



Hirschel Valiente Rouco

**Influência da Distribuição Espacial do Reforço nas
Propriedades de Compósitos: Simulação e Caracterização
de Microestruturas. Modelagem por Elementos Finitos**

Tese de Doutorado

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos do Departamento de Engenharia de Materiais da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Sidnei Paciornik
Co-Orientador: Prof. José Roberto Moraes d'Almeida

Rio de Janeiro
Setembro de 2011



Hirschel Valiente Rouco

**Influência da Distribuição Espacial do Reforço nas
Propriedades de Compósitos: Simulação e Caracterização
de Microestruturas. Modelagem por Elementos Finitos**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Sidnei Paciornik

Orientador

Departamento de Engenharia de Materiais - PUC-Rio

Prof. José Roberto Moraes d'Almeida

Co-Orientador

Departamento de Engenharia de Materiais - PUC-Rio

Profa. Lavinia Maria Sanabio Alves Borges

UFRJ

Prof. Norberto Cella

UERJ

Prof. Roberto Ribeiro de Avillez

Departamento de Engenharia de Materiais - PUC-Rio

Prof. Marcos Henrique de Pinho Mauricio

Departamento de Engenharia de Materiais - PUC-Rio

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 21 de setembro de 2011

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, da autora e do orientador.

Hirschel Valiente Rouco

Graduado em Física pela Universidade de Havana. Mestre em Física pela Universidade de Havana.

Ficha Catalográfica

Rouco, Hirschel Valiente

Influência da Distribuição Espacial do Reforço nas Propriedades de Compósitos: Simulação e Caracterização de Microestruturas. Modelagem por Elementos Finitos / Hirschel Valiente Rouco; orientadores: Sidnei Paciornik e José Roberto Moraes d'Almeida. – Rio de Janeiro: PUC-Rio, Departamento de Engenharia de Materiais, 2011.

125 f. : il. ; 30 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia de Materiais.

Inclui referências bibliográficas.

Compósitos, Simulação, Distribuição Espacial, Cov(dmean), Ensaio Virtuais, Elementos Finitos

CDD: 620.11

Agradecimentos

Agradeço aos meus dois orientadores doutores Sidnei Paciornik e José Roberto d'Almeida pela orientação e a ajuda recebida, e por manter a fé em mim.

Agradeço ao Brasil e ao CNPq por fazer possível minha formação de doutor.

Resumo

Rouco, Hirschel Valiente; Paciornik, Sidnei; d'Almeida, José Roberto Moraes. **Influência da Distribuição Espacial do Reforço nas Propriedades de Compósitos: Simulação e caracterização de Microestruturas. Modelagem por Elementos Finitos.** Rio de Janeiro, 2011. 125p. Tese de Doutorado - Departamento de Engenharia de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

É um fato conhecido que o nível de dispersão da carga (reforço) num compósito assim como as características da sua distribuição espacial tem uma estreita relação com as propriedades do material. Neste sentido, a caracterização e o controle da distribuição espacial e/ou dispersão da carga no volume da matriz em materiais compósitos é um problema importante no qual atualmente se trabalha em várias frentes. O presente trabalho aprofunda no uso do coeficiente de variação da distância média aos vizinhos mais próximos $Cov(dmean)$ como parâmetro de caracterização da distribuição da carga em compósitos. São pesquisados os limites de uso deste parâmetro para a identificação de distribuições randômicas e homogêneas de partículas em imagens 2D. Para realizar este estudo foi necessário desenvolver diferentes códigos de programação com o fim de simular imagens de configurações espaciais características de corpos (distribuição randômica e homogênea, presença de clusters, zonas de exclusão), e caracterizá-las. Como resultado desta pesquisa é expandida a área de aplicação da metodologia que usa o $Cov(dmean)$ para estudar a presença de distribuições randômicas e homogêneas em imagens com concentrações menores do que 25% (em área de corpos). Também é sugerido um limite para o número mínimo de corpos em imagens e campos locais, abaixo do qual o critério oferecido pelo valor do $Cov(dmean)$ não é confiável. Uma nova ferramenta computacional é desenvolvida e apresentada: “mapas de $Cov(dmean)$ ”. Ela permite estudar a presença de distribuições espaciais características em campos locais entre outras potencialidades expostas na tese. Também, como parte deste trabalho de tese, são realizados ensaios virtuais usando o software de elementos finitos OOF2, para determinar propriedades em materiais compósitos reais e virtuais com vários tipos de distribuição espacial do reforço, observando a influência da distribuição da carga nas propriedades finais do compósito.

Palavras-chave

Compósitos; Simulações; Distribuição Espacial; $Cov(dmean)$; Elementos Finitos

Abstract

Rouco, Hirschel Valiente; Paciornik, Sidnei (Advisor); d'Almeida, José Roberto Moraes (Co-Advisor). **Influence of the reinforcement spatial distribution on the properties of composites. Simulation and Characterization of Microstructures. Modeling by Finite Elements.** Rio de Janeiro, 2011. 125p. Doctoral Thesis – Departamento de Engenharia de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

It is a known fact that the level of dispersion of the load (reinforcement) in a composite and the characteristics of its spatial distribution has a close relationship to the material properties. In this sense, the characterization and control of the spatial distribution and / or spread of the load in the volume of the matrix in composite materials is an important problem that is currently under research on several fronts. This thesis promotes the use of the coefficient of variation of the average distance to nearest neighbors $Cov(dmean)$ as a parameter characterizing the load distribution in composites. In this work, the limits of use of this parameter for the identification of random and homogeneous distributions of particles in 2D images are investigated. To conduct this study it was necessary to develop different programming codes in order to simulate images of characteristic spatial configurations of bodies (random, homogeneous distribution, presence of clusters, zones of exclusion), and characterize them. As a result of this research the area of application of the methodology that uses the $Cov(dmean)$ to study the presence of random and homogeneous distributions in images is expanded to lower concentrations below 25% (in area of bodies). Moreover a limit to the minimum number of bodies in images and local fields is suggested, below which the criteria offered by the value of $Cov(dmean)$ is unreliable. A new computer tool is developed and presented: "maps of $Cov(dmean)$ ". It allows to study the presence of spatial distributions in local fields and other application presented in the thesis. Also, as part of this thesis, virtual tests are conducted using the finite element software OOF2 to determine properties of real and virtual composites with various types of spatial distributions of reinforcement, observing the influence of the load distribution on the final properties of the composite.

Keywords

Composites; Simulations; Spatial Distribution; $Cov(dmean)$; Finite Elements

Sumário

1 Introdução	15
2 Revisão Bibliográfica	19
2.1. Materiais compósitos, classificações. Distribuição espacial da carga e propriedades.	19
2.2. Definição de ensemble espacial de partículas. Ensemble real e ensemble virtual.	20
2.3. Ensemble homogêneo randômico (random homogeneous ensemble RHE)	21
2.3.1. Técnicas para simular RHE. Ensemble por sequência de adição randômica (random sequential addition ensemble RSAE)	21
2.4. Caracterização da distribuição espacial de corpos num ensemble. Parâmetros espaciais.	23
2.4.1. Medidas de frequência espacial	24
2.4.2. Operação de “tessellation” e parâmetros espaciais derivados.	25
2.5. O coeficiente de variação da distancia media aos vizinhos mais próximos (Covdmean) como identificador de um ensemble homogêneo randômico RHE.	27
2.6. Softwares de elementos finitos. OOF2: Testes virtuais para a estimação de propriedades de materiais compósitos	32
2.7. Objetivos do trabalho de tese	36

3 Algoritmos e metodologia	37
3.1. Construção de ensembles virtuais	37
3.1.1. Determinação das coordenadas de cada partícula num RHE	39
3.1.2. Determinação das coordenadas de cada partícula em ensembles com distribuição espacial heterogênea (clusters)	40
3.1.3. Determinação das coordenadas de cada partícula em ensembles com distribuição espacial heterogênea (áreas de exclusão)	42
3.2. Determinação do Cov_{dmean} de ensembles reais e virtuais (imagens 2D)	43
3.3. Cálculo do Cov_{dmean} local e geração de mapas de Cov_{dmean}	47
3.4. Metodologia	49
3.4.1. Corroborando os resultados de N. Yang e co-autores [33]	49
3.4.2. Estendendo a validade dos resultados de N. Yang e co-autores [33]	52
3.4.3. Construindo mapas de Cov_{dmean}	55
3.5. Algoritmo e metodologia para a implementação de ensaios virtuais.	55
3.5.1. Materiais	55
3.5.2. Definição do problema físico	57
3.5.3. Aplicação do método de elementos finitos	58
4 Resultados e discussão	61
4.1. Verificação dos resultados de N. Yang e co-autores [33]	61
4.2. Ampliando a área de validade dos resultados de N. Yang e co-autores [33]	63

4.3. Geração de mapas de Cov_{dmean} . Potencialidade e aplicações	66
4.4. Implementação de ensaios virtuais. Resultados	69
5 Conclusões e Recomendações para Trabalhos Futuros	74
5.1. Conclusões	74
5.2. Recomendações	75
6 Referências	77
7 Apêndice 1 – Códigos computacionais para a construção de ensembles virtuais	81
8 Apêndice 2 – Código computacional para a determinação do Cov_{dmean} de ensembles reais e virtuais.	118
9 Apêndice 3 – Códigos computacionais para a determinação do Cov_{dmean} local e para a construção de mapas de Cov_{dmean}	121

Lista de figuras

Figura 1 – Esquema de relação entre os parâmetros de distribuição espacial, as variáveis de processamento e as propriedades do material.	16
Figura 2 – Classificação dos materiais compósitos. Imagens dos três casos de compósitos reforçados por fibras	20
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).	23
Figura 4 – Medidas básicas de frequência espacial na direção do eixo “x”. a) Contagem no segmento, b) Contagem nas áreas	25
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.	26
Figura 6 – “tessellation” de Voronoi: As fronteiras da célula do corpo definem os vizinhos mais próximos.	27
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.	28
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	29
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).	30
Figura 10 – Evolução do Cov_{dmean} com a diminuição do tamanho de partículas (878 partículas)	31
Figura 11 – Área de validade dos resultados de Yang e co-autores (2001) [33]	32
Figura 12 – Interface inicial do OOF2	33
Figura 13 – Esquema geral do OOF2	33
Figura 14 – Esqueleto associado à imagem transversal de um compósito virtual de fibras infinitas e paralelas. (branco: fibra, azul: matriz).	35
Figura 15 – Estrutura macroscópica dos algoritmos usados	38
Figura 16 – Fluxograma do algoritmo genérico para a determinação das coordenadas de cada partícula num RHE. A descrição dos elementos A-F é fornecida no texto do corpo da tese.	39
Figura 17 – Fluxograma do algoritmo genérico para a determinação das coordenadas de cada partícula em ensembles com distribuição espacial heterogênea formando clusters. A descrição dos elementos A - I é fornecida no texto do corpo da tese.	41
Figura 18 – Fluxograma do algoritmo genérico para a determinação das coordenadas de cada partícula em ensembles com distribuição espacial heterogênea com zonas de exclusão. A descrição dos elementos A - H é fornecida no texto do corpo da tese.	42
Figura 19 – Esquema geral do algoritmo para a obtenção do Cov_{dmean}	44
Figura 20 – Algoritmo básico usado para aplicar a operação de “tessellation” de Voronoi.	45

Figura 21 – Exemplo de aplicação da “tessellation” de Voronoi: Img_0 (esquerda), Img_{Tess} (direita)	45
Figura 22 – Algoritmo da segunda etapa: determinação do Cov_{dmean} .	47
Figura 23 – Rotina para a determinação do Cov_{dmean} local.	48
Figura 24 – Rotina para a construção do mapa de Cov_{dmean} .	49
Figura 25 – Algoritmo usado para a construção e caracterização de ensembles	50
Figura 26 – Área de validade dos resultados Yang e co-autores [33] (verde): Novas direções de pesquisa propostas	52
Figura 27 – Algoritmo usado para criar e caracterizar ensembles diminuindo o número de partículas sem alterar a fração de área.	53
Figura 28 – Algoritmo usado para criar e caracterizar ensembles diminuindo o número de corpos com o tamanho do campo e dos corpos fixo.	54
Figura 29 – Imagem para a qual foi construído o mapa de Cov_{dmean}	55
Figura 30 – Ensembles usados no experimento virtual. a-c) Ensembles virtuais d) Ensemble real	56
Figura 31 – Seção transversal de uma viga de compósito reforçado por fibras, deformada na direção x.	57
Figura 32 – Medições de Cov_{dmean} para diferentes tipos de ensembles (Tabela 1)	61
Figura 33 – Procedimentos usados para criar ensembles virtuais: a) N. Yang e co-atores [33] b) Presente Tese	62
Figura 34 – Medições de Cov_{dmean} em função do tamanho do campo de imagens (RHE) de 878 corpos, 15% de concentração (acima); e de 1463 corpos, 25% de concentração (abaixo)	63
Figura 35 – Medições de Cov_{dmean} em função do número de corpos	

(direita) e da concentração de corpos (esquerda) em imagens (RHE) de tamanho constante	65
Figura 36 – Resultados <u>estendidos</u> de N. Yang e co-autores	66
Figura 37 – Resultado dos testes virtuais nas peças virtuais	69
Figura 38 – Mapas de tensões da seção transversal das peças 1,2 e 3 deformadas. Imagens a), b) e c) respectivamente. (Escala de cores em GPa).	72

Lista de tabelas

Tabela 1 – Configurações dos ensembles virtuais construídos	51
Tabela 2 – Parâmetros usados nos ensaios virtuais	57
Tabela 3 – Mapa de Cov_{dmean} associado à imagem da Figura 29	67
Tabela 4 – Interpretação do mapa de Cov_{dmean} (Tabela 3)	68