

Anderson Vieira Guimarães

Mecanismos de Fratura em materiais multifásicos

Fortaleza - CE

Abr / 2014

Anderson Vieira Guimarães

Mecanismos de Fratura em materiais multifásicos

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal do Ceará
como parte dos requisitos para a obtenção do
título de Mestre em Física.

Prof.Dr. Humberto de Andrade Carmona.

Prof.Dr. José Soares Andrade Júnior.

MESTRADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Fortaleza - CE

Abr / 2014

Tese de mestrado sob o título *Mecanismos de Fratura em materiais multifásicos*, defendida por *Anderson Vieira Guimarães* e aprovada no dia 2 de Julho de 2014 em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora:

Prof.Dr. Humberto de Andrade Carmona
Departamento de Física - Universidade Federal do Ceará
Orientador

Prof.Dr. José Soares Andrade Júnior
Departamento de Física - Universidade Federal do Ceará

Prof.Dr. Luciano Rodrigues da Silva
Departamento de Física - Universidade Federal do Rio
Grande do Norte

G976m

Guimarães, Anderson Vieira

Mecanismos de fratura em materiais multifásicos./
Anderson Vieira Guimarães - Fortaleza: [s.n], 2014.
72f. : Il.col., enc. ; 30 cm.

Dissertação – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,
Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física,
Fortaleza, 2014.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona

Co-orientador: Prof. Dr. José Soares Andrade Júnior

1. Física da Matéria Condensada. 2. Fratura (Física).
3. Mecânica dos Meios Contínuos. I. Título.

CDD 530.41

Dedicatória

*A minha mãe,
Maria dos Prazeres Fernandes Vieira e a minha avó
Maria Mirtes Fernandes Guimarães, e
minha namorada,
Mariana Vieira da Rocha,
que estiveram comigo
em todos os momentos e
sempre me apoiaram
nesse sonho.*

Agradecimentos

Quero agradecer à todos que contribuíram para a realização deste trabalho. Em especial:

– À minha mãe Maria dos Prazeres, avó Maria Mirtes e namorada Mariana Vieira, primeiramente;

– Ao Prof. Dr. José Soares Andrade Júnior, pela orientação, experiência e ajuda na elaboração deste trabalho, tornando-o mais rico;

– Ao Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona, pela orientação, puxões de orelha que me fizeram amadurecer como pesquisador, incentivo e confiança depositada em mim em todos os momentos;

– Aos meus amigos, Marcos Vinicius e Adevaldo Gonçalves com quem pude trocar várias experiências no período de pesquisas.

– À minha namorada Mariana Vieira que sempre me apoiou nos momentos mais difíceis e pela sua paciência em todos esses anos;

– À todos os professores do Departamento de Física da UFC pelos conhecimentos passados nesses anos e seus funcionários;

– Ao CNPq, CAPES e FUNCAP pelo financiamento dessa pesquisa.

“Não sei como o mundo me vê, mas eu me sinto como um garoto brincando na praia, contente em achar aqui e ali, uma pedra mais lisa ou uma concha mais bonita, mas tendo sempre diante de mim, ainda por descobrir, O grande oceano de verdades .”

Isaac Newton

Resumo

O entendimento sobre os processos de fraturas em materiais é de grande importância para a física e indústrias da construção civil. Através dos processos de fraturas podemos compreender melhor as propriedades elásticas dos materiais, como seu módulo de Young macroscópico, tensão de ruptura e módulo de rigidez. Podemos definir os processos de fraturas como sendo aqueles que dividem um sistema em duas ou mais partes, destruindo a conexão global dos elementos que o constituem. Nesse contexto, no primeiro capítulo é feita uma descrição matemática das equações da mecânica do contínuo, no segundo capítulo aborda-se o modelo de elementos discretos (DEM) que é um método numérico capaz de descrever o comportamento mecânico de materiais granulados. No terceiro capítulo, construímos o modelo computacional para estudar, as propriedades mecânicas de 3 tipos de amostras, cristalina, amorfa e multifásica. O modelo computacional utilizado se mostrou bastante interessante e apresentou resultados que podemos considerar como sendo satisfatórios.

Palavras-chave: Fratura, Hastes, Mecânica do Contínuo.

Abstract

The understanding about the fractures processes in materials has a big importance for physics and civil construction industries. Through the fractures processes, we can better understand the materials' elastic properties as its macroscopic Young module, rupture tension and rigidity module. We can define the fractures processes as those which divide a system into two or more parts, destroying the global connection of the elements that constitute it. In this context, in the first chapter, we can find a mathematical description of continuum mechanics equations. The second chapter discusses the model of Discrete Element (DEM), which is a numerical method capable of describing the mechanical behavior of granular materials. In the third chapter, we built the computational model for studying the mechanical properties of three types of samples, crystalline, amorphous and multiphase. The computational model showed itself quite interesting and presented results which we can consider satisfactory.

Keywords: fractures; stems; continuum mechanics.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1	Introdução	p. 15
2	Mecânica do contínuo	p. 19
2.1	Tensor de deformação	p. 19
2.2	Tensor de tensão	p. 21
2.3	Termodinâmica das deformações	p. 23
2.4	Relação entre tensão e deformação	p. 25
2.5	Deformações homogêneas	p. 28
2.6	Equações de equilíbrio para corpos isotrópicos	p. 30
2.7	Mecânica da fratura	p. 32
	A abordagem do balanço de energia	p. 32
3	Elementos discretos	p. 35
3.1	Regras de Ruptura	p. 38
	3.1.1 Desordem	p. 39
3.2	Evolução temporal	p. 40
3.3	Cálculo das propriedades do sistema	p. 41
4	Resultados	p. 43
4.1	Construção das amostras	p. 43

4.1.1	Amostras Cristalinas.	p. 43
4.1.2	Amostras Amorfas.	p. 44
4.1.3	Amostras Multifásicas	p. 46
4.2	Caracterização das amostras	p. 47
4.2.1	Cristalina	p. 48
4.2.2	Amorfa	p. 51
4.2.3	Multifásica	p. 53
4.3	Simulações de Impacto	p. 56
4.3.1	Mecanismos de fragmentação	p. 56
4.4	Regimes de Fragmentação	p. 59
5	Conclusão	p. 67
	Apêndice A – Tesselação de Voronoi	p. 69
	Referências Bibliográficas	p. 71

Lista de Figuras

- 1.1 Fotografia do material clínquer e pequenos fragmentos gerados através da sua cominuição. p. 16
- 1.2 Ilustração da parte interna de um moinho de cimento com duas câmaras .
Obtido em [38] p. 16
- 1.3 Micrografia na escala de 100 microns de uma seção plana de uma amostra de clínquer. Alita é um grão convexo afiado, belita possui a forma mais arredondada, ferrita e aluminato tricálcico possuem as formas mais irregulares preenchendo o espaço intersticial. Obtido em [32] p. 17
- 3.1 Representação da interação elástica entre dois elementos esféricos p. 37
- 3.2 Deformação típica de uma haste no plano x-y, mostrando as forças resultantes de flexão, cisalhamento e torques. O eixo z é perpendicular à imagem. p. 37
- 4.1 Amostra cristalina. Elementos alocados em uma rede HCP conectados por hastes. p. 43
- 4.2 Amostra esférica cristalina p. 44
- 4.3 Etapas de construção das amostras amorfas. (a) Os vetores velocidade distribuídos aleatoriamente são representados por setas, Evolução temporal do sistema (b) após 7 000 passos , (c) após 10 000 passos, (d) após 17.900 e finalizando a simulação em 100.000 passos. Em (f) temos os elementos empacotados e conectados por hastes. p. 45
- 4.4 Amostra esférica amorfa. p. 46
- 4.5 Etapas de construção das amostras multifásicas. p. 47
- 4.6 Amostra esférica multifásica. p. 47
- 4.7 Amostra retangular cristalina, em a) temos a parte superior e inferior em destaque e em b) a parte central em destaque. p. 48

4.8	Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} , e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação.	p. 49
4.9	Curva dos módulos de Young em relação aos módulos das hastes para o material cristalino.	p. 50
4.10	Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} para o material amorfo, e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação. . . .	p. 51
4.11	Curva para diferentes módulos de elasticidade do material amorfo.	p. 52
4.12	Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} para o material multifásico, e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação. . .	p. 54
4.13	Curva para diferentes módulos de elasticidade do material multifásico.	p. 54
4.14	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Amostra cristalina, velocidade de impacto 95 m/s.	p. 56
4.15	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas. Amostra cristalina, velocidade de impacto 95 m/s.	p. 57
4.16	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Amostra amorfa, velocidade de impacto 115 m/s.	p. 58
4.17	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas. Amostra amorfa, velocidade de impacto 115 m/s.	p. 58
4.18	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Os elementos e hastes estão coloridos de acordo com a fase a qual pertencem. Amostra multifásica, velocidade de impacto 100 m/s.	p. 59
4.19	Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas, coloridas de acordo com a fase a qual pertencem. Amostra multifásica, velocidade de impacto 100 m/s. . . .	p. 60

4.20	Dano inicial. Fatia vertical que passa pelo centro das amostras esféricas de simulações de impacto para amostras DEM a) Cristalina, b) Amorfa e c) Multifásica. Apenas os feixes estão representados, coloridos de acordo com a tensão circunferencial no plano perpendicular à direção do impacto, no sistema de coordenadas local, que varia de -100,0 MPa a 100 MPa (azul para vermelho). Ligações quebradas são representadas por planos de cores escuras perpendiculares às suas direções.	p. 60
4.21	Dependência da energia de colisão para a massa do maior fragmento e a massa média dos outros fragmentos para amostras (a) cristalina, multifásica (b) e (c) amorfas.	p. 61
4.22	Número total de hastes quebradas H_q em função da energia inicial do sistema E_0/K_c , normalizada pela energia crítica de fragmentação para cada tipo de amostra.	p. 65
4.23	Orientação da posição das ligações quebradas em um plano-xy, perpendicular à direção de impacto, para amostras a) cristalina, com energia de colisão 68 J b) multifásica, com energia de colisão 78 J e c) amorfa, com energia de colisão 94 J. As cores correspondem à probabilidade de termos um vínculo quebrado com a sua posição projetada no plano xy.	p. 65
4.24	Histograma bidimensional das posições das ligações quebradas no plano-xy, perpendicular à direção de impacto.	p. 66
4.25	Distribuição de massa dos fragmentos com a energia crítica para todos os tipos de amostras.	p. 66
4.26	Distribuição de massa dos fragmentos $K = 194$ J para todos os tipos de amostras.	p. 66
A.1	Conjunto de nove pontos. Na figura do lado esquerdo temos triângulos de Delaunay, e na figura do lado direito temos as circunferências circunscritas a tesselação de Delaunay. Obtido em [15]	p. 69
A.2	Conjunto de nove pontos. Na figura do lado esquerdo temos os centros das circunferências circunscritas aos triângulos de Delaunay, e na figura do lado direito temos a ligação dos centros, formando assim polígonos de Voronoi. Obtido em [15]	p. 70
A.3	Conjunto de nove pontos. Tesselação de Voronoi. Obtido em [15]	p. 70

Lista de Tabelas

1.1	Fases principais do clínquer	p. 16
4.1	Parâmetros utilizados nas simulações	p. 50
4.2	Parâmetros utilizados nas simulações	p. 53
4.3	Parâmetros utilizados nas simulações	p. 55

1 *Introdução*

O entendimento das propriedades mecânicas de determinados materiais é de grande utilidade para a física e indústrias da construção civil, muitos produtos industriais utilizam agregados granulares cimentados, os mais conhecidos são: concreto, argamassas, rochas sedimentares como arenito e conglomerados [5] e biomateriais como o endosperma do trigo, que é composto de grânulos de amido conectados por uma matriz que no caso em questão é uma proteína.

O estudo realizado nesse trabalho tem como objetivo estudar o processo de fratura em materiais multifásicos. Podemos definir um compósito ou material multifásico, como sendo um material composto de diferentes fases homogêneas, são abundantes na natureza e constituem matérias-primas básicas para muitos processos industriais. Os materiais compósitos são classificados em: 1- Reforçados com partículas que são subdivididos em partículas grandes e reforçados por dispersão; 2- Reforçados com fibras que são subdivididos em: contínuo (alinhado) e descontínuo (curto); 3- Estrutural que é subdividido em laminados e painéis em sanduíche, conforme [9]. No presente trabalho o material multifásico utilizado é classificado como reforçado com partículas grandes, pois as interações partícula-matriz não podem ser tratadas no nível atômico ou molecular e sim do ponto de vista da mecânica do contínuo.

A fragmentação é um processo importante e que consome muita energia, onde vários princípios físicos são aplicados para fragmentar o material multifásico até um pó. A moagem do clínquer que é o componente principal utilizado para produção do cimento portland, é um exemplo de um processo que consome uma parte significativa da energia consumida pela humanidade([16]-[27]). As figuras 1.1 e 1.2 mostram respectivamente o material clínquer com pequenos fragmentos gerados através de sua moagem e um moinho de cimento que é responsável pela cominuição do clínquer.

Clínquer é o produto da calcinação de uma mistura de minerais triturados (80%) e argilas (20%). O composto misturado é um produto mineral complexo composto de pelo menos quatro fases principais, silicato tricálcico C_3S , silicato dicálcico C_2S , aluminato tricálcico C_3A e ferroaluminato tetracálcico C_4AF (as abreviaturas utilizadas são válidas somente nas fases puras),



Figura 1.1: Fotografia do material clínquer e pequenos fragmentos gerados através da sua cominuição.

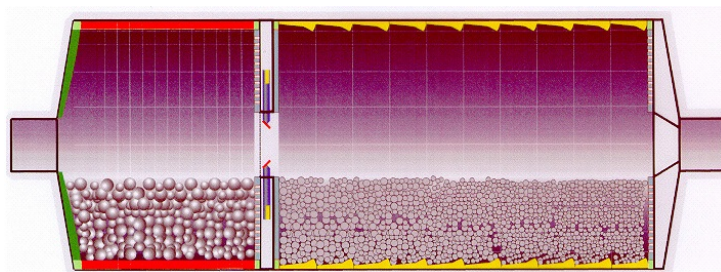


Figura 1.2: Ilustração da parte interna de um moinho de cimento com duas câmaras . Obtido em [38]

conforme visto na figura 1.3 [3]. A tabela 1.1 sintetiza as fases descritas acima com as suas respectivas frações químicas, as duas primeiras fases (alita (50 – 65%) e belita (10 – 20%)) são cristalinas, e as demais fases são amorfas. Em particular, os estudos de fragmentação têm mostrado um potencial para reduzir substancialmente o consumo de energia da produção de cimento global ([11], [29]).

Fase	Notação química	Fração de Volume
Alita	C_3S	50 – 65%
Belita	C_2S	10 – 20%
Aluminato	C_3A	5 – 10%
Ferrita	C_4AF	5 – 15%

Tabela 1.1: Fases principais do clínquer

Os materiais cristalinos são definidos como materiais que apresentam uma ordenação dos seus átomos a longas distâncias atômicas, formando uma estrutura tridimensional chamada de rede cristalina. Os materiais cristalinos mais conhecidos são os metais, alguns materiais cerâmicos e certos polímeros submetidos a condições normais de solidificação [9].

Os materiais amorfos também chamados de não-cristalinos são materiais em que não existe

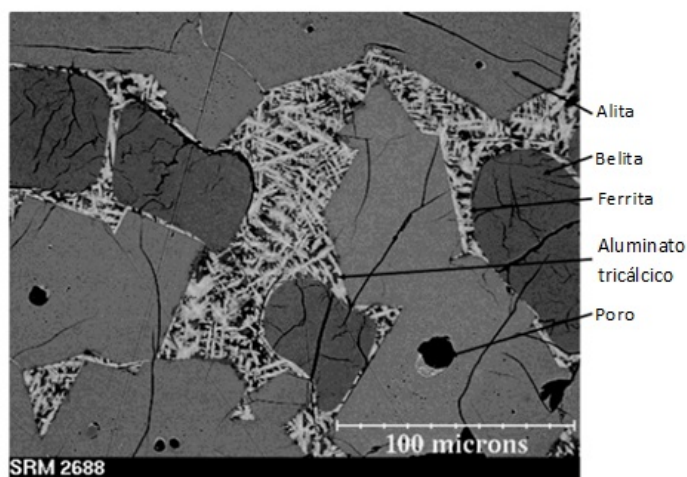


Figura 1.3: Micrografia na escala de 100 microns de uma seção plana de uma amostra de clínquer. Alita é um grão convexo afiado, belita possui a forma mais arredondada, ferrita e aluminato tricálcico possuem as formas mais irregulares preenchendo o espaço intersticial. Obtido em [32]

ordem de longo alcance na disposição dos átomos. O material amorfo mais conhecido é o vidro, porém existem outros tipos menos conhecidos mas também importantes como por exemplo o poliestireno que é uma resina que serve de matéria prima na produção de copos descartáveis de plástico, lacres de barris de chope e de vários tipos de embalagens em geral [39].

No passado, modelos estatísticos e correspondentes esquemas de simulação foram desenvolvidos sistematicamente para investigar fragmentação frágil ([2]-[3]) em termos da distribuição de tamanho de fragmento resultante, fusão e propagação de fendas, instabilidade e ramificação, e a ocorrência da transição de danos. Simulações com base em sistemas de Lennard-Jones (MD), modelos de elementos com haste-treliça foram capazes de reproduzir perfeitamente o comportamento observado. No entanto, por razões de simplicidade e para aumentar a eficiência computacional, a maioria das simulações de fragmentação consideram apenas materiais monofásicos. Neste trabalho, abordamos o processo de fragmentação frágil dos materiais multifásicos, considerando o caso mais simples de materiais em duas fases, onde uma fase cristalina elástica é incorporada em uma matriz elástica amorfa.

O estudo realizado nesse trabalho é comparativo, analisando os comportamentos de materiais cristalinos, amorfos e multifásicos. A abordagem é através de simulações computacionais usando a técnica de modelagem dos elementos discretos (DEM), que possui grande aplicabilidade no estudo de simulações com materiais granulares constituídos de partículas rígidas.

Nesse contexto no capítulo 2 introduziremos os conceitos fundamentais da teoria da elasticidade, necessários para compreensão das simulações computacionais. Grandezas que apa-

receram constantemente no presente trabalho, como tensor de deformação e de tensão, entre outras, serão encontradas naturalmente nesse capítulo, assim como as equações de equilíbrio para corpos isotrópicos que tem papel fundamental para construção do modelo computacional.

No capítulo 3 apresentaremos o modelo de elementos discretos (DEM), abordando desde a sua construção, que inicialmente abordava apenas simulações bidimensionais de discos, até as suas aplicações mais modernas utilizadas hoje na literatura, que aborda modelos tridimensionais mais complexos com esferas e poliedros. As regras de ruptura e o cálculo das propriedades do sistema como tensor momento interno e tensor tensão de Cauchy também são tratados nesse capítulo.

No capítulo 4 apresentamos resultados de simulações com 3 tipos de materiais (cristalino, amorfo e multifásico), na primeira parte do capítulo (seção 4.1) são descritas as construções das 3 amostras, na segunda parte do capítulo (seção 4.2) as amostras são caracterizadas através de simulações com tensão uniaxial aplicada ao sistema e finalmente na terceira e última parte do capítulo (seção 4.3), são realizadas simulações numéricas de colisões de partículas esféricas (cristalina, amorfa e multifásica) construídas na seção 4.1 com uma placa rígida.

No capítulo 5 conclui-se o trabalho apresentando sua relevância na literatura e fazendo observações sobre os resultados encontrados nos modelos propostos. Sugestões e perspectivas para trabalhos futuros nessa mesma linha de pesquisa também são delineados.

2 *Mecânica do contínuo*

2.1 Tensor de deformação

A mecânica dos corpos sólidos, considerados como meios contínuos, forma o conteúdo da teoria da elasticidade. Sobre a ação de forças aplicadas corpos sólidos apresentam deformações, em certa medida, ou seja, eles mudam de forma e volume. Podemos descrever matematicamente a deformação de um corpo através da posição \vec{r} de um ponto do corpo em algum sistema de coordenadas com componentes $(x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z)$, onde \vec{r} é o raio vetor antes da deformação; \vec{r}' é o raio vetor depois da deformação (com componentes x'_i). O deslocamento desse ponto devido à deformação é dado pelo vetor $\vec{r}' - \vec{r}$, que vamos denotar por \vec{u} :

$$u_i = x'_i - x_i \quad (2.1)$$

O vetor deslocamento \vec{u} é uma função da forma $u(\vec{r})$. Considerando dois pontos muito próximos entre si, visto que quando um corpo se deforma, variam as distancias entre seus pontos, podemos dizer que o raio vetor que os une antes da deformação é dx_i e o raio vetor que une os mesmos pontos do corpo deformado será $dx'_i = dx_i + du_i$. A distância entre os pontos antes da deformação é:

$$dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$$

Utizando a regra geral das somas podemos escrever:

$$dl^2 = \sum_i dx_i^2 = dx_i^2$$

Consequentemente depois da deformação teremos:

$$dl'^2 = dx_i'^2 = (dx_i + du_i)^2$$

Substituindo

$$u_i = u_i(x_k)$$

$$du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$$

Podemos expressar dl'^2 na forma:

$$dl'^2 = dl^2 + 2\varepsilon_{ik} dx_i dx_k \quad (2.2)$$

Onde ε_{ik} , chamado tensor de deformação, é definido como:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (2.3)$$

Assim a equação 2.3 fornece a variação de comprimento infinitesimal quando o sólido se deforma. Por definição o tensor de deformação é simétrico, ou seja,

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}. \quad (2.4)$$

Como ε_{ki} é um tensor simétrico, em qualquer ponto do sólido, podemos escolher um sistema de eixos coordenados (os eixos principais do tensor) de tal maneira que somente as componentes diagonais $u_{11}, u_{22}, u_{33} = u^{(1)}, u^{(2)}, u^{(3)}$ do tensor são diferentes de zero.

Se o tensor de deformação está diagonalizado em um ponto, em suas proximidades podemos escrever,

$$dx_i'^2 = (1 + 2u^{(i)}) dx_i^2. \quad (2.5)$$

Podemos encontrar o elemento de volume infinitesimal depois da deformação, considerando: $dv = dx_1 dx_2 dx_3$, como sendo o elemento de volume antes da deformação, com isso, $dv' = dx_1' dx_2' dx_3'$ será dado por:

$$dv' = dv(1 + u^{(1)})(1 + u^{(2)})(1 + u^{(3)})$$

Desprezando os termos de ordem não linear,

$$dv' \approx dv(1 + u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)}).$$

Como sabemos o traço do tensor $\varepsilon_{ik} (u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)})$ é invariante, logo $u_{ii} = u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)}$, o mesmo em qualquer sistema de coordenadas. Portanto,

$$dv' = dv(1 + u_{ii}) \quad (2.6)$$

O que nos da

$$u_{ii} = \frac{dv' - dv}{dv},$$

ou seja, é o traço do tensor ε_{ik} que corresponde à variação de volume local por unidade de volume. Considerando u_i pequeno para pequenas deformações, podemos desprezar o terceiro termo de 2.3, por ser de segunda ordem. Com isso,

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \quad (2.7)$$

A teoria da elasticidade é uma teoria que trata um sólido como um contínuo. Isso significa dizer que quando consideramos um deslocamento du_i , ou um elemento de volume dv estamos lidando com um deslocamento muito maior que a distância atômica e volumes que contém inúmeras moléculas.

2.2 Tensor de tensão

Chamamos de tensões internas as forças internas que aparecem quando os corpos se deformam. Deformações provocam mudanças na distribuição das moléculas dos corpos que se encontravam originalmente em seu estado de equilíbrio. Se não há deformação, não existem tensões internas. A força total exercida sobre um volume do corpo, é a soma de todas as forças que atuam sobre cada um dos elementos de volume do corpo, com isso podemos escrevê-la como uma integral de volume $\int \vec{f} dv$.

Onde \vec{f} é força por unidade de volume e $\vec{f} dv$ é a força exercida sobre o elemento de volume dv . A força que os elementos distintos da porção considerada exercem um sobre os outros se anulam mutuamente em virtude da 3ª lei de Newton. Além disso, em virtude da teoria da elasticidade ser macroscópica, o alcance das forças de tensão é considerado nulo. Dessa forma, a força total sobre o elemento de volume considerado também pode ser representada como a soma das forças exercidas sobre todos os elementos de sua superfície, ou seja, mediante uma integral de superfície.

Consequentemente para qualquer porção do sólido cada uma das 3 componentes da resultante das tensões internas pode ser transformada em uma integral de superfície. Ou seja, cada componente da força por unidade de volume f_i deve ser o divergente de algum campo vetorial.

$$f_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (2.8)$$

o que define o tensor de tensão σ_{ik} .

Temos que para elementos de superfície nos planos xy, yz, zx as componentes do tensor de tensão são $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}, \sigma_{zy}, \sigma_{zz}$ representam as forças por unidade de área perpendicular aos eixos x, y e z respectivamente. Já os demais termos representam as forças tangenciais. O momento de uma força também deve ser expresso como uma integral sobre a superfície onde:

$$\vec{M} = \vec{f} \times \vec{r} = f_i x_j \epsilon_{ijk} \mathbf{e}_k$$

Temos

$$M_{ij} = (f_i x_j - f_j x_i)$$

$$M_{ik} = \int (f_i x_k - f_k x_i) dv$$

Portanto,

$$M_{ik} = \int \left(\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial x_l} x_k - \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} x_i \right) dv$$

Que pode ser escrito como:

$$M_{ik} = \oint (\sigma_{il} x_k - \sigma_{kl} x_i) ds_l - \int (\sigma_{ik} - \sigma_{ki}) dv$$

Para que M_{ik} seja expresso como uma integral de superfície $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$. Levando a conclusão de que o tensor de tensão é simétrico. Considerando \vec{P} a força externa por unidade de superfície que atua no corpo; $\vec{P} dS$ será a força que age sobre o elemento de superfície dS . Em equilíbrio essa força externa deverá ser anulada pelas tensões internas que atuam sobre esse elemento de superfície. Conclui-se então que as tensões internas devem produzir uma força para haver tal equilíbrio, logo:

$$P_i dS - \sigma_{ik} dS_k = 0$$

Escrevemos.

$$dS_k = n_k dS$$

Obtemos.

$$P_i = \sigma_{ik} n_k \quad (2.9)$$

Onde n_k é o vetor unitário na direção da normal externa a superfície. A condição proposta pela equação 2.9 deve ser satisfeita em cada ponto da superfície de um corpo em equilíbrio.

No equilíbrio as forças de tensão internas em todo elemento de volume devem se balancear. Assim,

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0.$$

Caso haja um campo externo, como um campo gravitacional, a soma das forças de tensão internas e das forças do campo externo $\vec{f} + \rho \vec{g}$ devem se anular. Nesse caso,

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0$$

2.3 Termodinâmica das deformações

Esta seção tem como objetivo encontrar a relação fundamental da termodinâmica para corpos deformados (energia interna infinitesimal), e derivar as relações entre os tensores de tensão e deformação em função da energia interna livre e do potencial termodinâmico.

Considere um corpo deformado e suponhamos que se varie um pouco a deformação, de tal maneira que u_i (vetor deslocamento) sofra uma pequena modificação representada por δu_i ; O trabalho realizado pelas tensões internas nesta mudança será o produto de 2.8 por δu_i integrando em todo volume, ou seja, $\delta w = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i$;

$$\int \delta w dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i dV$$

Onde δw é o trabalho por unidade de volume realizado pelas tensões internas. Usando integração por partes temos:

$$\int \delta w dV = \oint \sigma_{ik} \delta u_i dS_k - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV$$

Considerando um meio ilimitado não deformado no infinito, $\sigma_{ik} = 0$ na superfície e a pri-

meira integral se anula. Assim,

$$\int \delta w dV = - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV,$$

como σ_{ik} é simétrico, podemos escrever:

$$\int \delta w dV = - \frac{1}{2} \int \sigma_{ik} \delta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dV$$

Portanto,

$$\int \delta w dV = - \int \sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik} dV.$$

Assim, o trabalho realizado por unidade de volume, ao variar o tensor de deformação é dado por

$$\delta w = -\sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik}. \quad (2.10)$$

Podemos encontrar a partir de 2.10 a relação termodinâmica fundamental para corpos deformados. Considerando um processo termodinâmico reversível temos, a variação da energia interna por unidade de volume,

$$dU = T dS - dw.$$

Onde T é a temperatura e S é a entropia por unidade de volume.

Logo,

$$dU = T dS + \sigma_{ik} d\varepsilon_{ik} \quad (2.11)$$

Introduzindo a energia livre de Helmholtz do corpo $F = U - TS$, e substituindo 2.11, temos

$$dF = \sigma_{ik} d\varepsilon_{ik} - S dT \quad (2.12)$$

que nos dá a energia livre por unidade de volume em função dos tensores deformação e tensão. O potencial termodinâmico pode ser obtido a partir da generalização da expressão usual

$\Phi = U - TS + PV$ que representa a energia livre de Gibbs. Com isso:

$$\Phi = U - TS - \sigma_{ik}\varepsilon_{ik} = F - \sigma_{ik}\varepsilon_{ik} \quad (2.13)$$

Analogamente temos:

$$d\Phi = -SdT - \varepsilon_{ik}d\sigma_{ik} \quad (2.14)$$

Finalmente derivando 2.11 e 2.12 com a entropia constante ou a temperatura constante chegamos:

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_s = \left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T \quad (2.15)$$

Analogamente derivando 2.14 com relação às componentes do tensor de tensão encontramos as componentes do tensor de deformação ε_{ik} :

$$\varepsilon_{ik} = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma_{ik}} \right)_T \quad (2.16)$$

2.4 Relação entre tensão e deformação

Esta seção tem como objetivo encontrar uma relação entre os tensores de tensão e deformação para pequenas deformações. Naturalmente nas expressões matemáticas apareceram o módulo de compressão hidrostática e o módulo de rigidez. Começaremos desenvolvendo a energia livre em série de potências de ε_{ik} , visto que as deformações consideradas são pequenas e os casos considerados são de corpos isotrópicos.

A energia livre F deve ser um escalar, assim expandimos em séries de $(u_{ii})^2$, o traço ao quadrado, e ε_{ik}^2 , a soma do quadrado de todas as componentes do tensor ε_{ik} , que são escalares (não alteram se for feita uma rotação no sistema de coordenadas).

$$F = F_0 + \frac{\lambda}{2} u_{ii}^2 + \mu \varepsilon_{ik}^2 \quad (2.17)$$

Observe que não aparece termos lineares em (2.17), visto que para $\varepsilon_{ik} = 0 \Rightarrow \sigma_{ik} = 0$ e $\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T$. A expressão (2.17) representa a expressão geral para a energia livre de um corpo isotrópico deformado. As grandezas λ e μ são chamadas coeficientes de Lamé. Lembrando que

a mudança de volume é dado pela soma u_{ii} . Portanto se a soma é zero, não a mudança de volume durante a deformação, apenas da forma do corpo. Chamamos tais deformações que não variam o volume de deformações de cisalhamento. No caso oposto onde á deformação provoca uma mudança no volume do corpo chamamos de compressão hidrostática. É conveniente então representar (2.17) como uma soma das deformações de cisalhamento e de compressão hidrostática, precisamos então utilizar a identidade:

$$\varepsilon_{ik} = \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} u_{ll} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ik} u_{ll} \quad (2.18)$$

O primeiro termo de (2.18) é a deformação de cisalhamento, visto que a soma de seus elementos diagonais é zero, onde $\delta_{ii} = 3$ e o segundo termo é a compressão hidrostática. Como expressão geral é conveniente representar (2.17) como um módulo de rigidez e um módulo de compressão hidrostática. Para isso vamos elevar (2.18) ao quadrado e substituir em (2.17). Obtemos:

$$F = \mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} u_{ll}^2 \right)^2 + \frac{u_{ll}^2}{2} \left(\lambda + \frac{2\mu}{3} \right)$$

Introduzindo o módulo de compressão hidrostática ($K = \lambda + \frac{2\mu}{3}$), temos:

$$F = \mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} u_{ll} \right)^2 + \frac{K u_{ll}^2}{2}, \quad (2.19)$$

onde μ é também chamado módulo de cisalhamento. No estado de equilíbrio termodinâmico a energia deve ser um mínimo. F em função de ε_{ik} deve então ter um mínimo. Como as deformações de compressão hidrostática pura e cisalhamento puro podem ocorrer independentemente, resulta que.

$$K > 0, \mu > 0 \quad (2.20)$$

Vamos utilizar a equação 2.15 para encontrarmos a relação entre o tensor de tensão e deformação.

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T$$

Vamos escrever a diferencial total dF a (temperatura constante). Temos:

$$\begin{aligned}
dF &= Ku_{ll}du_{ll} + 2\mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}u_{ll}\delta_{ik} \right) d \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}u_{ll}\delta_{ik} \right). \\
&= Ku_{ll}du_{ll} + 2\mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{u_{ll}\delta_{ik}}{3} \right) d\varepsilon_{ik}.
\end{aligned}$$

Substituindo du_{ll} por $\delta_{ik}d\varepsilon_{ik}$,

$$dF = [Ku_{ll}\delta_{ik} + 2\mu(\varepsilon_{ik} - \frac{u_{ll}\delta_{ik}}{3})]d\varepsilon_{ik}.$$

O tensor de tensão será:

$$\sigma_{ik} = Ku_{ll}\delta_{ik} + 2\mu(\varepsilon_{ik} - \frac{\delta_{ik}u_{ll}}{3}). \quad (2.21)$$

Chegamos em 2.21 que determina o tensor de tensão em termos do tensor de deformação para um corpo isotrópico. Também é possível obter ε_{ik} como função de σ_{ik} . Para fazer isso, vamos utilizar a soma dos termos diagonais σ_{ii} em 2.21.

$$\sigma_{ii} = Ku_{ii}\delta_{ii} + 2\mu(u_{ii} - \frac{\delta_{ii}u_{ii}}{3}).$$

$$\sigma_{ii} = 3Ku_{ii}$$

Chegamos então:

$$u_{ii} = \frac{\sigma_{ii}}{3K} \quad (2.22)$$

Podemos observar em (2.22) que a mudança relativa de volume u_{ii} em qualquer deformação de um corpo isotrópico depende somente da soma σ_{ii} dos elementos diagonais do tensor de tensão. Substituindo (2.22) em (2.21), obtemos ε_{ik} como função de σ_{ik} .

$$\sigma_{ik} = K(\sigma_{ll}/3K)\delta_{ik} + 2\mu\varepsilon_{ik} - \frac{2\mu\delta_{ik}\sigma_{ll}/3K}{3}.$$

$$\varepsilon_{ik} = \frac{\delta_{ik}\sigma_{ll}}{9K} + \frac{1}{2\mu}(\sigma_{ik} - \frac{\delta_{ik}\sigma_{ll}}{3}). \quad (2.23)$$

A expressão (2.23) nos fornece o tensor de deformação em termos do tensor de tensão. Observamos que ε_{ik} é uma função linear de σ_{ik} , ou seja, a deformação é proporcional as forças aplicadas ao corpo. Esta lei válida para pequenas deformações é conhecida como lei de Hooke.

2.5 Deformações homogêneas

Para introduzir as grandezas módulo de Young e razão de Poisson, considere a haste localizada ao longo do eixo-z, e suponha que se aplicam forças nos extremos da mesma, que a distendem em sentidos opostos. Estas forças atuam uniformemente em toda a superfície dos extremos; chamaremos de p esta força por unidade de área. Deformações homogêneas são aquelas em que o tensor de deformação é constante em todo o corpo, ou seja, ε_{ik} tem o mesmo valor em todo ponto do corpo. Podemos determinar σ_{ik} , que também é constante, a partir das condições de contorno 2.9. Não existem forças aplicadas na superfície lateral da haste: Com isso, $\sigma_{ik}n_k = 0$ nas mesmas superfícies. Como o vetor unitário \hat{n} sobre a superfície lateral é perpendicular ao eixo z, ($n_z = 0$), pode-se concluir então que todas as componentes σ_{ik} , exceto σ_{zz} , são nulas. Nos extremos $\sigma_{zi}n_i = p$, ou seja:

$$\sigma_{zz} = p.$$

Observamos na equação (2.23) que todas as componentes de ε_{ik} , com ($i \neq k$), são nulas. Portanto sobram apenas:

$$\begin{aligned} u_{xx} = u_{yy} &= \frac{1}{9K} \delta_{xx} \sigma_{zz} + \frac{1}{2\mu} \left(\sigma_{xx} - \frac{1}{3} \delta_{xx} \sigma_{zz} \right) \\ u_{zz} &= \frac{1}{9K} \delta_{zz} \sigma_{zz} + \frac{1}{2\mu} \left(\sigma_{zz} - \frac{1}{3} \delta_{zz} \sigma_{zz} \right) \\ u_{xx} = u_{yy} &= -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3K} \right) p, u_{zz} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{3K} \right) p \end{aligned} \quad (2.24)$$

A componente u_{zz} dá a mudança relativa do comprimento da haste. Podemos escrever u_{zz} como:

$$u_{zz} = \frac{1}{3} \left(\frac{\mu + 3K}{3K\mu} \right) p = \left(\frac{\mu + 3K}{9K\mu} \right) p$$

Defini-se o módulo de Young E tal que $p = Eu_{zz}$, de onde:

$$E = \frac{9K\mu}{3K + \mu} \quad (2.25)$$

As outras componentes u_{xx}, u_{yy} dão a contração relativa da haste na direção transversal. A razão entre a contração transversal e a extensão longitudinal define o coeficiente de Poisson, ou seja:

$$u_{xx} = -\nu u_{zz}, \quad (2.26)$$

de onde,

$$\nu = \frac{1}{2} \frac{3K - 2\mu}{3K + \mu} \quad (2.27)$$

Por causa de 2.20 o coeficiente de Poisson é limitado entre os valores:

$$-1 \leq \nu \leq \frac{1}{2} \quad (2.28)$$

Como $F \sim \varepsilon_{ik}^2$, $\varepsilon_{ik} \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} = 2F$, e como $\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} = \sigma_{ik}$ temos que $F = \frac{1}{2} \varepsilon_{ik} \sigma_{ik}$. Como somente a componente σ_{zz} é diferente de zero, podemos escrever, nesse caso,

$$F = \frac{\sigma_{zz} u_{zz}}{2} = \frac{p^2}{2E}. \quad (2.29)$$

Invertendo as equações 2.25 e 2.27 obtemos:

$$\mu = \frac{3EK}{9K - E}, \quad K = \frac{-2\mu(1+\nu)}{3(2\nu-1)}$$

De onde:

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad K = \frac{E}{3(1-2\nu)}. \quad (2.30)$$

É interessante reescrever as equações (2.19), (2.21) e (2.23) em termos dos módulos de

Young e da razão de Poisson. A energia livre (2.19) será:

$$F = \frac{E}{2(1+\nu)} (\varepsilon_{ik}^2 + \frac{\nu u_{ll}^2}{1-2\nu}) \quad (2.31)$$

Analogamente o tensor de tensão, a equação (2.21) pode ser reescrita como

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon_{ik} + \frac{\nu u_{ll} \delta_{ik}}{1-2\nu} \right). \quad (2.32)$$

E finalmente a equação (2.23),

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{E} [(1+\nu)\sigma_{ik} - \nu \sigma_{ll} \delta_{ik}]. \quad (2.33)$$

2.6 Equações de equilíbrio para corpos isotrópicos

Vamos escrever inicialmente as equações de equilíbrio para um campo gravitacional uniforme, pois estas são as forças que aparecem habitualmente na teoria da elasticidade. Substituindo na equação geral $\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0$ encontrada na seção (2.2) a expressão (2.32) para o tensor de tensão. Obtemos:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial u_{ll}}{\partial x_i} + \frac{E}{1+\nu} \frac{\partial \varepsilon_{ik}}{\partial x_k}$$

Substituindo (2.7) na equação acima, obtemos as equações de equilíbrio na forma

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_l} + \rho g_i = 0 \quad (2.34)$$

A equação (2.34) pode ser escrita na forma vetorial, onde $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2}$ são as componentes do vetor $\nabla^2 \vec{u}$ e $\frac{\partial u_l}{\partial x_l} \equiv \vec{\nabla} \cdot \vec{u}$. Temos então:

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \nabla^2 \vec{u} = - \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) - \rho \vec{g}$$

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \nabla^2 \vec{u} = - \frac{\vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} - \rho \vec{g}$$

$$\nabla^2 \vec{u} + \frac{\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{(1-2\nu)} = -\frac{2\rho \vec{g}(1+\nu)}{E} \quad (2.35)$$

Usando a identidade,

$$\nabla^2 \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

temos.

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} + \frac{\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{1-2\nu} = -\frac{2\rho \vec{g}(1+\nu)}{E}$$

$$\frac{\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})(1-\nu)}{(1-2\nu)} - \frac{(1-2\nu)\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u}}{2(1-2\nu)} = -\frac{\rho \vec{g}(1+\nu)}{E}$$

Multiplicando a equação acima por $(1-2\nu)$ e dividindo por $(1-\nu)$, chegamos finalmente a:

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \frac{(1-2\nu)\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u}}{2(1-\nu)} = -\frac{\rho \vec{g}(1+\nu)(1-2\nu)}{E(1-\nu)}. \quad (2.36)$$

Se existirem outras forças, o segundo membro de (2.35) deverá ser modificado de acordo com as condições estudadas. Se a deformação de um corpo é causada por forças aplicadas sobre a superfície. A equação de equilíbrio será então:

$$\nabla^2 \vec{u} + \frac{\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{(1-2\nu)} = 0$$

$$(1-2\nu)\nabla^2 \vec{u} + \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = 0 \quad (2.37)$$

Podemos escrever de outra forma:

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \frac{(1-2\nu)\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u}}{2(1-\nu)} = 0$$

Resultando então:

$$2(1-\nu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - (1-2\nu)\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} = 0. \quad (2.38)$$

Tomando a divergência da equação (2.37), encontramos:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = \nabla^2(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = 0, \quad (2.39)$$

Ou seja, $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ (que determina a mudança de volume devido a deformação) é uma função harmônica. Tomando o laplaciano da equação (2.37), encontramos:

$$\nabla^2 \nabla^2 \vec{u} = 0, \quad (2.40)$$

Ou seja, em equilíbrio, o vetor de deslocamento satisfaz a equação biharmônica.

2.7 Mecânica da fratura

A robustez nos metais estruturais – particularmente de aço – pode ser aumentada para níveis muito elevados, manipulando a microestrutura de modo a inibir o movimento de deslocamento. Infelizmente, isso torna o material cada vez mais frágil, propiciando que as rachaduras possam se propagar catastróficamente. Inúmeros desastres de engenharia estão relacionados diretamente com este fenômeno, estudiosos da área de engenharia de materiais e áreas afins envolvidos no projeto estrutural devem estar cientes dos procedimentos agora disponíveis para proteger contra a fratura frágil. O termo "mecânica da fratura" refere-se a uma especialização vital dentro da mecânica dos sólidos em que presume-se a presença de uma fissura, queremos encontrar relações quantitativas entre o comprimento da rachadura, a resistência inerente do material ao crescimento da rachadura e a tensão em que a fenda se propaga a alta velocidade para causar a falha estrutural.

A abordagem do balanço de energia

O trabalho de Inglis' sobre fraturas em materiais apresentava uma grande dificuldade matemática: no limite de uma rachadura perfeitamente nítida, as tensões na ponta da fissura eram muito grandes, aproximadamente infinitas. Pouco antes de 1920 Griffith ciente do trabalho de Inglis', resolveu tirar o foco das tensões na ponta da fissura e resolveu focar na abordagem do balanço de energia, que se tornou um dos mais famosos desenvolvimentos em ciência dos materiais. A energia de deformação por unidade de volume de material tensionado é

$$F = \frac{1}{V} \int f' dx = \int \frac{f'}{A} \frac{dx}{L} = \int p d\varepsilon.$$

Se o material é linear ($p = E\varepsilon$), então a energia de deformação por unidade de volume é

$$F = \int E\varepsilon d\varepsilon = \frac{E\varepsilon^2}{2} = \frac{p^2}{2E}$$

Quando uma rachadura cresce em um sólido, a uma profundidade, uma região de material adjacente à superfície livre é descarregada, e sua energia de tensão liberada. Usando a solução de Inglis, Griffith conseguiu calcular essa energia. Uma maneira de visualizar essa liberação de energia, é considerar duas regiões triangulares próximas a fissura, de largura a e altura βa , como sendo completamente descarregadas, enquanto o material restante continua a sentir a tensão total p . Verifica-se que para o plano de estresse de carga $\beta = \pi$ a solução concorda com o proposto por Inglis. A energia de deformação total F^* liberada será:

$$F^* = -\frac{p^2}{2E} \cdot \pi a^2$$

F^* representa a energia de deformação libertada por unidade de espessura da amostra. Esta energia de deformação é libertada pelo crescimento da rachadura. A energia de superfície S associada com uma rachadura de comprimento a é:

$$S = 2\gamma a.$$

O fator 2 aparece em virtude das duas superfícies livres formadas e γ é a energia de superfície. A energia total associada com a fissura é então a soma da (positiva) energia absorvida para criar as novas superfícies, além da energia de pressão (negativa) liberada, permitindo que as regiões próximas da rachadura tornem-se descarregadas. Observa-se que depois do ponto, o crescimento da fenda é espontâneo e catastrófico. O comprimento crítico da fenda $a = a_c$ pode ser encontrado fazendo a derivada total da energia $S + F^*$ igual a zero. Temos então:

$$\frac{\partial(S + F^*)}{\partial a} = 2\gamma - \frac{p_f^2 \pi a}{E} = 0$$

Resultando em,

$$p_f = \sqrt{\frac{2E\gamma}{\pi a}}.$$

Chamamos p_f de tensão crítica. No seu trabalho original Griffith tratou de materiais muito frágeis, barras de vidro mais especificamente. Quando o material apresenta maior ductilidade,

a energia de superfície sozinha não fornece um modelo exato para a fratura. Irwin e Orowan sanaram algum tempo depois, pelo menos em parte, de forma independente essa deficiência. Eles sugeriram que em um material dúctil grande parte da energia de deformação não libertada foi absorvida através da criação de novas superfícies. Irwin e Orowan sugeriram que a fratura catastrófica ocorre quando a energia de deformação é lançada a uma velocidade suficiente para satisfazer as necessidades de todos os dissipadores de energia e denotando essa taxa de liberação de energia como tensão crítica, pelo parâmetro g_c ; a equação de Griffith pode então ser reescrita na forma:

$$p_f = \sqrt{\frac{Eg_c}{\pi a}}$$

Esta expressão relaciona de forma sucinta uma relação entre a tensão crítica, o parâmetro g_c e a largura a .

3 *Elementos discretos*

O Modelo de elementos discretos (DEM) foi apresentado pela primeira vez por Cundall e Strack (1979) [8], para estudar mecânica das rochas. Desde então diferentes aplicações de DEM foram feitas com sucesso. Essas aplicações variam do estudo de comportamento estático de materiais granulares, à fragmentação por impacto e explosão, usando partículas elementares de várias formas que são conectadas por diferentes tipos de elementos de coesão ([33], [41] – [25], [23], [30] – [7]).

De maneira geral o método se baseia no uso das equações de Newton para governar o movimento de translação e rotação dos elementos, que concentram toda a massa. Forças e torques surgem das interações entre os elementos, seja de contato ou coesão, de forças volumétricas que atuam no sistema e, naturalmente da interação com limites como paredes.

Ao longo deste trabalho, utilizamos uma implementação tridimensional de DEM, onde material sólido é representado por um conjunto de esferas de diferentes tamanhos. Essas esferas, os elementos do método, estão conectadas através de elementos de haste-treliça, que deformam por alongamento, cisalhamento, flexão e torção.

Além de transportar toda a massa do sistema, não são permitidos aos elementos esféricos penetrar-se uns aos outros sem uma força repulsiva, agindo sobre eles. Esse mecanismo é incluído no modelo para levar em conta as possíveis interações entre diferentes fragmentos formados durante a quebra do material.

A força total e momento atuando sobre cada elemento consiste de forças de contato resultantes de interações de esfera esfera, $\vec{F}^c = \vec{F}^{def} + \vec{F}^{dis}$, das forças de alongamento e flexão $\vec{F}^b = \vec{F}^{elo} + \vec{Q}$, e momentos \vec{M}^b transmitidos pelos elementos de coesão haste-treliça.

A força de contato tem um termo repulsivo devido à interação elástica entre elementos esféricos. Atribuindo a cada elemento esférico, ou partícula, o módulo de Young E^p e a razão de Poisson ν^p , o termo repulsivo da força de contato pode ser calculado a partir da equação de equilíbrio entre dois sólidos isotrópicos (ver seção 2.6), equação (2.38). Esse "problema de contato" na teoria da elasticidade foi resolvido por Hertz em 1882 ([26], [18]). A força na

partícula i em contato com a partícula j , em função da deformação ξ_{ij} (veja a figura 3.1) é dada por

$$\vec{F}_{ij}^{def} = \frac{4}{3} \frac{E^p \sqrt{R^{ef}}}{(1 - \nu^2)} \xi_{ij}^{3/2} \hat{n}, \quad (3.1)$$

onde \vec{r}_{ij} é a posição relativa da partícula j com respeito à i (veja figura 3.1), $\xi_{ij} = R_i + R_j - |\vec{r}_{ij}|$ representa a deformação das esferas, $\frac{1}{R^{eff}} = 1/R_i + 1/R_j$, e $\hat{n} = \vec{r}_{ij}/|\vec{r}_{ij}|$.

O uso de elementos esféricos também pode levar a um ligeiro aumento de tenacidade à fratura por cisalhamento no caso da fratura sob compressão. Em nosso caso, entretanto, a falha da modalidade *II* é rara segundo [10] e conseqüentemente este efeito não é muito importante nas aplicações apresentadas nesse trabalho.

A representação 3D das hastes usadas neste trabalho são uma extensão do caso bidimensional das hastes de Euler-Bernoulli descrito na Ref. [35]. Em três dimensões, no entanto, a deformação total de uma haste é calculada pela superposição de alongamento, torção, bem como dobra e corte em dois planos diferentes.

À força de deformação dada por (3.1) adiciona-se as forças de amortecimento viscoso e atrito entre as partículas para se levar em conta no modelo os processos de dissipação de energia durante a fragmentação. Esses termos adicionais são ([14], [23]) dados por.

$$\vec{F}_{ij}^{dis} = -\gamma_n \vec{v}_{ij,n} - \min(\gamma_t |\vec{v}_{ij,t}|, \mu |\vec{F}_{ij}^{def}|) \hat{t} \quad (3.2)$$

onde $\vec{v}_{ij,n} = (\vec{v}_{ij} \cdot \hat{n}) \hat{n}$, $\vec{v}_{ij,t} = (\vec{v}_{ij} - \vec{v}_{ij,n}) + \vec{\omega}_{ij} \times \hat{n}$ são as componentes normal e tangencial da velocidade relativa entre as partículas i e j , com $\vec{\omega}_{ij} = \vec{\omega}_j - \vec{\omega}_i$ a diferença entre as velocidades angulares, e $\hat{t} = \vec{v}_{ij,t}/|\vec{v}_{ij,t}|$. Aqui γ_n e γ_t referem-se aos termos de amortecimento viscoso, e μ ao coeficiente de atrito de acordo com a lei de Coulomb para fricção entre dois corpos.

O termo tangencial adiciona um torque à partícula i devido à fricção com a partícula j dado por

$$\vec{M}_{ij}^{dis} = \vec{v}_{ij,t} \times (R_i \hat{n}) \quad (3.3)$$

A força restauradora, atuando sobre o elemento i conectado por uma haste ao elemento j devido ao alongamento da haste é dado por

$$\vec{F}_{ij}^{elo} = E^b A^b \varepsilon_{ij} \hat{n}, \quad (3.4)$$

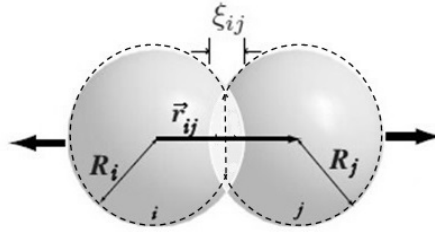


Figura 3.1: Representação da interação elástica entre dois elementos esféricos .

onde E^b é a rigidez da haste, $\varepsilon_{ij} = (|\vec{r}_{ij}| - l_0)/l_0$, com l_0 o comprimento inicial do feixe e A^b sua seção transversal. Desta forma, a força restauradora é atrativa para o alongamento e repulsiva para a compressão dos elementos haste-treliça.

As forças de flexão e os torques transmitidos pela haste são calculados a partir da alteração nas orientações em cada extremidade da haste, em relação ao sistema de coordenadas fixo do corpo da haste $(\hat{e}_x^b, \hat{e}_y^b, \hat{e}_z^b)$.

A Figura 3.2 mostra uma típica deformação devido à rotação de ambas as extremidades do feixe em relação ao eixo \hat{e}_z^b , com \hat{e}_x^b orientado na direção de \vec{r}_{ij} . Tendo em conta as orientações angulares θ_i^z e θ_j^z , a correspondente força de flexão $\vec{Q}_{ij}^{z,b}$ e momento $\vec{M}_{ij}^{z,b}$ para a deformação elástica da haste são dadas por [29]:

$$\vec{Q}_{ij}^{z,b} = 3E^b I \frac{(\theta_i^z + \theta_j^z)}{L^2} \hat{e}_y^b, \quad (3.5)$$

$$\vec{M}_{ij}^{z,b} = E^b I \frac{(\theta_i^z - \theta_j^z)}{L} \hat{e}_z^b + (\vec{Q}_{ij}^{z,b} \times |\vec{r}_{ij}| \hat{e}_x^b), \quad (3.6)$$

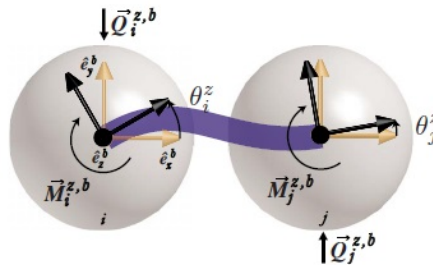


Figura 3.2: Deformação típica de uma haste no plano x-y, mostrando as forças resultantes de flexão, cisalhamento e torques. O eixo z é perpendicular à imagem.

onde I é o momento de inércia do feixe. Equações correspondentes são escritas para rotações gerais em torno de \hat{e}_y^b , e as forças e momentos são somados. O torque devido torção é

calculado considerando uma rotação relativa dos elementos ao redor de \hat{e}_x^b :

$$\vec{M}_{ij}^{x,b} = -G^b I^{tor} \frac{(\theta_j^x - \theta_i^x)}{L} \hat{e}_x^b \quad (3.7)$$

com G^b e I^{tor} representando o módulo de corte e o momento de inércia das hastes ao longo do eixo da haste, respectivamente. As forças de flexão e momentos são transformados para o sistema de coordenadas global, antes de serem adicionados ao contato, volume e forças de paredes.

3.1 Regras de Ruptura

As hastes podem quebrar a fim de modelar explicitamente os danos, a fratura, e a falha do sólido. A regra de quebra imposta leva em conta a quebra devido ao alongamento e flexão de uma haste ([6], [28], [22], [19], [12]), uma haste é considerada "quebrada" se

$$\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{th}} \right)^2 + \frac{\max(|\theta_i|, |\theta_j|)}{\theta_{th}} \geq 1, \quad (3.8)$$

onde $\varepsilon = \Delta l/l_0$ é a deformação longitudinal, e θ_i e θ_j são os ângulos gerais de rotação nas extremidades da haste entre os elementos i e j , respectivamente. Aqui $\cos \theta_i = \hat{e}_x^{ib} \cdot \hat{e}_x^b$, onde $(\hat{e}_x^{ib}, \hat{e}_y^{ib}, \hat{e}_z^{ib})$ define a orientação das i -partículas no sistema de coordenadas fixo do corpo da haste, cálculo similar é executado para avaliar θ_j . A equação (3.8) tem a forma do critério de rendimento de Von Mises para a plasticidade do metal ([19], [34]). A primeira parte da equação 3.8 refere-se à quebra da haste através do alongamento e a segunda através da flexão, com ε_{th} e θ_{th} , sendo os respectivos limiares. Os valores de limiar introduzidos são tomados aleatoriamente para cada haste, de acordo com a distribuição de Weibull:

$$P(\varepsilon_{th}) = \frac{k}{\varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon_{th}}{\varepsilon_0} \right)^{k-1} \exp\left[-\left(\frac{\varepsilon_{th}}{\varepsilon_0}\right)^k\right], \quad (3.9a)$$

$$P(\theta_{th}) = \frac{k}{\theta_0} \left(\frac{\theta_{th}}{\theta_0} \right)^{k-1} \exp\left[-\left(\frac{\theta_{th}}{\theta_0}\right)^k\right], \quad (3.9b)$$

Aqui k , ε_0 e θ_0 são parâmetros do modelo, que controlam a largura das distribuições e os valores médios para ε_{th} e θ_{th} , respectivamente. Desordem baixa é obtido através da utilização de grandes valores de k , desordem grande através da utilização de pequenos valores de k . A desordem é introduzida também no modelo pelos diferentes comprimentos da haste na discretização conforme descrito abaixo.

As regras de quebra são avaliadas em cada passo de tempo. A quebra da haste é irreversível, o que significa que hastes quebradas são excluídas dos cálculos da força para todas as etapas de tempo consecutivos.

3.1.1 Desordem

A desordem está associada ao processo de ruptura macroscópico, visto que, cada elemento de coesão representa o sistema em escala macroscópica, basta então adicionar a cada elemento de coesão um ponto de quebra e possivelmente módulo elástico diferente. Uma das vantagens de se utilizar o DEM no estudo de fraturas de meios desordenados é que a desordem pode ser adicionada facilmente no modelo estudado através das propriedades elásticas das partículas. Neste trabalho são atribuídas as mesmas propriedades elásticas a todas as hastes, a fim de investigarmos unicamente o papel da desordem no sistema, pois os processos de fratura e ruptura são muito sensíveis a desordem. Dessa forma podemos introduzir desordem localmente de forma direta para realizarmos o estudo de fratura. A desordem é criada através:

- Da rede utilizada.
- Variáveis da elasticidade (tamanho, densidade, tensão de deformação e outras propriedades das partículas.
- Critérios de ruptura.
- Remoção de uma fração dos elementos de coesão antes do início de uma simulação.

Todas as hastes tem o mesmo módulo de Young. A constante da mola é $K' = \frac{E^p A^b}{l_0}$, onde A^b é a área da seção transversal; E^p o módulo de Young e l_0 é o comprimento inicial. Como o módulo de Young é constante e a área da seção também é constante, pois as vigas utilizadas satisfazem as hipóteses de Euler-Bernoulli, a desordem é introduzida no sistema através de l_0 no tempo $t = 0$, depois não varia mais. Chamamos essa desordem de desordem "congelada". A desordem "congelada" ocorre em processos lentos de fratura de determinados materiais, nesse caso as propriedades de ruptura dos elementos coesivos são estabelecidas apenas uma vez no início da simulação. A lei de distribuição usada no presente trabalho é a lei de Weibull. Os valores críticos ε_{th} e θ_{th} obedecem a essa lei de distribuição.

3.2 Evolução temporal

A evolução temporal do sistema é seguida resolvendo-se numericamente as equações de movimento para a translação e rotação de todos os elementos, discretizando-se o tempo em passos de tamanho δt . Na implementação do método DEM utilizada nesse trabalho utilizamos o algoritmo de integração conhecido como predictor-corrector de sexta-ordem, descrito abaixo. A dinâmica das rotações dos elementos é descrita usando quatérnios ([35], [36]).

O método predictor-corrector (PC) é um algoritmo que é constituído de dois passos. No primeiro passo a predição faz um cálculo de estimativa aproximada da quantidade desejada. No segundo passo o corretor refina a aproximação inicial utilizando outro meio. Resolvendo-se assim uma equação diferencial de segunda ordem da forma

$$\ddot{\zeta} = f(\zeta, \dot{\zeta}, t)$$

Para o instante $t + \delta h$ o passo predictor é uma extrapolação dos valores apurados em tempos $t, t - \delta h$. O predictor será

$$P(\zeta) : \zeta(t + \delta h) = \zeta t + \delta h \dot{\zeta}(t) + \delta h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \psi_i f(t + [1 - i]\delta h)$$

A equação acima é chamada de equação de Adams-Boshforth e contém a mesma informação que uma expansão de Taylor, esta equação proporciona resultados exatos para $\zeta(t) = t^q$ onde $q \leq k$; Isso torna-se verdade se os coeficientes $[\psi_i]$ satisfazem o conjunto de $k - 1$ equações

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1 - i)^q \psi_i = \frac{1}{(1 + q)(2 + q)}, q = 0, \dots, k - 2$$

Para $\frac{d\zeta}{dt}$

$$P(\dot{\zeta}) : \delta h \dot{\zeta}(t + \delta h) = \zeta(t + \delta h) - \zeta(t) + \delta h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \psi'_i f(t + [1 - i]\delta h)$$

os coeficientes devem satisfazer as equações

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1 - i)^q \psi'_i = \frac{1}{(2 + q)}$$

Feito o primeiro passo que foi calcular o valor de $f(t + \delta h)$ utilizando ζ e $\dot{\zeta}$, podemos refinar a estimativa prevista no primeiro passo utilizando a fórmula de Adams-Moulton

$$C(\zeta) : \zeta(t + \delta h) = \zeta t + \delta h \dot{\zeta}(t) + \delta h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \gamma_i f(t + [2 - i]\delta h)$$

$$C(\dot{\zeta}) : \delta h \dot{\zeta}(t + \delta h) = \zeta(t + \delta h) - \zeta(t) + \delta h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \gamma'_i f'(t + [2 - i]\delta h)$$

Os coeficientes são

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2 - i)^q \gamma_i = \frac{1}{(1 + q)(2 + q)}, \quad \sum_{i=1}^{k-1} (1 - i)^q \gamma'_i = \frac{1}{(1 + q)(2 + q)}$$

Analogamente as fórmulas do método PC para, $\dot{\zeta} = f(\zeta, t)$ serão:

-Preditor

$$P(\zeta) : \zeta(t + \delta h) = \zeta t + \delta h \sum_{i=1}^{k-1} \psi_i f(t + [1 - i]\delta h).$$

-Corretor

$$C(\zeta) : \zeta(t + \delta h) = \zeta t + \delta h \sum_{i=1}^{k-1} \gamma_i f(t + [2 - i]\delta h)$$

Os coeficientes obtidos serão

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1 - i)^q \psi_i = \frac{1}{(1 + q)}, \quad \sum_{i=1}^{k-1} (2 - i)^q \gamma_i = \frac{1}{(1 + q)}$$

3.3 Cálculo das propriedades do sistema

Para cada passo de tempo, certas propriedades do sistema são calculadas e acumuladas para a obtenção de médias temporais. Destacamos aqui o cálculo da energia total do sistema, e dos campos de tensão e deformação.

A energia total do sistema é obtida pela soma das energias cinéticas de cada partícula e energia potencial do sistema devido às interações de pares descritas acima. A energia total é dada por

$$\begin{aligned}
E_{total} = & \sum_i \left(\frac{1}{2} m_i v_i^2 + \frac{1}{2} I_i \omega_i^2 \right) + \\
& + \sum_i \sum_{j \neq i}^{contatos} \frac{20 E^p \sqrt{R^{ef}}}{6 (1 - \nu^2)} \xi^{\frac{5}{2}} + \\
& + \sum_i \sum_{j \neq i}^{hastes} \left(\frac{1}{2} E^b A^b \ell_0 \varepsilon_{ij}^2 + E^b I_{fl} (\theta_{y,i} + \theta_{y,j})^2 + E^b I_{fl} (\theta_{x,i} + \theta_{x,j})^2 + G^b I_{tor} (\theta_x)^2 \right)
\end{aligned}$$

A componente (α, β) do tensor de tensão na posição da partícula i é aproximada por ([5]).

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{V} \sum_j^{vizinhos} (\vec{r}_j - \vec{r}_i)_\alpha (\vec{F}_{ij})_\beta \quad (3.10)$$

onde $(\vec{F}_{ij})_\beta$ é a soma das contribuições das forças de contato e de coesão entre as partículas i e j , tomada a componente β . Essa aproximação é baseada na relação entre tensão e momento (veja quinta equação da página 20) e pode ser verificada considerando-se o tensor tensão de Cauchy, que tem como finalidade principal tratar problemas de corpos que sofrem pequenas deformações ([28], [37]).

A componente (α, β) do tensor de deformação na posição da partícula i é aproximada por

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_{vizinhos}} \sum_j^{vizinhos} \frac{1}{2} \left(\frac{(\vec{u}_i - \vec{u}_j)_\alpha}{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)_\beta} + \frac{(\vec{u}_i - \vec{u}_j)_\beta}{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)_\alpha} \right) \quad (3.11)$$

onde $\vec{u}_i = (\vec{r}_i - \vec{r}_i(t=0))$ e são tomados apenas os vizinhos mais próximos. Essa aproximação basea-se na definição do tensor de deformação, (eq. 2.7).

4 *Resultados*

Nesse capítulo são descritas simulações para três diferentes tipos de amostras. Cristalina, amorfa e multifásica.

4.1 Construção das amostras

4.1.1 Amostras Cristalinas.

As amostras cristalinas são obtidas alocando-se os nós, ou seja, a posição de cada elemento do método de elementos discretos em uma rede ordenada HCP (Hexagonal close packing). Os elementos associados aos primeiro-vizinhos da rede são então conectados por hastes, como mostrado na figura 4.1. As propriedades elásticas e os limiares de quebra para alongamento e flexão de cada haste são escolhidos a partir de uma distribuição de Weibull conforme mencionado anteriormente no capítulo 3.

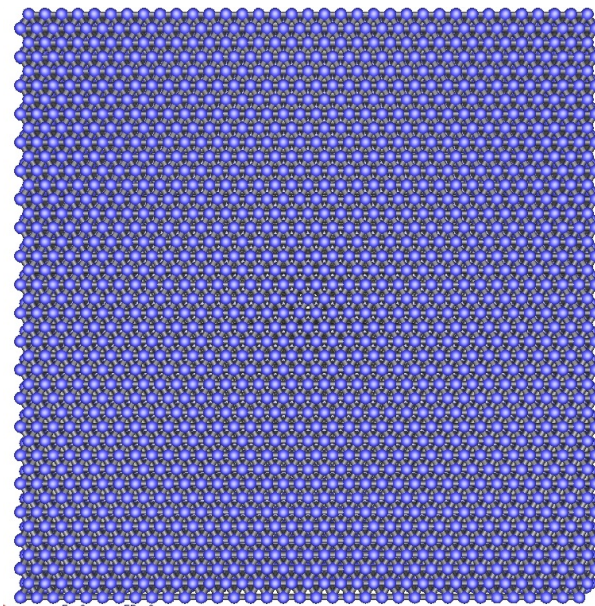


Figura 4.1: Amostra cristalina. Elementos alocados em uma rede HCP conectados por hastes.

Uma amostra esférica é então obtida pela exclusão de todos os elementos e de todas as

ligações externas da região esférica desejada. A figura 4.2. mostra a amostra esférica obtida a partir da amostra mostrada na figura 4.1

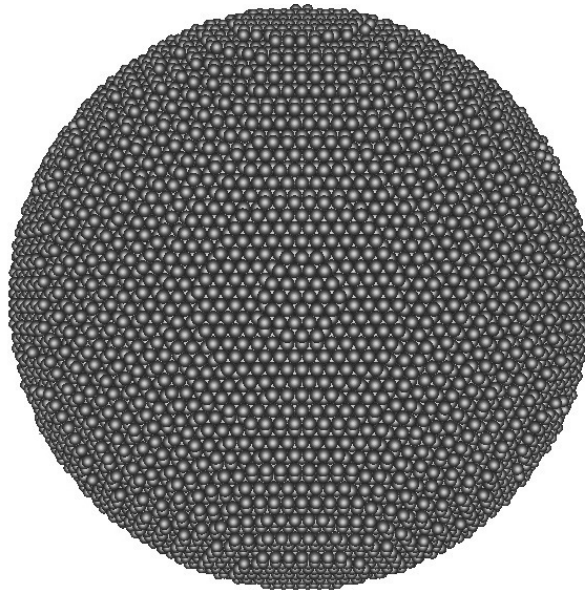


Figura 4.2: Amostra esférica cristalina .

4.1.2 Amostras Amorfas.

A construção numérica da amostra amorfa envolve a alocação dos elementos em uma rede não-ordenada com velocidade inicial aleatória. Os raios dos elementos são escolhidos aleatoriamente de uma distribuição binária, sendo o raio mínimo 95% do raio máximo. O sistema é deixado evoluir no tempo até que as posições dos elementos fiquem aleatórias. Nesse período de tempo o sistema se expande. Em seguida a amostra é comprimida hidrostáticamente para compactar novamente os elementos. Uma força viscosa é adicionada durante esse período de compressão de tal forma que as velocidades dos elementos se anulem e esses permaneçam nas posições de equilíbrio, produzindo elementos compactados em uma rede aleatória.

Uma vez que são obtidas as posições aleatórias, com raios e densidades já conhecidos, conectamos os elementos com hastes utilizando o método de tesselação de Voronoi [15] (veja Apêndice A).

As propriedades elásticas e os limiares de quebra para alongamento e flexão de cada haste são escolhidos a partir de uma distribuição de Weibull conforme mencionado anteriormente no capítulo 3.

Na figura 4.3 temos as etapas de construção da amostra numérica amorfa. Primeiramente com a distribuição aleatória das velocidades em (a) e posteriormente a evolução temporal da

simulação com a compressão hidrostática do sistema que observamos de (b) até (d). Em (e) as partículas estão todas empacotadas e em (f) os elementos são mostrados conectados por hastes usando a tesselação de Voronoi.

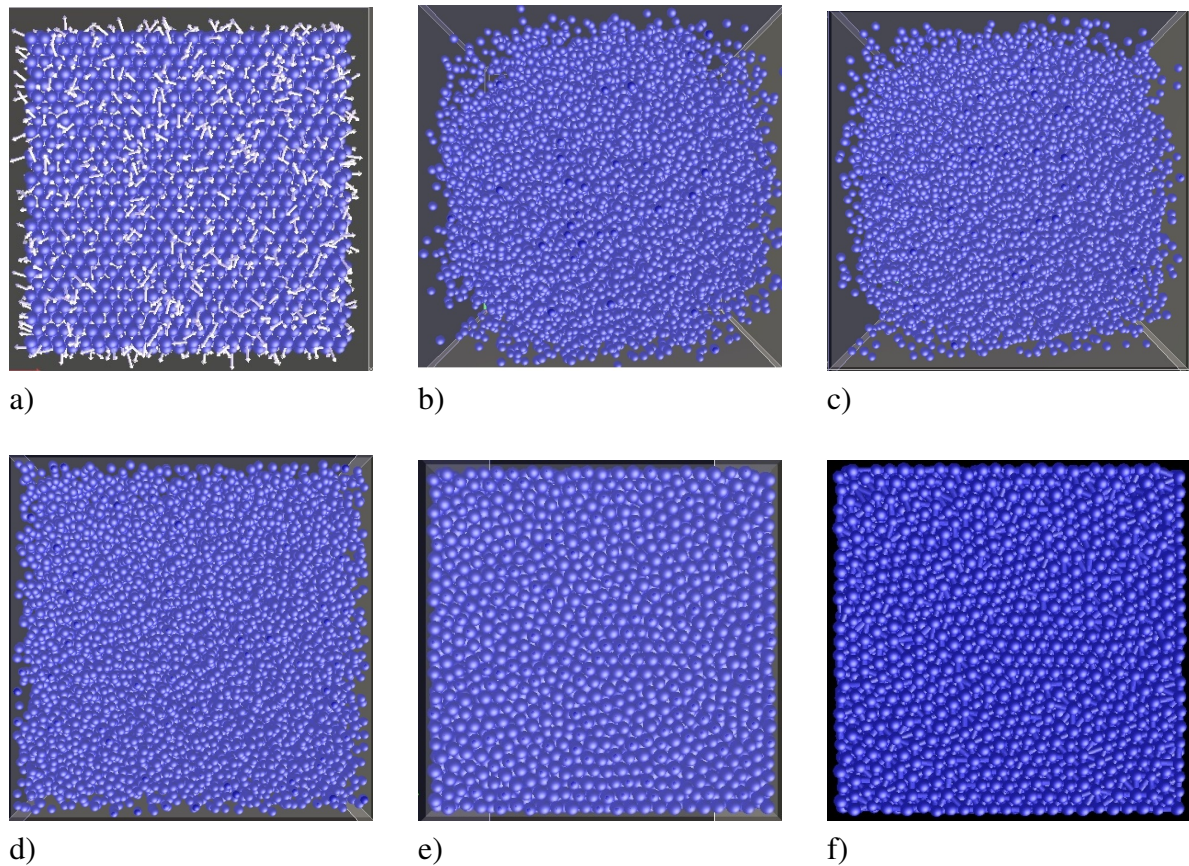


Figura 4.3: Etapas de construção das amostras amorfas. (a) Os vetores velocidade distribuídos aleatoriamente são representados por setas, Evolução temporal do sistema (b) após 7 000 passos , (c) após 10 000 passos, (d) após 17.900 e finalizando a simulação em 100.000 passos. Em (f) temos os elementos empacotados e conectados por hastes.

A seguir na figura 4.4 mostramos a amostra esférica amorfa gerada através dos procedimentos detalhados acima.

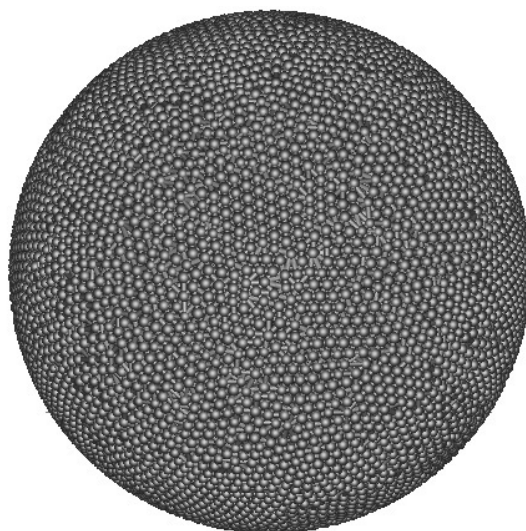


Figura 4.4: Amostra esférica amorfa.

4.1.3 Amostras Multifásicas

O terceiro tipo de amostra, rotulada multifásica, é mais complexa. A figura 4.5 mostra as etapas de construção da amostra multifásica. Primeiro, um empacotamento de poliedros convexos aleatórios, seguindo uma distribuição de tamanho desejado é gerada. Dentro de cada poliedro, partículas cristalinas são geradas, colocando elementos usando redes HCP orientadas de acordo com o sistema de coordenadas local principal. Estes elementos estão ligados por vigas usando os vizinhos mais próximos. Após este primeiro passo, elementos soltos são adicionados nos espaços intersticiais entre poliedros. Velocidades aleatórias são atribuídas para todos os elementos (partículas cristalinas e elementos soltos) e o sistema é deixado para evoluir confinado a uma parede esférica com um diâmetro maior até os elementos soltos serem capazes de acomodar-se nas regiões entre as partículas cristalinas. O diâmetro do recipiente esférico é então reduzido lentamente confinando assim os elementos.

O empacotamento resultante possui então um reticulado HCP ordenado (partículas cristalinas) e regiões de treliça aleatória (amorfa) como mostrado na figura 4.6. Todos os elementos soltos são conectados por hastes usando a tesselação de Voronoi. Ligações conectando partículas amorfas a cristalinas são rotuladas interface amorfo-cristalina e ligações conectando diferentes partículas cristalinas são rotuladas cristalina - cristalina. Dependendo de como são feitas as ligações as propriedades do material podem ser diferentes.

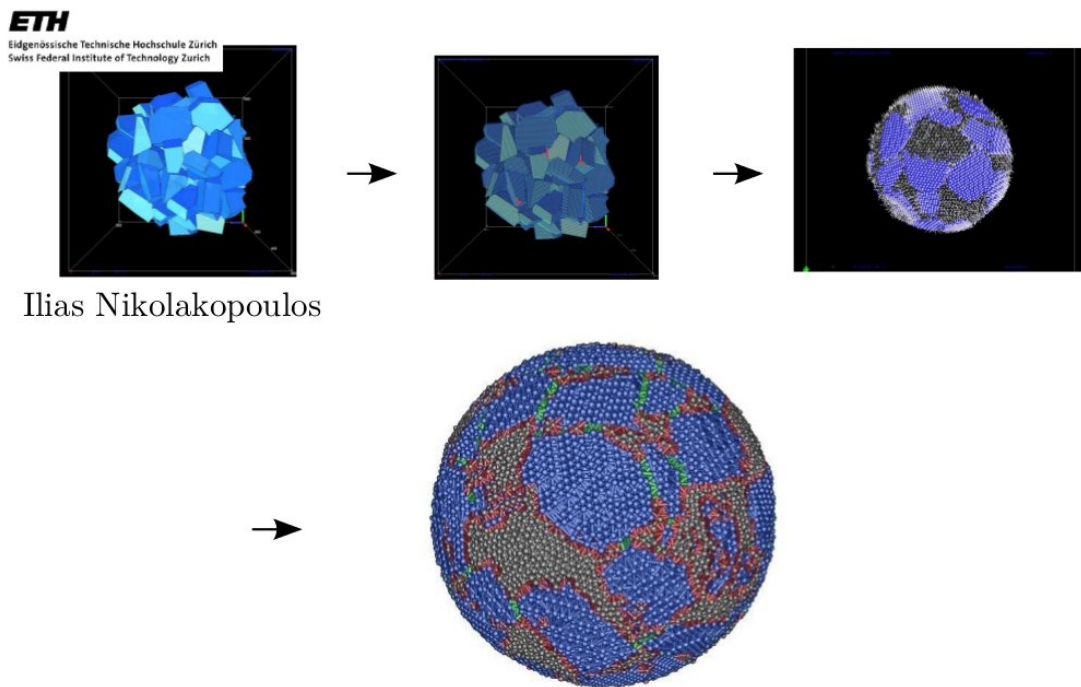


Figura 4.5: Etapas de construção das amostras multifásicas.

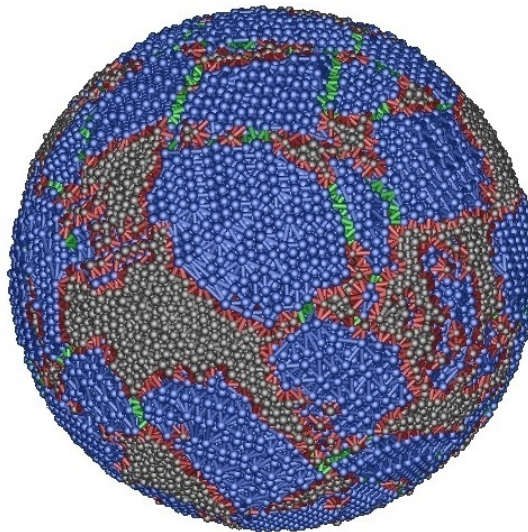


Figura 4.6: Amostra esférica multifásica.

4.2 Caracterização das amostras

Nessa seção serão caracterizados os materiais cristalino, amorfo e multifásico através de simulações com tensão uniaxial aplicada ao sistema. Para caracterização das propriedades elásticas do sistema como um todo (propriedades macroscópicas), retira-se uma pequena fatia retangular das amostras esféricas cristalina, amorfa e multifásica mostradas na seção (4.1). Ao final de cada subseção encontra-se uma tabela com o resumo das principais propriedades elásticas de cada material.

Todas as amostras numéricas retangulares são divididas em conjuntos de elementos, um na parte superior, outro na inferior e um na parte central. Esses conjuntos permitem controlar o movimento dos elementos e permitem realizar médias de medidas para o cálculo das propriedades elásticas. A seguir escolhemos uma fatia retangular da amostra esférica cristalina a fim de ilustrarmos as ideias contidas neste parágrafo, veja a figura 4.7.

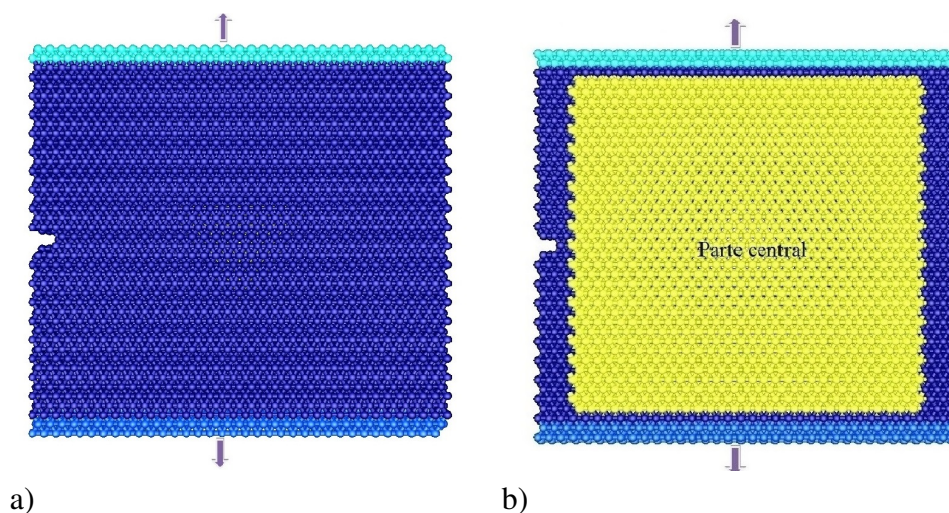


Figura 4.7: Amostra retangular cristalina, em a) temos a parte superior e inferior em destaque e em b) a parte central em destaque.

Na figura 4.7 cores diferentes são utilizadas para representar elementos que pertencem a conjuntos diferentes. Os elementos na parte superior (verde) e inferior (azul) são usados para aplicar uma tensão uniaxial ao sistema, movendo os superiores para cima e os inferiores para baixo com velocidade constante. Os elementos na parte central da amostra (amarelos) serão usados para calcular os valores micros de tensão e deformação. A fim de controlar a posição inicial da trinca gerada pela tensão uniaxial, uma pequena trinca é adicionada à amostra na região central.

4.2.1 Cristalina

O entendimento do processo de fratura em diversos materiais é de grande importância para a física e indústrias da construção civil. A tensão de ruptura, por exemplo, é um parâmetro extremamente importante, que pode ser determinada através de curvas tensão-deformação em ensaios de tensão uniaxial.

A figura 4.8 mostra uma curva tensão-deformação para uma amostra cristalina sujeita a uma tensão uniaxial na direção y , para a qual foram usados os parâmetros microscópicos mostrados na tabela 4.1. A tensão crítica, a tensão máxima imediatamente antes da fratura, para esses

parâmetros é de 0.035 GPa, a inclinação da curva antes da fratura corresponde ao módulo de Young para o material macroscópico que possui valor de 4.4 GPa. As imagens na figura 4.8 correspondem a fotos instantâneas do sistema nas tensões correspondentes as indicadas pelas setas, as cores correspondem à tensão local σ_{yy} , sendo vermelho 0.11 GPa e azul, -0.11 GPa. Podemos ver que inicialmente a tensão no sistema é aproximadamente homogênea, na deformação correspondente a $\epsilon_{yy} \approx 0.006$ já podemos identificar uma concentração de tensão na extremidade da trinca inicial. Na deformação $\epsilon_{yy} \approx 0.013$ o material está prestes a se romper, e podemos claramente ver a concentração de tensão na extremidade da trinca inicial, agora saturada na escala de cores utilizada. A medida que o material se rompe a trinca inicial cresce e podemos observar uma região aproximadamente triangular onde a tensão é reduzida, e a concentração de tensão na extremidade da trinca procede até o material se romper totalmente.

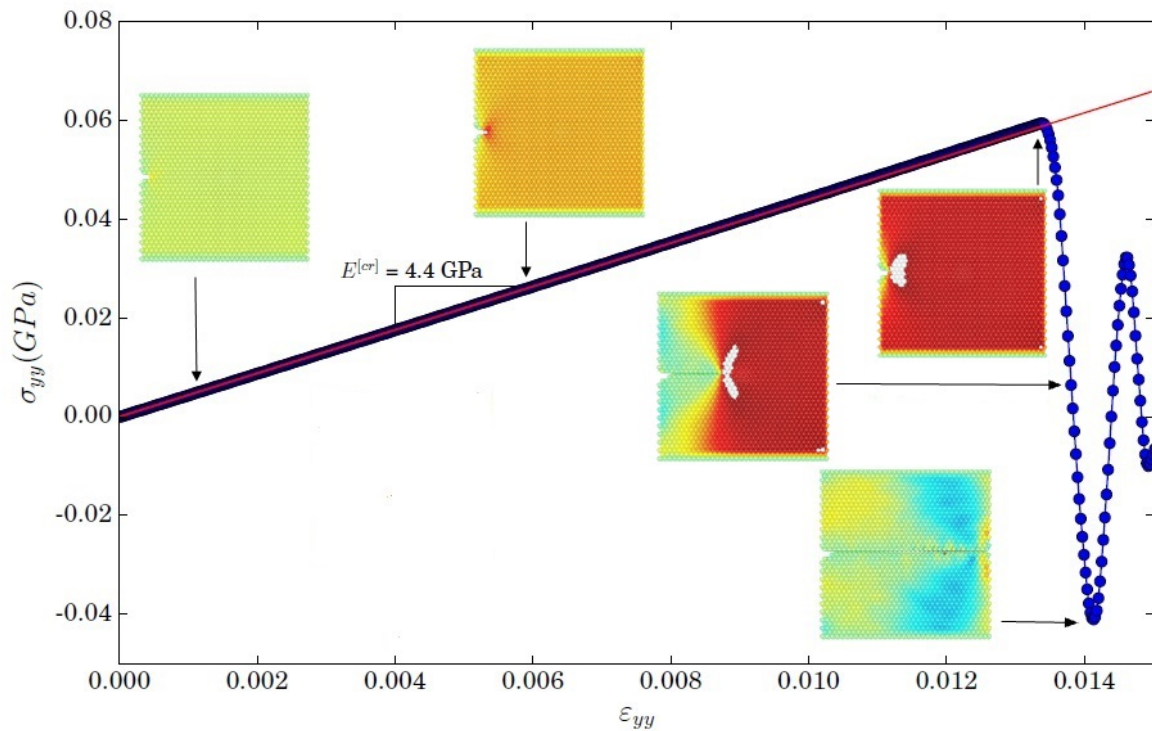


Figura 4.8: Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} , e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação.

Foram realizadas várias simulações variando o módulo de Young "microscópico" das hastes com o objetivo de estudar como varia o módulo de Young macroscópico do material em função desse parâmetro. A figura 4.9 mostra como o módulo de Young macroscópico depende do módulo de Young microscópico. A dependência é linear dado por $E^{[cr]} = 0.73E_{micro}$ para amostras cristalinas com hastes de diâmetro igual ao diâmetro dos elementos esféricos. Com isso podemos ajustar os parâmetros microscópicos para obter o módulo de Young do material

desejado.

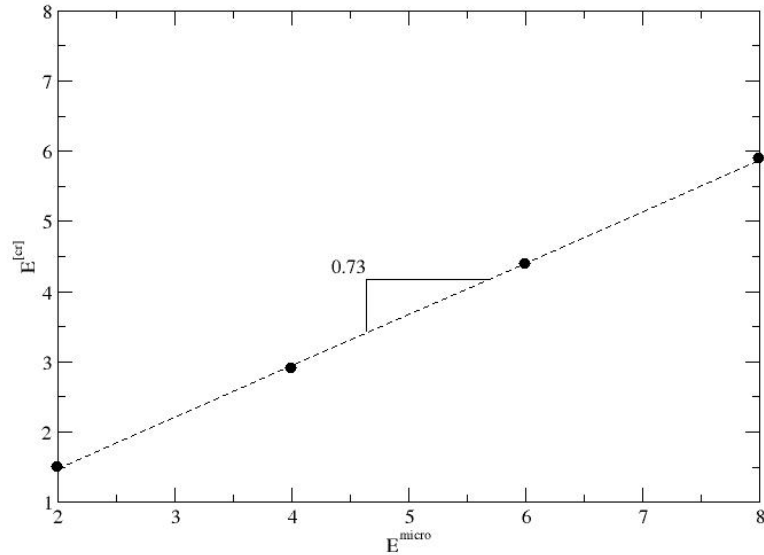


Figura 4.9: Curva dos módulos de Young em relação aos módulos das hastes para o material cristalino.

Descrição	Valor
Estrutura	Cristalina HCP
Tipo de Haste	Linear elástica
Diâmetro dos Elementos	0.75mm
Densidade dos Elementos	3000 $\frac{kg}{m^3}$
Módulo de Young dos Elementos E_{micro}	6 GPa
Módulo de Young das Hastes E_{micro}	6 GPa
Diâmetro das Hastes	0.75mm
Limite médio de quebra por alongamento	0.02
Limite médio de quebra por flexão	3.5°
Módulo de Young Macroscópico $E^{[cr]}$	4.4 GPa
Tensão de ruptura σ_{yy}^{max}	0.035 GPa
Deformação de ruptura ϵ_{yy}^{max}	0.009

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados nas simulações

4.2.2 Amorfa

A figura 4.10 mostra a curva tensão-deformação obtida para a amostra amorfa, para a qual foram usados os parâmetros microscópicos mostrados na tabela 4.2. A tensão crítica de ruptura é 0.054 GPa, e o módulo de Young obtido da inclinação da curva antes da ruptura é 5.1 GPa. As imagens na figura 4.10 correspondem a fotos instantâneas do sistema nas tensões correspondentes às indicadas pelas setas, as cores correspondem à tensão local σ_{yy} , sendo vermelho 0.05 GPa e azul, -0.05GPa, nesse caso somente as hastes estão representadas para melhor visualização. A tensão inicial do sistema é aproximadamente homogênea, na deformação correspondente a $\epsilon_{yy} \approx 0.006$ já podemos identificar uma concentração de tensão na extremidade da trinca inicial. Nesse caso o campo de tensão é menos homogêneo que no caso da amostra cristalina devido às flutuações na própria rede. Na deformação $\epsilon_{yy} \approx 0.0126$ o material está prestes a se romper, e podemos claramente ver a concentração de tensão na extremidade da trinca inicial, agora saturada na escala de cores utilizada. A medida que o material se rompe a trinca inicial cresce e podemos observar uma região aproximadamente triangular onde a tensão é reduzida, e a concentração de tensão na extremidade da trinca procede até o material se romper totalmente.

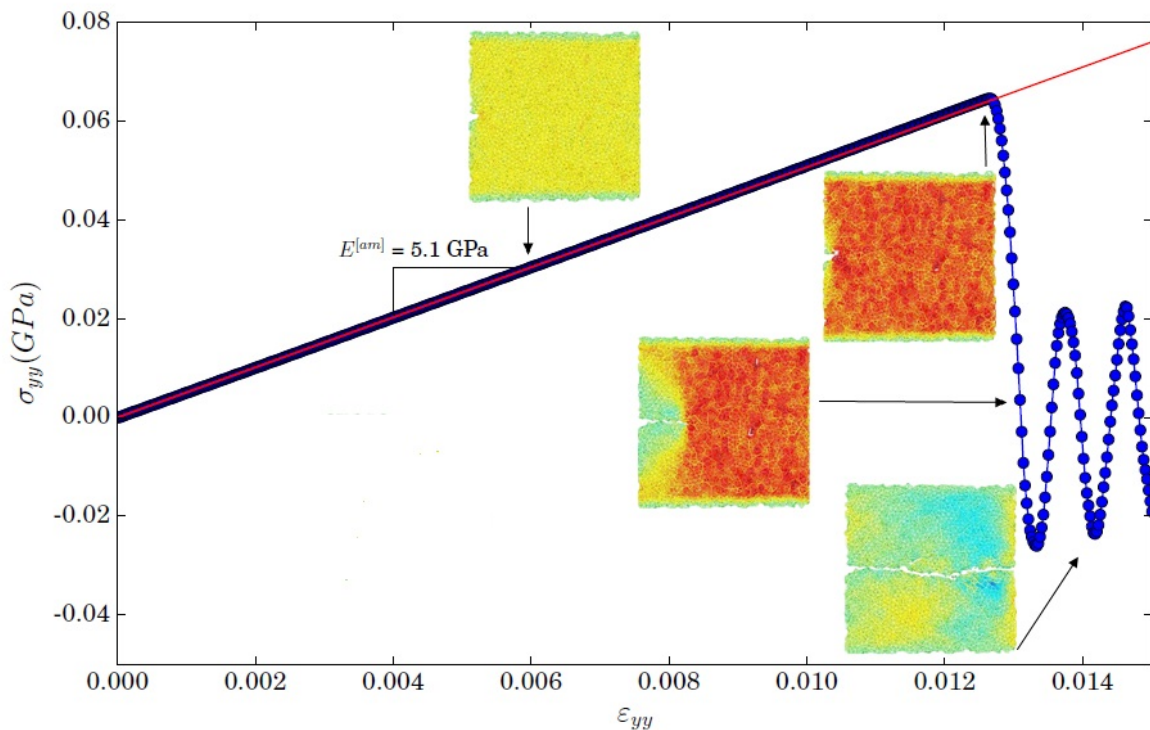


Figura 4.10: Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} para o material amorfo, e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação.

Novamente foram realizadas várias simulações variando o módulo de Young "microscópico"

das hastes com o objetivo de estudar como varia o módulo de Young macroscópico do material em função desse parâmetro. A figura 4.11 mostra como o módulo de Young macroscópico do material varia com o módulo de Young das hastes. Podemos ver novamente que o comportamento é linear, dado por $E^{[am]} = 0.85E_{micro}$ para amostras amorfas com hastes de diâmetro igual ao diâmetro dos elementos esféricos. Notamos que devido a rede ser desordenada o módulo de Young macroscópico para o material amorfo é maior que o módulo de Young para o material cristalino com as mesmas propriedades microscópicas. A rede cristalina possui um módulo de Young macroscópico menor, devido sua organização estrutural com várias hastes perpendiculares à direção da deformação, e que portanto não contribuem para a resistência do material à deformações perpendiculares a elas.

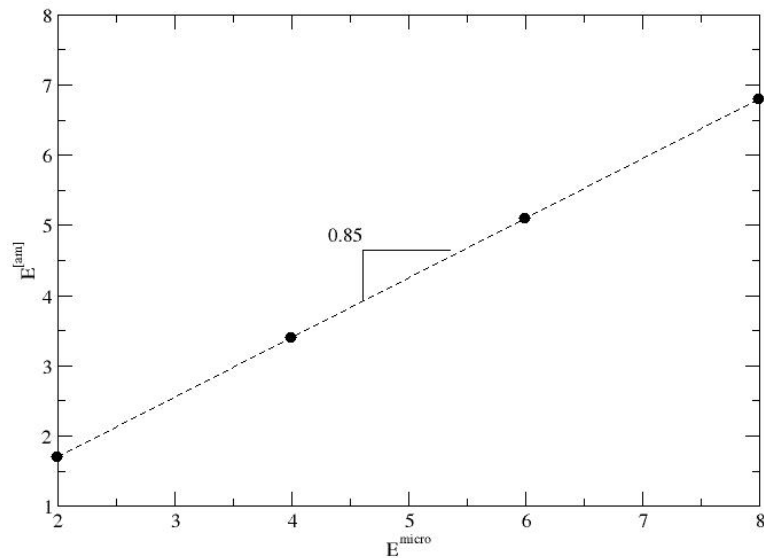


Figura 4.11: Curva para diferentes módulos de elasticidade do material amorfo.

Descrição	Valor
Estrutura	Amorfa HCP
Tipo de Haste	Linear elástica
Diâmetro dos Elementos	0.75mm
Densidade dos Elementos	3000 $\frac{kg}{m^{3.0}}$
Módulo de Young dos Elementos E_{micro}	6 GPa
Módulo de Young das Hastes E_{micro}	6 GPa
Diâmetro das Hastes	0.75mm
Limite médio de quebra por alongamento	0.02
Limite médio de quebra por flexão	3.5°
Módulo de Young Macroscópico $E^{[cr]}$	5.1 GPa
Tensão de ruptura σ_{yy}^{max}	0.054 GPa
Deformação de ruptura ϵ_{yy}^{max}	0.0086

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados nas simulações

4.2.3 Multifásica

A curva tensão-deformação para a amostra multifásica com os parâmetros microscópicos mostrados na tabela 4.3 está mostrada na figura 4.12. A tensão máxima de ruptura para esse material é de 0.050 GPa e o módulo de Young obtido da inclinação da curva antes da ruptura é 4.8 GPa. Podemos ver que para os mesmos parâmetros microscópicos das amostras cristalina e amorfa o material multifásico apresenta um módulo de Young maior do que o do material cristalino e menor do que o amorfo, ficando com um valor intermediário entre os módulos dos materiais. A inclusão de partículas cristalinas com interfaces amorfas produz um material mais duro. As imagens na figura 4.12 correspondem a fotos instantâneas do sistema na tensão correspondente as indicadas pelas setas, as cores correspondem à tensão local σ_{yy} , sendo vermelho 0.35 GPa e azul, -0.35GPa, nesse caso somente as hastes estão representadas para melhor visualização. Diferentemente dos outros materiais, no caso da amostra multifásica a inclusão de uma desordem em maior escala espacial (a escala das partículas cristalinas) faz com que o campo de tensão σ_{yy} seja não homogêneo desde o início. A tensão se concentra na região amorfa, nas interfaces entre as partículas cristalinas, como pode ser visto nas imagens da figura 4.12. Uma vez que a trinca começa a se propagar, ela atravessa as regiões cristalinas e amorfas sem alterar sua direção.

A figura 4.13 mostra como o módulo de Young macroscópico do material varia com o módulo de Young das hastes, obtida através de várias simulações com parâmetros microscópicos diferentes. Observa-se novamente o comportamento linear, nesse caso dado por $E^{[mp]} = 0.8E_{micro}$.

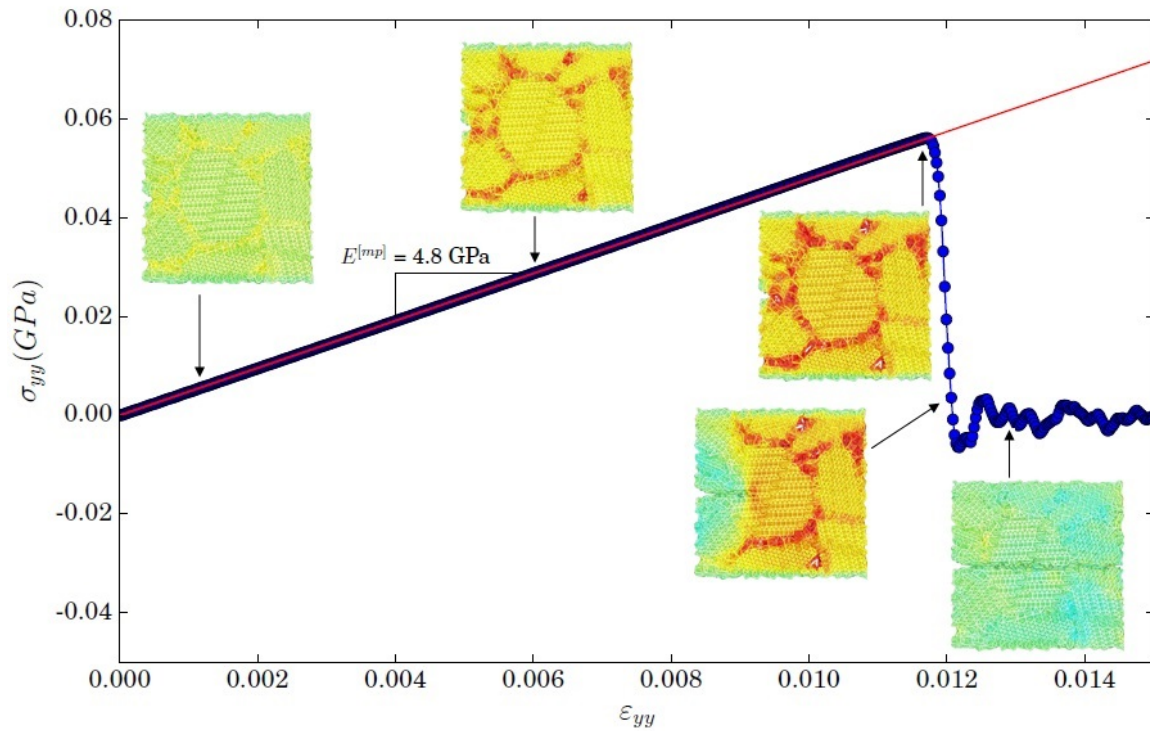


Figura 4.12: Curva com valores dos tensores de tensão σ_{yy} e deformação ϵ_{yy} para o material multifásico, e as imagens de crescimento da micro-trinca na simulação.

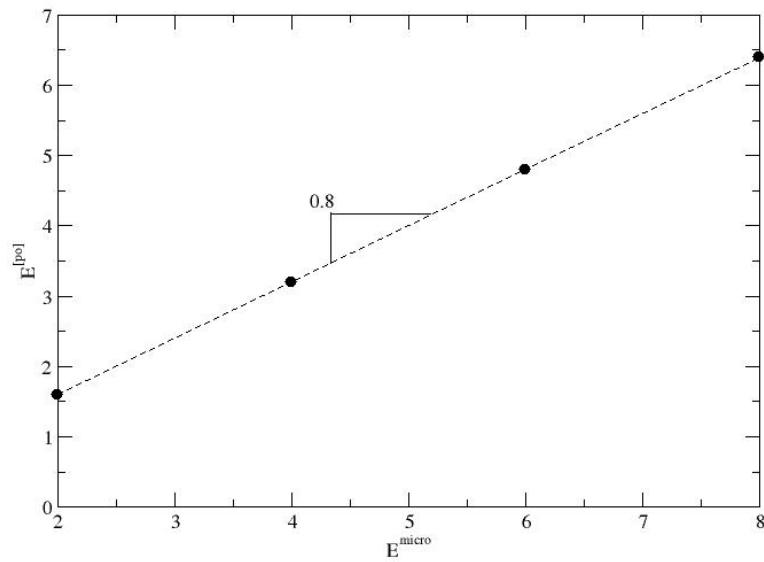


Figura 4.13: Curva para diferentes módulos de elasticidade do material multifásico.

O limite superior das amostras pode ser calculado através das equações:

$$K_{eff1} = k_1 + \frac{v_2}{1/((k_2 - k_1) + 3v_1/(3k_1 + 4\mu_1))} \quad (4.1)$$

Descrição	Valor
Estrutura	Multifásica HCP
Tipo de Haste	Linear elástica
Diâmetro dos Elementos	0.75mm
Densidade dos Elementos	3000 $\frac{kg}{m^{3.0}}$
Módulo de Young dos Elementos E_{micro}	6 GPa
Módulo de Young das Hastes E_{micro}	6 GPa
Diâmetro das Hastes	0.75mm
Limite médio de quebra por alongamento	0.02
Limite médio de quebra por flexão	3.5°
Módulo de Young Macroscópico E^{mp}	4.8 GPa
Tensão de ruptura $\sigma_{yy}^{máx}$	0.050 GPa
Deformação de ruptura $\varepsilon_{yy}^{máx}$	0.008

Tabela 4.3: Parâmetros utilizados nas simulações

$$\mu_{eff1} = \mu_1 + \frac{v_2}{1/(\mu_2 - \mu_1) + 6v_1(k_1 + 2\mu_1)/5\mu_1(3k_1 + 4\mu_1)} \quad (4.2)$$

Substituindo a equação 2.30 em 4.1 e 4.2, teremos:

$$K_{eff1} = \frac{E^{am}}{3(1-2\sigma)} + \frac{v_2}{1/[E^{cr}/3(1-2\sigma) - E^{am}/3(1-2\sigma)] + 3v_1/[3E^{am}/3(1-2\sigma) + 4E^{am}/2(1+\sigma)]}$$

$$\mu_{eff1} = \frac{E_{am}}{2(1+\sigma)} + \frac{v_2}{\frac{1}{\frac{E_{cris}}{2(1+\sigma)} - \frac{E_{am}}{2(1+\sigma)}} + \frac{6v_1[\frac{E_{am}}{3(1-2\sigma)} + \frac{2E_1}{2(1+\sigma)}]}{\frac{5E_1}{2(1+\sigma)}[\frac{3E_{am}}{3(1-2\sigma)} + \frac{4E_{am}}{2(1+\sigma)}]}}$$

Fazendo o cálculo das equações acima encontramos $\frac{E^{[mp]}}{E^{[cr]}} = 1.03$ e $\frac{E^{[mp]}}{E^{[am]}} = 0.90$ que é o valor teórico obtido de [17]. O resultado encontrado no presente trabalho é $\frac{E^{[mp]}}{E^{[cr]}} = \frac{0.8}{0.73} = 1.1$ e $\frac{E^{[mp]}}{E^{[am]}} = \frac{0.8}{0.85} = 0.94$.

Os resultados aqui encontrados podem ser considerados satisfatórios, pois estão bem próximos do valor teórico.

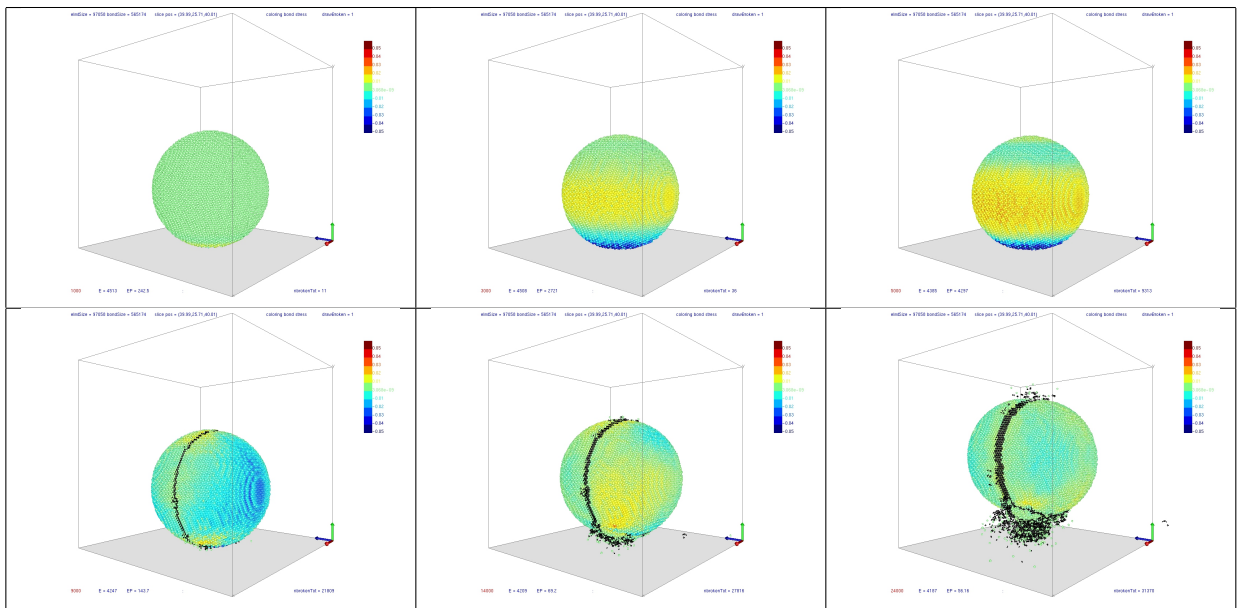


Figura 4.14: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Amostra cristalina, velocidade de impacto 95 m/s.

4.3 Simulações de Impacto

As propriedades microscópicas, ou seja, as propriedades elásticas de elementos e ligações, bem como os limites de quebra das ligações, são escolhidos para alcançar o desejado módulo de Young macroscópico e a resistência à tração. Neste trabalho, são atribuídas as mesmas propriedades elásticas a todas as hastes, a fim de investigar unicamente o papel da desordem nas propriedades elásticas do sistema.

4.3.1 Mecanismos de fragmentação

Foram realizadas inúmeras simulações numéricas de colisões de partículas esféricas, construídas conforme descrito nas seções 4.1.1 a 4.1.3 com uma placa rígida. A interação entre elementos e placa são idênticas às interações elemento-elemento.

A figura 4.14 mostra uma sequência de fotos do sistema em diferentes instantes de tempo durante uma simulação de impacto. Nessa figura a amostra cristalina é utilizada, e a velocidade de impacto é 95 m/s. As cores dos elementos e hastes correspondem aos respectivos alongamentos das hastes. À medida que a partícula se move em direção a placa começa a deformar-se devido as forças de contato. Como resultado desta deformação, surgem danos e, se a energia de colisão for grande o suficiente, a fragmentação da amostra. Os danos e fraturas estão representados na figura pelas ligações quebradas, representadas pela coloração preta.

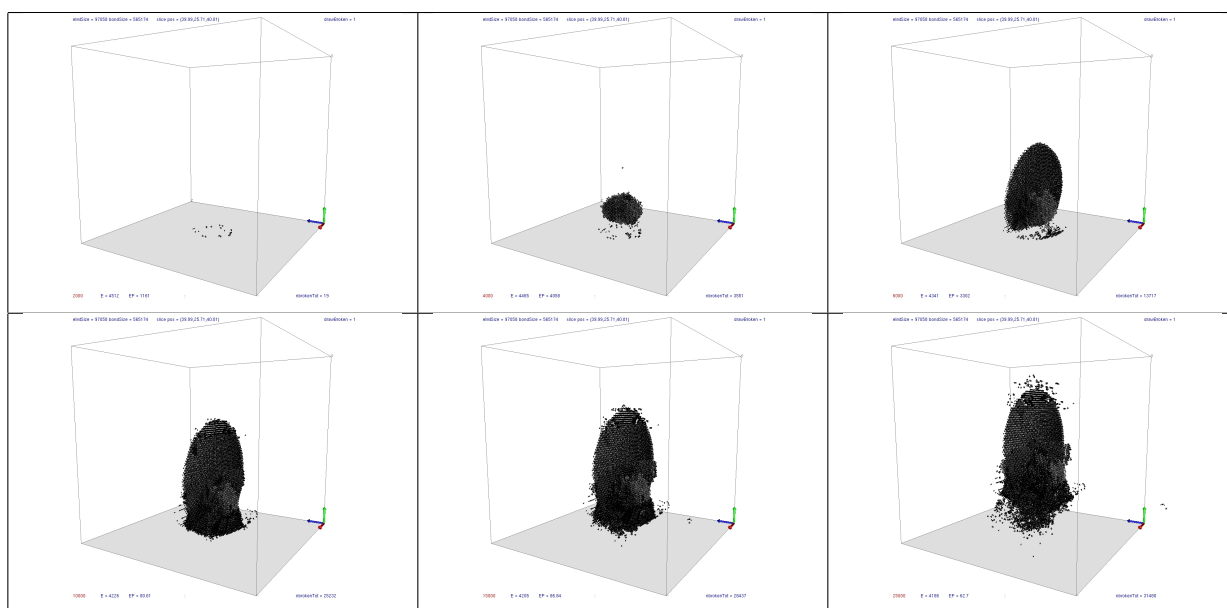


Figura 4.15: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas. Amostra cristalina, velocidade de impacto 95 m/s.

A formação de um anel de ligações quebradas devido a falha por cisalhamento no disco de contato e danos difusos acima dessa região, são os primeiros mecanismos de fragmentação que surgem no material como resultado do impacto. Para melhor visualização na figura 4.15, mostramos a mesma sequência de fotos mostrada na figura 4.14 representando somente as ligações quebradas.

A medida que a fratura evolui, rachaduras originadas na região com estado de tensão biaxial desenvolvem-se para formar rachaduras meridionais. Se a energia de colisão é suficiente para fragmentar o material, para as amostras cristalinas estas rachaduras propagam-se através dos planos da rede cristalina, ocorrendo a clivagem da amostra em rachaduras com planos bem definidos (veja figura 4.15).

Para amostras amorfas não há planos preferenciais na rede, porém rachaduras meridionais ainda desenvolvem levando ao corte da amostra em fragmentos meridionais. Os mesmos mecanismos iniciais de fragmentação podem ser observados para essas amostras. Essa característica está ilustrada nas figuras 4.16 e 4.17.

Para amostras multifásicas rachaduras meridionais planas também crescem a partir da região de estado biaxial de estresse, levando à fragmentação da amostra, como mostrado na figura 4.18. No caso dessas amostras multifásicas a morfologia das fissuras é mais complexa, devido às heterogeneidades de estresse adicional produzidas pela escala adicional de desordem das propriedades dos materiais. As rachaduras que se originam na região de stress biaxial crescem e propagam-se através de planos de clivagem nas partículas cristalinas da amostra multifásica,

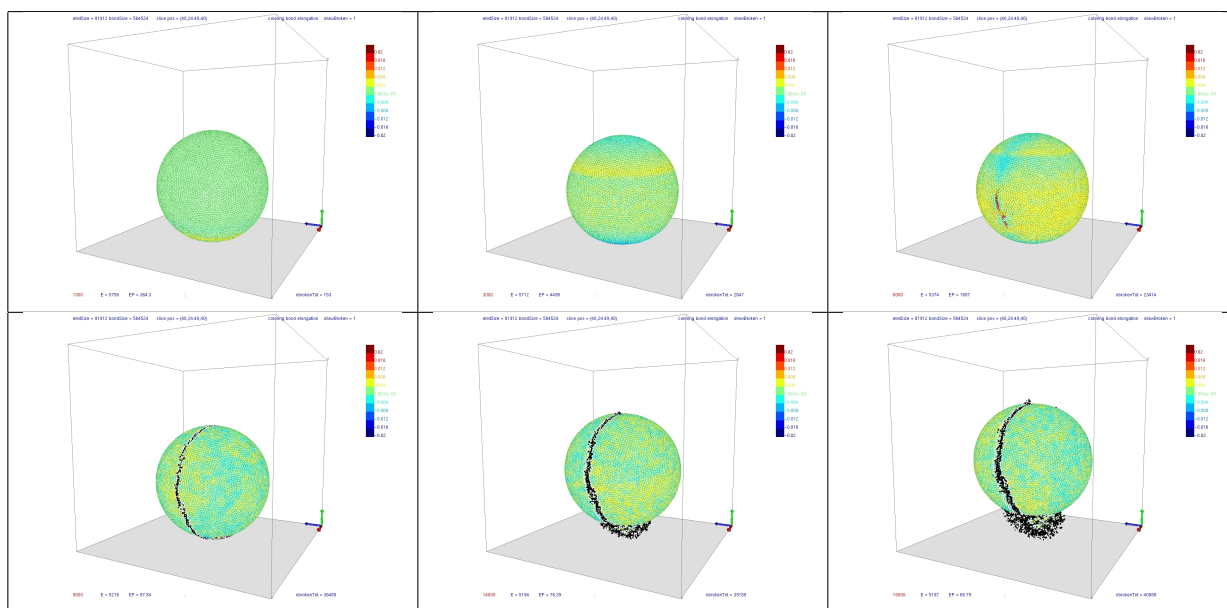


Figura 4.16: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Amostra amorfa, velocidade de impacto 115 m/s.

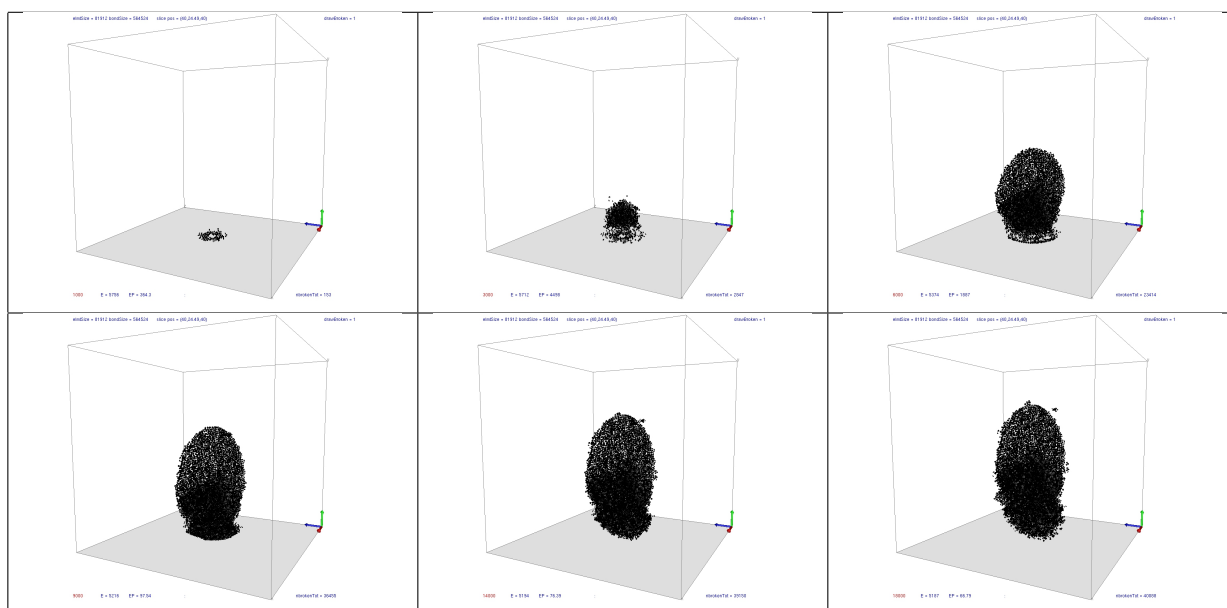


Figura 4.17: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas. Amostra amorfa, velocidade de impacto 115 m/s.

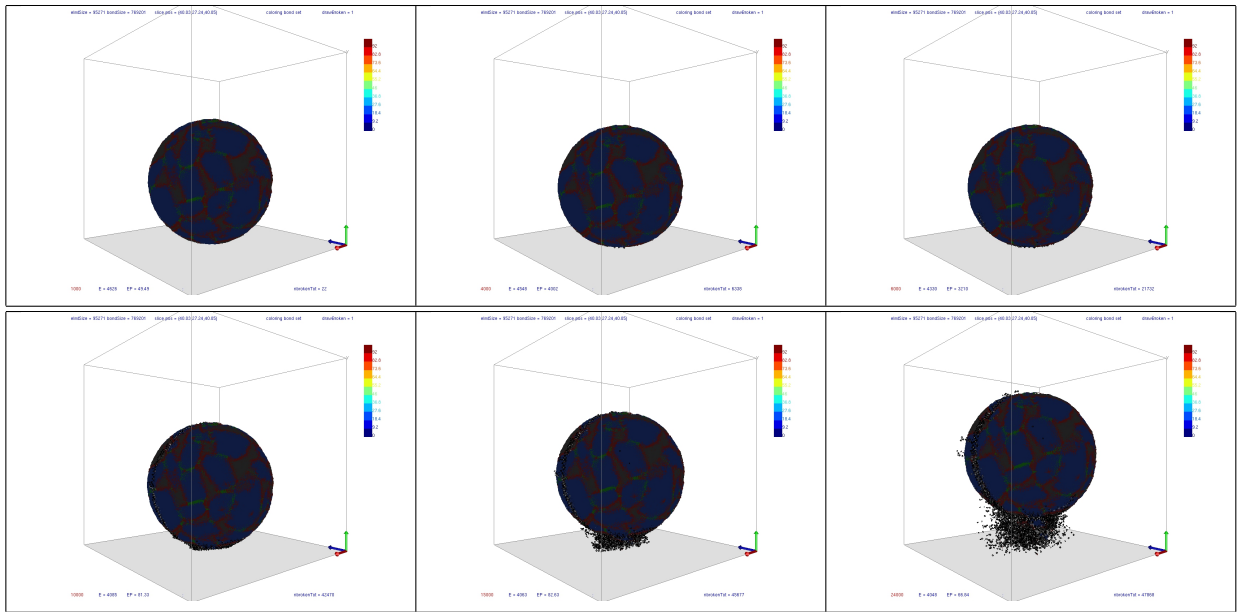


Figura 4.18: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Os elementos e hastes estão coloridos de acordo com a fase a qual pertencem. Amostra multifásica, velocidade de impacto 100 m/s.

e cortam as regiões de fase amorfa, em geral, sem mudar de direção como ilustrado na figura 4.19 onde as ligações quebradas estão representadas em cores correspondentes às fases que pertencem, sendo azul cristalina, preto amorfa e vermelho e verde as regiões de interface cristalina-cristalina e cristalina-amorfa respectivamente.

Pode ser visto na figura 4.20, que existe uma forte correlação da posição da região de dano difuso com a localização de uma região onde a tensão circunferencial no plano perpendicular à direção de impacto está em tensão. Este estado de tensão biaxial é sobreposto por uma compressão na direção de impacto. Embora para a amostra multifásica o estado de tensão seja mais heterogêneo, devido à diferente simetria da rede local, este mecanismo de formação de rachadura é bastante robusto, sendo o mesmo para todos os três tipos de amostras. Este mecanismo já foi relatado tanto experimentalmente e numericamente para materiais de fase única [1][6].

4.4 Regimes de Fragmentação

Várias simulações foram realizadas com diferentes energias de colisão e sementes do gerador de números aleatórios, a fim de investigar os fragmentos finais que resultam dos mecanismos descritos acima. Os tamanhos dos fragmentos finais dependem da energia de colisão e da estrutura interna da amostra. Na figura 4.21 a massa do maior fragmento, m_{max} , juntamente com a massa média dos demais fragmentos m_2/m_1 , com $m_k = \sum_i^{N_f} m_i^k - m_{max}^k$, normalizadas para a

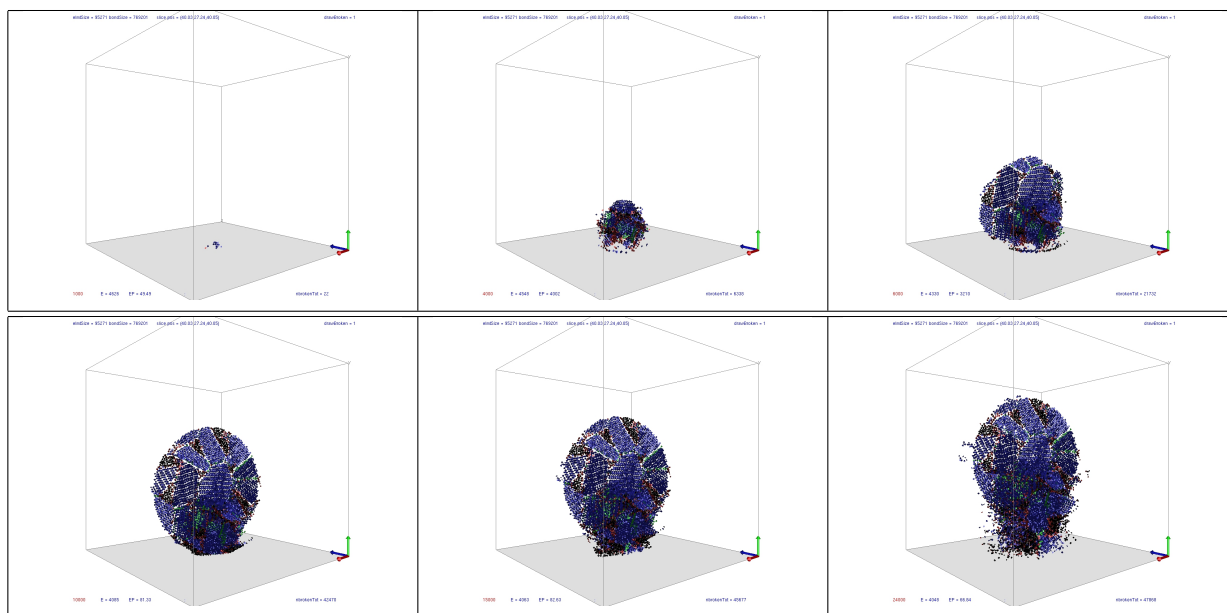


Figura 4.19: Sequência de imagens instantâneas do sistema em diferentes instantes. Somente ligações quebradas estão representadas, coloridas de acordo com a fase a qual pertencem. Amostra multifásica, velocidade de impacto 100 m/s.

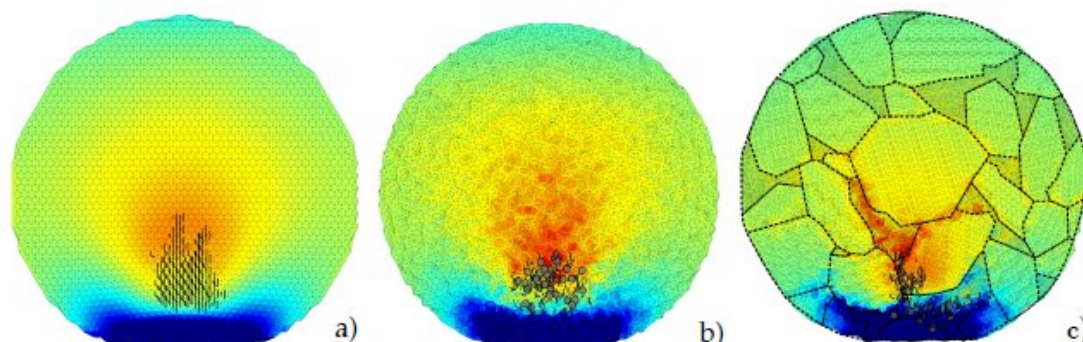


Figura 4.20: Dano inicial. Fatia vertical que passa pelo centro das amostras esféricas de simulações de impacto para amostras DEM a) Cristalina, b) Amorfa e c) Multifásica. Apenas os feixes estão representados, coloridos de acordo com a tensão circunferencial no plano perpendicular à direção do impacto, no sistema de coordenadas local, que varia de -100,0 MPa a 100 MPa (azul para vermelho). Ligações quebradas são representadas por planos de cores escuras perpendiculares às suas direções.

massa inicial do sistema, são representados como uma função da energia de colisão de K , para os três tipos diferentes de amostras.

Pode-se observar que em todos os três casos, há uma energia crítica de colisão, K_c , abaixo da qual somente danos que ocorrem, sendo a massa do maior fragmento $m_{max}/m_0 \sim 1$, correspondente a aproximadamente a massa do sistema original. A transição de danos à fragmentação é bastante acentuada, e ocorre em $K_c^{cr} = 68 \pm 8$ J para amostras cristalinas, $K_c^{mp} = 78 \pm 2$ J para amostras multifásicas e $K_c^{am} = 93 \pm 4$ J para amostras amorfas. O valor de K_c^{cr} para amostras

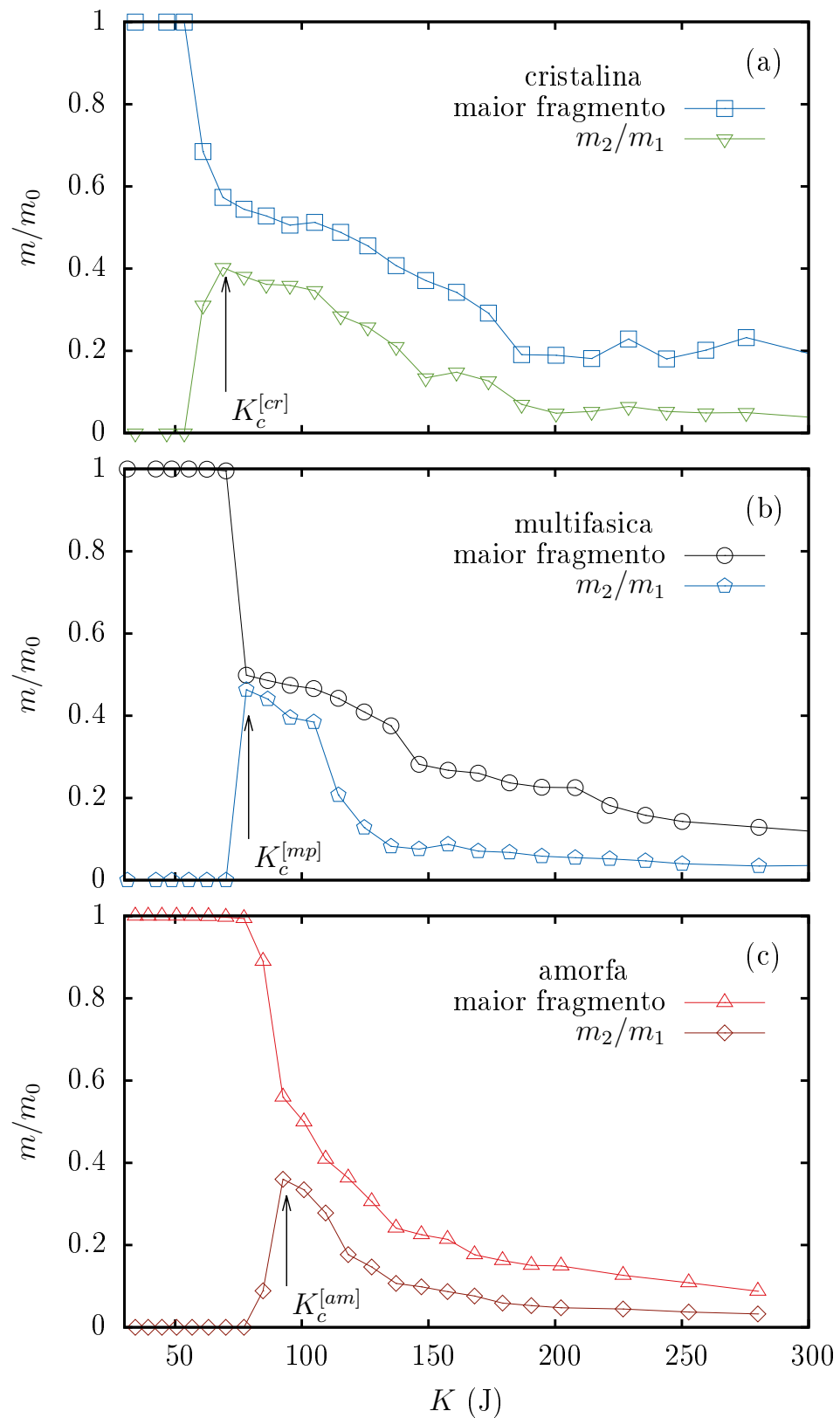


Figura 4.21: Dependência da energia de colisão para a massa do maior fragmento e a massa média dos outros fragmentos para amostras (a) cristalina, multifásica (b) e (c) amorfas.

crystalinas depende fortemente da orientação da estrutura da amostra em relação à direção do impacto. Os resultados aqui apresentados referem-se sempre ao caso em que há um plano de clivagem com normal perpendicular à direção de impacto.

Na energia crítica K_c o valor de $m_{max} \approx 0.5m_0$ e $m_2/m_1 \approx 0.5m_0$, ou seja, a metade da massa inicial do sistema, indicando que nesta energia uma das fendas meridionais chega à superfície da amostra cortando-a em dois fragmentos grandes e alguns pequenos fragmentos. Acima da energia crítica a amostra se divide em fragmentos menores. Podemos observar que m_{max} e m_2/m_1 decaem a uma taxa menor, como uma função de K , para o caso de amostras cristalinas e multifásicas do que para as amostras amorfas. Isto indica que os fragmentos formados com planos de clivagem nos dois primeiros casos, são mais difíceis de fragmentar ainda mais por mecanismos secundários.

A amostra cristalina geralmente têm energias críticas menores, uma vez que os planos de clivagem são bem definidos, e menos energia é dissipada na geração de danos não correlacionados. Amostras multifásicas também apresentam planos de clivagem dentro de suas partículas cristalinas, e assim a energia de colisão crítica para estas amostras são menores do que para as amostras amorfas. Isso pode ser visto diretamente na fig. 4.22, que mostra o número total médio de hastes quebradas H_q no final das simulações de impacto, em função da energia inicial do sistema E_0/K_c normalizada pela energia de colisão crítica para cada tipo de amostra. Esse número é diretamente proporcional à energia total dissipada na quebra das ligações em cada simulação. Podemos ver da fig.4.22 que na energia de colisão crítica, a energia total dissipada pelas amostras cristalinas é menor que para as amostras multifásicas, que, por sua vez, é menor que para as amostras amorfas.

A orientação dos planos de rachadura que resultam na fragmentação da amostra é explorada na figura 4.24, onde a probabilidade $g(\phi)$ de uma ligação quebrada com posição projetada em um plano perpendicular à direção de impacto, com um ângulo azimutal ϕ é expressa sobre a forma de um gráfico polar. Os gráficos na figura 4.24 correspondem a simulações com a energia de colisão crítica para cada tipo de amostra, e estão normalizados de forma que a integral sobre o ângulo é a unidade nos três casos.

Todas as três amostras apresentam algumas ligações quebradas descorrelatadas correspondentes aos danos não correlacionados na zona de tensão biaxial no início do processo de fragmentação. Os picos evidentes em $g(\phi)$ indicam que as rachaduras formam planos diametralmente bem definidos. O plano de rachadura é mais bem definido para a amostra cristalina, o que corresponde a um plano de clivagem da rede cristalina por baixo. As amostras amorfas apresentam rachaduras mais descorrelatadas perto do eixo de impacto. Podemos ver que, mesmo

para a amostra multifásica a fragmentação da fenda é um plano diametralmente bem definido, mostrando que uma vez que uma fenda é formada na região difusa no início do processo de fragmentação, se desenvolve sem mudar de direção quebrando o material em dois fragmentos.

À medida que a energia de colisão é aumentada mais rachaduras meridionais e azimutais, perpendiculares ao eixo de impacto, aparecem como um segundo mecanismo. Estas rachaduras são originadas a partir da superfície, em uma região fina onde o estresse na direção do eixo de impacto está em tensão devido a dobra da partícula de forma esférica. Estas rachaduras se concentram perto do disco de contato. Fendas oblíquas também aparecem devido o estado de estresse complexo que se origina quando a partícula é dividida em fragmentos em forma de laranja.

Para análise mais detalhada a distribuição de massa do fragmento na energia crítica é plotada na Figura 4.25. Aqui $F(m)$ significa a densidade de probabilidade para encontrar um fragmento com massa entre m e Δm . Os valores são médias de mais de 30 realizações com diferentes limiares de quebra. Na energia de colisão crítica $F(m)$ apresenta picos para fragmentos grandes, perto de metade da massa inicial do sistema, correspondente a quebra de partículas em dois fragmentos grandes. No intervalo de pequeno fragmento de massa, para fragmentos com normalmente menos de 1% da massa do sistema, a distribuição de massa do fragmento segue uma lei de potência.

As características de lei de potência se estendem para $K > K_c$, como pode ser observado na Figura 4.26, onde as distribuições de massa do fragmento para $K = 194J$ é plotada para os três tipos de amostras. Com essa energia de colisão alta, a distribuição de massa do fragmento apresenta mais claramente uma dependência de lei de potência para pequenos fragmentos, $F(m) \sim m^{-\tau}$ com $\tau = 1.6 \pm 0.1$.

O amplo máximo na escala de grande fragmento representa os fragmentos formados pelas rachaduras meridionais e azimutais formadas devido a geometria esférica das amostras. Como podemos ver a partir das figuras 4.25 e 4.26 a distribuição de massa do fragmento é independente da estrutura interna do material. A forma de $F(m)$ para altas energias de colisão pode ser descrita pela relação:

$$F(m) \sim (1 - \beta)m^{-\tau} \exp\left(\frac{-m}{m_0}\right) + \beta \exp\left(\frac{-m}{m_1}\right). \quad (4.3)$$

Esta forma funcional foi proposta por Astrom et al [3, 4] e tem sido aplicada com sucesso para descrever ambos os resultados experimentais e simulações de computador. O primeiro termo na Eq.(4.3) está relacionado com o processo de fusão de ramificação de trincas instáveis, enquanto o segundo termo se origina do processo de nucleação Poissoniano das primeiras trincas

dominantes. O expoente τ depende apenas da dimensionalidade do sistema e o parâmetro β controla a importância relativa dos dois mecanismos. Na figura 4.24, a Eq.(4.3) é plotada usando $\bar{m}_0 = 0.05 \pm 0.02$, $\bar{m}_1 = 0.07 \pm 0.01$ e $\beta = 0.9991 \pm 0.0003$ indicando que o processo inicial de formação de trincas na zona de estado biaxial de estresse no início do processo de fragmentação é o mecanismo de fragmentação dominante.

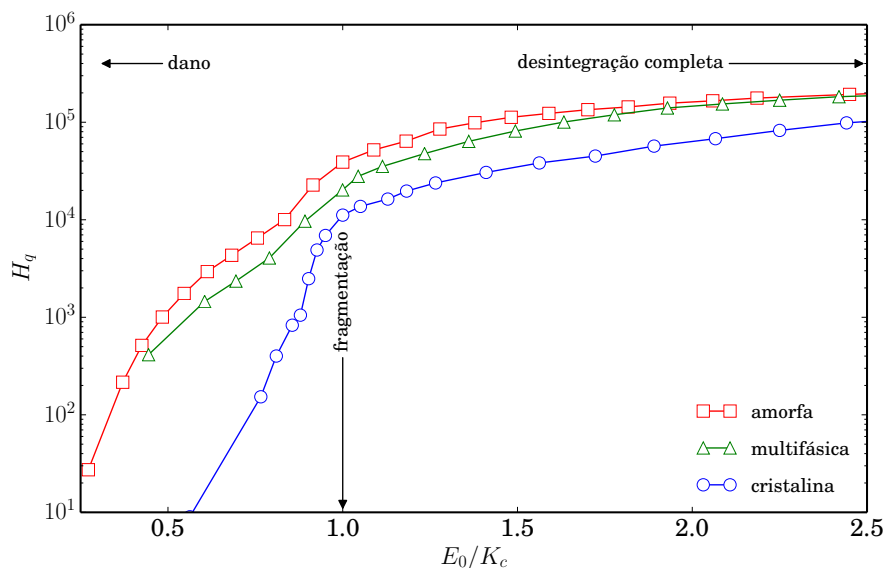


Figura 4.22: Número total de hastes quebradas H_q em função da energia inicial do sistema E_0/K_c , normalizada pela energia crítica de fragmentação para cada tipo de amostra.

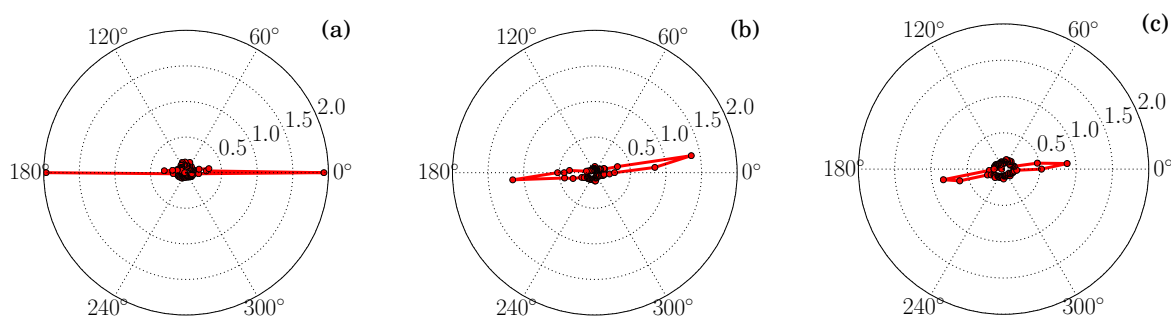


Figura 4.23: Orientação da posição das ligações quebradas em um plano-xy, perpendicular à direção de impacto, para amostras a) cristalina, com energia de colisão 68 J b) multifásica, com energia de colisão 78 J e c) amorfa, com energia de colisão 94 J. As cores correspondem à probabilidade de termos um vínculo quebrado com a sua posição projetada no plano xy.

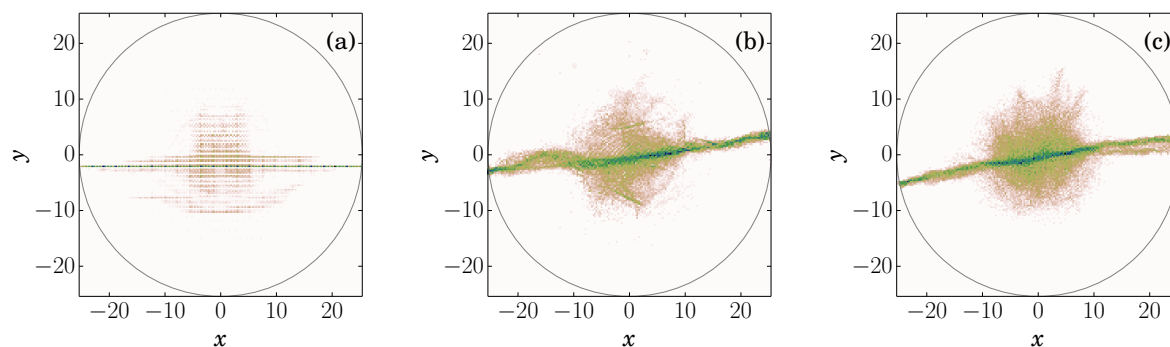


Figura 4.24: Histograma bidimensional das posições das ligações quebradas no plano-xy, perpendicular à direção de impacto.

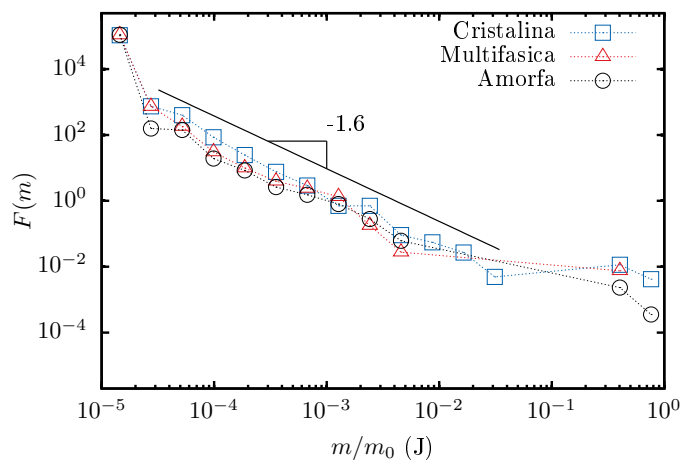


Figura 4.25: Distribuição de massa dos fragmentos com a energia crítica para todos os tipos de amostras.

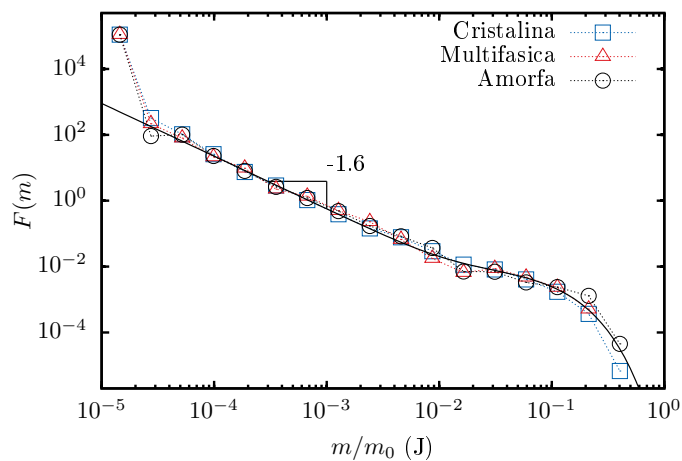


Figura 4.26: Distribuição de massa dos fragmentos $K = 194$ J para todos os tipos de amostras.

5 *Conclusão*

Estudamos a fragmentação das esferas materiais multifásicas sólidas quebradiças devido a colisão com uma parede sólida. Amostras cristalinas, amorfas e multifásicas foram comparadas. Com o objetivo de estudar apenas o papel da estrutura interna no processo de fragmentação, usamos elementos haste-treliça em 3D para a coesão das partículas com as mesmas propriedades elásticas em todas as fases.

O estudo feito na seção (4.2) deste trabalho mostrou que as simulações com tensão uniaxial aplicada ao sistema proporcionaram uma maior compreensão das propriedades elásticas do sistema, como por exemplo a tensão de ruptura dos materiais e o módulo de Young macroscópico através das curvas de tensão-deformação encontradas. As simulações também mostraram como os módulos de Young macroscópicos dependem dos módulos de Young microscópicos, o resultado foi uma dependência linear para as três amostras. O modelo proposto nessa dissertação reproduziu satisfatoriamente o que é previsto para as propriedades macroscópicas das amostras, dadas as propriedades microscópicas.

Uma transição de um estado danificado para um estado fragmentado é observada com um limiar crítico de energia de colisão para cada tipo de amostra. Amostras cristalinas tendem a fragmentar com menor limiar de energia de colisão, se houver um plano de clivagem com a normal perpendicular à direção de impacto. Neste caso, a fratura da fenda dominante corresponde a um plano de clivagem da estrutura interna muito bem definido. Para o material multifásico a rachadura dominante cliva as partículas cristalinas internas do material e atravessa a fase amorfa sem mudar de direção. As amostras amorfas tem o maior limiar de energia de colisão.

Observou-se que o mecanismo de fragmentação dominante está relacionado com fendas que se formam no interior do material, devido à tração e tensão radial circunferencial em uma região com forma de disco por cima do plano de contato. Estas rachaduras crescem para dar origem a planos de fratura meridionais que resultam em um pequeno número de grandes fragmentos. Mesmo que a distribuição de tensões seja menos homogênea no material multifásico, este mecanismo de fragmentação foi encontrado ser predominante independentemente da estru-

tura interna do material.

Como resultado, a distribuição de massa final dos fragmentos é independente da estrutura interna do material. A partir da energia de colisão crítica apresenta-se um regime de lei de potência para fragmentos pequenos. A forma da distribuição de massa dos fragmentos resultantes da colisão pode ser explicada com sucesso pelo processo de fusão de ramificação de trincas instáveis e o processo Poissoniano de iniciação de trincas para as rachaduras dominantes. Os resultados encontrados na seção (4.2) estão de acordo com o proposto pela literatura [17] e podem ser considerados satisfatórios, dando assim uma maior solidificação a este trabalho.

A influência do tamanho e forma de dispersão das partículas cristalinas, assim como a importância das propriedades elásticas de cada tipo de fase, em materiais multifásicos dão origem a questões interessantes a serem estudadas como continuação desse trabalho. A capacidade do modelo de reproduzir o estado de tensão complexo e planos de rachaduras com planos de clivagem bem definidos nas regiões cristalinas abre a possibilidade de estudar mais problemas de propagação de trincas em materiais multifásicos. Extensão para diferentes propriedades dos materiais com diferentes fases e estudo detalhado da influência da dispersão de tamanhos estão em andamento.

APÊNDICE A – Tesselção de Voronoi

A tesselção de Voronoi é uma estrutura geométrica obtida através de um conjunto de pontos arbitrários no espaço euclidiano, estes pontos geram polígonos convexos regulares ou irregulares que por sua vez formam essa estrutura. Diversas aplicações podem ser dadas a esses pontos, entre elas encontramos na literatura:

- Representação de centros comerciais;
- Representação de átomos;
- Representação de redes cristalinas;

Antes de descrevermos a tesselção de Voronoi, apresentaremos os elementos básicos da tesselção, são eles:

- Vértice é o ponto que sempre está associado a um polígono e define a região de dominância ao seu redor;
- Polígono ou célula de Voronoi é a estrutura básica da tesselção;
- Aresta é o lado do polígono de Voronoi, funciona como uma fronteira entre cada polígono;

Utilizaremos a triangulação de Delaunay para gerar a tesselção de Voronoi.

Aplicando a triangulação de Delaunay a um conjunto de pontos no plano euclidiano, o primeiro procedimento a se fazer é calcular as circunferências que contém os 3 vértices do triângulo, ou seja, as circunferências circunscritas dos triângulos, conforme ilustrado na figura A.1. O se-

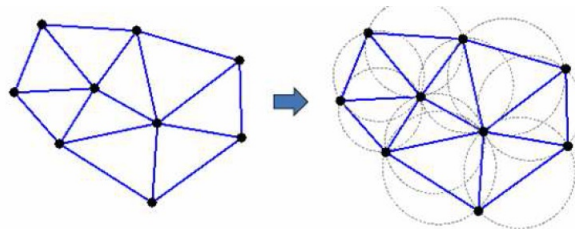


Figura A.1: Conjunto de nove pontos. Na figura do lado esquerdo temos triângulos de Delaunay, e na figura do lado direito temos as circunferências circunscritas a tesselção de Delaunay. Obtido em [15]

gundo procedimento a se fazer é ligar os centros das circunferências dos triângulos que possuem em comum um mesmo lado, visto que, podemos observar da figura A.1 que cada circunferência

provém de um triângulo. A ilustração desse passo está na figura A.2. O terceiro e último pro-

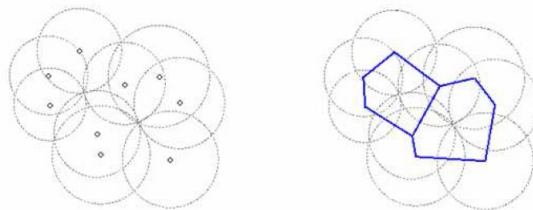


Figura A.2: Conjunto de nove pontos. Na figura do lado esquerdo temos os centros das circunferências circunscritas aos triângulos de Delaunay, e na figura do lado direito temos a ligação dos centros, formando assim polígonos de Voronoi. Obtido em [15]

cedimento gera os polígonos restantes, visto que, consideramos um conjunto de nove pontos, portanto devemos obter 9 polígonos de Voronoi. Os polígonos restantes são gerados através dos pontos na fronteira do conjunto de pontos.

O procedimento consiste em ligarmos os pontos médios das linhas formadas pelas arestas, aos centros das circunferências circunscritas aos triângulos de Delaunay, dessa maneira construímos as linhas que formam as novas arestas dos polígonos do nosso conjunto de pontos.

Obtém-se assim a tesselção ou mosaico de Voronoi para o conjunto de 9 pontos, conforme ilustra a figura A.3.

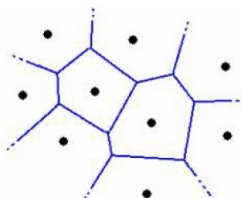


Figura A.3: Conjunto de nove pontos. Tesselção de Voronoi. Obtido em [15]

Referências Bibliográficas

- [1] Andrews, E.W., Kim, K.S., Threshold conditions for dynamic fragmentation of ceramic particles. *Mechanics Of Materials*, 29(3-4):161-180, August 1998.
- [2] Araripe, L. E., Diehl, A., Andrade, J. S. and Costa, R. N. *International Journal of Modern Physics C* 16, 253 (2005).
- [3] Astrom, J. A. Statistical models of brittle fragmentation. *ADVANCES IN PHYSICS*, 55(3-4):247278, May - Jun 2006.
- [4] Astrom, J. A., Linna, R. P., Timonen, J., Moller, P. F and Oddershede, L. Exponential and power-law mass distributions in brittle fragmentation. *PHYSICAL REVIEW E*, 70(2):026104, Aug 2004.
- [5] Affes, R. Delenne, J. Y. Monerie, Y. Radjai, F. and Topin, V. Tensile strength and fracture of cemented granular aggregates. *Eur. Phys. J. E* (2012).
- [6] Behera, B., Kun, F., McNamara, S. and H. J. Herrmann, *J. Phys.: Condens. Matter* 17, S2439(2005).
- [7] Carmona, H. A., Kun, F., Jr, J. S. A., and Herrmann, H. J. *Phys. Rev. E* 75, 046115 (2007).
- [8] CUNDALL, P. A., STRACK, O. D. L., *A discrete numerical model for granular assemblies (1979). Géotechnique* 29, No. 1, 47-65.
- [9] CALLISTER JR., William D. *Ciência e engenharia de materiais: uma introdução. 5.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.*
- [10] CARMONA, H.A., WITTEL, F.K., KUN, F., HERRMANN, H.J., *Fragmentation processes in impact of spheres, Phys. Rev. E* 77, 051302 (2008), *arXiv:0711.2993*.
- [11] Cleary, P. W., Sinnott, M. D. and Morrison, R. D. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 58, 319 (2008).
- [12] D'Addetta, G. A., Kun, F., Ramm, E., and Herrmann, H. J. in *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive- Frictional Materials, Springer Lecture Notes in Physics Vol. 568, edited by P. Vermeer Springer-Verlag, Berlin, (2001), pp. 231-258.*
- [13] D'Addetta, G. A., Kun, F., Ramm, E., Herrmann, H. J., *From solids to granulates - discrete element simulations of fracture and fragmentation processes in geomaterials, in Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials, eds. P.A. Vermeer, et al., Springer Lecture Series in Physics 568 (2001), p.231-258.*
- [14] D'Addetta, G. A., and Ramm, E. *Granular Matter* 8, 159 (2006).
- [15] FORTUNE, S., *A Sweepline Algorithm for Voronoi Diagrams, Algorithmica* (1987).

- [16] Flatt, R. J., Roussel, N., and Cheeseman, C. R. *Journal of the European Ceramic Society* 32, 2787 (2012).
- [17] Hashin, Z., Shtrikman, S. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 127 (1963).
- [18] Hertz H. *Über die Berührung fester elastischer Körper (On the contact of elastic solids)*. *J. Reine und angewandte Mathematik* (1882); 92:156-171
- [19] Herrmann, H. J., Hansen, A., and Roux, S. *Phys. Rev. B* 39, 637 (1989).
- [20] Herrmann, H. J and Roux, S. *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*, edited by North-Holland, Amsterdam, (1990).
- [21] HERRMANN, H.J., KERTÉSZ, J., *Stability analysis of crack propagation*, *Physica A*178, 409-412 (1991).
- [22] Kun, K., and Herrmann, H. J. *Int. J. Mod. Phys. C* 7, 837 (1996).
- [23] Kun, F., and Herrmann, H. J. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 138, 3 (1996).
- [24] Kun, F., and Herrmann, H. J., *Phys. Rev. E* 59, 2623 (1999).
- [25] Khanal, M., Schubert, W., and Tomas, J. *Granular Matter* 5, 177 (2004).
- [26] Landau, L. D., and Lifshitz, E. M. *Theory of Elasticity, Course of Theoretical Physics Vol. 7*, 3rd ed. Butterworth-Heinemann, London, (1986).
- [27] Mander, J. B., Priestley, M. J. N., and Park, R. *Journal of Structural Engineering-ASCE* 114, 1804 (1988).
- [28] Moreau, J. J. *Numerical Investigation of Shear Zones in Granular Materials*, in *Friction, Arching, Contact Dynamics*, edited by D.E. Wolf, P. Grassberger (World Scientific, Singapore, (1997), pp. 233-247.
- [29] Misra, A., and Cheung, J. *Powder Technology* 105, 222 (1999).
- [30] Mishra, B. K., and Thornton, C. *Int. J. Miner. Process.* 61, 225 (2001).
- [31] *Método dos Elementos Finitos: Análise de Pórticos Planos*. Lisboa: Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa. Disponível em: < [http : //www.civil.ist.utl.pt/ luis/ae2/AE2porticos.pdf](http://www.civil.ist.utl.pt/luis/ae2/AE2porticos.pdf) >. Acesso em: 04 nov. 2013.
- [32] Nikolakopoulos, I. *Clinker Simulation*, Master Thesis ETH Zurich(4/2013).
- [33] Potapov, A. V., Hopkins, M. A., and Campbell, C. S. *Int. J. Mod. Phys. C* 6, 371 (1995).
- [34] Potyondy, D. O., and Cundall, P. A. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 41, 1329 (2004).
- [35] Pöschel, T., and Schwager, T. *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms* Springer-Verlag, Berlin, (2005).
- [36] Rapaport, D.C. *The art of molecular dynamics simulations*. Cambridge University Press, The Edinburgh Building, Cambridge CB2 2RU, UK, 2004.
- [37] Staron, L., Radjai, F., Vilotte, J. P. *Eur Phys J E Soft Matter* 18(3), 311 (2005).

- [38] SILVA, Marko Cromwell Cerqueira. *Relações entre microestrutura, composição, resistência a ruptura e moabilidade de clínquer de cimento Portland*. 2007. 144 f. Dissertação (Pós Graduação) - Curso de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.
- [39] Shackelford, J.F. *Ciências dos Materiais*, Pearson Prentice Hall, 6ed., cap 3, 2008.
- [40] Santos, E.G. Mesquita, A.L.A. GOMES, L.M.NETO, E.F. MAFRA, M.P., *Análise da forma geométrica da partícula na aplicação do método dos elementos discretos - DEM*. **Anais: VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica - CONEM 2012**, São Luís-MA, 2012.
- [41] Thornton, C., Yin, K. K and Adams, M. J., *J. Phys. D* 29, 424 (1996).
- [42] Thornton, C., Ciomocos, M. T., and Adams, M. J. *Powder Technol.* 105, 74 (1999).
- [43] Thornton, C., and Liu, L. F. *Powder Technol.* 143-4, 110 (2004).
- [44] Thornton, C., Ciomocos, M. T., and Adams, M. J. *Powder Technol.* 140, 258 (2004).
- [45] Ueda, T., Matshushima, T., Yamada, Y., *DEM simulation on the one-dimensional compression behavior of various shaped crushable granular materials*, *Granular Matter* (2013) 15:675–684 DOI 10.1007/s10035-013-0415-y.
- [46] WITTEL, F., KUN, F., HERRMANN, H.J., KRÖPLIN, B.H., *Fragmentation of shells: egg slosion*, *Phys. Rev. Lett.* 93, 035504 (2004), cond-mat/0402461.