

2

Revisão Bibliográfica

2.1. Materiais compósitos, classificações. Distribuição espacial da carga e propriedades.

Um material compósito é definido como a associação de dois ou mais materiais diferentes que são separados por uma interface definida. As propriedades de um material compósito estão relacionadas com as proporções das fases que o constituem. Este fato é aproveitado para construir o material com características e performances mais precisos e afins com a aplicação dada, em relação aos materiais constituintes isoladamente [1].

Muitos desses materiais são compostos por apenas duas fases; uma é chamada de matriz, que é contínua e envolve a outra fase, chamada freqüentemente de fase dispersa [1,2].

Exigências específicas das condições de utilização podem requer a adição, à estrutura do compósito, de outros materiais nomeados como aditivos. Eles constituem a terceira fase que geralmente é encontrada neste tipo de material.

A fase dispersa normalmente é definida como o reforço que fica embebido e protegido pela matriz, embora os aditivos incorporados na matriz do compósito também sejam considerados dentro desta definição de fase.

Os materiais compósitos podem ser classificados em função da geometria, tamanho, distribuição e orientação da fase dispersa, segundo a Figura 2.

A fase dispersa tem um peso fundamental na melhora das propriedades do material compósito com respeito à matriz sozinha. O nível de homogeneidade na distribuição espacial desta fase de reforço tem um impacto importante nas propriedades e na performance do compósito ou da peça de compósito [1]. Geralmente, tanto na procura de melhoras na resposta mecânica do material como de melhoras das propriedades térmicas e outros tipos de propriedades, é importante que a distribuição espacial da fase dispersa seja o mais homogênea possível [1,2]. É por isto que, há alguns anos, vêm se desenvolvendo várias técnicas para estudar e tentar caracterizar a distribuição espacial das partículas de

reforço no volume da matriz, a partir da análise de imagens 2D e 3D de materiais compósitos reais e simulados [3 - 54].

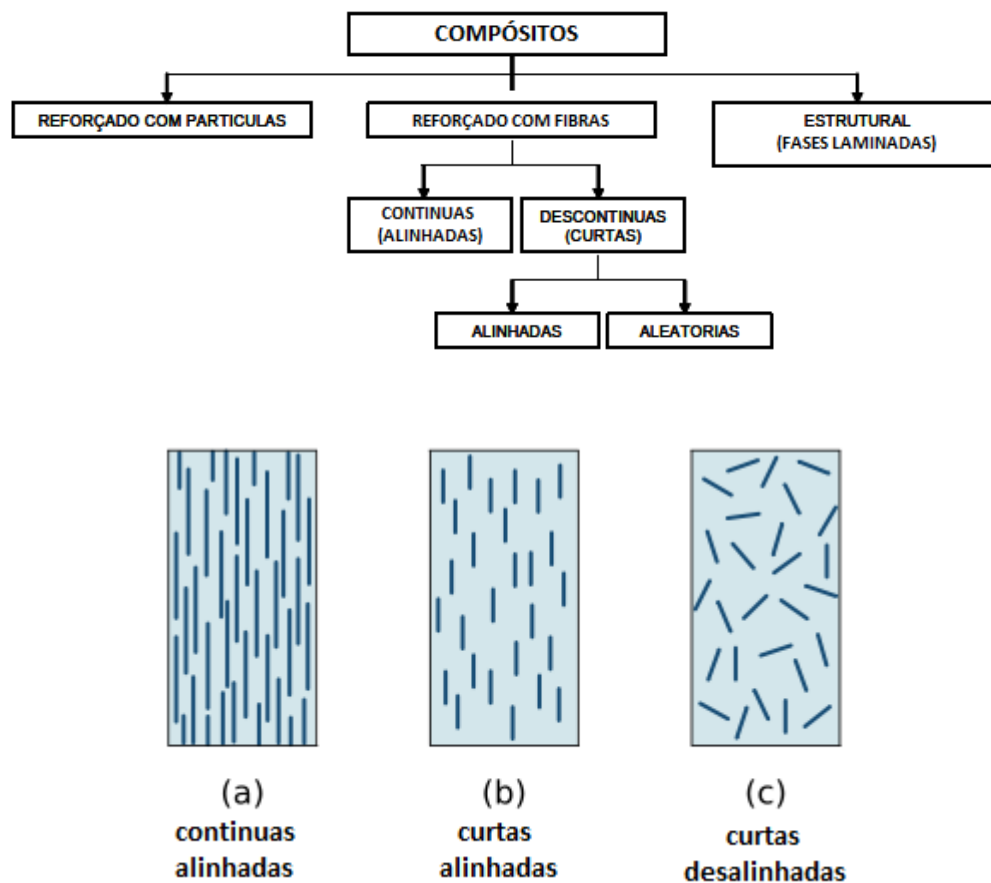


Figura 2 – Classificação dos materiais compósitos. Imagens dos três casos de compósitos reforçados por fibras

2.2. Definição de ensemble espacial de partículas. Ensemble real e ensemble virtual.

Um ensemble espacial de partículas ou só “ensemble de partículas”, pode ser definido como um conjunto de corpos que, com determinada distribuição espacial, ocupam certa área (2D) ou volume (3D). O conjunto de corpos, tanto em duas como em três dimensões, tem em geral determinada distribuição de tamanho, forma e/ou orientação podendo, inclusive, ser de tamanho infinitesimal (pontos).

Em um compósito particulado, tanto a imagem tridimensional da estrutura interna da peça, como uma imagem bidimensional, produto de um corte transversal, constituem exemplos de ensembles de partículas em três e duas

dimensões respectivamente. Neste caso, a imagem tridimensional caracteriza completamente a distribuição de carga na peça, enquanto que a imagem bidimensional em princípio só fornece informação parcial da distribuição de carga.

Por outro lado, num compósito de fibras infinitas e paralelas, a distribuição da carga é caracterizada totalmente a partir de uma imagem da secção transversal da peça, que constitui um ensemble de partículas em duas dimensões.

Estes exemplos de casos de ensembles de partículas constituem ensembles reais porque são uma “foto” de uma realidade objetiva: o compósito real. Mas para fins de pesquisa são criados ensembles virtuais mediante simulações computacionais. Estes ensembles virtuais simulam determinado ensemble real (ou ideal) com determinado nível de aproximação. [3]

2.3. Ensemble homogêneo randômico (random homogeneous ensemble RHE)

Um ensemble homogêneo randômico vai ser definido, para fins da presente tese, como aquele ensemble ideal que representa exatamente um estado de equilíbrio randômico homogêneo de corpos num volume (2D ou 3D) [3,4]. Um exemplo de RHE, na prática, poderia ser o caso de uma imagem de um compósito com a carga num nível de dispersão “perfeito”. Determinados ensembles reais podem ser considerados como RHE. Para isso é preciso fazer um minucioso estudo quantitativo da distribuição espacial e, além disso, é necessário considerar a natureza do material e dos fenômenos envolvidos na história de sua elaboração. Isto é necessário para argumentar que o material se encontra em estado de equilíbrio de dispersão randômica e homogênea dos corpos, no momento que foi tomada a imagem.

2.3.1. Técnicas para simular RHE. Ensemble por seqüência de adição randômica (random sequential addition ensemble RSAE)

Simular um RHE (que não seria mais que criar um ensemble virtual que simule um RHE) tem sido um grande desafio para a computação durante muitos anos [5-24]. Afortunadamente na atualidade já existem varias aproximações aceitas para este problema. Entre as técnicas atualmente usadas para simular RHE pode-se citar:

- Algoritmo de sequência de adição randômica (random sequential addition RSA) [25],
- Algoritmos de Metrópolis [26],
- Esquemas Booleanos [27],
- Campos randômicos gaussianos (Gaussian random fields) [28],
- Processos de recozimento simulados (simulated annealing process) [29],
- Processos de Gibbs [29],
- Tecelagens de Dirichlet (Dirichlet “tessellation”s) [30] e
- Técnicas de Monte Carlo [31,32].

O algoritmo para criar RHE por sequência de adição randômica (RSAE) não é tão preciso quanto outros, por exemplo o algoritmo de Metrópolis, e tem uma faixa de confiabilidade menor quanto à concentração de partículas. Em compensação é bem mais simples e veloz, podendo ser implementado em trabalhos dentro da faixa de concentração certa e onde o nível de exigência quanto à precisão permite usá-lo [25,33].

Nos estudos apresentados na presente tese foram construídos RSAE para simular RHE. A idéia do algoritmo genérico a ser implementado em um software especializado para construir um RSAE é relativamente simples:

No espaço vazio inicialmente vão sendo colocados os corpos um a um, sucessivamente com qualquer coordenada randômica que não crie superposição de corpos [Figura 3].

A programação computacional desta idéia relativamente simples não é imediata, em particular para o caso em que possa existir no conjunto de corpos determinada distribuição de tamanho, forma e/ou orientação. No próximo capítulo vão ser expostos os detalhes da rotina de programação implementada para este fim.

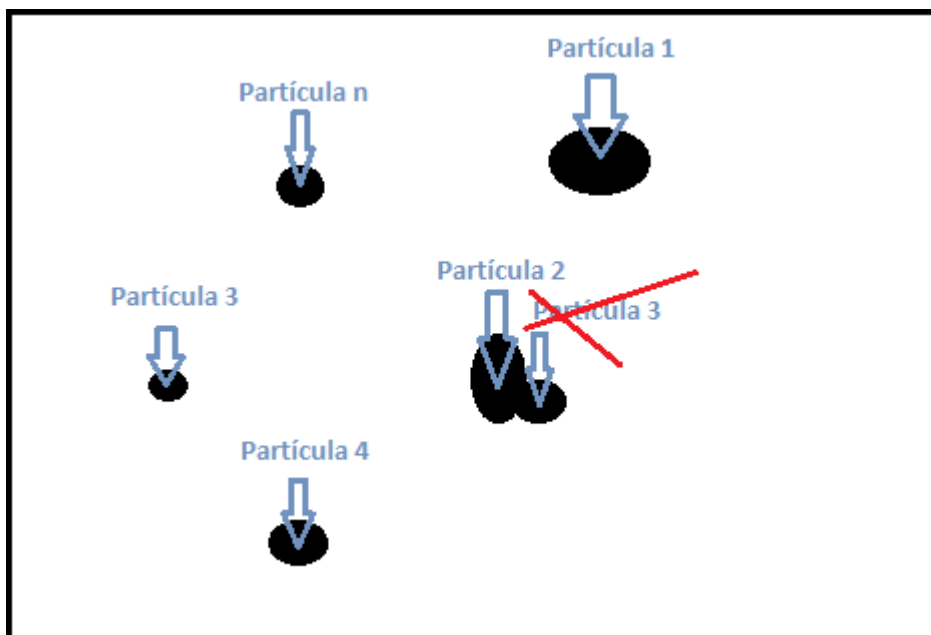


Figura 3 – Idéia geral do algoritmo RSAE: quando a coordenada randômica da partícula implica superposição com uma partícula que já existe, esta é gerada outra vez (partícula 3).

2.4. Caracterização da distribuição espacial de corpos num ensemble. Parâmetros espaciais.

Um primeiro estudo importante na imagem que define o ensemble está associado com a análise das características do conjunto de corpos que o formam, ou seja: quantidade de corpos, distribuição de tamanho, forma e/ou orientação. Técnicas para este tipo de análise estão em geral bem estabelecidas. O presente trabalho não vai se focar nesse tipo de pesquisa.

Por outro lado, o que complementa o estudo do ensemble espacial de corpos é precisamente a análise da distribuição dos corpos no espaço. Para este tipo de pesquisa existem vários métodos [34] onde se definem vários parâmetros espaciais. Cada um deles independentes traz uma informação não necessariamente completa da distribuição espacial. É comum usar vários métodos e medir vários parâmetros para ter uma caracterização mais completa da distribuição espacial. Neste sentido, ajuda o conhecimento de dados e informações sobre a distribuição espacial obtidas por outras vias, que não se baseiam na análise matemático-geométrico direta da imagem que define o ensemble. Estas outras vias têm a ver com o conhecimento da natureza do material: seu histórico, das leis e modelos de fenômenos físicos associados ao processo de dispersão da carga, etc.

Para facilitar a medição dos parâmetros de distribuição, a imagem é previamente segmentada em relação ao conjunto de corpos cuja distribuição espacial vai ser estudada. A operação de segmentação é comum na área de processamento digital de imagens. Ela consiste em conseguir levar a apenas duas cores a imagem inicial de tal maneira que os corpos ou as áreas de interesse fiquem com uma cor (branca) e o resto na outra cor (preta). Para esse propósito um procedimento standard é “segmentar” o histograma de cores da imagem, escolhendo adequadamente os limites ou limiares de cada segmento.

Também cabe assinalar que os parâmetros a seguir vão ser definidos para a análise de imagens de duas dimensões, considerando que no presente trabalho só foram analisadas imagens bidimensionais. No entanto, estender a definição a três dimensões é imediato na maioria dos casos.

2.4.1. Medidas de frequência espacial

Uma vez a imagem segmentada (2D), a medida de frequência espacial se define primeiro escolhendo um segmento na imagem, que geralmente chega até os extremos da mesma. Depois, partindo de um extremo e com um tamanho de passo “h” se avança contando quantos objetos existem em cada passo, até chegar ao outro extremo do segmento. Desta maneira se levanta um perfil de frequência espacial de objetos no segmento. Este procedimento pode ser estendido a uma análise direcional de toda a estrutura. Isto pode ser feito a partir do mesmo segmento anterior andando com passo “h”, mas esta vez contando quantos corpos ficam em todo o plano de espessura “h” transversais ao segmento analisado. É comum fazer este último procedimento escolhendo segmentos nas direções “x” e “y” da imagem [2] (Figura 4).

Manipulando estatisticamente os dados de forma adequada [3, 35,36], é possível extrair determinada informação da distribuição espacial de corpos na imagem.

Dada a natureza desta medida, não é difícil ver que este parâmetro é especialmente útil na identificação de gradientes de concentração nas imagens: determinando a direção e sentido do gradiente e avaliando o quão pronunciado é. Além disso, ainda que de uma maneira grosseira, permite detectar a presença de outros tipos de inhomogeneidades como clusters ou áreas de exclusão [1,2,3].

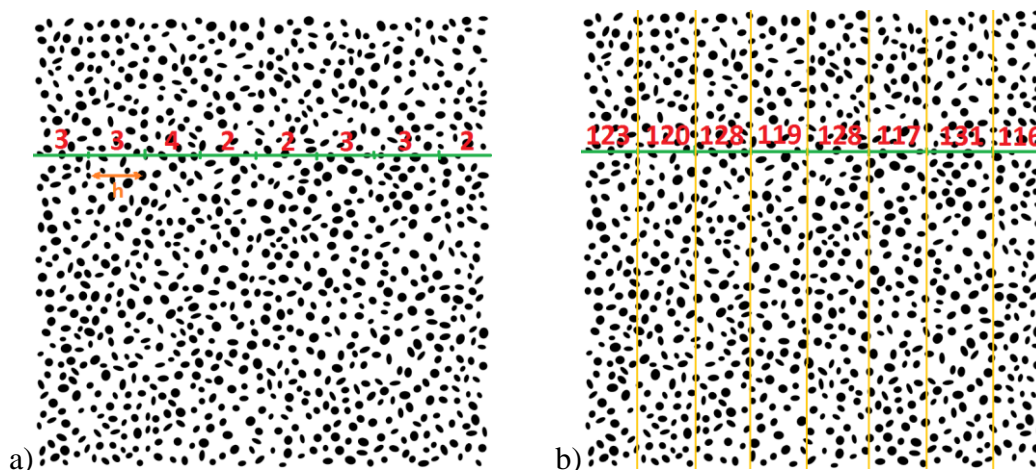


Figura 4 – Medidas básicas de frequência espacial na direção do eixo “x”. a) Contagem no segmento, b) Contagem nas áreas

2.4.2. Operação de “tessellation” e parâmetros espaciais derivados.

“Tessellation” é uma palavra do inglês cuja tradução mais aproximada ao português é “mosaico”, e dá nome a uma importante metodologia de análise geométrico-quantitativo a partir da qual é possível definir vários parâmetros de distribuição para um ensemble de partículas. O desenvolvimento desta técnica historicamente representou um grande avanço em matéria de análise de imagens [37,38,39,40,41,42].

O método de “tessellation” de Dirichlet utiliza o centro de gravidade (ou centróide) das partículas de uma imagem para gerar uma rede de células polinomiais de tal maneira que cada ponto do interior da célula está mais próximo do centro da célula (i.e centróide da partícula) que de qualquer outro centróide [37,38,39]. A vizinhança imediata de cada partícula fica automaticamente definida considerando as partículas cujas células compartilham fronteira (Figura 5a).

A “tessellation” de Dirichlet pode ser usada em imagens de compósitos onde a concentração de carga é bem pequena (menor de 1%), ou no caso raro onde a carga esteja representada na imagem por partículas de forma, tamanho e orientação muito parecidas. Esta técnica, no entanto, foi estendida para ser aplicada em imagens de corpos de dimensões finitas e qualquer padrão de forma e/ou distribuição de tamanho e orientação, no que se conhece na literatura como “tessellation” de corpos finitos ou “tessellation” de Voronoi [42,43]. Neste caso, cada ponto do interior da célula está mais próximo à interface do corpo do interior da célula que à de qualquer outro corpo exterior (Figura 5b).

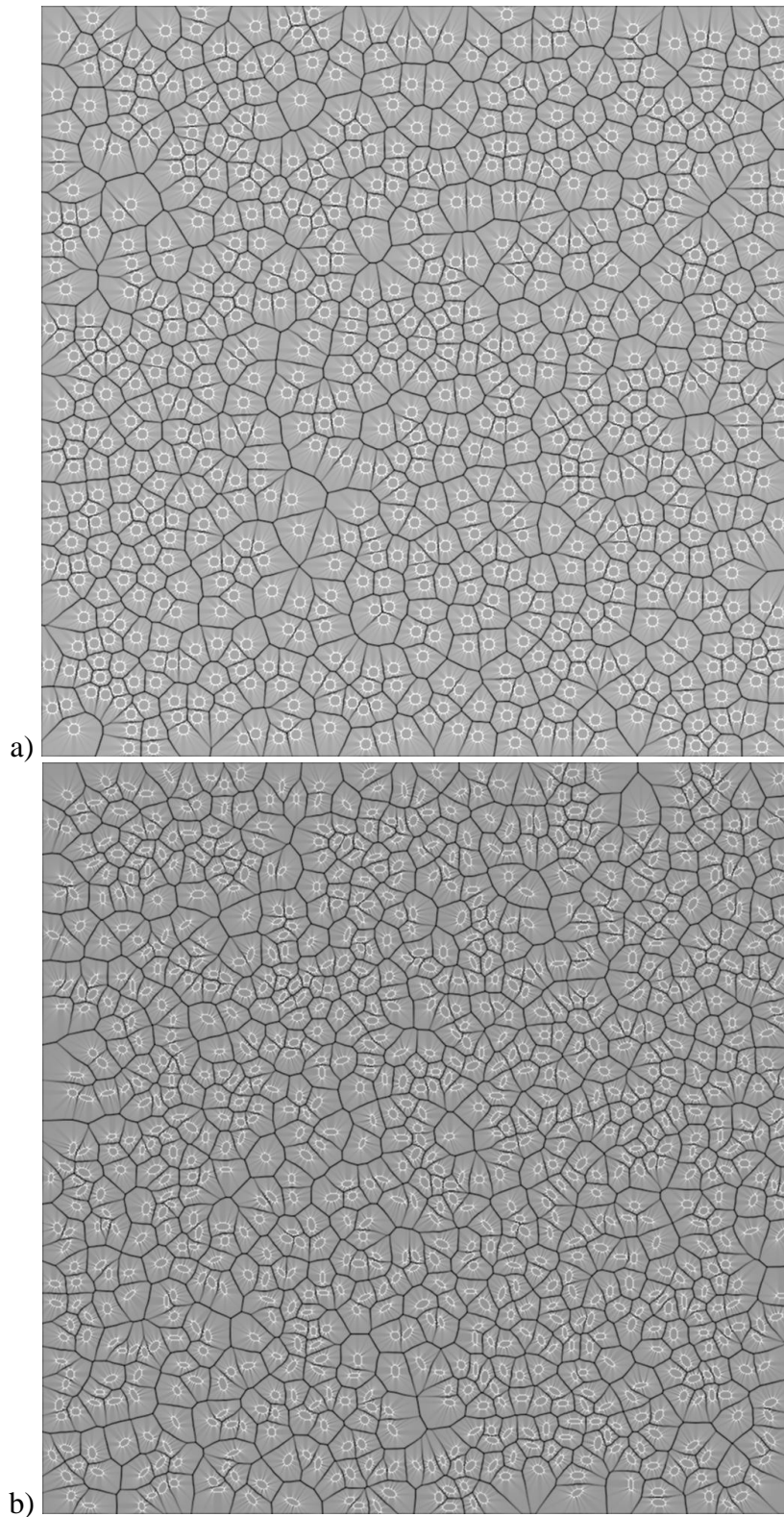


Figura 5 – a) “tessellation” de Dirichlet aplicada a um ensemble espacial de corpos circulares idênticos. b) “tessellation” de Voronoi aplicada a um ensemble espacial de corpos com distribuição de tamanho, forma e orientação heterogênea.

A partir da operação de “tessellation” é possível definir vários parâmetros locais de distribuição espacial associados a cada corpo (Figura 6):

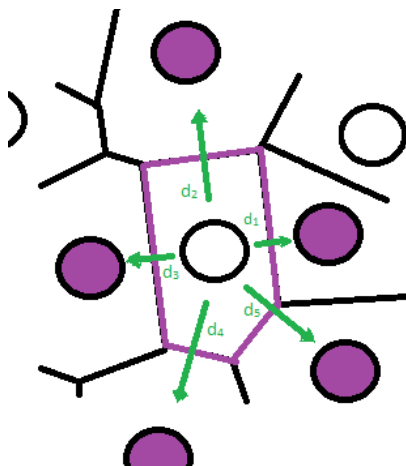


Figura 6 – “tessellation” de Voronoi: As fronteiras da célula do corpo definem os vizinhos mais próximos.

- Área da célula
- Fração de área local (área do corpo/área da célula)
- Número de vizinhos mais próximos
- Distância até o vizinho mais próximo (dnearest)
- Média da distância aos vizinhos mais próximos (dmean)

Os parâmetros estatísticos associados a cada um deles – a média, o desvio padrão e, em particular, o coeficiente de variação (descrito a seguir) – são usados para fazer a análise da distribuição global de partículas na imagem [42,43,33].

2.5.O coeficiente de variação da distancia media aos vizinhos mais próximos (Covdmean) como identificador de um ensemble homogêneo randômico RHE.

O Cov_{dmean} , como o nome o indica, se define como:

$$Cov_{dmean} = \text{DesvioPadrão}(dmean)/\text{Média}(dmean) \quad \text{Eq. 1}$$

Este parâmetro já tinha sido estudado e se mostrou útil na avaliação da homogeneidade espacial em ensembles de corpos pontuais [41,44] e em ensembles de corpos de idêntica forma e tamanho [43]. De fato, foram os autores ingleses N. Yang et al., em seu trabalho de 2001 [33], que estenderam estes estudos a um campo de maior generalidade, considerando corpos com uma determinada distribuição de forma, tamanho e orientação, em ensembles virtuais (RSAE) homogêneos e heterogêneos.

O trabalho desenvolvido na presente tese tem uma estreita relação com o artigo supracitado [33], que é usado como referência e ponto de partida das

pesquisas e resultados expostos no presente documento. Por isso, na presente seção vão ser abordados e comentados os resultados de N. Yang e co-autores com certo detalhe.

Em seu trabalho [33] os autores ingleses, usando 878 e 1463 partículas para 15% e 25% de fração de área respectivamente, constroem vários tipos de ensembles virtuais via basicamente RSA, com distribuição de tamanho, forma e orientação não uniforme, criando distribuições espaciais homogêneas (Figura 7) e heterogêneas (Figura 8). Para as distribuições espaciais heterogêneas foram concebidas dois tipos de inhomogeneidades: clusters e zonas de exclusão. Tanto os clusters como as zonas de exclusão foram concebidos com forma elipsoidal, sendo possível mudar livremente a distribuição de tamanho, forma e orientação dos mesmos (Figura 8).

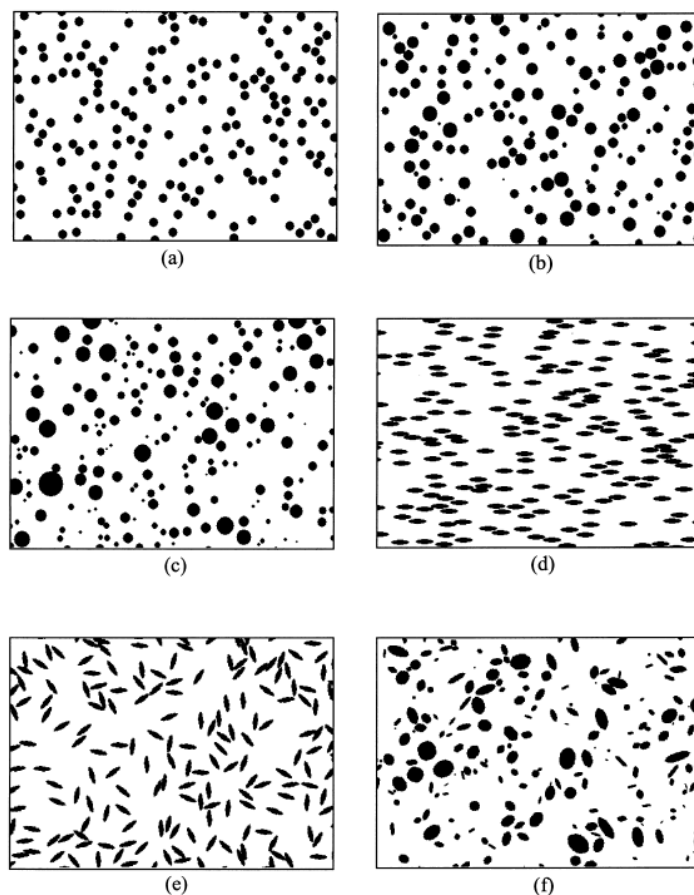


Figura 7 – Ensembles de partículas com distribuição espacial homogênea. a) Forma circular, distribuição de tamanho uniforme. b) Forma circular, distribuição de tamanho normal. c) Forma circular distribuição de tamanho exponencial. d) Forma elipsoidal, distribuição de tamanho uniforme, distribuição de orientação uniforme. e) Forma elipsoidal, distribuição de tamanho uniforme, distribuição de orientação randômica. f) Parâmetros de forma randômicos, distribuição de tamanho não uniforme, distribuição de orientação randômica.

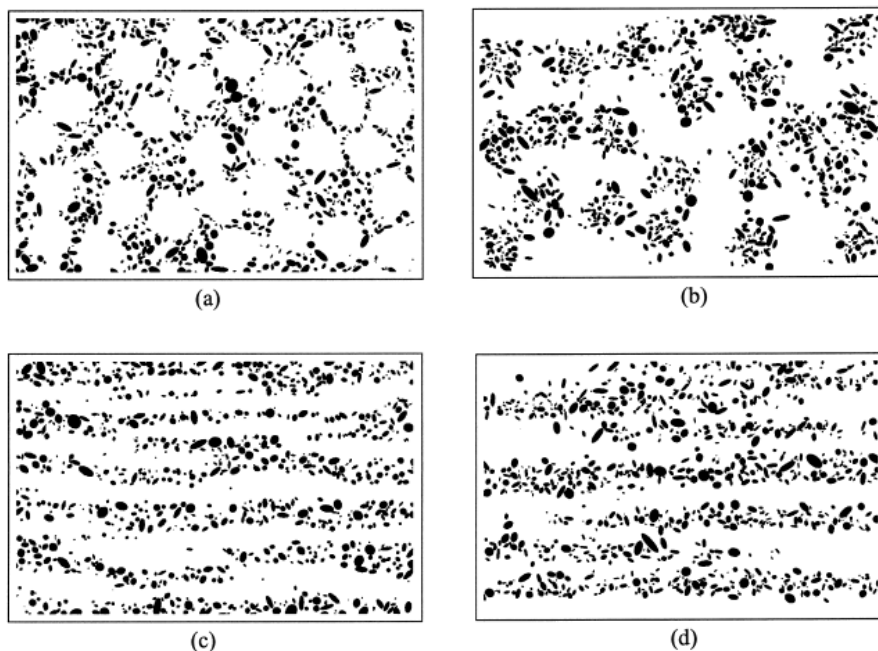


Figura 8 – Ensembles de partículas com distribuição espacial heterogênea. a) Áreas de exclusão isotrópicas. b) Clusters isotrópicos. c) Áreas de exclusão anisotrópicas. d) Clusters anisotrópicos

Logo a seguir, foi medido um conjunto de parâmetros espaciais em ensembles de cada uma das combinações possíveis mudando a concentração (15 ou 25%), variando a distribuição de tamanho, forma e orientação dos corpos, e com distribuição espacial homogênea ou heterogênea (clusters ou zonas de exclusão). A Figura 9 mostra os resultados.

Observe-se que o Cov_{dmean} , diferentemente de outros parâmetros espaciais, conserva um valor praticamente constante ($\sim 0,36$) para todos os ensembles com distribuição espacial homogênea, e muda seu valor dramaticamente para o caso de distribuição espacial heterogênea (clusters, zonas de exclusão). Os autores aprofundaram mais um pouco seu estudo, medindo o Cov_{dmean} em ensembles espaciais homogêneos de 878 partículas, diminuindo o tamanho das partículas, até o limite de partículas pontuais (Figura 10). Como mostra o gráfico, o valor do Cov_{dmean} só começa a cair a partir de 2% de fração de área.

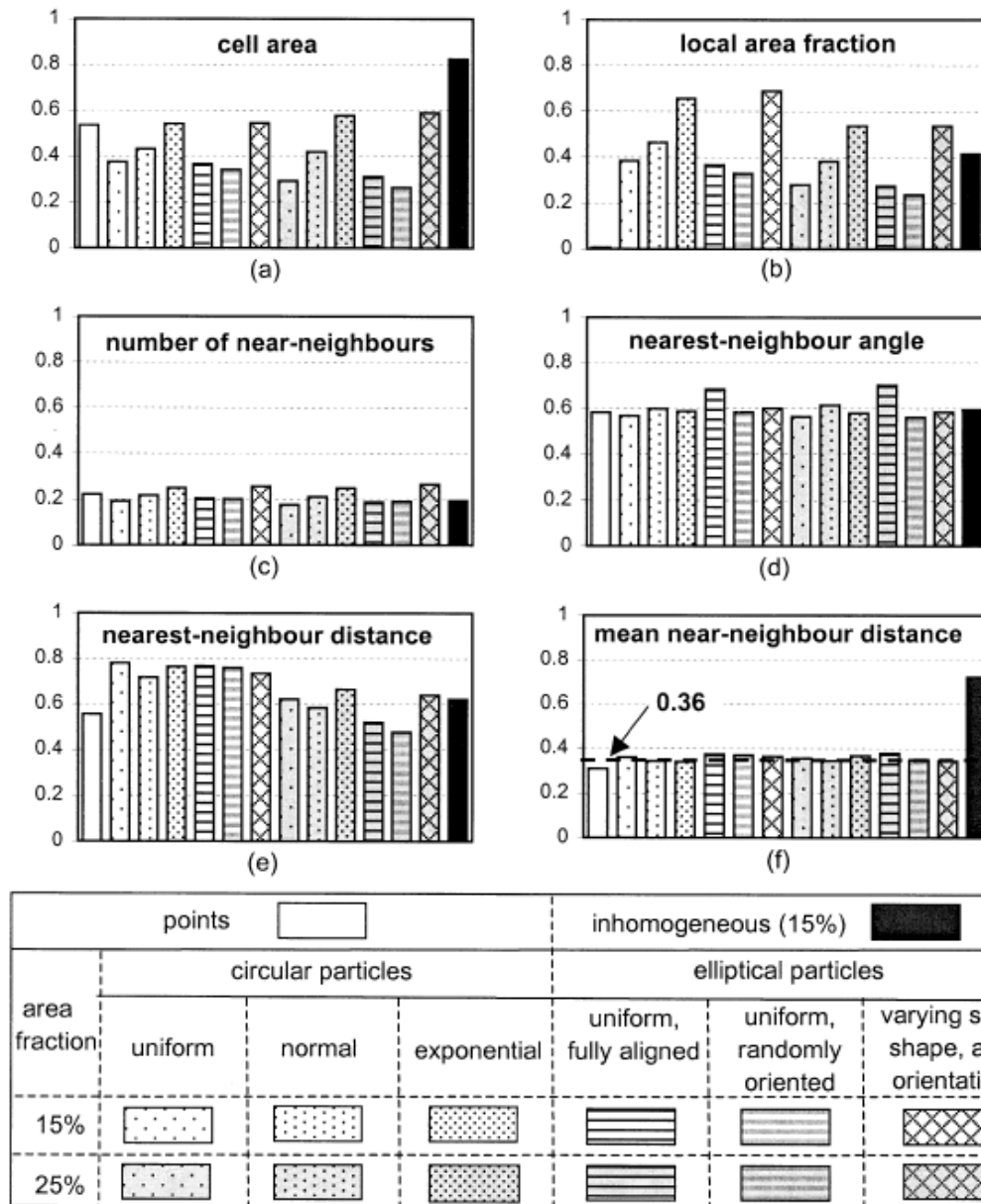


Figura 9 – Resultados do trabalho de Yang e co-autores [33]: Coeficiente de variação de parâmetros de “tessellation” de Voronoi para distribuições simuladas homogêneas e heterogênea (zonas de exclusão).

Este estudo estabelece uma importante argumentação para o uso do Cov_{dmean} como medidor de homogeneidade. No entanto, vale a pena neste ponto colocar limites nesta análise porque, por outro lado, é um fato bem estabelecido [3] que o valor de Cov_{dmean} não depende estritamente da presença de um RHE: existem ensembles espacialmente heterogêneos ou não randômicos que podem ter um valor de Cov_{dmean} de 0,36.

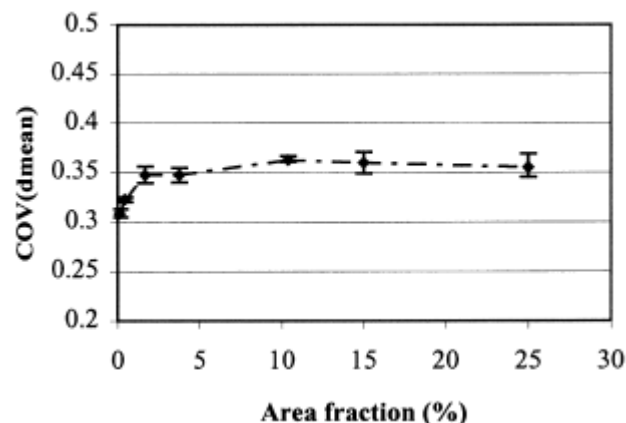


Figura 10 – Evolução do Cov_{dmean} com a diminuição do tamanho de partículas (878 partículas)

Usando a lógica formal para resumir este assunto: “dado um RHE então o Cov_{dmean} medido será de $\sim 0,36$ ”. O contrario deste enunciado não necessariamente é verdade, mas seu contra-recíproco se cumpre tanto quanto ele: “se o Cov_{dmean} medido não é de $\sim 0,36$ então o ensemble não é um RHE”. E este último enunciado oferece uma ferramenta mais prática: usar a medida de Cov_{dmean} para negar a presença de RHE.

Este resultado tem permitido a vários pesquisadores de diferentes áreas usar o Cov_{dmean} para estudar o nível de dispersão da carga nos seus materiais. I. Sinclair, N. Chawla e outros autores [45,46,47,48,49,50] utilizam o Cov_{dmean} e os resultados de N. Yang [33] para estudar o nível de dispersão de partículas de SiC em matrizes de alumínio. Z.P. Luo e co-autores estudam a distribuição espacial de nanofibras, nanotubos de carbono e nanosilicatos em matrizes poliméricas [51,52] usando o Cov_{dmean} e outras variantes estatísticas e metodológicas de sua autoria [53,54].

É importante assinalar que os resultados de N. Yang e co-autores têm uma generalidade limitada, com uma área de validade definida em termos de fração de área e número de partículas. O gráfico da Figura 11 define a área de validade destes resultados. Nas diferentes áreas das ciências e da engenharia em que se estudam ensembles reais (imagens de compósitos, por exemplo) são muitos os casos que não se situam na área de validade destes resultados, de forma que as conclusões e ferramentas derivadas do trabalho de Yang [33] não são, em princípio, aplicáveis para esses casos.

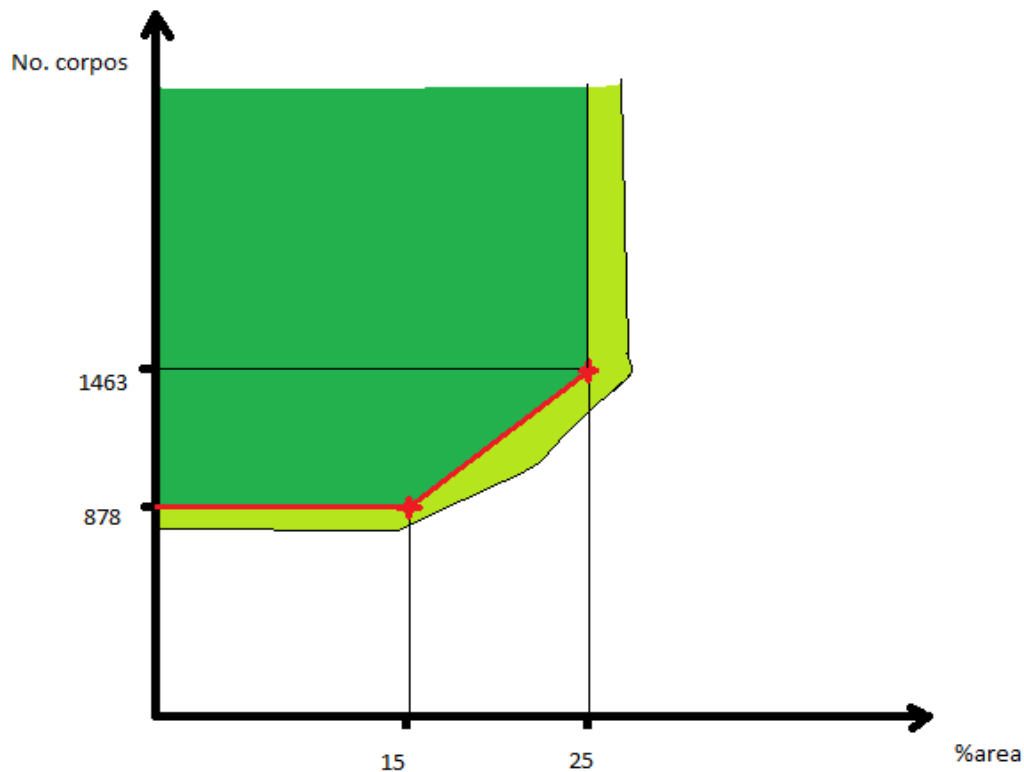


Figura 11 – Área de validade dos resultados de Yang e co-autores (2001) [33]

2.6. Softwares de elementos finitos. OOF2: Testes virtuais para a estimação de propriedades de materiais compósitos

Um software de elementos finitos é, em princípio, um programa de computação que usa a teoria matemática de elementos finitos [55] para resolver problemas físicos importantes para a área de engenharia. Alguns deles são concebidos e programados para resolver problemas da engenharia de materiais e são úteis na resolução e/ou simulação de importantes problemas da área, tais como a avaliação do desempenho de determinada peça com determinada geometria complicada; a determinação de propriedades de um compósito dada a estrutura, a geometria, a distribuição espacial na peça e propriedades dos constituintes; assim como outros problemas importantes e básicos da engenharia de materiais.

O OOF2 é um software de domínio público de elementos finitos dedicado à engenharia de materiais e particularmente efetivo na estimação de propriedades de materiais compósitos mediante testes virtuais [56] (Figura 12).

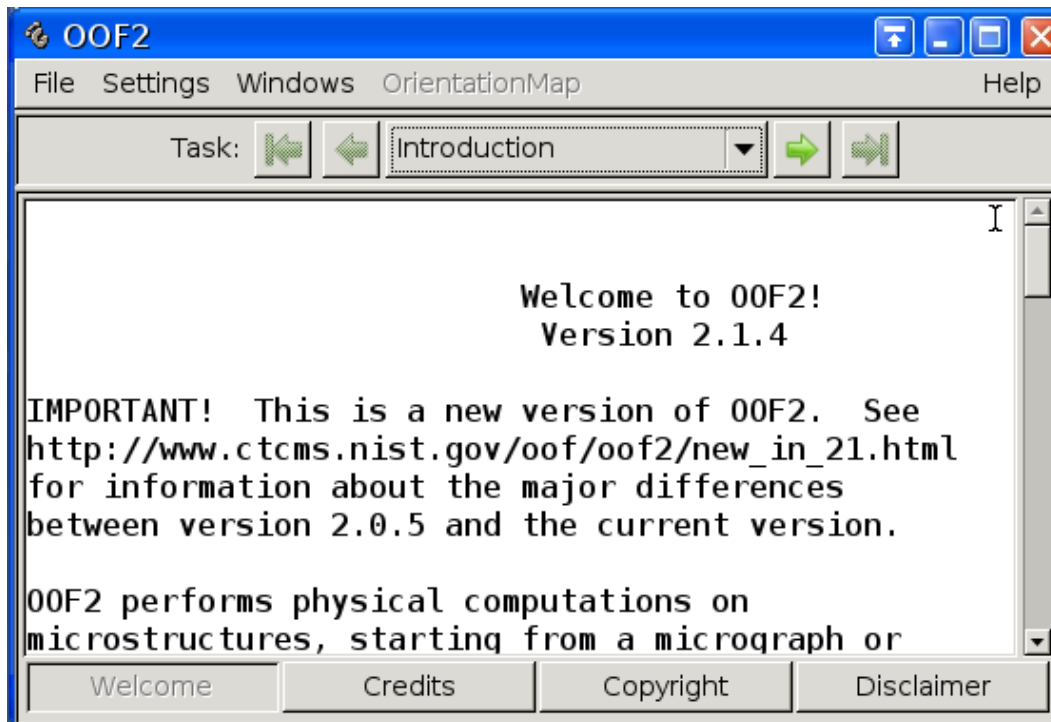


Figura 12 – Interface inicial do OOF2

A Figura 13 mostra o esquema geral de funcionamento do OOF2. Numa primeira área ou fase inicial é necessário definir para o programa a estrutura interna do material: geometria e distribuição espacial e propriedades dos constituintes. Isto se faz na prática usando uma imagem geralmente de um compósito real (ensemble real), embora também possa ser uma imagem que simule a estrutura de um compósito (ensemble virtual).



Figura 13 – Esquema geral do OOF2

Por outro lado, dependendo de qual é o objetivo do usuário, é necessário definir o problema físico a ser resolvido pelo OOF2. O objetivo neste caso geralmente é determinar ou estimar alguma propriedade mecânica (módulo de Young, coeficiente de Poisson, etc.) ou térmica (condutividade, capacidade calorífica, etc.) do material. Uma maneira efetiva nesse sentido é usar o problema físico associado aos experimentos reais, de maneira que a resolução de seu problema físico no OOF2 seria o resultado teórico (ou uma estimativa teórica) do valor da propriedade, a ser medida num teste real.

No sentido de avaliar propriedades em compósitos pode-se dizer que o OOF2 é usado para fazer um teste virtual (ou simulação) e estimar determinada propriedade de interesse. É importante assinalar que o OOF2 só resolve problemas bi-dimensionais, de forma que o objetivo do usuário e a planificação do teste virtual, devem se restringir a esta limitação.

Uma vez definida para o software a estrutura do material e o problema físico a resolver, segue então aplicar a teoria de elementos finitos para a resolução do problema desejado. Uma primeira etapa e muito importante, é a construção do esqueleto¹. O esqueleto é um artifício virtual: uma malha de elementos finitos que se associa à estrutura do compósito (Figura 14). O usuário deve ir “refinando” e/ou “polindo” o esqueleto mediante uma seqüência de passos para atingir o melhor compromisso possível entre vários parâmetros que são:

- 1- Índice de homogeneidade: os elementos da malha devem ser homogêneos com respeito ao material contido em suas respectivas áreas.
- 2- Formas dos elementos: a forma dos elementos devem ser as menos “complicadas” possíveis (evitar ângulos abruptos, etc.)
- 3- Número de elementos: é bom não incrementar em demasia o número de elementos para não sobrecarregar a memória do computador e afetar o desempenho do mesmo.

¹ Para a descrição desta parte de aplicação do método de elementos finitos, estão sendo usados e brevemente explicados os conceitos e a nomenclatura definida no manual de usuário do programa.

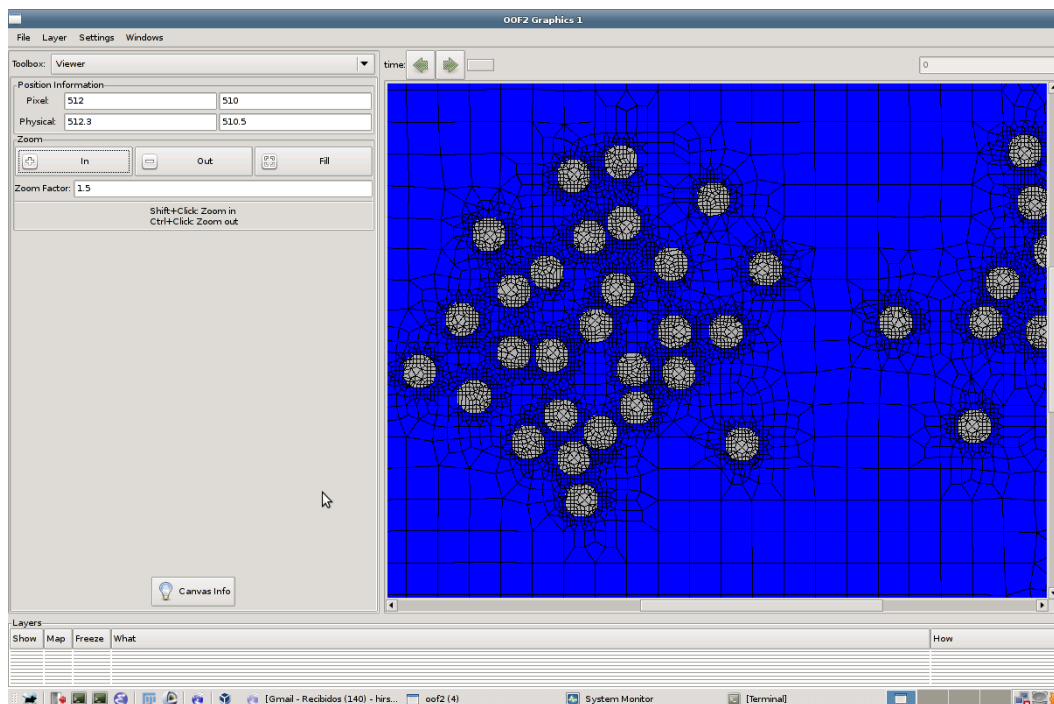


Figura 14 – Esqueleto associado à imagem transversal de um compósito virtual de fibras infinitas e paralelas. (branco: fibra, azul: matriz).

Uma vez refinado o esqueleto é necessário escolher o tipo de malha a usar, definindo o tipo de elemento. Isto se faz escolhendo a ordem do polinômio associado aos elementos da malha. Geralmente se trabalha com ordem 2, embora seja possível aumentar essa ordem para obter um ganho em precisão do resultado final, sacrificando o tempo de cálculo. Os usuários avançados devem explorar melhor esta parte.

Já com a malha definida o software está em condições de começar o cálculo que dará solução ao problema que lhe foi colocado: o teste virtual está pronto para ser efetuado. Geralmente as condições do problema levam o sistema a uma nova condição de equilíbrio, ou ao menos a uma condição estacionária. O software fornece os novos valores das magnitudes de interesse na nova condição de equilíbrio, as quais são usadas para determinar as propriedades do material.

Na atualidade o OOF2 e outros softwares de elementos finitos similares são utilizados para estudar e/ou estimar propriedades de diferentes materiais. A. Zivelonghi, A. Brendel e co-autores no seu trabalho [57] utilizam uma aproximação bi-dimensional para, mediante uso do OOF2, pesquisar a resposta mecânica local de compósitos particulados de W–CuCrZr e para fazer um estudo da condução térmica de uma camada de tungstênio poroso obtida por plasma-spray. Tobias Zieglere e co-autores [58] usam o OOF2 para estimar propriedades

elásticas de compósitos laminados de metal/cerâmica (AlSi12/Al₂O₃) e comparar os resultados com os valores obtidos mediante testes de espectroscopia ultrassônica de fase (ultrasonic phase spectroscopy UPS). Em seu trabalho, Srinivasa R. Bakshi [59] aplica outro software livre de elementos finitos para estimar propriedades elásticas em TaC sintetizado por arco de plasma. Leon L. Mishnaevsky Jr, no seu trabalho [60], usando um sofisticado programa de elementos finitos (Voxel2FEM) que permite gerar complexos mapas estruturais em 3D, estuda o nível de danos em compósitos particulados virtuais. As referências [61-65] contêm mais alguns exemplos de uma lista bem maior do uso de softwares de elementos finitos na caracterização de materiais.

2.7.Objetivos do trabalho de tese

1. Reproduzir os resultados de N. Yang e co-autores [33].
2. Ampliar a área de validade dos resultados de N. Yang e co-autores, para o que se propõe diminuir o número de partículas abaixo de 878 em ensembles virtuais RHE criados por RSA, verificando até que ponto o valor do Cov_{dmean} se mantém constante e/ou estável ao redor de 0,36. Para isso, caminha-se em duas direções dentro do gráfico apresentado na Figura 11 :
 - a. Mantendo a fração de área de partículas constante
 - b. Mantendo tamanho de partículas constante
3. Programar um código computacional que permita criar e refinar com eficiência mapas de Cov_{dmean} de imagens binárias simuladas ou reais.
4. Efetuar testes virtuais no OOF2 para estudar a relação da resposta mecânica transversal de peças virtuais de compósitos com fibras infinitas e paralelas, com as características da distribuição espacial das fibras no interior do material.