipótese de adesão perfeita entre a fibra e a matriz é uma idealização, levando a divergências nas soluções obtidas com a realidade. Trabalhos recentes de Tita *et al.* (2015) modelam a interface como sendo uma terceira fase do compósito, degradando suas propriedades para simular o contato imperfeito.

A metodologia utilizada neste trabalho é baseada no método dos elementos finitos junto a abordagem micromecânica baseada no Volume Elementar Representativo (VER), a fim de determinar as propriedades efetivas elétricas, dielétricas e piezelétricas de materiais compósitos ativos com interface imperfeita.

1.2 OBJETIVOS

Este trabalho visa determinar as propriedades efetivas de materiais compósitos reforçados por fibras ativas envolvidas em uma matriz não polarizada, a partir de um modelo computacional via método dos elementos finitos em conjunto com uma abordagem micromecânica baseada em conceitos de homogeneização a partir do volume elementar representativo (VER). O texto será dividido nos seguintes objetivos:

- Modelar computacionalmente o VER via método dos elementos finitos, seguindo-se para a solução encontrada das constantes elásticas, dielétricas e piezelétricas do tensor constitutivo de materiais compósitos reforçados por fibras piezelétricas.
- Avaliar e analisar a influência da fração volumétrica de fibra, geometria da fibra e do contato imperfeito entre as regiões do modelo estudado, e por fim discutir e comparar os resultados com resultados analíticos encontrados na literatura.

1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO

A estrutura deste trabalho é planejada de tal forma que o leitor possa ser habituado aos conceitos matemáticos necessários para o entendimento da metodologia proposta, a fim de determinar os coeficientes efetivos de materiais compósitos inteligentes com contato imperfeito entre as fases. Assim, o trabalho é estruturado da seguinte forma:

- Primeiro Capítulo Neste capítulo, apresenta-se uma breve discussão sobre a aplicação de materiais inteligentes na engenharia ao longo das décadas, bem como o desenvolvimento de materiais que sintetizam uma propriedade global através da combinação de propriedades de outros materiais de fases não miscíveis. Por fim, através dos objetivos, são resumidos os pontos principais a serem vencidos pela metodologia empregada.
- Segundo Capítulo Neste capítulo, conceitos do fenômeno de piezeletricidade e piezeletricidade inversa são expostos, bem como a dedução termodinâmica através de equações de estado das relações constitutivas acopladas de materiais piezelétricos. Apresenta-se a teoria da homogeneização de materiais periódicos, que é base para o entendimento do modelo micromecânico chamado de Volume Elementar Representativo (VER). Conceitos do método dos elementos finitos, hipótese de

propriedades médias pelo teorema das médias também são introduzidos para o entendimento da metodologia. Expõe-se a formulação do problema, bem como a hipótese de não continuidade no campo de deslocamentos na região interfásica entre a fibra e a matriz. Por fim, são revisados os principais trabalhos abordando a determinação de propriedades efetivas de materiais compósitos considerando um contato imperfeito.

- Terceiro Capítulo Neste capítulo, apresenta-se um fluxograma da metodologia utilizada para realizar o trabalho, bem como o detalhamento de cada análise a ser realizada para a determinação dos coeficientes. Por fim, exibe-se um resumo das condições de contorno, carregamentos mecânicos e elétricos, e deslocamentos prescritos em cada análise. A teoria apresentada aqui é aplicada diretamente nos estudos de caso.
- Quarto Capítulo Neste capítulo, mostra-se dois estudos de caso. O primeiro é realizado com o objetivo de validar a modelagem computacional empregada, comparando os resultados diretamente com a literatura. O segundo estudo de caso emprega a modelagem na determinação dos 11 coeficientes efetivos de um material compósito piezelétrico de fibras PZT-5A. Gráficos são expostos demonstrando a influência da fração volumétrica de fibra, geometria da fibra e nível de imperfeição interfásica. Por fim, discute-se os principais pontos apresentados nos gráficos.
- Quinto Capítulo Neste capítulo apresenta-se as conclusões obtidas através dos resultados e as principais discussões realizadas no Capítulo 4. Desta forma, finaliza-se o trabalho com as principais contribuições e sugestões para trabalhos futuros nesta área.
- Sexto Capítulo Neste capítulo, são referenciadas todas as fontes utilizadas como base neste trabalho, desde as citações indiretas utilizadas em partes do texto, até as citações diretas.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 PIEZELETRICIDADE

O fenômeno piezelétrico foi demonstrado pelos irmãos Jacques Curie e Pierre Curie em 1880, quando observou-se uma diferença de potencial em certos cristais quando submetidos a uma dada pressão. Dentre estes materiais estão os minerais quartzo, turmalina, topázio e sal de Rochelle. Entretanto, a deformação dos cristais sob efeito de um potencial elétrico não foi predita pelos irmãos (CURIE; CURIE, 1882). Através de relações termodinâmicas, foi deduzido matematicamente a relação inversa do fenômeno por Lippmann logo em 1881. Este acoplamento eletromecânico chamado de piezeletricidade ocorre em materiais com estrutura cristalina não centrossimétrica, ou seja, o centro das cargas positivas e das cargas negativas não estão na mesma posição (CARDOSO, 2005). Este desbalanceamento de cargas causa um momento dipolo, chamado de polarização espontânea. A Figura 2.1 representa a diferença das estruturas cristalinas de um material com polarização e sem polarização.



Figura 2.1 – Diferença de uma estrutura (a) centrossimétrica e (b) não centrossimétrica

No ano de 1916, período da primeira guerra mundial, o físico francês Paul Langevin desenvolveu o primeiro sonar utilizando cristais de quartzo. Porém, estes cristais estudados pelos irmãos Curie possuíam baixos valores de coeficiente piezelétrico. Com a descoberta de que materiais ferroelétricos com estrutura Perovskite do tipo ABO₃ submetidos a altos valores

Fonte: CARDOSO, 2005.

de campo elétrico possuíam efeito piezelétrico, surgiram as chamadas cerâmicas piezelétricas. Exemplos são o Titanato de Bário (BTO) e o mais famoso Titanato Zirconato de Chumbo (PZT) (ZAMBRANO; PEREIRA, 2004).

O fato destas cerâmicas piezelétricas serem sintéticas, torna possível a fabricação de fibras piezelétricas de diferentes formatos de seção transversal. Em relação à resistência à fadiga, as fibras no formato circular são mais adequadas. Isto ocorre devido a sua melhor distribuição de tensão por não possuir arestas. Já as fibras retangulares provêm de uma maior área de contato com o eletrodo e possuem uma maior área por unidade de espessura em relação às fibras circulares (DE MEDEIROS, 2012). Neste trabalho, será abordada a determinação das propriedades efetivas de compósitos reforçados por fibras de PZT em seções quadradas e circulares.

2.1.1 Abordagem Termodinâmica

Para obter-se as relações constitutivas de um material com acoplamento térmico, mecânico e elétrico, pode-se introduzir através da abordagem termodinâmica. Os resultados são as chamadas equações de estado, que relacionam os parâmetros medidos sob diferentes condições experimentais. Estas relações são fundamentais para a modelagem e entendimento de dispositivos piezelétricos (DAMJANOVIC, 1999).

Segundo a primeira e a segunda lei da termodinâmica, sabe-se que a variação de energia dU na energia interna U de um sólido elástico e dielétrico, submetido a diferenciais de deformação dS, deslocamento elétrico dD, entropia ds, e fluxo magnético dB é dada por:

$$dU = \varphi ds + T_{ij} dS_{ij} + E_i dD_i + H_i dB_i .$$
(2.1)

onde, φ_i é a temperatura, T_{ij} é o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff, S_{ij} é o tensor deformação de Green, E_i é o tensor de primeira ordem do campo elétrico e H_i é o tensor de primeira ordem do campo magnético.

Como em muitas situações são utilizadas condições isotérmicas e utilizam-se variáveis de campo elétrico como variáveis independentes, pode-se escrever a Eq. (2.1) em termos de φ , *S*, *E* e *H*. Para isto, é feita uma transformação de Legendre, resultando na conhecida função energia livre de Gibbs,

$$G = U - \varphi s - T_{ij}S_{ij} - E_i D_i - H_i B_i.$$
(2.2)

A partir da diferenciação da Eq. (2.1) junto a Eq. (2.2), tem-se a variação,

$$dG = sd\varphi - T_{ij} dS_{ij} - D_i dE_i - B_i dH_i.$$
(2.3)

Da Eq. (2.3), obtêm-se,

$$s = \left(\frac{\partial G}{\partial \varphi}\right)_{SEH},$$

$$T_{ij} = -\left(\frac{\partial G}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H},$$

$$D_i = -\left(\frac{\partial G}{\partial E_i}\right)_{S\varphi H},$$

$$B_i = -\left(\frac{\partial G}{\partial H_i}\right)_{SE\varphi}.$$
(2.4)

onde os subscritos das derivadas parciais indicam as variáveis mantidas constantes na derivação. Lembrando que, se existe uma relação f = f(x, y) entre 2 ou mais variáveis independentes, então o diferencial de f é dado por,

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y} dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{x} dy.$$
(2.5)

Assim, pode-se escrever as derivadas totais das variáveis s, S_{ij}, D_i, B_i, dadas por,

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H} dS_{ij} - \left(\frac{\partial s}{\partial E_{i}}\right)_{S\varphi H} dE_{i} - \left(\frac{\partial s}{\partial \varphi}\right)_{ESH} d\varphi - \left(\frac{\partial s}{\partial H_{i}}\right)_{ES\varphi} dH_{i},$$

$$dT_{ij} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H} dS_{ij} - \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_{i}}\right)_{S\varphi H} dE_{i} - \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial \varphi}\right)_{ESH} d\varphi - \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial H_{i}}\right)_{ES\varphi} dH_{i},$$

$$dD_{i} = \left(\frac{\partial D_{i}}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H} dS_{ij} - \left(\frac{\partial D_{i}}{\partial E_{i}}\right)_{S\varphi H} dE_{i} - \left(\frac{\partial D_{i}}{\partial \varphi}\right)_{ESH} d\varphi - \left(\frac{\partial D_{i}}{\partial H_{i}}\right)_{ES\varphi} dH_{i},$$

$$dB_{i} = \left(\frac{\partial B_{i}}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H} dS_{ij} - \left(\frac{\partial B_{i}}{\partial E_{i}}\right)_{S\varphi H} dE_{i} - \left(\frac{\partial B_{i}}{\partial \varphi}\right)_{ESH} d\varphi - \left(\frac{\partial B_{i}}{\partial H_{i}}\right)_{ES\varphi} dH_{i}.$$
(2.6)

Cada uma das derivadas parciais representa um coeficiente constitutivo. Destas equações, pode-se demonstrar a equivalência termodinâmica dos efeitos direto e inverso do

acoplamento piezelétrico. Portanto, define-se o coeficiente piezelétrico direto e inverso, respectivamente,

$$e_{ijk} = \left(\frac{\partial D_k}{\partial S_{ij}}\right)_{E\varphi H},$$
$$e_{kij} = -\left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k}\right)_{S\varphi H}.$$

No coeficiente piezelétrico que representa o efeito direto, tem-se a deformação como variável independente, ou seja, através de uma tensão ou deformação no material, gera-se um campo elétrico dependente. No coeficiente piezelétrico inverso, ocorre justamente o oposto.

Desta forma, utilizando a Eq. (2.4), obtemos a seguinte relação de igualdade, que demonstra a equivalência termodinâmica dos efeitos piezelétricos direto e inverso,

$$e_{ijk} = \left(\frac{\partial D_k}{\partial S_{ij}}\right)_{S\varphi H} = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial S_{ij}\partial E_k}\right) = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial E_k \partial S_{ij}}\right) = -\left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k}\right)_{S\varphi H} = e_{kij}.$$
(2.7)

Considerando um processo isotérmico e desprezando as parcelas magnéticas e térmicas, obtemos o seguinte sistema com apenas os coeficientes elásticos, dielétricos e piezelétricos,

$$T_{ij} = c_{ijlk}S_{ij} - e_{kij}E_k ,$$

$$D_i = e_{ijk}S_{kl} + \varepsilon_{ij}E_j ,$$
(2.8)

onde c_{ijlk} é o tensor de propriedades elásticas, e_{kij} o tensor de propriedades piezelétricas ε_{ij} é definido como o tensor de permissividade elétrica, ou dielétrica (CARDOSO, 2005; DAMJANOVIC, 1999; LINES; GLASS, 2001; REICHL, 1980).

As equações constitutivas supracitadas podem ser escritas na forma matricial geral, considerando um material anisotrópico, definidas por,

onde $[c]^{E}$ é um tensor constitutivo elástico com 21 constantes elásticas independentes, que relaciona as componentes de tensão e deformação, [e] é o tensor piezelétrico com 18 constantes piezelétricas independentes, que relaciona o acoplamento mecânico e elétrico, e $[\varepsilon]^{s}$ é o tensor dielétrico ou de permissividade do material, com 6 constantes dielétricas independentes, que relaciona puramente as variáveis elétricas. Os sobrescritos *E* e *S* significam que os tensores foram medidos sob condições de campo elétrico e deformação nulas ou constantes, respectivamente.

2.1.2 Simetria Cristalina e Relação Constitutiva

Dentre as 32 possíveis classes pontuais de arranjo cristalino nos materiais, como mostrado na Tabela 2.1, apenas 21 possuem caráter não centrossimétrico. Ou seja, apenas 21 das 32 podem ter comportamento piezelétrico, exceto a classe 432. Dos milhões de materiais conhecidos, apenas 30% deles são não-centrossimétricos, e apenas alguns milhares destes revelam alguma propriedade piezelétrica. E dos milhares com atividade piezelétrica, somente algumas centenas são pertinentes a serem utilizados na prática (KHOLKIN; PERTSEV; GOLTSEV, 2008).

Sistema cristalino	Simetria dos elementos	Centrossimétrico	Não centrossimétrico
Triclínico	Centro	<u>1</u>	1
Monoclínico	Centro, eixo, plano	2/m	2, m
Ortorrômbico	Centro, eixo, plano	mmm	222, mm2
Tetragonal	Centro, eixo, plano	4/m, 4/mmm	4, <u>4</u> , 422, 4mm, <u>4</u> 2m
Trigonal	Centro, eixo, plano	<u>3</u> , <u>3</u> m	3, 32, 3m
Hexagonal	Centro, eixo, plano	6/m, 6/mmm	6, <u>6</u> , 622, 6mm, <u>6</u> m2
Cúbico	Centro, eixo, plano	m3, m3m	23, <u>4</u> 3m, 432

Tabela 2.1 – Classes de simetria cristalina centrossimétricas e não-centrossimétricas presentes na natureza

Fonte: Adaptado de KHOLKIN; PERTSEV; GOLTSEV, 2008.

Devido a sua grande utilização em diversas aplicações, será abordada a determinação das propriedades elásticas, dielétricas e piezelétricas de um compósito cuja fibra é do tipo PZT hexagonal de 6mm. O tensor de segunda ordem piezelétrico desta classe é definido por,

$$[e] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ e_{13} & e_{13} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
(2.10)

onde seus coeficientes e_{13} , e_{33} e e_{15} definem o acoplamento eletromecânico do sistema.

A Figura 2.2 ilustra os diferentes tipos de simetria que os compósitos ativos podem conter variando os graus de anisotropia de seus constituintes (fibra e matriz), e destaca a simetria a ser utilizada neste trabalho.

Figura 2.2 – Esquema ilustrando a dependência da simetria dos compósitos ativos com os graus de anisotropia da matriz e da fibra



Fonte: Adaptado de KAR-GUPTA; VENKATESH, 2007.

Considerando um sólido piezelétrico linear transversalmente isotrópico, tem-se que a matriz constitutiva completa possui 11 coeficientes independentes, dentre eles os coeficientes elásticos, dielétricos e piezelétricos. Sua forma expandida é dada por,

$$\begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13} \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13} \\ c_{13} & c_{11} & c_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33} \\ 0 & 0 & 0 & c_{66} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & -e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & -e_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & \varepsilon_{11} & 0 \\ e_{13} & e_{13} & e_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \\ E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}.$$
(2.11)

2.2 TEORIA DA HOMOGENEIZAÇÃO

Por conterem duas ou mais fases de materiais com propriedades distintas, os materiais compósitos reforçados por fibras são considerados extremamente heterogêneos, ou seja, as propriedades não são iguais em todos os pontos pertencentes ao domínio do corpo. Entretanto, utilizando a hipótese de um material contendo heterogeneidades regulares ou quase regulares, pode-se assumir um grau de periodicidade estrutural. Este tipo de materiais é muitas vezes definido por compósitos com microestrutura periódica (HASSANI; HINTON, 1999).

A análise dos problemas de valor de contorno destes meios heterogêneos é extremamente difícil, mesmo com a utilização de computadores de alta velocidade. Para resolver estes problemas, pode-se recorrer a soluções experimentais, que são relativamente impraticáveis devido ao custo e tempo dos testes a serem realizados. A solução alternativa a estes experimentos, é a chamada Teoria da Homogeneização. Descoberta por matemáticos na década de 70, consiste em substituir um meio heterogêneo periódico estudado por um modelo equivalente, calculando as propriedades médias efetivas do meio homogeneizado. De fato, a fundamentação teórica por trás deste método já vem sendo utilizado quando assumimos qualquer meio contínuo como homogêneo, já que em uma escala atômica e molecular todos os materiais são heterogêneos.

Um meio heterogêneo é considerado periódico se as funções denotando uma característica física ou geométrica possuem a forma,

$$F(x + NY) = F(x), \qquad (2.12)$$

onde x representa o vetor posição de um ponto do corpo, N é uma matriz de números inteiros arbitrários, e Y é o vetor que representa o período da estrutura. Por exemplo, para um material

periódico representado por repetidas células de dimensão *Y*, seu comportamento mecânico é dado pela relação constitutiva,

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl}, (2.13)$$

onde o tensor constitutivo c_{ijkl} é uma função periódica das coordenadas de x, respeitando a propriedade,

$$c_{ijkl}(x + NY) = c_{ijkl}(x), \qquad (2.14)$$

Na teoria de homogeneização, os valores de *Y* são assumidos como sendo muito pequenos se comparados a dimensão do domínio. Desta forma considera-se uma escala macroscópica, que representa lentas variações nos valores das funções características, e uma escala microscópica, que representa rápidas oscilações. Ambas sendo relacionadas por um fator denominado dimensão característica de não-homogeneidade (ε). A Figura 2.3 representa a dimensão característica como um fator (1/ ε) que amplifica o valor Y de uma célula base para que possa ser comparada com a dimensão do material.

Figura 2.3 – Amplificação da escala de uma célula base



Fonte: Adaptado de HASSANI; HINTON, 1999.

Esta escala que satisfaz as condições de homogeneidade é chamada de Volume Elementar Representativo (VER), e denota a menor porção do meio contínuo que representa as propriedades da matriz, fibra e interface. É possível então estabelecer um problema de cálculo das médias das propriedades do meio homogeneizado em função das características geométricas e físicas de cada fase. Estas propriedades médias são denominadas propriedades efetivas, e uma vez calculadas, podem ser utilizadas para resolver o problema de valor de contorno sobre o meio homogeneizado equivalente ao meio heterogêneo original.

Utilizando estas propriedades médias, podemos empregar métodos analíticos e numéricos para a determinação das propriedades efetivas de compósitos periódicos. O chamado método da homogeneização assintótica (AHM), consiste em derivar as propriedades efetivas a partir de expansões de dupla escala assintóticas. Métodos numéricos podem ser utilizados para modelar o volume elementar representativo, utilizando conceitos de homogeneização e elementos finitos, para obter as propriedades médias do compósito. As equações diferenciais parciais não homogeneizadas, que antes tinham seus coeficientes e tensores em função de cada parte heterogênea, agora são dependentes dos coeficientes homogeneizados, e os tensores independentes da escala microscópica (HASSANI; HINTON, 1999).

2.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Se considerarmos o problema de valor de contorno linear estático de um meio piezelétrico heterogêneo, que é descrito por um sistema acoplado de equações diferenciais parciais, definido em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, de fronteira suave $\partial \Omega$ e volume $|\Omega|$, desprezando as parcelas de força de corpo e forças de inércia temos,

$$(c_{ijkl}u_{k,l} + e_{lij}\varphi_{,l}(x))_{,j} = 0,$$

$$(e_{ikl}u_{k,l} - d_{ij}\varphi_{,l})_{,j} = 0,$$
(2.15)

escrita em termos dos vetores deslocamento e potencial elétrico $u \in \varphi$. Estas equações estão relacionadas as condições de contorno,

$$u_i \Big|_{\partial \Omega_u} = u_i^0, \quad \varphi_i \Big|_{\partial \Omega_\varphi} = \varphi^0, \quad T_{ij} n_j \Big|_{\partial \Omega_T} = t_i^0, \quad D_m n_m \Big|_{\partial \Omega_D} = d^0.$$
(2.16)

2.4 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINÍTOS

A mecânica dos meios contínuos tem como objetivo o desenvolvimento de modelos matemáticos que melhor descrevam problemas reais de corpos sujeitos a esforços mecânicos.

A solução destes problemas pode ser a determinação dos campos de deslocamentos, deformações, tensões e outros (FONSECA, 2002). Além disso, em muitos casos estes problemas são modelados por equações diferenciais, cuja procura pelas soluções analíticas pode ir além da simplicidade. Esta dificuldade induz a necessidade de hipóteses simplificativas que afastam o modelo matemático do problema real. Para simplificar estas equações diferenciais, foram introduzidos métodos de aproximação de equações diferenciais, como o método dos resíduos ponderados, que mais tarde serviria como ideia básica ao método dos elementos finitos.

Com origem nos métodos de aproximação de Rayleigh-Ritz e Galerkin, o método dos elementos finitos se originou dos avanços na análise estrutural da indústria aeronáutica. Em 1943, Richard Courant iniciou o que em 1960 seria chamado de Elemento Finito, utilizando interpolações polinomiais por partes sobre sub-regiões triangulares em um meio contínuo.

No MEF, o meio contínuo é considerado como sendo composto por uma união de elementos de dimensão finita, onde as funções contínuas que representam as quantidades físicas do modelo são substituídas por funções contínuas por partes. Estas funções de "aproximação", chamadas de funções de interpolação, são construídas através dos valores nodais de cada elemento, definindo então o campo da grandeza desejada ao longo de todo o meio.

O MEF é então um método numérico de solução aproximada de equações diferenciais. A simplicidade está em transformar o que seria a solução de uma equação diferencial na solução numérica de uma integral sobre um domínio. O método vem sendo amplamente utilizado devido aos avanços computacionais dos últimos 30 anos.

2.4.1 Formulação Piezelétrica

Neste trabalho, o método dos elementos finitos é utilizado para solucionar um problema de acoplamento piezelétrico, sendo então necessário apresentar uma breve formulação do problema aproximado. O elemento utilizado deve possuir graus de liberdade mecânicos e elétricos.

O efeito piezelétrico é governado pelas equações mecânicas de equilíbrio e de conservação de fluxo elétrico acopladas, onde a equação de equilíbrio mecânico é descrita diretamente em termos do tensor das tensões de Cauchy, e não do segundo tensor de Piola-Kirchhoff, e é dada por,

$$\int_{V} \boldsymbol{T} \,\delta \boldsymbol{S} \,dV = \int_{S} \boldsymbol{t} \cdot \delta \boldsymbol{u} \,dS + \int_{V} \boldsymbol{f} \cdot \delta \boldsymbol{u} \,dV \,, \qquad (2.17)$$

onde T é o tensor das tensões de Cauchy, t é o vetor tração de superfície, δu o vetor de deslocamentos infinitesimais, δS o vetor de deformações infinitesimais ($\delta S = \nabla(\delta u)$), f o vetor forças de corpo por unidade de volume, por exemplo as de d'Alembert,

$$\boldsymbol{f} = -\rho \boldsymbol{\ddot{\boldsymbol{u}}} , \qquad (2.18)$$

em que ρ é a densidade do corpo. Neste caso as forças de corpo são desconsideradas, como já citado na seção anterior.

A equação para conservação do fluxo elétrico é definida por,

$$\int_{V} \boldsymbol{D} \cdot \delta \boldsymbol{E} \, dV + \int_{S} \boldsymbol{D}_{S} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \, dS + \int_{V} \boldsymbol{D}_{V} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \, dV = 0 \,, \qquad (2.19)$$

onde D é o vetor de deslocamento elétrico, D_S é o vetor deslocamento elétrico por unidade de área de superfície, D_V é o vetor deslocamento elétrico por unidade de volume e $\delta E = \nabla(\delta \varphi)$ é o vetor campo elétrico infinitesimal, onde $\delta \varphi$ é o vetor potencial elétrico infinitesimal.

Sabendo que no método dos elementos finitos os valores de deslocamento e potencial elétrico são escritos em termos de valores nodais, interpola-se os valores dos nós para o elemento através de funções de interpolação.

Estes deslocamentos \boldsymbol{u} e potenciais elétricos $\boldsymbol{\varphi}$ são dados por,

$$oldsymbol{u} = oldsymbol{N}^N u^N$$
 , $oldsymbol{arphi} = oldsymbol{N}^N arphi^N$,

onde N^N são o conjunto de funções de interpolação, e u^N e φ^N são valores nodais. Os valores de fluxo, ou seja, deformação e campo elétrico são definidos pelas derivadas de u e φ , escritos por,

$$oldsymbol{S} = oldsymbol{B}_u^N u^N$$
 , $oldsymbol{E} = -oldsymbol{B}_arphi^N arphi^N$,

onde $B_u^N \in B_{\varphi}^N$ é o conjunto de derivadas espaciais de N^N que opera sobre os valores nodais.

Com este conjunto de equações de "aproximação nodal", que é a base do método dos elementos finitos, juntamente com as equações constitutivas definidas na Eq. (2.9), o seguinte sistema de equações é definido em termos nodais,

$$K_{uu}^{MN}u^N + K_{\varphi u}^{MN}\varphi^N = P^M , \qquad (2.20)$$

$$K^{MN}_{\varphi u}u^N - K^{MN}_{\varphi \varphi}\varphi^N = -Q^M , \qquad (2.21)$$

onde,

$$K_{uu}^{MN} = \int_V \boldsymbol{B}_u^M \boldsymbol{C} \boldsymbol{B}_u^N dV$$
 ,

é a matriz de rigidez de deslocamento,

$$K^{MN}_{\varphi\varphi} = \int_{V} \boldsymbol{B}^{M}_{\varphi} \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{B}^{N}_{\varphi} \, dV$$

é a matriz de rigidez dielétrica,

$$K_{\varphi u}^{MN} = \int_{V} \boldsymbol{B}_{\varphi}^{M} \boldsymbol{e} \boldsymbol{B}_{u}^{N} \, dV$$
 ,

é a matriz de rigidez de acoplamento piezelétrico,

$$P^M = \int_S \mathbf{N}^M \, \mathbf{P}_S \, dS + P_C^M \, ,$$

é o vetor de forças, e

$$Q^M = \int_S \mathbf{N}^M \cdot \mathbf{Q}_S \, dS + Q_C^M$$
 ,

é o vetor de cargas elétricas. Os vetores P^M e Q^M incluem as forças e cargas elétricas de superfície P_S e Q_S , e os carregamentos e cargas concentradas P_C^M e Q_C^M (SZE; PAN, 1999).

Desta forma, o problema consiste em determinar os campos de deslocamentos e de potencial elétrico, e com isto, determinar os fluxos elétricos e as deformações.

2.4.2 Teorema das Médias

Segundo PÉREZ-FERNÁNDEZ (2009), a homogeneização de um compósito refere-se em encontrar a dependência funcional entre as médias dos parâmetros do modelo que descreve o comportamento físico do mesmo. Para isto, faz-se necessário o cálculo das médias em termos das condições de contorno aplicadas ao compósito.

Para as condições de contorno gerais da Eq. (2.16), em $\partial \Omega$, sejam *S* e *E* grandezas compatíveis e *T* e *D* auto equilibradas, tem-se

$$\langle S_{ij} \rangle = \frac{1}{2|V|} \int_{\partial S} (u_i^0 n_j + u_j^0 n_i) dS , \qquad (2.22)$$

$$\langle E_m \rangle = \frac{1}{|V|} \int_{\partial S} \varphi^0 n_m \, dS \,, \qquad (2.23)$$

$$\langle T_{ij} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_{\partial S} t_i^0 x_j \, dS \,, \qquad (2.24)$$

$$\langle D_m \rangle = \frac{1}{|V|} \int_{\partial S} d^0 x_m \, dS \,, \tag{2.25}$$

onde no caso de condições de contorno uniformes,

$$\langle S_{ij} \rangle = \bar{S}_{ij}, \quad \langle E_m \rangle = \bar{E}_m, \quad \langle T_{ij} \rangle = \bar{T}_{ij}, \quad \langle D_m \rangle = \bar{D}_m.$$
 (2.26)

Para a demonstração do teorema das médias para as variáveis *S*, *E*, *T* e *D*, introduzimos as magnitudes *F* e *G*, tais que F_i , $G_i \in L^2(\Omega)$, com $F_{i,i} = 0$, e que existe um $\gamma \in C^1(\Omega)$, tal que

 $G_i = \gamma_{,i}$, onde $L^2(\Omega) \in C^1(\Omega)$ são respectivamente o espaço das funções de quadrado integrável, e o espaço das funções contínuas com derivada primeira. Se impormos as condições de contorno $\gamma \mid_{\partial\Omega} = \gamma^0 \in F_i n_i \mid_{\partial\Omega} = \phi^0$, que no caso de serem uniformes, são da forma, $\gamma^0 = \overline{G}_i x_i$ e $\phi^0 = \overline{F}_i n_i$. Desta forma, podemos identificar *T* e *D* como *F*, e *S* e *E* como *G*. Levando em consideração o teorema da divergência, em particular para o delta de Kronecker, tem-se que,

$$\delta_{ij} = \langle \delta_{ij} \rangle = \langle x_{i,j} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} x_i n_j dS \,. \tag{2.27}$$

Seja *G* tal que $G_i = \gamma_{,i}$, com $\gamma \Big|_{\partial\Omega} = \gamma^0 e \gamma^0 = \overline{G}_i x_i$ caso as condições de contorno sejam uniformes. Logo,

$$\langle G_i \rangle = \langle \gamma_{,i} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} \gamma n_i dS = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} \gamma^0 n_i dS , \qquad (2.28)$$

onde, no caso de as condições de contorno serem uniformes, tem-se,

$$\langle G_i \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} \gamma^0 n_i dS = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} \bar{G}_j x_j n_i dS = \bar{G}_i \quad .$$
(2.29)

Seja *F* tal que $F_{j,i} = 0$, com $F_i n_i \Big|_{\partial \Omega} = \phi^0 e \phi^0 = \overline{F}_i n_i$ caso as condições de contorno sejam uniformes. Logo,

$$\langle F_i \rangle = \langle F_i \delta_{ij} \rangle = \langle F_j x_{i,j} \rangle = \langle (F_i x_i)_{,j} - (F_{j,j} x_i) \rangle = \langle (F_j x_i)_{,j} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial \Omega} F_j n_j x_i dS \quad , \qquad (2.30)$$

onde, no caso de as condições de contorno serem uniformes, tem-se

$$\langle F_i \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} F_j n_j x_i dS = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \phi^0 x_i dS = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \overline{F_j} n_j x_i dS = \overline{F_i} \quad .$$
(2.31)
Conclui-se então através do teorema das médias, que a média de uma grandeza tal como *S*, *T*, *D* e *E*, é igual a média da grandeza para condições de contorno uniformes.

2.5 DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES EFETIVOS

Pode-se agora considerar um volume elementar representativo (VER) periódico de duas fases, consistindo de uma fibra e uma matriz, onde todas as fibras possuem a mesma dimensão, seção transversal e orientação. As equações de equilíbrio descritas pela Eq. (2.11) são válidas.

Figura 2.4 – Volume Elementar Representativo



Fonte: Adaptado de TITA et al., 2015.

Na interface, denotada por Γ , assumimos inicialmente uma total continuidade no campo de tensões T e deslocamentos u,

$$\begin{cases} u_i^f = u_i^m \\ T_{ij}^f n_j^f = -T_{ij}^m n_j^m \end{cases} , \forall x \in \Gamma , \qquad (2.32)$$

onde n_j^k , (k = m, f), são as componentes do vetor normal unitário em relação a fibra (f) e a matriz (m). Na fronteira $\partial \Omega$ do VER, assume-se que o campo de deslocamentos pode ser decomposto em uma parte linear e uma parte periódica,

$$u_i(x) - S_{ij}^0 x_j = u_i^p(x) , \qquad (2.33)$$

onde S_{ij}^0 são componentes constantes do tensor de deformações. A Eq. (2.33) garante a periodicidade da célula unitária do VER, bem como a continuidade de deslocamento e a independência dos seis modos puros de carregamento (três normais e três de cisalhamento) em cada microestrutura.

Para a determinação dos coeficientes efetivos de um compósito ativo, utilizamos o sistema da Eq. (2.9), porém utilizando as propriedades médias.

$$\left\{ \frac{\overline{T}}{\overline{D}} \right\} = \begin{bmatrix} c^{eff^{\overline{E}}} & -e^{eff^{\overline{T}}} \\ e^{eff} & \varepsilon^{eff^{\overline{S}}} \end{bmatrix} \left\{ \frac{\overline{S}}{\overline{E}} \right\} ,$$
 (2.34)

onde o sobrescrito "*eff*" denota que os coeficientes relacionando os campos médios são os coeficientes efetivos. Utilizando-se do teorema das médias, e assumindo que a média das propriedades mecânicas e elétricas de uma célula unitária é igual a média das propriedades do material compósito em questão, podemos calcular as propriedades médias no volume ∂V do VER,

$$\bar{T}_{ij} = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} T^0_{ij} dV \quad , \tag{2.35}$$

$$\bar{S}_{kl} = \frac{1}{|V|} \int\limits_{\partial V} S^0_{kl} dV \quad , \tag{2.36}$$

$$\overline{D}_i = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} D_i^0 dV \quad , \tag{2.37}$$

$$\bar{E}_i = \frac{1}{|V|} \int\limits_{\partial V} E_i^0 dV , \qquad (2.38)$$

Ao discretizarmos a célula unitária em elementos finitos, podemos aproximar o cálculo destas integrais em um somatório discreto, calculando assim uma média ponderada sobre o volume de cada elemento finito da malha. Portanto, as equações supracitadas podem ser escritas da forma,

$$\bar{T}_{ij} = \frac{1}{|V|} \sum_{n=1}^{nel} T_{ij}^{0^{(n)}} V^{(n)} , \qquad (2.39)$$

$$\bar{S}_{kl} = \frac{1}{|V|} \sum_{n=1}^{nel} S_{kl}^{0^{(n)}} V^{(n)} , \qquad (2.40)$$

$$\overline{D}_{i} = \frac{1}{|V|} \sum_{n=1}^{nel} D_{i}^{0^{(n)}} V^{(n)} , \qquad (2.41)$$

$$\bar{E}_i = \frac{1}{|V|} \sum_{n=1}^{nel} E_i^{0^{(n)}} V^{(n)} , \qquad (2.42)$$

Modelando um Volume Elementar Representativo (VER) por elementos finitos, e aplicando as condições de contorno adequadas, os coeficientes efetivos podem ser calculados através destas equações.

2.5.1 Teorema das Médias

Como forma de simplificação, as equações para as propriedades médias desenvolvidas na seção anterior trataram a interface entre a fibra e a matriz como tendo perfeita continuidade nos campos de tensão e deslocamento. Introduzimos então um sistema local de coordenadas cilíndricas (r, θ, z), que será útil para definir os parâmetros de imperfeição na interface.

Considerando um problema onde a interface entre a matriz e a fibra do compósito em questão, não segue a lei de total continuidade nos campos de deslocamento e tensão descritos na Eq. (2.32). Segundo Hashin (1990), podemos escrever as equações levando em consideração condições de interface imperfeita, da forma,

$$T_{nn}^{m} = T_{nn}^{f} = K_{n} ||u_{r}|| ,$$

$$T_{nt}^{m} = T_{nt}^{f} = K_{t} ||u_{\theta}|| ,$$

$$T_{ns}^{m} = T_{ns}^{f} = K_{s} ||u_{z}|| ,$$
(2.43)

onde os valores T_{nn}^m , T_{nt}^m e T_{ns}^m são as componentes de tensão superficial na interface, no sistema de coordenadas definido anteriormente. As constantes K_n , $K_t \ e \ K_s$ são parâmetros de imperfeição, em unidade de tensão por comprimento, e podem ser análogas a rigidez de uma mola nas três direções. Os valores de $||u_i||$ são definidos por,

$$\|u_i\| = u_i^m - u_i^f , (2.44)$$

para i = n, t, s.

Nesta análise, os efeitos da interfase são contabilizados ao introduzir uma relação linear entre as trações e os saltos de deslocamento. Desta forma, pode-se variar os parâmetros K_i , a fim de propositalmente causar uma descontinuidade no campo de deslocamentos da interface. Utilizando valores infinitos de K_i , temos uma condição de contato perfeito, e para quaisquer valores finitos nos parâmetros de imperfeição, temos a condição de contato imperfeito. Assim, a influência de cada parâmetro sobre as propriedades efetivas pode ser calculada.

Porém, segundo Hashin (1990), prefere-se uma representação de um compósito de três fases a esta descrição supracitada de um compósito de duas fases com condições de interface. Isto se deve aos seguintes fatores: (a) Os parâmetros de interface K_i podem ser escritos em termos das propriedades da interface; (b) os parâmetros de caracterização da interface nestes termos podem ser utilizados experimentalmente; (c) é matematicamente mais simples.

Tratando-se então um problema onde a interface entre a matriz e a fibra do compósito em questão não segue a lei de total continuidade nos campos de deslocamento (porém segue a continuidade nos campos de tensão) descritos na Eq. (2.32), pode-se considerar uma terceira fase Γ , representando esta interface, cujas propriedades podem ser iguais ou superiores as da matriz (contato perfeito) ou degradadas em relação a estas (contato imperfeito). Devido aos processos de produção dos materiais compósitos, a hipótese de contato perfeito entre as fases do material não é realista, e desconsidera uma terceira fase em que ocorre adesão. Modela-se esta região Γ com uma espessura *t* dada pelo parâmetro adimensional,

$$\eta = \frac{t}{r^f},\tag{2.45}$$

onde r^{f} é o raio da fibra (WÜRKNER; BERGER; GABBERT, 2014).

Assumindo o material da interface como linear elástico isotrópico, apenas duas constantes independentes podem definir suas propriedades, no caso o módulo de elasticidade

transversal *G* e o coeficiente de Poisson *v*. A Figura 2.5 ilustra as três fases distintas do material compósito, considerando a interface fibra-matriz.



Figura 2.5 – Representação esquemática das fases do VER

Fonte: Adaptado de HASHIN, 1990.

2.6 CONDIÇÕES DE CONTORNO APLICADAS AO VER

Dado um VER periódico, que representa o meio homogeneizado de um material compósito reforçado por fibras ativas de comprimento infinito, é fundamental a formulação das condições de contorno periódicas para a determinação das propriedades efetivas. Para a imposição das condições de contorno pelo método dos elementos finitos, é necessário convencionar um sistema de referência e nomear as faces do VER.

Na Figura 2.6, as faces do VER são designadas por X+, X-, Y+, Y-, Z+, Z-, e o sistema de referências é adotado da forma em que a fibra é orientada ao longo do eixo Z. Contudo, devese tomar cuidado com a nomenclatura encontrada na literatura para materiais piezelétricos. Nos trabalhos referentes a materiais compósitos, mecânica do contínuo, elementos finitos, e problemas em escala meso e macromecânica, utiliza-se a seguinte nomenclatura: a direção 1 (X) é alinhada a extensão das fibras, a direção 2 (Y) é normal a direção X e pertence ao plano da lâmina, e a direção 3 (Z) é o complemento ortogonal destas. Por outro lado, nos trabalhos que abordam estruturas micromecânicas de materiais compósitos piezelétricos, é comum encontrar a direção Z alinhada a direção das fibras. O presente trabalho segue o segundo caso, como evidenciado na Figura 2.7(b).



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Como os materiais compósitos podem ser tratados como um arranjo periódico de células unitárias, as condições de contorno periódicas devem ser aplicadas ao volume elementar representativo de modo a garantir que nenhum tipo de separação ou interpenetração ocorra na vizinhança das células. Estas condições de contorno foram estudadas por diversos pesquisadores, entre eles Xia *et al.* (2003) *e* Jin *et al.* (2008).

Figura 2.7 – Nomenclaturas encontradas na literatura para o sistema local de coordenadas em materiais compósitos com fibras piezelétricas



a) Direção encontrada na literatura

Fonte: Adaptado de SARTORATO, 2013.

Para um VER cúbico, como mostrado na Figura 2.6, os deslocamentos de um par de faces opostas (normal ao longo do eixo X, por exemplo), é descrito, segundo a Eq. (2.33), por,

$$u_i^{j+} = \bar{S}_{ik} x_k^{j+} + u_i^* , \qquad (2.46)$$

$$u_i^{j-} = \bar{S}_{ik} x_k^{j-} + u_i^* , \qquad (2.47)$$

b) Presente trabalho

onde o sobrescrito "j+" representa a normal na direção positiva de X e "j-" representa a normal na direção negativa de X. Para a condição de pequenos deslocamentos, a diferença entre as duas equações resulta,

$$u_i^{j+} - u_i^{j-} = \bar{S}_{ik} \left(x_k^{j+} - x_k^{j-} \right) = \bar{S}_{ik} \Delta x_k^j , \qquad (2.48)$$

em que Δx_k^j é uma constante para qualquer RVE estudado.

Desta forma, podemos escrever esta condição de contorno na forma geral,

$$u_i^{j+}(x, y, z) - u_i^{j-}(x, y, z) = c_i^j, \qquad (i, j = 1, 2, 3), \qquad (2.49)$$

onde os valores de c_i^j representam a diferença de deslocamento em cada um dos 6 modos de deformação da célula, sendo eles três componentes normais (c_1^1, c_2^2, c_3^3) e três componentes cisalhantes $(c_1^2 = c_2^1, c_1^3 = c_3^1, c_2^3 = c_3^2)$. Um exemplo desta diferença de deslocamentos em todos os pares de nós das faces opostas está na imposição das condições de contorno de cisalhamento no VER. Como pode ser ilustrado na Figura 2.8, a condição de contorno de deslocamento uniforme na direção X garante que a Eq. (2.49) seja respeitada.

Figura 2.8 - Condições de contorno periódicas para o caso de cisalhamento puro no plano XY



Fonte: Adaptado de JIN et al., 2008.

Este caso pode ser estendido também para o plano YZ, e as condições de contorno ilustradas são consideradas em toda a profundidade da célula. Através de condições de contorno adequadas no VER discretizado por elementos finitos, os coeficientes efetivos elásticos, piezelétricos e dielétricos podem ser determinados. Neste presente trabalho estas condições foram aplicadas utilizando a linguagem *Python* junto aos softwares do pacote *ABAQUS*TM.

2.7 ABORDAGENS CONSIDERANDO INTERFACE MATRIZ-FIBRA

A representação de materiais compósitos lineares elásticos por um meio anisotrópico homogêneo já vem sendo bem estudada desde o fim da década de 70 e início da década de 80 (CASTILLERO *et al.*, 1998). Porém, na teoria do comportamento mecânico dos materiais compósitos, parte-se da premissa de que existe total continuidade nos campos de tração e de deslocamento na interface dos constituintes. Esta interface "perfeita" é uma idealização, pois sabe-se que na interface existem defeitos internos e de fabricação destes materiais.

Diversos trabalhos investigam o comportamento dos materiais compósitos modificando esta teoria, "relaxando" a continuidade dos deslocamentos entre as fases do compósito. Em Hashin (1990, 1991), são determinadas as propriedades termoelásticas de materiais compósitos com fibras unidirecionais através dos parâmetros de interface imperfeita *Kt*, *Kn* e *Ks*. No trabalho também são derivadas expressões que relacionam estes parâmetros com as propriedades do material da interface.

Através de uma abordagem analítica via expansão assintótica, Benveniste e Miloh (2001) definiram sete regimes diferentes de contato entre as fases, desenvolvendo um modelo de interface similar a teorias de casca. Com o desenvolvimento dos computadores e softwares, na última década houve um crescente avanço no emprego dos métodos numéricos sobre o estudo do comportamento de materiais compósitos ativos.

Em Caporale *et al.* (2006), análises foram realizadas em um modelo de material compósito sofrendo delaminação. A falha da interface foi simulada através do método dos elementos finitos, utilizando molas elásticas normais e tangenciais conectando a fibra e a matriz. Nos trabalhos de Kari *et al.* (2008), utilizando métodos numéricos de homogeneização (VER) junto ao método dos elementos finitos (MEF), foram calculadas as propriedades efetivas de materiais compósitos com fibras distribuídas aleatoriamente. Através da modelagem de uma terceira fase simulando a interface, estas propriedades foram definidas sob a influência da rigidez e volume da interface.

Novamente utilizando o MEF em conjunto ao VER, nos trabalhos de Berger *et al.* (2013, 2014) e Würkner *et al.* (2013, 2014), foram determinadas as propriedades efetivas de compósitos utilizando elementos de mola em três dimensões cilíndricas conectando a fibra e a matriz. Desta forma, seguindo as relações descritas por Hashin (1991), relacionou-se os parâmetros de mola de interface com as constantes de rigidez elásticas dos elementos finitos de mola.

Em se tratando de materiais compósitos com acoplamento eletromecânico, porém com contato perfeito entre as fases, diversos trabalhos envolvendo o MEF trataram de calcular as propriedades efetivas mecânicas, dielétricas e piezelétricas. Na década de 90, em Gaudenzi (1997), mesmo com menores avanços de tecnologias computacionais, estimou numericamente o comportamento de um material compósito piezelétrico através de uma célula unitária submetida a carregamentos e condições de contorno adequadas.

Berger *et al.* (2005a, 2005b, 2006) determinaram as propriedades efetivas de compósitos piezelétricos através do método dos elementos finitos para diferentes arranjos de célula unitária e diferentes frações volumétricas de fibra, obtendo resultados coerentes com o método da homogeneização assintótica (MHA).

Em se tratando de compósitos ativos com interface imperfeita, López-Realpozol *et al.* (2017), Rodriguez-Ramos *et al.* (2015) e Sevostianov *et al.* (2012) determinaram as propriedades efetivas elásticas, dielétricas e piezelétricas, comparando métodos analíticos como MHA e MEF-VER, utilizando o modelo de três fases e o modelo de molas.

Desta forma, pelo que foi supracitado, é constatado o grande número de contribuições já realizadas no cálculo de propriedades efetivas de materiais compósitos, porém ainda existem áreas a serem exploradas, materiais a serem estudados e modelos que sejam mais eficientes computacionalmente.

3 METODOLOGIA

3.1 METODOLOGIA CIENTÍFICA

A metodologia proposta para este trabalho resume-se em seis etapas fundamentais, das quais: 1) Revisão bibliográfica; 2) Seleção de casos na literatura; 3) Análise de resultados da literatura; 4) Modelagem computacional; 5) Pós-processamento; 6) Análise dos Resultados obtidos via MEF; 7) Análise de coerência. Esta metodologia pode ser expressa em termos de um fluxograma de processos, ilustrado na Figura 3.1.



Figura 3.1 - Fluxograma representando a metodologia científica utilizada

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Pode-se dividir o fluxograma em quatro momentos. No primeiro é realizada uma revisão bibliográfica envolvendo a determinação dos coeficientes efetivos de materiais compósitos ativos sob influência de uma interface imperfeita. Para isso, deve-se realizar uma revisão dos conceitos básicos como os de piezeletricidade, homogeneização de materiais heterogêneos periódicos, teoremas de média, e outros dos quais foram apresentados.

Segue-se à fase de apresentação da modelagem computacional de uma célula unitária, juntamente com a imposição das condições de contorno adequadas a cada uma das análises necessárias para a determinação da matriz de coeficientes efetivos do material. Considera-se esta fase de escolha das condições de contorno fundamental, pois tem impacto direto nos resultados obtidos. Em paralelo a esta, são selecionados casos presentes na literatura, necessários para a validação do modelo computacional. Na terceira fase, são obtidos os resultados das análises via MEF, comparando-os com os resultados obtidos no caso de literatura selecionado. Nesta, os trabalhos encontrados na literatura são reproduzidos utilizando o volume elementar representativo modelado.

Por fim, com o modelo validado, são obtidos resultados ainda não presentes em trabalhos anteriores, discutindo-os e avaliando os potenciais da metodologia adotada.

3.2 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Propõe-se nesta seção uma apresentação da metodologia utilizada para modelar computacionalmente a célula unitária (VER), juntamente com a imposição das condições de contorno necessárias para o cálculo de cada um dos 11 coeficientes efetivos de um material compósito ativo transversalmente isotrópico, ou AFC (*"Active Fiber Composite"*). A metodologia em questão foi elaborada a partir de um conjunto de outros trabalhos envolvendo a determinação de propriedades efetivas de materiais compósitos ativos com contato imperfeito.

Ao selecionar o tipo de arranjo a ser utilizado, optou-se pela escolha do arranjo quadrado devido ao seu elevado grau de simetria. Neste arranjo, todas as condições de contorno podem ser aplicadas em um único tipo de célula. No arranjo hexagonal, não existe simetria nas faces Y+ e Y-, isto é, deve-se utilizar outro tipo de célula unitária para as condições de cisalhamento envolvendo este plano.

O modelo a ser utilizado de uma célula unitária é de arranjo quadrado e com seção transversal de fibra circular, e de fibra quadrada, como é ilustrado na Figura 3.2.



Figura 3.2 – Modelo de célula unitária com arranjo quadrado com fibras de seção circular e quadrada

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Através da matriz constitutiva representada na Eq. (2.9), e com base nas condições de contorno a serem explicitadas nas próximas seções, pode-se observar que são necessárias 6 análises independentes para determinar os 11 coeficientes efetivos, sendo 6 deles elásticos, 2 dielétricos e 3 piezelétricos.

3.2.1 Primeira Análise

Os primeiros coeficientes efetivos elásticos a serem determinados são o c_{33}^{eff} e c_{13}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Utiliza-se a Eq. (3.1) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER. Isto mostra que, tornando os valores de $\bar{S}_1 = \bar{S}_2 = \bar{S}_4 = \bar{S}_5 = \bar{S}_6 = 0$ e assegurando que os valores de $\bar{E}_1 = \bar{E}_2 = \bar{E}_3 = 0$, restam duas equações do sistema. Isto possibilita o cálculo dos coeficientes c_{33}^{eff} e c_{13}^{eff} apenas utilizando os valores de T_1 , T_3 e S_3 . Para isso, impõe-se que os deslocamentos normais as faces X+, X-, Y+, Y- e Z-são nulos, e que os potenciais elétricos em todas as faces são também nulos. E para que o valor de \bar{S}_3 seja diferente de zero, arbitra-se um valor para o deslocamento na face Z+. A Figura 3.3 mostra a célula sujeita às condições de contorno supracitadas.

$$\begin{cases} \overline{T}_{1} \\ \overline{T}_{2} \\ \overline{T}_{3} \\ \overline{T}_{4} \\ \overline{T}_{5} \\ \overline{T}_{6} \\ \overline{D}_{1} \\ \overline{D}_{2} \\ \overline{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & 0 & 0 & \varepsilon_{13}^{eff} \end{bmatrix}$$
(3.1)

Figura 3.3 – Problema local da primeira análise



Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

Os coeficientes c_{33}^{eff} e c_{13}^{eff} podem ser calculados através de,

$$c_{13}^{eff} = \frac{\bar{T}_1}{\bar{S}_3} , \qquad (3.2)$$

$$c_{33}^{eff} = \frac{\bar{T}_3}{\bar{S}_3} . (3.3)$$

3.2.2 Segunda Análise

Segue-se então para a determinação dos coeficientes efetivos piezelétricos $e_{13}^{eff} e e_{33}^{eff}$ e do coeficiente efetivo dielétrico ε_{33}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Utiliza-se a Eq. (3.4) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER. Isto mostra que, tornando os valores de $\bar{S}_1 = \bar{S}_2 = \bar{S}_3 = \bar{S}_4 = \bar{S}_5 = \bar{S}_6 = 0$ e aplicando uma diferença de potencial no par de faces Z+ e Z-, restam apenas três equações no sistema. Assim, é possível determinar os coeficientes e_{13}^{eff} , e_{33}^{eff} e ε_{33}^{eff} utilizando apenas os valores de \bar{T}_1 , \bar{T}_3 , $\bar{D}_3 e \bar{E}_3$. Desta forma, impõe-se que os deslocamentos normais a todas as faces sejam nulos, e aplica-se uma diferença de potencial no par de faces Z+ e Z-, forçando que exista um campo elétrico apenas na direção 3. A Figura 3.4 mostra a célula sujeita às condições de contorno descritas.

$$\begin{cases} \overline{T}_{1} \\ \overline{T}_{2} \\ \overline{T}_{3} \\ \overline{T}_{4} \\ \overline{T}_{5} \\ \overline{T}_{6} \\ \overline{D}_{1} \\ \overline{D}_{2} \\ \overline{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{11}^{eff} \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{33}^{eff} \end{bmatrix}$$

$$(3.4)$$

Os coeficientes e_{13}^{eff} , e_{33}^{eff} e ε_{33}^{eff} podem ser calculados através de,

$$e_{13}^{eff} = -\frac{\bar{T}_1}{\bar{E}_3} , \qquad (3.5)$$

$$e_{33}^{eff} = -\frac{\bar{T}_3}{\bar{E}_3} , \qquad (3.6)$$

$$\varepsilon_{33}^{eff} = \frac{\overline{D}_3}{\overline{E}_3} \ . \tag{3.7}$$

Figura 3.4 – Problema local da segunda análise



Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

3.2.3 Terceira Análise

Na terceira análise, os coeficientes efetivos elásticos determinados são o c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Utiliza-se a Eq. (3.8) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER. Isto mostra que, tornando os valores de $\bar{S}_2 = \bar{S}_3 = \bar{S}_4 = \bar{S}_5 = \bar{S}_6 = 0$ e assegurando que os valores de $\bar{E}_1 = \bar{E}_2 = \bar{E}_3 = 0$, restam duas equações do sistema. Isto possibilita o cálculo dos coeficientes c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} apenas utilizando os valores de \bar{T}_1 , T_2 e S_1 . Desta forma, impõe-se que os deslocamentos normais as faces Y+, Y-, Z+, Z- e X- são nulos, e que os potenciais elétricos em todas as faces são também nulos. E para que o valor de \bar{S}_1 seja diferente de zero, impõe-se um valor arbitrário para o deslocamento na face X+. A Figura 3.5 mostra a célula sujeita às condições de contorno supracitadas.

$$\begin{cases} \bar{T}_{1} \\ \bar{T}_{2} \\ \bar{T}_{3} \\ \bar{T}_{4} \\ \bar{T}_{5} \\ \bar{D}_{1} \\ \bar{D}_{2} \\ \bar{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & 0 & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{eff} \end{bmatrix} ,$$
 (3.8)

Figura 3.5 – Problema local da terceira análise



Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

Os coeficientes c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} podem ser calculados através de,

$$c_{11}^{eff} = \frac{\bar{T}_1}{\bar{S}_1} , \qquad (3.9)$$

$$c_{12}^{eff} = \frac{\bar{T}_2}{\bar{S}_1} , \qquad (3.10)$$

3.2.4 Quarta Análise

Segue-se então para a determinação do coeficiente efetivo dielétrico ε_{11}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Utiliza-se a Eq. (3.11) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER. Isto mostra que, tornando os valores de $\bar{S}_1 = \bar{S}_2 = \bar{S}_3 = \bar{S}_4 = \bar{S}_5 = \bar{S}_6 = 0$ e aplicando uma diferença de potencial no par de faces X+ e X-, resta apenas uma equações no sistema. Assim, é possível determinar o coeficiente efetivo ε_{11}^{eff} utilizando apenas os valores de \bar{D}_1 e \bar{E}_1 . Desta forma, impõe-se que os deslocamentos normais a todas as faces sejam nulos, e aplicar uma diferença de potencial no par de faces X+ e X-, forçando que exista um campo elétrico apenas na direção 1. A Figura 3.6 mostra a célula sujeita às condições de contorno descritas.

$$\begin{cases} \bar{T}_{1} \\ \bar{T}_{2} \\ \bar{T}_{3} \\ \bar{T}_{4} \\ \bar{T}_{5} \\ \bar{D}_{1} \\ \bar{D}_{2} \\ \bar{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & e_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & e_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & e_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{33}^{eff} \end{bmatrix}$$
 (3.11)

Figura 3.6 – Problema local da quarta análise



Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

O coeficiente ε_{11}^{eff} pode ser calculado através de,

$$\varepsilon_{11}^{eff} = \frac{\overline{D}_1}{\overline{E}_1} , \qquad (3.12)$$

3.2.5 Quinta Análise

A quinta análise é dedicada a determinação do coeficiente efetivo elástico c_{66}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Porém, neste caso as condições de contorno devem ser impostas de modo a manter o paralelismo entre as faces que sofrem cisalhamento. Utiliza-se a Eq. (3.13) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER.

$$\begin{cases} \bar{T}_{1} \\ \bar{T}_{2} \\ \bar{T}_{3} \\ \bar{T}_{4} \\ \bar{T}_{5} \\ \bar{T}_{6} \\ \bar{D}_{1} \\ \bar{D}_{2} \\ \bar{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{eff} \end{bmatrix} ,$$
 (3.13)

Isto mostra que, tornando os valores de $\bar{S}_1 = \bar{S}_2 = \bar{S}_3 = \bar{S}_5 = \bar{S}_6 = 0$ e impondo que os potenciais elétricos sejam nulos em todas as faces do VER, resta apenas uma equação no sistema. Assim, é possível determinar o coeficiente c_{66}^{eff} utilizando apenas os valores de \bar{T}_4 e \bar{S}_4 . Para isto, todos os nós da face Y- são restringidos na direção 1 e todos os nós da face X- e X+ são restringidos na direção Y. Para garantir que $\bar{E}_1 = \bar{E}_2 = \bar{E}_3 = 0$, é imposto um potencial elétrico nulo em todas as faces do VER. Na Figura 2.9, é dado como exemplo a condição de contorno de cisalhamento imposta neste caso, onde são aplicadas forças de mesmo módulo e de direções opostas nas faces Y+ e Y-, e nas faces X+ e X-. Para garantir que todos os nós das faces opostas possuam a mesma diferença de deslocamento (condição de periodicidade), é necessário garantir que todos os nós da face Y+ tenham deslocamentos uniformes na direção 1, ou seja, tenham o mesmo deslocamento.



Figura 3.7 – Problema local da quinta análise

Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

O coeficiente c_{66}^{eff} pode ser calculado através de,

$$c_{66}^{eff} = \frac{T_4}{\bar{S}_4} , \qquad (3.14)$$

3.2.6 Sexta Análise

Segue-se então para a determinação dos coeficientes efetivos c_{44}^{eff} e e_{15}^{eff} . As condições de contorno são aplicadas de tal forma que a célula unitária se mantenha compatível com as condições de periodicidade descritas na Eq. (2.49). Utiliza-se a Eq. (3.15) para visualizar as condições de contorno aplicadas no VER. Isto mostra que, tornando os valores de $\overline{S}_1 = \overline{S}_2 = \overline{S}_3 = \overline{S}_4 = \overline{S}_6 = 0$ e impondo que os potenciais elétricos sejam nulos em todas as faces do VER, resta apenas uma equação no sistema. Assim, é possível determinar os coeficientes c_{44}^{eff} e e_{15}^{eff} utilizando apenas os valores de \overline{T}_5 , \overline{D}_2 , \overline{S}_5 e o coeficiente dielétrico calculado na quarta análise ε_{11}^{eff} . Para isto, todos os nós da face Y- são restringidos na direção 3 e todos os nós da face Z- e Z+ são restringidos na direção Y. É imposto um potencial elétrico nulo apenas nas faces X+, X-, Y+ e Y-. São aplicadas forças de mesmo módulo e de direções opostas nas faces Y+ e Y-, e nas faces Z+ e Z-. Para garantir que todos os nós das faces opostas possuam a mesma diferença

de deslocamento (condição de periodicidade), é necessário garantir que todos os nós da face Y+ tenham deslocamentos uniformes na direção 3, ou seja, tenham o mesmo deslocamento.

$$\begin{cases} \bar{T}_{1} \\ \bar{T}_{2} \\ \bar{T}_{3} \\ \bar{T}_{4} \\ \bar{T}_{5} \\ \bar{T}_{6} \\ \bar{D}_{1} \\ \bar{D}_{2} \\ \bar{D}_{3} \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^{eff} & c_{12}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{12}^{eff} & c_{11}^{eff} & c_{13}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{13}^{eff} \\ c_{13}^{eff} & c_{13}^{eff} & c_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{33}^{eff} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{15}^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^{eff} & -e_{15}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{eff} & \varepsilon_{11}^{eff} & 0 & 0 \\ e_{13}^{eff} & e_{13}^{eff} & e_{33}^{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{eff} \end{bmatrix} ,$$
 (3.15)

Figura 3.8 – Problema local da sexta análise



Fonte: DE MEDEIROS, 2012.

Os coeficientes e_{15}^{eff} e c_{44}^{eff} podem ser calculados através de,

$$e_{15}^{eff} = \frac{\left(-\bar{E}_2 \varepsilon_{11}^{eff} + \bar{D}_2\right)}{\bar{S}_5} , \qquad (3.16)$$

$$c_{44}^{eff} = \frac{\left(\bar{E}_2 e_{15}^{eff} + \bar{T}_5\right)}{\bar{S}_5} \ . \tag{3.17}$$

3.2.7 Considerações Adicionais Acerca da Modelagem

As 6 análises descritas sintetizam o procedimento adotado para determinar os coeficientes efetivos do VER, sendo que em cada análise, a célula esteve sujeita a diferentes condições de imperfeição da interface. Vale ressaltar que nas análises que não envolveram os modos de cisalhamento da célula, as condições de contorno aplicadas garantiram as condições de paralelismo entre as faces do VER, não sendo necessário nenhuma restrição adicional. No caso das análises 5 e 6, houve necessidade da implementação de uma condição extra, garantindo que as condições de contorno de cisalhamento respeitassem a hipótese de periodicidade. Esta condição é a de deslocamento uniforme na face sujeita ao máximo deslocamento de cisalhamento, da forma em que é mostrada na Figura 2.8.

Os seguintes comentários ilustram esta condição extra:

- a) Os nós pertencentes as arestas ortogonais ao plano de cisalhamento (seja ele XY ou YZ), não podem estar sujeitos as condições de deslocamento uniforme.
- b) Estes mesmos nós, não devem estar sujeitos as forças de cisalhamento, que no caso de um VER discretizado em elementos finitos, são distribuídas em cada nó da face.
 A Figura 3.9 ilustra a célula sujeita a estas restrições adicionais.



Figura 3.9 – Células unitárias sujeitas a restrições adicionais

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Vale novamente ressaltar que todas estas condições de contorno foram implementadas com o auxílio da linguagem *Python*, que está presente no software ABAQUS[™]. Com isto foi possível automatizar todas as análises, parametrizando variáveis como fração volumétrica de fibra, dimensões de cada componente da célula, propriedades e outras.

A Tabela 3.1 resume as condições de contorno, carregamentos mecânicos e elétricos adotados para cada uma das seis análises realizadas.

	Deslocame	nto (m)		Potencial Elétrico (V)		
Coeficientes Efetivos	Prescrição (Zero)		Força (N)	Prescrição	Restrição (Zero)	
$\begin{array}{c}c_{13}^{eff}\\c_{33}^{eff}\end{array}$	Extensão na face Z+	Normal as faces X+, X-, Y+, Y- e Z-	-	-	Todas as faces do VER	
e_{13}^{eff} e_{33}^{eff} ε_{33}^{eff}	-	Todas as faces do VER	-	Positivo na face Z+	-	
$c_{11}^{eff} \\ c_{12}^{eff}$	Extensão na face X+	Normal as faces X-, Y+, Y-, Z- e Z+	-	-	Todas as faces do VER	
ε_{11}^{eff}	-	Todas as faces do VER	-	Positivo na face X+	-	
c ₆₆	Restrição multiponto (MPC) nos nós face Y+ na direção X (Deslocamentos Uniformes)	Na direção Y nas faces X+ e X-; na direção X na face Y-	F_y paralela a face X+, F_x paralela a face Y+, $-F_y$ paralela a face X-, $-F_x$ paralela a Y-	-	Todas as faces do VER	
c_{44}^{eff} e_{15}^{eff}	Restrição multiponto (MPC) nos nós face Y+ na direção Z (Deslocamentos Uniformes)	Na direção Y nas faces Z+ e Z-; na direção Z na face Y-	F_y paralela a face Z+, F_z paralela a face Y+, $-F_y$ paralela a face Z-, $-F_z$ paralela a Y-	-	Nas faces X+, X-, Y+ e Y-	

 $Tabela \ 3.1 - Condições \ de \ contorno \ e \ carregamentos \ adotados \ nas \ análises$

Fonte: Adaptado de DE MEDEIROS, 2012.

4 APLICAÇÕES E POTENCIALIDADES DA METODOLOGIA

4.1 ESTUDO DE CASO I (VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA)

Nesta seção, os resultados obtidos através da metodologia computacional exposta anteriormente são apresentados e comparados com a literatura. A fim de validarmos a modelagem computacional empregada, são determinados os coeficientes efetivos c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} , e c_{44}^{eff} relacionados aos resultados obtidos por HASHIN (2002).

No modelo micromecânico de Hashin, conhecido como CCA (*Composite Cylindrical Assemblage*), o compósito em questão consiste em fibras unidirecionais de seção transversal circular, dentro em uma matriz circular concêntrica com a fibra. O modelo também considera uma interface como terceira fase. A fração volumétrica de fibra é fixada no valor 0.4. As propriedades da fibra e da matriz devem seguir a relação,

$$\frac{G_f}{G_m} = 10 \quad , \tag{4.1}$$

onde G_f é o módulo de cisalhamento transversal referente a fibra, e G_m referente a matriz. O coeficiente de Poisson v da fibra, matriz e da interface são dados por $v_f = 0.2$, $v_m = 0.35$ e $v_i = 0.3$, respectivamente. A espessura da interface t é dada por,

$$\eta = \frac{t}{r^f} , \qquad (4.2)$$

onde η é um parâmetro adimensional, fixado em 0.001, e r^f é o raio da fibra.

O modelo micromecânico utilizado neste trabalho consiste em um VER, com fibras de arranjo quadrado respeitando as relações e parâmetros supracitados. Com estes parâmetros, é definido o comportamento do módulo volumétrico transversal efetivo k_t^{eff} do VER sob diferentes valores adotados para o módulo de cisalhamento G_i da interface. Desta forma, com os coeficientes efetivos c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} determinados, o módulo k_t^{eff} é dado por,

$$k_t^{eff} = \frac{c_{11}^{eff} + c_{12}^{eff}}{2} , \qquad (4.3)$$

4.1.1 Parâmetros Associados ao Material

No modelo proposto por Hashin (2002), os materiais que constituem o compósito (fibra, matriz e interface) são isotrópicos e não piezelétricos. Tem-se então uma completa descrição do material definindo o coeficiente de Poisson v e o módulo de cisalhamento G da matriz, fibra e interface. A Tabela 4.1 apresenta os valores para as propriedades da matriz e da fibra do compósito.

Tabela 4.1 – Propriedades dos materiais da Matriz e da Fibra

Fibra		Matriz	
G_f	v_f	G_m	v_m
10 GPa	0,2	1 GPa	0,35

Fonte: Adaptado de HASHIN, 2002.

A avaliação do contato imperfeito entre as fases do compósito é dada pela degradação das propriedades mecânicas da interface, sendo ela também isotrópica com coeficiente de Poisson v^i fixado em 0.3. Assim, variando o módulo de cisalhamento G_i tem-se o comportamento do compósito sob diferentes tipos de contato.

4.1.2 Modelo em Elementos Finitos

Para a obtenção dos resultados, realizaram-se análises por Elementos Finitos no software *ABAQUS*TM. Devido à grande quantidade de análises a serem feitas, uma rotina na linguagem *Python* foi desenvolvida para automatizar a modelagem das geometrias, geração de malhas, parametrizar as propriedades da interface, rodar as análises e obter os resultados. A metodologia exposta na seção 3 foi utilizada para obter os coeficientes efetivos necessários. Nas análises utilizou-se elementos hexaédricos trílineares isoparamétricos de 8 nós (três graus de liberdade por nó). Na formulação deste elemento não estão presentes as funções bolha que permitem um

modo de deformação adicional, o que aumenta o número de elementos necessários para a convergência.

Realizou-se uma análise de convergência para o caso de $G_i = 10^9 Pa$ e uma sequência de Cauchy (convergente) foi obtida. A medida que a sequência avança, a diferença entre os valores de k_t^{eff} se aproximam cada vez mais, porém a partir de um valor $n_0 = 11.000$ elementos observa-se que a diferença é mínima. Sabendo que o Método dos Elementos Finitos é um método de aproximação, podemos utilizar então um número de elementos que aproxime o resultado da convergência. A Figura 4.2 ilustra o VER utilizado nas análises. Através do gráfico de convergência, optou-se então pela utilização de cerca de 11.000 elementos na geração da malha.



Figura 4.1 – Análise de Convergência para o valor do módulo volumétrico

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

As análises foram realizadas para uma grande faixa de imperfeição de interface, podendo ser comparado com o gráfico obtido por Hashin (2002). Os resultados para as principais análises numéricas realizadas são ilustrados nas Figuras 4.3 e 4.4, onde pode-se observar com nitidez os diferentes tipos de contato. Os valores de $G_i = 10^3 Pa$, $G_i = 10^7 Pa$ e $G_i = 10^9 Pa$ são considerados como baixos, intermediários e altos valores para rigidez da interface, respectivamente. As fibras são orientadas na direção 3, como descrito em seções anteriores. Uma observação está na notação utilizada no software $ABAQUS^{TM}$., que considera as componentes de tensão com a letra maiúscula *S*, e as componentes de deformação com a letra maiúscula *S*.



Figura 4.2 – Modelo em Elementos Finitos do Volume Elementar Representativo utilizado

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Figura 4.3 – Resultados das análises para c_{11}^{eff} e c_{12}^{eff} , para baixos ($G_i = 10^3 Pa$), intermediários ($G_i = 10^7 Pa$) e altos ($G_i = 10^9 Pa$) valores de rigidez da interface



(c) Valores de S1, T1 e T2 para análise com interface de alta rigidez ($G_i = 10^9 Pa$).

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Figura 4.4 – Resultados das análises para c_{44}^{eff} , para baixos ($G_i = 10^3 Pa$), intermediários ($G_i = 10^7 Pa$) e altos ($G_i = 10^9 Pa$) valores de rigidez da interface



(a)

Valores de S5 e T5 para análise com interface de baixa rigidez ($G_i = 10^3 Pa$).



(b) Valores de S5 e T5 para análise com interface de rigidez intermediaria ($G_i = 10^7 Pa$).



(c) Valores de S5 e T5 para análise com interface de alta rigidez ($G_i = 10^9 Pa$). Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Através destes resultados, pode-se obter os gráficos ilustrados nas Figura 4.5 e 4.6, comparando-os com os valores analíticos obtidos por Hashin (2002), onde também foi utilizado um modelo CCA de três fases (fibra, matriz e interface).



Figura 4.5 – Módulo volumétrico transversal normalizado.

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.





Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Conforme ilustrado nos gráficos das Figuras 4.5 e 4.6, constata-se que a metodologia utilizada para determinar os coeficientes efetivos de materiais compósitos considerando o contato imperfeito é eficiente, e obteve-se resultados próximos aos relatados no trabalho de Hashin (2002). Na Tabela 4.2 observa-se uma comparação direta entre os valores obtidos para as duas zonas de estabilização do gráfico, que representam um contato totalmente imperfeito e um contato perfeito, respectivamente.

-	$log_{10}(G_i/$	$(G_m) = -6$	$log_{10}(G_i/G_m)=0$		
_	k_t^{eff}/G_m	G_a^{eff}/G_m	k_t^{eff}/G_m	G_a^{eff}/G_m	
Presente Trabalho	0,8506	0,4034	5,2036	1,9332	
Hashin (2002)	0,8582	0,4300	5,2212	1,9686	
Diferença relativa (%)	0,8926	6,5903	0,3380	1,8300	

Tabela 4.2 – Valores para zonas de estabilização, Presente Trabalho x Hashin (2002)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Observa-se que as diferenças relativas ao cálculo de G_a^{eff}/G_m são maiores do que os observados para k_t^{eff}/G_m . Isto se decorre a complexidade das condições de contorno para o cálculo de G_a^{eff} , que equivale ao valor de C_{44}^{eff} , onde o mesmo envolve esforços de cisalhamento e restrições multiponto (MPC's).

Através dos gráficos das Figura 4.5 e 4.6, observa-se o comportamento do módulo volumétrico transversal efetivo k_t^{eff} e do módulo de cisalhamento longitudinal G_a^{eff} do compósito sob o efeito de uma grande faixa de imperfeição da interface. Para baixos valores de *Gi*, o compósito comporta-se como um modelo "vazio", ou seja, como se as propriedades da fibra não influenciassem nas propriedades efetivas do material. A medida que a rigidez elástica da interface aumenta - na faixa de valores de $log_{10}(G_i/G_m)$ entre -4 e -2 - ocorre um aumento significativo das propriedades efetivas, até que estabilizem no valor esperado para um compósito com contato perfeito entre as fases. O aumento no valor das propriedades a partir de $log_{10}(G_i/G_m) = 2.5$ não é considerado realístico, pois ocorre devido a valores extremos de rigidez da interface.

4.2 ESTUDO DE CASO II

Neste segundo estudo de caso, a metodologia apresentada é utilizada para a determinação dos coeficientes efetivos de materiais compósitos com fibras piezelétricas de seção transversal circular e retangular, com contato imperfeito entre as fases. É realizado um estudo do comportamento destes coeficientes com a variação da fração volumétrica de fibra, seção transversal da fibra e nível de imperfeição da interface.

4.2.1 Dados do Material

Selecionou-se um material compósito com uma fibra e uma matriz comumente utilizadas na engenharia, e com as propriedades facilmente encontradas na literatura. Desta forma, utilizouse a fibra piezelétrica PZT-5A transversalmente isotrópica envolvida em uma matriz de resina epóxi isotrópica (polimérica e não piezelétrica). A Tabela 4.3 define os coeficientes elásticos, piezelétricos e dielétricos que caracterizam a matriz constitutiva dos constituintes do compósito utilizados por (BERGER et al., 2005a).

	<i>c</i> ₁₁	<i>C</i> ₁₂	<i>c</i> ₁₃	<i>C</i> ₃₃	C44	<i>c</i> ₆₆	e ₁₃	e_{15}	<i>e</i> ₃₃	ε_{11}	\mathcal{E}_{33}
			GPa					C/m ²		nF	/m
Fibra	121	75,4	75,2	111	21,1	22,8	-5,4	12,3	15,8	8,11	7,35
Matriz	3,86	2,57	2,57	3,86	0,64	0,64	-	-	-	0 <i>,</i> 0797	0,0797

Tabela 4.3 – Parâmetros do material compósito utilizado

Fonte: Adaptado de BERGER et al., 2005a

Definidos os parâmetros da fibra e da matriz, modela-se uma interface isotrópica com as mesmas propriedades dielétricas e piezelétricas da matriz, porém com os valores do módulo de cisalhamento G_i utilizados, a fim de estudar o comportamento dos coeficientes efetivos sob contato imperfeito. O coeficiente de Poisson da interface v_i é novamente fixado em 0.3.

4.2.2 Modelo em Elementos Finitos

Da forma como descrito na seção anterior, todas as análises foram realizadas no pacote de softwares de análise por Elemento Finitos *ABAQUS*TM, utilizando uma rotina na linguagem *Python* para automatizar a modelagem das geometrias, geração das malhas e aplicação das condições de contorno. Uma nova rotina foi realizada para o pós-processamento dos resultados obtidos, podendo assim determinar as propriedades efetivas conforme as equações descritas no capítulo de revisão bibliográfica.

Foram utilizados elementos piezelétricos trílineares isoparamétricos de 8 nós, com 4 graus de liberdade por nó, sendo eles 3 de translação e 1 de potencial elétrico, conforme também descrito em seções anteriores. Com base na análise de convergência do modelo utilizado na validação, foram utilizados cerca de 11.000 elementos em cada análise. A Figura 4.7 ilustra o conjunto de Volumes Elementares Representativos discretizados via MEF, utilizados nas análises para cada fração volumétrica de fibra. Ressalta-se que o sistema de coordenadas adotado é o mesmo citado em seções anteriores, sendo a direção 3 (Z) a direção da fibra.

Figura 4.7 – Frações volumétricas de fibra utilizadas: 10%, 20%, 30%, 40%, 50% e 60%



(b) Frações volumétricas de fibra retangular.

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Os resultados obtidos para a segunda e sexta análise no caso de baixa rigidez da interface ($G_i = 10^3 GPa$) e fração volumétrica de fibra 0.4 são ilustrados na Figura 4.8. 70

Figura 4.8 – Resultados obtidos para segunda e sexta análise

(d) Valores de T5, E2, D2 e S5 para sexta análise com fibra quadrada ($G_i = 10^3 Pa$).

Com a posse dos coeficientes efetivos para cada uma das análises, construiu-se os gráficos ilustrados nas Figuras 4.9 – 4.19, demonstrando a influência dos parâmetros fração volumétrica de fibra, seção transversal da fibra e nível de imperfeição da interface. Nos gráficos, são utilizados três valores de referência para o nível de imperfeição, sendo eles os valores para o módulo de cisalhamento da interface $G_i = 10^{-3}MPa$, $G_i = 10^{0}MPa$ e $G_i = 10^{4}MPa$, representado um descolamento completo da fibra-matriz (baixo valor de rigidez), uma região intermediaria e um contato perfeito (alto valor de rigidez), respectivamente.



Figura 4.9 – Comportamento de C_{11}^{eff} normalizado

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.





Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Figura 4.11 – Comportamento de C_{13}^{eff} normalizado.

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Figura 4.12 – Comportamento de C_{33}^{eff} normalizado.

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.


Figura 4.13 – Comportamento de C_{44}^{eff} normalizado

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.





Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Figura 4.15 – Comportamento de e_{15}^{eff} .

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.





Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.



Figura 4.19 – Comportamento de ε_{33}^{eff} normalizado.

Fonte: Elaborado pelo próprio Autor.

Em se tratando de coeficientes elásticos, todos os coeficientes têm seu valor reduzido com a degradação das propriedades da interface, exceto o c_{33}^{eff} , que praticamente se mantém constante. Isto ocorre devido a direção da aplicação do deslocamento prescrito ser na própria direção longitudinal da fibra, fazendo com que as propriedades da interface praticamente não influenciem no comportamento deste coeficiente efetivo.

Nos outros coeficientes efetivos elásticos, ao analisarmos os resultados para baixos valores de rigidez da interface, os valores decrescem com o aumento da fração volumétrica de fibra (FVF). Este decrescimento pode ser justificado pelo aumento da fração volumétrica da própria interface, que cresce com o aumento da FVF. Sob condições de contato perfeito, os coeficientes efetivos elásticos tem seus valores aumentados com o aumento da FVF.

Em se tratando dos coeficientes piezelétricos, os valores para e_{33}^{eff} se mantém inalterados com a variação do nível de imperfeição da interface, da mesma forma que o coeficiente elástico c_{33}^{eff} , porém possuem uma variação significativa com o aumento da FVF.

Por fim, tratando-se dos coeficientes dielétricos, percebe-se que os coeficientes ε_{11}^{eff} e ε_{33}^{eff} variam apenas com a FVF, mantendo-se inalterados com a imperfeição da interface.

Os resultados para ambas fibras retangulares e circulares são coerentes, sendo próximos durante o comportamento de todos os coeficientes, quando sob as mesmas condições de FVF e

rigidez da interface. Seus valores se distinguem em maior intensidade nos coeficientes efetivos $c_{11}^{eff}, c_{12}^{eff}, c_{66}^{eff}$ e e_{15}^{eff} . As diferenças encontradas entre os modelos com fibra com seção transversal retangular e circular para o coeficiente e_{15}^{eff} são de até 36% para o caso de baixa rigidez da interface ($G_i = 10^3 Pa$), e diminuem para valores próximos a 25% no caso de contato perfeito. Para o coeficiente c_{66}^{eff} as diferenças chegam a até 150% para os casos de baixa rigidez, e diminuem para o caso de contato perfeito ($G_i = 10^9 Pa$), chegando a 9%. A diferença encontrada nestes coeficientes é também relatada em trabalhos anteriores de Tita *et al.* (2015).

Estas diferenças podem ser justificadas por vários fatores, dentre eles a própria geração da malha do modelo. As faces contendo a fibra (Z+) foram particionadas a fim de melhorar a qualidade da malha, tornando-a simétrica. Porém observa-se um problema na razão de aspecto dos elementos da interface, devido ao fato de a espessura ser muito pequena em relação ao tamanho de cada elemento. Este problema gera erros numéricos e pode afetar os resultados. A geração da malha da fibra retangular pode parecer simples, porém ao adicionar uma terceira fase de fina interface entre a fibra e a matriz, os elementos passam a se distorcer nas regiões próximas ao vértice da fibra. A diferença nos valores das propriedades da rigidez da interface pode gerar problemas numéricos de condicionamento na matriz de rigidez do sistema de equações lineares, podendo também afetar os resultados.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho, abordou-se uma modelagem numérica a fim de determinar as propriedades efetivas de materiais compósitos com fibras piezelétricas (circular e quadrática) sujeitas a um contato imperfeito com a matriz. Assim, foram abordados conceitos de um modelo micromecânico comumente denominado Volume Elementar Representativo (VER), que sujeito a condições de contorno adequadas, é capaz de determinar as propriedades do meio efetivo homogeneizado. Além disso, apresentou-se uma revisão bibliográfica com o intuito de habituar o leitor com os conceitos necessários para um total entendimento da metodologia.

Com relação aos resultados, inicialmente validou-se o modelo computacional, determinando o comportamento do módulo de bulk transversal efetivo k_t^{eff} e do módulo de cisalhamento longitudinal efetivo G_a^{eff} sob diferentes condições de contato entre a fibra e a matriz de um compósito não piezelétrico. Em seguida comparou-se os resultados com aqueles obtidos por Hashin (2005), que utilizou um modelo micromecânico CCA (Composite Cylindrical Assemblage). Obteve-se resultados próximos do esperado, com diferenças pontuais nas zonas de contato perfeito e contato totalmente imperfeito em valores máximos de 6%.

No segundo estudo de caso, abordou-se a determinação dos coeficientes efetivos elásticos, piezelétricos e dielétricos de um material compósito com fibras piezelétricas PZT-5A, sob diferentes tipos de contato entre as fases, e sob a influência de fibras circulares e retangulares. Pode-se observar que uma variação dos níveis de imperfeição mecânica da interface não interfere apenas nos coeficientes efetivos elásticos, mas também nos coeficientes piezelétricos do material. As diferenças entre os casos de fibra circular e fibra retangular, sob os mesmos parâmetros de fração volumétrica de fibra e condição de interface são maiores nos coeficientes efetivos c_{11}^{eff} , c_{12}^{eff} , c_{66}^{eff} e e_{15}^{eff} , obtendo diferenças de até 150% para o caso de baixa rigidez no coeficiente c_{66}^{eff} . Porém estas diferenças diminuem com o aumento da rigidez da interface, chegando ao valor máximo de 9% para o caso de contato perfeito.

A metodologia foi empregada para fibras piezelétricas PZT-5A, porém nada impede que sejam estudados outros tipos de fibra piezelétrica, como a PZT-7A. As rotinas em *Python* desenvolvidas para modelar a geometria, parametrizar os dados de material, gerar a malha, aplicar as condições de contorno e pós-processar os resultados, podem facilmente ser

alimentadas com os parâmetros do novo material, para assim determinar o comportamento das propriedades efetivas deste.

Conclui-se que a metodologia empregada é eficiente para predizer o comportamento de materiais compósitos inteligentes sob uma ampla faixa de imperfeição entre as fases, e pode ser utilizada tanto para determinar as propriedades efetivas elásticas, piezelétricas e dielétricas, como para contribuir no projeto de estruturas inteligentes e no monitoramento da integridade estrutural desta.

Como perspectivas para trabalhos futuros envolvendo a determinação de propriedades efetivas de materiais inteligentes, tem-se no estudo não apenas da imperfeição mecânica entre as fases, mas também de uma imperfeição elétrica. Desta forma, pode-se modelar uma terceira fase representando uma impedância a passagem de corrente entre a fibra e a matriz. Pode-se também simular o contato imperfeito entre as fases através da imposição de elementos de mola entre os nós coincidentes, desta forma, variando a rigidez destas molas, tem-se o contato imperfeito. Tratando-se também de elementos de mola, pode-se modelar uma delaminação pontual na interface, degradando a rigidez de apenas algumas molas. Por fim, através da modelagem computacional tratada neste trabalho, análises dinâmicas podem vir a ser estudadas, a fim de estudar todo o comportamento destes materiais.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BENVENISTE, Y.; MILOH, T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. **Mechanics of Materials**, v. 33, n. 6, p. 309–323, 2001.
- BERGER, H. et al. An analytical and numerical approach for calculating effective material coefficients of piezoelectric fiber composites. International Journal of Solids and Structures, v. 42, n. 21–22, p. 5692–5714, 2005a.
- BERGER, H. et al. A comprehensive numerical homogenisation technique for calculating effective coefficients of uniaxial piezoelectric fibre composites. Materials Science and Engineering A, v. 412, n. 1–2, p. 53–60, 2005b.
- BERGER, H. et al. Unit cell models of piezoelectric fiber composites for numerical and analytical calculation of effective properties. Smart Materials and Structures, v. 15, n. 2, p. 451–458, 2006.
- BERGER, H.; WÜRKNER, M.; GABBERT, U. Effective properties for fiber composites with rhombic pattern and imperfect interface. The 19th International Conference on Composite Materials, p. 5306–5311, 2013.
- BERGER, H.; WÜRKNER, M.; GABBERT, U. A Numerical Homogenization Procedure for Fiber Reinforced Composites With Rhombic Pattern and. Congress of Applied Mechanics, v. 1, p. 1–6, 2014.
- CAPORALE, A.; LUCIANO, R.; SACCO, E. Micromechanical analysis of interfacial debonding in unidirectional fiber-reinforced composites. Computers and Structures, v. 84, n. 31–32, p. 2200–2211, 2006.
- CARDOSO, E. L. Otimização topológica de transdutores piezelétricos considerando nãolinearidade geométrica. [s.l.] PROMEC-UFRGS, 2005.
- CASTILLERO, J. B. et al. Asymptotic homogenization of laminated piezocomposite materials. International Journal of Solids and Structures, v. 35, n. 5–6, p. 527–541, 1998.
- DAMJANOVIC, D. Ferroelectric, dielectric and piezoelectric properties of ferroelectric thin films and ceramics. **Reports on Progress in Physics**, v. 61, n. 9, p. 1267, 1999.
- DE MEDEIROS, R. Desenvolvimento de uma metodologia computacional para determinar coeficientes efetivos de comopósitos inteligentes. [s.l.] Universidade de São Paulo, 2012.
- DROSSEL, W. G. et al. Smart materials for smart applications. Procedia CIRP, v. 36, p. 211-

216, 2015.

FONSECA, J. Ferramentas de Simulação em Mecânica : Elementos Finitos. p. 90, 2002.

- GAUDENZI, P. On the electromechanical response of active composite materials with piezoelectric inclusions. **Computers & Structures**, v. 65, n. 2, p. 157–168, 1997.
- HASHIN, Z. Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. **Mechanics** of Materials, v. 8, n. 4, p. 333–348, 1990.
- HASHIN, Z. Thermoelastic properties of particulate composites with imperfect interface. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, v. 39, n. 6, p. 745–762, 1991.
- HASHIN, Z. Thin interphase/imperfect interface in elasticity with application to coated fiber composites. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, v. 50, n. 12, p. 2509–2537, 2002.
- HASSANI, B.; HINTON, E. Homogenization and Structural Topology Optimization: Theory, practice and software. London: Springer-Verlag, 1999.
- JIN, K. K. et al. Distribution of micro stresses and interfacial tractions in unidirectional composites. Journal of Composite Materials, v. 42, n. 18, p. 1825–1849, 2008.
- K. KAW, A. Mechanics of Composite Materials. 2. ed. [s.l.] LLC, 2006. v. 29.
- KAR-GUPTA, R.; VENKATESH, T. A. Electromechanical response of 1-3 piezoelectric composites: An analytical model. Acta Materialia, v. 55, n. 3, p. 1093–1108, 2007.
- KARI, S. et al. Evaluation of influence of interphase material parameters on effective material properties of three phase composites. **Composites Science and Technology**, v. 68, n. 3– 4, p. 684–691, 2008.
- KHOLKIN, A. L.; PERTSEV, N. A.; GOLTSEV, A. V. Chapter 2: Piezoelectricity and crystal symmetry. Piezoelectric and Acoustic Materials for Transducer Applications, p. 17– 38, 2008.
- LAMPERT, C. M. Chromogenic smart materials. Materials Today, v. 7, n. 3, p. 28-35, 2004.
- LINES M., E.; GLASS A., M. Principles and Applications of Ferroelectrics and Relted Materials. Oxford: Claredon Press, 2001.
- LÓPEZ-REALPOZO, J. C. et al. Analysis of mechanical and electrical imperfect contacts in piezoelectric composites. **Mechanics Research Communications**, 2017.
- M. DANIEL, I.; ISHAI, O. Engineering mechanics of composite materials. 2. ed. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- ÖLANDER, G. A. Zeitschrift für Kristallographie, Kristallgeometrie, Kristalphysic, Kristallchemie. Leipzig, v. 83, p. 145–148, 1932.
- PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D. et al. On the constitutive relations and energy potentials of linear

thermo-magneto-electro-elasticity. **Mechanics Research Communications**, v. 36, n. 3, p. 343–350, 2009.

- REICHL L., E. A Modern Course in Statistical Physics. [s.l.] University of Texas Press., 1980.
- RODRIGUEZ-RAMOS, R. et al. Characterization of piezoelectric composites with mechanical and electrical imperfect contacts. **Journal of Composite Materials**, v. 50, n. 12, p. 1603– 1625, 2015.
- SARTORATO, M. Desenvolvimento de um elemento finito para análise de compósitos inteligentes: Formulação, Implementação e Avaliação. [s.l.] EESP/USP, 2013.
- SEVOSTIANOV, I. et al. Connections between different models describing imperfect interfaces in periodic fiber-reinforced composites. International Journal of Solids and Structures, v. 49, n. 13, p. 1518–1525, 2012.
- SHIMIZU, K.; TADAKI, T. Shape Memory Alloys. **Gordon and Breach Science Publishers**, p. 1–60, 1987.
- SZE, K. Y.; PAN, Y. S. Hybrid Finite Element Models for Piezoelectric Materials. Journal of Sound and Vibration, v. 226, n. 3, p. 519–547, 1999.
- TITA, V. et al. Effective properties evaluation for smart composite materials with imperfect fiber-matrix adhesion. Journal of Composite Materials, v. 49, n. 29, p. 3683–3701, 2015.
- WÜRKNER, M.; BERGER, H.; GABBERT, U. Numerical study of effective elastic properties of fiber reinforced composites with rhombic cell arrangements and imperfect interface. International Journal of Engineering Science, v. 63, p. 1–9, 2013.
- WÜRKNER, M.; BERGER, H.; GABBERT, U. Numerical investigations of effective properties of fiber reinforced composites with parallelogram arrangements and imperfect interface. Composite Structures, v. 116, n. 1, p. 388–394, 2014.
- XIA, Z.; ZHANG, Y.; ELLYIN, F. A unified periodical boundary conditions for representative volume elements of composites and applications. International Journal of Solids and Structures, v. 40, n. 8, p. 1907–1921, 2003.
- ZAMBRANO, M. .; PEREIRA, A. H. . Curso de Materiais e Dispositivos Piezelétricos: Fundamentos e Desenvolvimento. São Carlos, Brasil: ATCP do Brasil, Soluções Piezelétricas, 2004.