

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
CENTRO DE TECNOLOGIA - CTEC  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL - PPGEC

RODRIGO MERO SARMENTO DA SILVA

**Acoplamento entre modelos de otimização geométrica de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios para análise multiescala de compósitos cimentícios multifásicos**

Maceió - AL  
Dezembro de 2022

RODRIGO MERO SARMENTO DA SILVA

**Acoplamento entre modelos de otimização geométrica de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios para análise multiescala de compósitos cimentícios multifásicos**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Centro de Tecnologia da Universidade Federal de Alagoas.

Orientador: Dr<sup>a</sup> Aline da Silva Ramos Barboza

Maceió - AL

Dezembro de 2022

**Catálogo na fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**  
Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

- S586a Silva, Rodrigo Mero Sarmento da.  
Acoplamento entre modelos de otimização geométrica de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios para análise multiescala de compósitos cimentícios multifásicos / Rodrigo Mero Sarmento da Silva. – 2022.  
168 f. : il. color.
- Orientadora: Aline da Silva Ramos Barboza.  
Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil. Maceió, 2022.
- Bibliografia: f. 134-140.  
Apêndices: f. 141-168.
1. Micromecânica. 2. Materiais compósitos. 3. Modelagem multiescala. 4. Acoplamentos. I. Título.

CDU: 624

## RESUMO

O concreto em sua macroescala pode ser considerado como um material homogêneo, inclusive sendo ensaiado como tal, contudo, ao se reduzir sua escala o mesmo possui fases inerentes a cada nível. Modelar o concreto sempre foi um grande desafio, devido a toda complexidade desse material cimentício, apesar disso propostas surgem constantemente, como, por exemplo, a homogeneização por micromecânica. A micromecânica dos campos médios tem em sua fundamentação básica a homogeneização de compósitos bifásicos, compostos por inclusões imersas em uma matriz infinita. De fato, em uma escala macroscópica pode-se entender o concreto como sendo composto simplificadaamente por inclusões (agregados graúdos) imersas em uma matriz (argamassa), sendo por muitas vezes modelado nessa configuração macro. No entanto, é sabido que existem mais fases que precisam ser avaliadas para se conseguir um resultado mais próximo dos ensaios de laboratório, como exemplo pode ser citado a zona de transição interfacial. Além da modelagem, pode-se afirmar que a indústria da construção civil busca maximizar as propriedades do concreto, sendo uma ideia inicial buscar o empacotamento dos sistemas particulados (inclusões) minimizando a fase dispersa (matriz). Diante desse campo aberto, o presente trabalho desenvolve uma metodologia multiescala avaliando a precisão de modelos bifásicos e modelos de múltiplas fases com ensaios experimentais encontrados na literatura. Para maximização das propriedades mecânicas do concreto, desenvolve-se uma metodologia que acopla modelos de otimização de sistemas particulados a modelos de homogeneização de compósitos. Toda estratégia supracitada foi construída em um *framework* orientado a objetos composto por um conjunto de classes projetadas para resolução dos problemas desacoplados: homogeneização e empacotamento, bem como em problemas que envolvem as duas metodologias conjuntas. O *framework* desenvolvido considera padrões de projetos e uma arquitetura que possibilita a diversificação de problemas sem a necessidade de alteração na codificação base, tirando proveito dos paradigmas de herança, encapsulamento, polimorfismo implícito nesse tipo de arquitetura de programação. Os resultados obtidos com a modelagem multiescala e o acoplamento entre as técnicas confirmam a maximização das propriedades mecânicas quando se otimiza os sistemas particulados.

**Palavras-chave:** Materiais Compósitos Cimentícios; Otimização de Sistemas Particulados; Micromecânica; Acoplamento; Multiescala.

## ABSTRACT

On a macro scale, concrete can be considered a homogeneous material and has even been tested as such. However, when its scale is reduced, it exhibits inherent phases at every level. Modeling concrete has always been a major challenge due to the complexity of this cementitious material, yet proposals such as homogenization by micromechanics are always made. Mean-field micromechanics is based on the homogenization of two-phase composites consisting of inclusions immersed in an infinite matrix. At the macroscopic level, concrete can be understood simply as a composition of inclusions (coarse aggregates) in a matrix (mortar) and is often modeled in this macro configuration. However, it is known that there are other phases that need to be evaluated to obtain a result closer to laboratory tests, such as the interfacial transition zone. In addition to modeling, it can be said that the construction industry is trying to maximize the properties of concrete, with an initial idea to seek the packaging of particle systems (inclusions) that minimizes the dispersed phase (matrix). Given this open field, the present work develops a multiscale methodology that evaluates the accuracy of biphasic models and multiphase models with experimental tests from the literature. In order to maximize the mechanical properties of concrete, a methodology is developed that combines optimization models of particle systems with models of homogenization of composite materials. The entire above strategy has been built on an object-oriented framework consisting of a set of classes designed to solve decoupled problems: homogenization and packaging, as well as problems involving the two common methods. The developed framework considers design patterns and an architecture that allows diversification of the problems without changing the base coding, using the paradigms of inheritance, encapsulation and polymorphism included in this type of programming architecture. The results obtained with the multiscale modeling and the coupling between the techniques confirm the maximization of the mechanical properties in the optimization of the particle systems.

**Keywords:** Cementitious Composite Materials, Optimization of Particulate Systems, Micromechanics; Coupling, Multiscale.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

|   |    |
|---|----|
| <b>Figura 1:</b> Diagrama micromecânico-multiescala, processos, níveis e estágios do concreto.....                        | 14 |
| <b>Figura 2:</b> Diagrama de ensaios experimentais, resultados experimentais e numéricos (> nível 3). ....                | 17 |
| <b>Figura 3:</b> O concreto como material multifásico. ....   | 21 |
| <b>Figura 4:</b> Modelo de Lu e Torquato para três fases. ....  | 33 |
| <b>Figura 5:</b> Modelo geométrico adotado para estimativa da zona de transição interfacial. ....                         | 35 |
| <b>Figura 6:</b> Elemento de volume representativo (EVR).....   | 40 |
| <b>Figura 7:</b> Elemento de volume representativo para material bifásico. ....   | 46 |
| <b>Figura 8:</b> Problema da inclusão de Eshelby.....   | 49 |
| <b>Figura 9:</b> Estratégia do problema de Eshelby.....   | 49 |
| <b>Figura 10:</b> Estratégia do problema de Eshelby. ....   | 50 |
| <b>Figura 11:</b> Campo de tensões e deformações do problema da inclusão de Eshelby.....                                  | 50 |
| <b>Figura 12:</b> Geometria da inclusão no problema de Eshelby. ....  | 51 |
| <b>Figura 13:</b> Inclusão cilíndrica no problema de Eshelby.....   | 53 |
| <b>Figura 14:</b> Inclusão esférica no problema de Eshelby. ....  | 54 |
| <b>Figura 15:</b> Elipsoide de referência para o problema da inclusão de Eshelby. ....                                    | 55 |
| <b>Figura 16:</b> Problema da inclusão de Eshelby.....  | 56 |
| <b>Figura 17:</b> Campo de tensões e deformações iguais após homogeneização.....  | 58 |
| <b>Figura 18:</b> Modelo em esferas/cilindros (CSA/CCA).....  | 65 |
| <b>Figura 19:</b> Processo de homogeneização do modelo Auto Consistente Generalizado. ....                                | 67 |
| <b>Figura 20:</b> Processo de homogeneização do modelo Auto Consistente. ....   | 70 |
| <b>Figura 21:</b> Processo de homogeneização do modelo de quatro-fases. ....  | 74 |
| <b>Figura 22:</b> Esquema dos modelos de dupla-inclusão e múltiplas-inclusões.....  | 75 |
| <b>Figura 23:</b> Homogeneização em três níveis sem consideração da zona de transição. ....                               | 80 |
| <b>Figura 24:</b> Homogeneização em três níveis considerando a zona de transição e modelos de três e múltiplas fases..... | 80 |
| <b>Figura 25:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise sem ZTI (Nível 1). ....                            | 81 |

|  |     |
|--|-----|
| <b>Figura 26:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise com ZTI (Nível 1).....  | 82  |
| <b>Figura 27:</b> Resultados para erro da homogeneização do Módulo de Elasticidade (sem ZTI). ....   | 86  |
| <b>Figura 28:</b> Resultados para erro da homogeneização do Módulo de Elasticidade (com ZTI). ....   | 87  |
| <b>Figura 29:</b> Módulo volumétrico homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI). ....  | 88  |
| <b>Figura 30:</b> Módulo cisalhante homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI). ....   | 89  |
| <b>Figura 31:</b> Coeficiente de Poisson homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI). ....                                      | 89  |
| <b>Figura 32:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise sem ZTI (Nível 1). ....   | 90  |
| <b>Figura 33:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise com ZTI (Nível 1).....  | 91  |
| <b>Figura 34:</b> Esquema do acoplamento entre modelos de otimização de sistemas particulados e micromecânica. ....  | 93  |
| <b>Figura 35:</b> Modelo de Alfred para otimização das curvas granulométricas. ....  | 95  |
| <b>Figura 36:</b> Comparação entre as frações padrão e otimizado. ....   | 98  |
| <b>Figura 37:</b> Propriedades otimizadas: [a] módulo de elasticidade, [b] coeficiente de Poisson, [c] módulo volumétrico, [d] módulo cisalhante. ....                 | 99  |
| <b>Figura 38:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para o acoplamento entre otimização e homogeneização.....  | 100 |
| <b>Figura 39:</b> Modelos para otimização das curvas granulométricas. ....   | 103 |
| <b>Figura 40:</b> Comparação entre as frações padrão e otimizado para todos os modelos. [a] Alfred, [b] Andreasen, [c] Bolomey, [d] Fuller, [e] Talbot e Richart. .... | 104 |
| <b>Figura 41:</b> Propriedades mecânicas otimizadas utilizando diversos modelos. ....  | 106 |
| <b>Figura 42:</b> Diagrama de segmentos do estudo a influência dos modelos de otimização de curvas granulométricas. ....   | 107 |
| <b>Figura 43:</b> Distribuição Normal dos agregados na mistura. ....   | 108 |
| <b>Figura 44:</b> Distribuição Gumbel dos agregados na mistura. ....   | 109 |
| <b>Figura 45:</b> Distribuição Gama dos agregados na mistura. ....   | 110 |
| <b>Figura 46:</b> Módulo de elasticidade x distribuições de estatística da granulometria ....  | 111 |
| <b>Figura 47:</b> Módulo cisalhante x distribuições de estatística da granulometria.....   | 112 |

|  |     |
|--|-----|
| <b>Figura 48:</b> Módulo volumétrico x distribuições de estatística da granulometria.....  | 112 |
| <b>Figura 49:</b> Comparação entre as frações para curva estatística. [a] Normal, [b] Gama, [c] Gumbel..                                   | 113 |
| <b>Figura 50:</b> Simulações para variável aleatória (curva granulométrica). Normal, Gama, Gumbel.....                                     | 114 |
| <b>Figura 51:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise estatística das curvas granulométricas. ....                        | 115 |
| <b>Figura 52:</b> Análise da influência da ZTI para homogeneização em dois níveis utilizando frações experimentais de Li et al (2019)..... | 116 |
| <b>Figura 53:</b> Análise da paramétrica da ZTI-2.....   | 117 |
| <b>Figura 54:</b> Análise da paramétrica da ZTI-1 [0% e 25% de ZTI-2].....   | 119 |
| <b>Figura 55:</b> Análise da paramétrica da ZTI-1 [50% e 75% de ZTI-2].....  | 120 |
| <b>Figura 56:</b> Análise da paramétrica da ZTI-1 [100% de ZTI-2].....   | 121 |
| <b>Figura 57:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise da influência da zona de transição interfacial. ....                | 122 |
| <b>Figura 58:</b> ZTI em função da curva granulométrica. ....  | 125 |
| <b>Figura 59:</b> Análise paramétrica da ZTI.....  | 126 |
| <b>Figura 60:</b> Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise geométrica da influência da zona de transição interfacial. ....     | 127 |
| <b>Figura 61:</b> Modelo de empacotamento virtual para partículas cúbicas. ....  | 141 |
| <b>Figura 62:</b> Modelo de empacotamento virtual para partículas esféricas. ....  | 142 |
| <b>Figura 63:</b> Modelo de empacotamento virtual para partículas esféricas. ....  | 143 |
| <b>Figura 64:</b> Classe granular dominante.....   | 145 |
| <b>Figura 65:</b> Classe granular 1 dominante para $d_1 \gg d_2$ .....   | 146 |
| <b>Figura 66:</b> Classe granular 2 dominante para $d_1 \gg d_2$ .....   | 148 |
| <b>Figura 67:</b> Classe granular dominante (Inclusão) para $d_1 \gg d_2$ , efeito de afastamento. ....                                    | 150 |
| <b>Figura 68:</b> Classe granular dominante (Matriz) para $d_1 \gg d_2$ , efeito de parede.....  | 151 |
| <b>Figura 69:</b> Compacidade em função da fração fina. ....   | 154 |
| <b>Figura 70:</b> Diagrama de classes do <i>framework</i> . ....   | 161 |
| <b>Figura 71:</b> Diagrama de classes para o módulo de homogeneização. ....  | 163 |
| <b>Figura 72:</b> Diagrama de classes para o módulo de otimização. ....  | 165 |

|   |     |
|---|-----|
| <b>Figura 73:</b> Diagrama de classes para o módulo de homogeneização local. .... | 166 |
| <b>Figura 74:</b> Diagrama de classes para o módulo de dosagem. ....              | 167 |

## LISTA DE TABELAS

|   |     |
|---|-----|
| <b>Tabela 1:</b> Valores de A da curva de Bolomey. ....   | 27  |
| <b>Tabela 2:</b> Características dos modelos de homogeneização. ....  | 77  |
| <b>Tabela 3:</b> Propriedade das fases do compósito. ....   | 79  |
| <b>Tabela 4:</b> Correção das frações volumétrica nos passos de homogeneização. ....                                  | 84  |
| <b>Tabela 5:</b> Resultados da homogeneização para os modelos limites. ....   | 85  |
| <b>Tabela 6:</b> Resultados numéricos por passos de homogeneização. ....  | 85  |
| <b>Tabela 7:</b> Correção das frações volumétrica nos passos de homogeneização. ....                                  | 86  |
| <b>Tabela 8:</b> Resultados numéricos por passos de homogeneização. ....  | 88  |
| <b>Tabela 9:</b> Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos. ....                                     | 92  |
| <b>Tabela 10:</b> Distribuição granulométrica dos agregados graúdos. ....   | 93  |
| <b>Tabela 11:</b> Distribuição granulométrica dos agregados miúdo. ....   | 93  |
| <b>Tabela 12:</b> P(d) para o modelo de Alfred e Real. ....   | 95  |
| <b>Tabela 13:</b> Propriedade das fases do compósito otimizada. ....  | 97  |
| <b>Tabela 14:</b> Resultados numéricos por passos de homogeneização. ....   | 98  |
| <b>Tabela 15:</b> P(d) para diversos modelos de otimização de curvas granulométricas. ....                            | 103 |
| <b>Tabela 16:</b> Frações volumétricas para diversos modelos de curvas de otimização. ....                            | 104 |
| <b>Tabela 17:</b> Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Normal aleatória. .... | 108 |
| <b>Tabela 18:</b> Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Gumbel aleatória. .... | 109 |
| <b>Tabela 19:</b> Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Gama aleatória. ....   | 110 |
| <b>Tabela 20:</b> Módulo de elasticidade em função da ZTI-2. ....   | 118 |
| <b>Tabela 21:</b> Módulo de elasticidade em função da ZTI-2 e ZTI-1. ....   | 120 |
| <b>Tabela 22:</b> Valores de índice de compactação. ....  | 155 |
| <b>Tabela 23:</b> Modelos de homogeneização elástica. ....  | 156 |
| <b>Tabela 24:</b> Modelos de homogeneização da condutividade térmica. ....  | 157 |

|  |     |
|--|-----|
| <b>Tabela 25:</b> Modelos de homogeneização para materiais piezoelétricos..... | 160 |
|--|-----|

# SUMÁRIO

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1. INTRODUÇÃO.....</b>  | <b>13</b> |
| 1.1. OBJETIVOS .....   | 18        |
| 1.1.1. <i>Objetivo Geral</i> .....   | 18        |
| 1.1.2. <i>Objetivos Específicos</i> .....  | 18        |
| 1.2. ESTRUTURA DA TESE .....   | 19        |
| <b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>  | <b>21</b> |
| 2.1. MODELOS DE OTIMIZAÇÃO DE SISTEMAS PARTICULADOS .....  | 25        |
| 2.1.1. <i>Modelos de Curvas de Otimização</i> .....  | 26        |
| 2.1.2. <i>Modelo de Empacotamento de Partículas</i> .....  | 29        |
| 2.1.3. <i>Modelo de Elementos Discretos</i> .....  | 31        |
| 2.2. MODELOS DE AVALIAÇÃO DE FRAÇÕES VOLUMÉTRICAS DE INTERFACES .....                                      | 32        |
| 2.2.1. <i>Modelo de Lu e Torquato</i> .....  | 32        |
| 2.2.2. <i>Modelo Simplificado para estimativa da ZTI</i> .....   | 34        |
| 2.2.2.1. Diâmetro Médio Ponderado .....  | 36        |
| 2.2.2.2. Diâmetro Médio Geométrico .....   | 37        |
| 2.3. MICROMECAÂNICA DOS CAMPOS MÉDIOS.....   | 37        |
| 2.3.1. <i>Elemento de Volume Representativo</i> .....  | 38        |
| 2.3.2. <i>Considerações Iniciais sobre Homogeneização de Compósitos</i> .....                              | 40        |
| 2.3.3. <i>Relações Básicas da Homogeneização de Compósitos</i> .....                                       | 42        |
| 2.3.4. <i>Material Bifásico: Problema Elástico</i> .....   | 46        |
| 2.4. O PROBLEMA DE ESHELBY .....   | 48        |
| 2.4.1. <i>Tensor de Eshelby para Inclusão Cilíndrica em Matriz Isótropa</i> .....                          | 52        |
| 2.4.2. <i>Tensor de Eshelby para Inclusão Esférica em Matriz Isótropa</i> .....                            | 53        |
| 2.5. MÉTODO DA INCLUSÃO EQUIVALENTE.....   | 55        |
| 2.6. MODELOS DE HOMOGENEIZAÇÃO DE COMPÓSITOS .....   | 59        |
| 2.6.1. <i>Modelos da Resistência dos Materiais</i> .....   | 60        |
| 2.6.1.1. Regra da Mistura.....   | 60        |
| 2.6.1.2. Modelo de Voigt.....  | 60        |
| 2.6.1.3. Modelo de Reuss.....  | 62        |
| 2.6.2. <i>Modelos Semiempíricos</i> .....  | 63        |
| 2.6.2.1. Hashin-Shtrikman .....  | 63        |
| 2.6.3. <i>Modelos da Teoria da Elasticidade</i> .....  | 65        |
| 2.6.3.1. Modelo CSA (Composite Sphere Assemblage) e CCA (Composite Cylinder Assemblage) .....              | 65        |
| 2.6.3.2. Modelo de Três-Fases (Auto Consistente Generalizado).....   | 66        |
| 2.6.4. <i>Modelos da Micromecânica dos Campos Médios</i> .....   | 69        |
| 2.6.4.1. Modelo da Concentração Diluída .....  | 69        |
| 2.6.4.2. Modelo Auto Consistente .....   | 70        |
| 2.6.4.3. Modelo Esquema Diferencial.....   | 71        |
| 2.6.4.4. Modelo de Mori-Tanaka.....  | 72        |
| 2.6.4.5. Modelo da Inclusão Equivalente - Tensão Média .....   | 73        |
| 2.6.4.6. Modelo de Quatro-Fases .....  | 73        |
| 2.6.4.7. Modelo de Multi-Fases.....  | 75        |
| <b>3. ESTUDOS DE CASOS .....</b>   | <b>78</b> |
| 3.1. HOMOGENEIZAÇÃO MULTIESCALA DO CONCRETO.....   | 78        |
| 3.1.1. <i>Metodologia</i> .....  | 79        |
| 3.1.2. <i>Análise crítica dos resultados</i> .....   | 82        |
| 3.1.3. <i>Análise de erros e propriedades homogeneizadas via modelagem micromecânica multiescala</i> ..... | 84        |
| 3.2. ACOPLAMENTO ENTRE MODELOS DE OTIMIZAÇÃO DE SISTEMAS PARTICULADOS E MICROMECAÂNICA.....                | 91        |
| 3.2.1. <i>Metodologia</i> .....  | 92        |
| 3.2.2. <i>Otimização das curvas granulométricas</i> .....  | 94        |
| 3.2.3. <i>Compacidade e frações volumétricas otimizadas</i> .....  | 95        |

|             |   |            |
|-------------|---|------------|
| 3.2.4.      | <i>Análise das propriedades otimizadas e homogeneizadas via modelagem micromecânica multiescala.....</i>                                      | <i>98</i>  |
| 3.3.        | <b>INFLUÊNCIA DOS MODELOS DE OTIMIZAÇÃO NA DISTRIBUIÇÃO DAS PARTÍCULAS NAS CURVAS GRANULOMÉTRICAS .....</b>                                   | <b>100</b> |
| 3.3.1.      | <i>Metodologia.....</i>   | <i>101</i> |
| 3.3.2.      | <i>Análise dos modelos de curvas de otimização granulométrica.....</i>  | <i>103</i> |
| 3.3.3.      | <i>Compacidade e frações volumétricas otimizadas.....</i>   | <i>104</i> |
| 3.3.4.      | <i>Avaliação do desempenho dos modelos de otimização de sistemas particulados nas propriedades mecânicas do compósito homogeneizado .....</i> | <i>106</i> |
| 3.3.5.      | <i>Avaliação da influência do diâmetro dos grãos nas propriedades mecânicas dos compósitos homogeneizados.....</i>                            | <i>108</i> |
| 3.4.        | <b>ANÁLISE PARAMÉTRICA DA INFLUÊNCIA DA ZONA DE TRANSIÇÃO NAS PROPRIEDADES DO CONCRETO</b>  | <b>115</b> |
| 3.4.1.      | <i>Metodologia.....</i>   | <i>116</i> |
| 3.4.2.      | <i>Análise da influência das ZTIs no compósito experimental.....</i>  | <i>117</i> |
| 3.5.        | <b>ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS CURVAS GRANULOMÉTRICAS NAS FRAÇÕES VOLUMÉTRICAS DAS ZONAS DE TRANSIÇÕES INTERFACIAIS .....</b>                   | <b>122</b> |
| 3.5.1.      | <i>Metodologia.....</i>   | <i>123</i> |
| 3.5.2.      | <i>Análise da influência das curvas granulométricas nas frações de ZTIs.....</i>  | <i>124</i> |
| 3.5.3.      | <i>Análise da influência das frações de agregados nas ZTIs .....</i>  | <i>125</i> |
| <b>4.</b>   | <b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....</b>  | <b>129</b> |
| 4.1.        | <b>SUGESTÕES .....</b>  | <b>132</b> |
|             | <b>REFERÊNCIAS .....</b>  | <b>134</b> |
| <b>A.</b>   | <b>APÊNDICE: MÉTODO DO EMPACOTAMENTO COMPRESSÍVEL .....</b>   | <b>141</b> |
| <b>A.1.</b> | <b>COMPACIDADE VIRTUAL .....</b>  | <b>141</b> |
| <b>A.2.</b> | <b>MISTURA DE DUAS FASES.....</b>   | <b>145</b> |
| <b>A.3.</b> | <b>MISTURA POLIDISPERSAS.....</b>   | <b>152</b> |
| <b>A.4.</b> | <b>COMPACIDADE.....</b>   | <b>153</b> |
| <b>B.</b>   | <b>APÊNDICE: MODELOS PARA HOMOGENEIZAÇÃO DE OUTRAS PROPRIEDADES DE COMPÓSITOS.....</b>  | <b>156</b> |
| <b>B.1.</b> | <b>ELÁSTICOS .....</b>  | <b>156</b> |
| <b>B.2.</b> | <b>CONDUTIVIDADE TÉRMICA .....</b>  | <b>157</b> |
| <b>B.3.</b> | <b>PIEZOELÉTRICOS .....</b>   | <b>158</b> |
| <b>C.</b>   | <b>APÊNDICE: DETALHAMENTO DO <i>FRAMEWORK</i> ORIENTADO A OBJETOS.....</b>  | <b>161</b> |
| <b>C.1.</b> | <b>CONCEITOS INICIAIS.....</b>  | <b>162</b> |
| <b>C.2.</b> | <b>CLASSES .....</b>  | <b>162</b> |

## 1. INTRODUÇÃO

A necessidade de se obter novos materiais e ainda materiais melhores, surgiu desde os primórdios e foi se aperfeiçoando para os dias atuais, onde se observa a busca contínua pela melhoria de diversas propriedades. Dentre essas propriedades destacam-se: propriedades mecânicas, térmicas, ópticas, piezoelétricas, químicas, magnéticas dentre outras. Uma das principais formas de se melhorar os materiais é combinando os mesmos de forma a maximizar suas qualidades e prolongar sua vida útil.

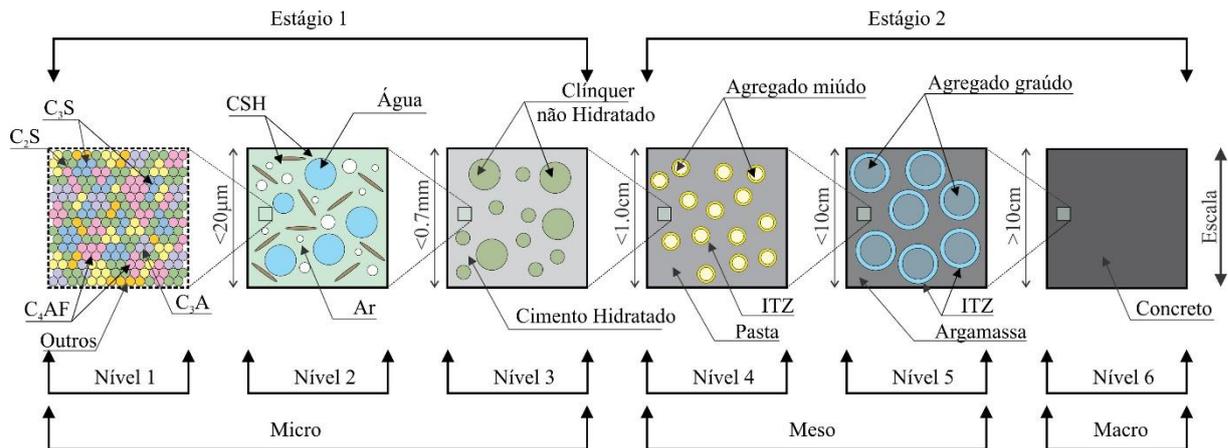
Na engenharia civil, destacam-se a busca de materiais que possam ser incorporados ao concreto de forma a elevar suas propriedades mecânicas, trabalhabilidade, dentre outras características. Na sua forma mais simplificada o concreto já é um material complexo devido a sua natureza multifásica e de multiescala, sendo as três principais denominadas: micro, meso e macroescala (VAN MIER, 1997), (RODRIGUES, 2015).

Em uma escala macroscópica o concreto pode ser entendido como um material homogêneo, contudo à medida que se diminui a escala (meso e microescala), o mesmo não pode ser considerado homogêneo e sim heterogêneo, explicitando suas respectivas fases (BERNARD, et al., 2003), (CONSTANTINIDES e ULM, 2004). De fato, conhecer as fases que compõe o concreto, suas respectivas frações e como elas interagem entre si é fundamental para avaliar a maximização de suas características.

Rodrigues (2015) explica que a região que compreende a mesoescala é bastante estudada na literatura (HÄFNER, et al., 2006), (ECKARDT e KÖNKE, 2007), (ECKARDT, 2009), (NGUYEN, et al., 2012), entretanto, existe ainda a microescala e a macroescala o que o torna um material compósito multiescala.

A Figura 1 ilustra uma proposta de diagrama que explicita uma modelagem micromecânica-multiescala do concreto, seus respectivos níveis, estágios e escala. A proposta de um diagrama micromecânico-multiescala é destacado inicialmente em (BERNARD, et al., 2003), podendo ser visto em (CONSTANTINIDES e ULM, 2004), (PICHLER e HELLMICH, 2011), (GÖBEL, et al., 2018), (SIVENTHIRARAJAH, et al., 2021).

**Figura 1:** Diagrama micromecânico-multiescala, processos, níveis e estágios do concreto.



**Fonte:** Autor, adaptado de (BERNARD, et al., 2003), (SIVENTHIRARAJAH, et al., 2021). (CSH - silicatos de cálcio hidratados,  $C_3S$  - silicato tricálcico,  $C_2S$  - silicato dicálcico,  $C_3A$  - aluminato tricálcico,  $C_4AF$  - ferro aluminato tetracálcico, ITZ – Zona de transição interfacial).

A modelagem multiescala consiste em avaliar cada nível e sua influência à medida que se constrói o compósito. Rodrigues (2015) define dois tipos de modelagem multiescala, a saber: técnica multiescala hierárquica e a técnica multiescala concorrente.

A técnica multiescala hierárquica pode ser dividida em desacoplada ou com acoplamento fraco. Na técnica desacoplada o problema da condição de contorno já é resolvido e as propriedades efetivas são levadas de uma escala para outra (comum em homogeneização micromecânica). Quando o problema é analisado pelo acoplamento fraco, as propriedades podem ser levadas da escala global para local e vice-versa e o problema de contorno não é resolvido inicialmente. Já na técnica multiescala concorrente as diferentes escalas são resolvidas simultaneamente, mantendo a condição de equilíbrio e deslocamentos, explicitando um acoplamento forte (RODRIGUES, 2015).

Em seu trabalho, Pichler e Hellmich (2011) caracterizam bem a modelagem multiescala de algumas fases do concreto (técnica desacoplada), a saber: argamassa, pasta de cimento e do processo de hidratação da pasta que contempla parcelas de silicatos hidratados, água/poros capilares e clínquer. A modelagem multiescala proposta por Pichler é totalmente desacoplada, ou seja, o processo de homogeneização de cada nível é levado ao próximo como *input* para nova escala.

Mais adiante, em 2018, o próprio Pichler em conjunto com Göbel e outros pesquisadores propõem uma modelagem multiescala do concreto contemplando uma campanha experimental para validação dos modelos propostos anteriormente (GÖBEL, et al., 2018).

Em ambos os trabalhos, não é avaliada a zona de transição interfacial, descrita na literatura como sendo uma das fases mais frágil do concreto convencional (MEHTA e MONTEIRO, 1994), contudo, pode-se entender que a não avaliação da zona de transição se dá no processo multiescala adotado, uma vez que a escala da zona de transição está entre  $20\mu\text{m}$  a  $70\mu\text{m}$  e a mesma só é quantificada no passo em que se introduz os agregados no compósito.

Siventhirarajah (2021) consegue ir além, propondo uma análise multiescala reduzindo a pasta de cimento em alguns níveis, chegando a escala nanométrica, avaliando os silicatos de cálcio hidratados CSH que compõe o clínquer ( $\text{C}_3\text{S}$ ,  $\text{C}_2\text{S}$ ,  $\text{C}_3\text{A}$ ,  $\text{C}_4\text{AF}$ ), silicato tricálcico, silicato dicálcico, aluminato tricálcico, ferro aluminato tetracálcico respectivamente (SOUZA, et al., 2015), como pode ser observado na Figura 1.

Siventhirarajah (2021) subdivide a análise do concreto em dois estágios, sendo o primeiro estágio responsável por integrar modelos de umidade, termodinâmico e de hidratação da pasta de cimento para avaliar as frações volumétricas das fases compreendidas entre os níveis 1 a 3 (microescala). Com as respectivas frações e propriedades das fases do estágio 1, é possível estimar a propriedade da pasta de cimento.

O segundo estágio está diretamente relacionado com a avaliação mecânica do compósito (meso e macroescala). Em seu trabalho Siventhirarajah (2021) está preocupada apenas com a pasta de cimento, contudo a extensão para avaliação do concreto é simples de se realizar podendo ser observado entre os níveis 4 a 6, incluindo as zonas de transição interfacial nos níveis 4 e 5, suprimidas nos trabalhos de Pichler.

Trazendo para uma escala macroscópica (nível 6), não se pode falar em concreto, sem falar sobre o controle tecnológico do mesmo, que atualmente é feito com ensaios básicos, como os de abatimento de tronco de cone para prever em especial a trabalhabilidade, moldagem de corpos de provas que serão submetidos em idades apropriadas (geralmente 3, 7 e 28 dias), a

compressão para observar a resistência do concreto lançado em obra e ensaios básicos de granulometria.

Novamente reduzindo o concreto em sua estrutura combinada (< nível 6), o mesmo pode ser entendido por um material compósito, cimentício e multifásico, o que o torna complexo e ensaios simples ou simplificados não conseguem avaliar seu comportamento. Existem diversos ensaios como os supracitados que conseguem avaliar as propriedades do concreto, mas não são suficientes para desenvolver modelos numéricos robustos que minimizem a necessidade por exemplo do rompimento de diversos corpos de prova.

Pode-se entender o concreto simplificado como a composição de uma matriz cimentícia (argamassa) com inclusões de particulados (agregados graúdos), distintos em suas fases e não homogêneo, sendo suas propriedades função direta das frações volumétricas na sua composição (nível 5).

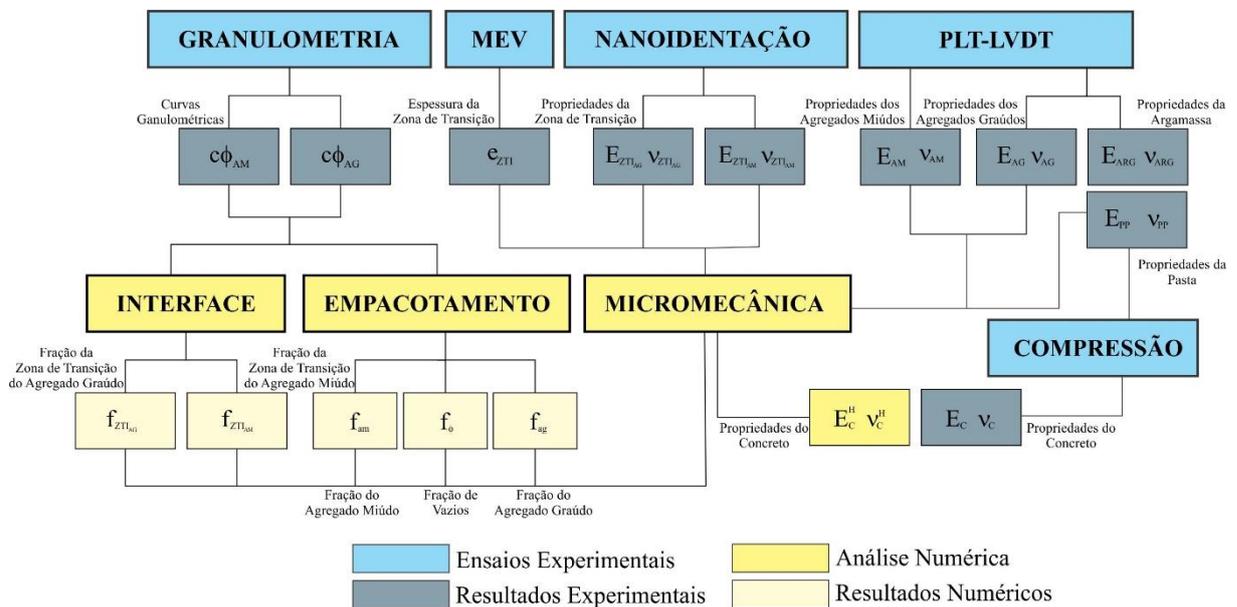
Ainda no nível 5, a literatura há muito tempo tenta entender a participação de cada componente dessa mistura nas características final do compósito, muito já foi descoberto, desde a grande influência das inclusões (MEDDAH, et al., 2010), (WU, et al., 2011), (BEUSHAUSEN e DITTMER, 2015) (SILVA, 2018), bem como de uma terceira fase mais frágil situada na interface matriz-inclusão (zona de transição interfacial), sendo essa de difícil mensuração porém já bastante ensaiada por diversas técnicas (PROKOPSKIA e HALBINIAKB, 2000), (SCRIVENER, et al., 2004), (LI, et al., 1999).

Silva, et al. (2019) destacam bem a relação entre essas fases e o possível comportamento de cada uma quando sujeito a solicitação. Quando a fase de inclusão é dominante na rigidez do compósito, as fases da matriz e a zona de transição se deformam em maior proporção, sendo provavelmente o caminho preferencial de abertura de fissuras e fraturamento do compósito.

Contudo, ainda que se incluam a zona de transição interfacial gerada pelos agregados graúdos, existem outras fases, destacando: agregados miúdos, poros, zona de transição interfacial geradas pelos agregados miúdos e fases ainda menores como clínquer não hidratado, os silicatos hidratados dentre outros, perpassando por todos os níveis apresentados na Figura 1.

Cada uma dessas fases, possuem propriedades e frações volumétricas distintas e uma modelagem mais precisa, está diretamente associada a caracterização de cada uma delas. A Figura 2, ilustra a associação entre ensaios experimentais, resultados experimentais como *input* para análises numéricas, considerando a parte física do problema (> nível 3).

**Figura 2:** Diagrama de ensaios experimentais, resultados experimentais e numéricos (> nível 3).



**Fonte:** Autor.

Sendo assim, o conhecimento das respectivas fases, suas proporções e como elas estabelecem relações constitutivas na fase final do compósito é de suma importância, sendo esse problema tratado há décadas dentro da comunidade científica, destacando os trabalhos (MEHTA e MONTEIRO, 1994), (BARBOSA, 2003), (SILVA, 2018), (SILVA, et al., 2019) sendo estas inúmeras variáveis responsáveis pela versatilidade desse tipo de material (BEBER, 2008).

Essa problemática direciona uma perspectiva obscura sobre a modelagem micromecânica do concreto, sendo por muitos anos apenas tratado como material bifásico (nível 5, sem zona de transição), associando um erro que muitas vezes extrapola os limites impostos pela teoria da elasticidade aos modelos micromecânicos de duas fases. Essa vertente, merece ser investigada para eventualmente validar a aplicação dos modelos numéricos de duas fases, ou confirmar a opção por modelos mais complexos que considere múltiplas fases.

Para De Larrard (1999), antes de um problema bem mais complexo de estrutura física, química e reológica, o problema inicial do concreto perpassa por um problema geométrico de empacotamento de grãos (níveis 4 e 5). Essa afirmação, foi comprovada por inúmeros ensaios experimentais em proporções de fases diferentes, evidenciando a veracidade da afirmação.

Os métodos e modelos de dosagem de concreto, em sua essência histórica, não levava em consideração os modelos geométricos de empacotamento propostos por De Larrard (1999), modificado nos últimos anos pela necessidade de se alcançar outras fronteiras na otimização do concreto.

Trabalhos que acoplem modelos de otimização de sistemas particulados, empacotamento compressível, modelos micromecânicos, multiescala, baseados em análise de dados experimentais ainda são insipientes na literatura. Ressalta-se então, que o presente trabalho está focando na meso e macroescala do concreto (estágio 2), e a microescala tratada com menor detalhe.

## **1.1. OBJETIVOS**

### **1.1.1. Objetivo Geral**

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma metodologia de acoplamento entre modelos de otimização de sistemas particulados e modelos micromecânicos de homogeneização de compósito em uma abordagem multiescala para avaliação das propriedades mecânicas do concreto, utilizando uma arquitetura computacional orientada a objetos.

### **1.1.2. Objetivos Específicos**

Para atender ao objetivo geral proposto, foram estabelecidos os seguintes objetivos específicos;

- Identificar e verificar modelos de otimização de constituintes particulados e micromecânicos que mais se adequam a análise do concreto;
- Propor estratégia de acoplamento e verificar a influência nas propriedades mecânicas do concreto;

- Desenvolver um sistema computacional com uma arquitetura orientada a objetos para implementação da estratégia de acoplamento e avaliação de estratégias de maximização das propriedades mecânicas do concreto;

## **1.2. ESTRUTURA DA TESE**

Este trabalho está organizado em quatro capítulos básicos, além de 3 apêndices complementares que serão descritos de forma simplificada a seguir.

No capítulo 1, é apresentada uma introdução à problemática da tese, com a abordagem multiescala do problema e o possível acoplamento de técnicas de homogeneização e otimização de sistemas particulados.

O capítulo 2 versa por uma ampla revisão bibliográfica destacando os diversos modelos numéricos para avaliação da otimização de sistemas particulados, com destaque para micromecânica dos campos médios e sua formulação tensorial. Nesse capítulo serão apresentados os diversos modelos empregados no estudo multiescala do concreto.

No capítulo 3, é apresentada uma estratégia de avaliação multiescala do concreto, propondo avaliar erros quando algumas fases desse compósito são suprimidas. Ainda nesse capítulo, destaca-se o procedimento de acoplamento entre modelos micromecânicos e modelos de otimização de sistemas particulados em uma estratégia multiescala de análise. Propõe-se ainda avaliar dois parâmetros que influenciam nas propriedades do compósito, a saber: curvas granulométricas e a zona de transição interfacial. Ainda nessa análise identifica-se como as curvas interferem nas zonas de transição e conseqüentemente nas propriedades do compósito homogeneizado.

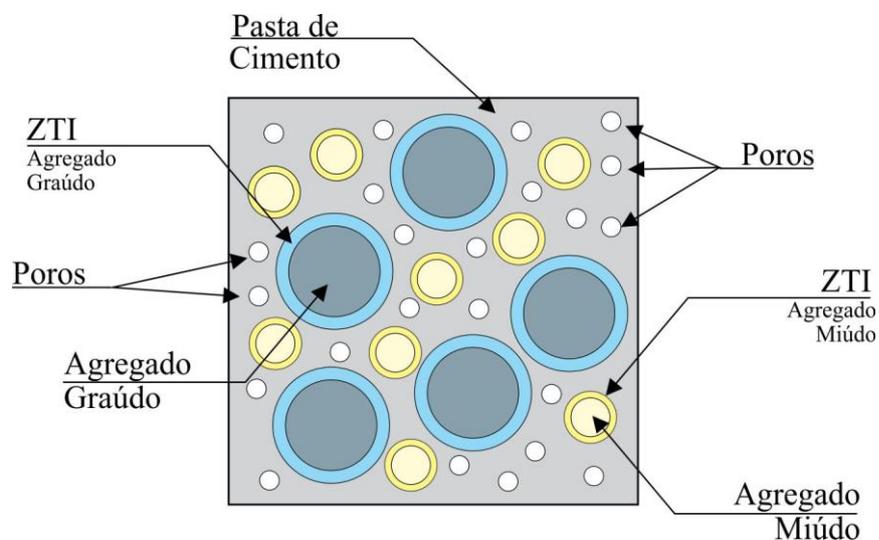
No capítulo 4, é realizada a conclusão do documento com uma análise ampla e discutindo cada um dos resultados obtidos com a metodologia abordada. Diante da abrangência do tema proposto, bem como da possibilidade de expansão em torno do desenvolvimento computacional, propuseram-se as sugestões explicitando a possibilidade de reuso do código bem como a aberturas de novas frentes de pesquisa.

Finalizando o documento, traz-se todo referencial bibliográfico utilizado para composição dessa tese, bem como os apêndices complementares, divididos em três, a saber: o primeiro trata da formulação do método do empacotamento compressível, o segundo versa por diversos modelos de homogeneização de outras propriedades de compósitos e o último detalha o *framework* orientado a objetos implementado na tese.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Como dito anteriormente, o concreto em sua microestrutura é um material compósito, cimentício e multifásico, definição essa que norteará as discussões a respeito do mesmo. A Figura 3, ilustra o concreto em sua microestrutura multifásica, multiescala (níveis 4 e 5), destacando as fases de pasta, agregado miúdo, zona de transição do agregado miúdo, agregado graúdo, zona de transição do agregado graúdo e poros, totalizando seis fases distintas para caracterização dele. Em uma análise mais aprofundada, pode-se ainda subdividir a pasta de cimento em outras fases como os silicatos hidratados, o clínquer não hidratado, água/poros capilares e outros (BERNARD, et al., 2003), (CONSTANTINIDES e ULM, 2004), (PICHLER e HELLMICH, 2011), (GÖBEL, et al., 2018). (SIVENTHIRARAJAH, et al., 2021).

**Figura 3:** O concreto como material multifásico.



**Fonte:** Autor.

Ressalta-se que o número de seis fases não é fixo, podendo o mesmo ter outras fases com as inclusões de reforços. Algumas das fases ilustradas, podem ter influência pouco significativa, a depender das características do concreto e seus constituintes. Por isso, é necessário entender cada uma das fases, quais ensaios serão necessários para avaliação das mesmas, quais modelos numéricos podem ser empregados para obtenção das propriedades mecânicas e geométricas otimizadas (Figura 2).

A fase da pasta de cimento, pode ser definida como sendo uma mistura padronizada de cimento e água, apresentando propriedades dependentes deste fator água-cimento. Para determinação

das características da pasta existem diversos dispositivos e ensaios, a saber: viscosímetros, cones de escoramentos, penetrômetros. Para avaliar as propriedades mecânicas da pasta, pode-se utilizar o ensaio simples de compressão ou o PLT (teste de carga pontual) desenvolvido por Silva (2018), (OLIVEIRA, et al., 2020), (OLIVEIRA, 2020), ensaios de nanoindentação ou de ultrassom. Já para avaliar resistência destaca-se o próprio PLT, além do ensaio de compressão. Essa fase do concreto é de simples determinação, tanto das suas propriedades mecânicas, quanto das frações volumétricas inseridas no concreto.

A fase referente aos agregados miúdos, em especial as areias para concreto, são dependentes do grau de compactação deles na hora do ensaio. Quanto maior o grau de compactação, maiores as propriedades mecânicas. Geralmente, a caracterização geotécnica das areias pode ser feita com ensaios triaxiais, ou opta-se pela caracterização simplificada, como peso específico, granulometria, mineralogia e identificar na literatura areias semelhantes.

Quando o interesse está na partícula, o teste de carga pontual acoplado com um transdutor para medição de deslocamento linear vem sendo difundido na literatura, fundamentados na teoria de contato de Hertz, podendo ser utilizado tanto em agregado miúdos como graúdos. Todo aparato mecânico, formulação da teoria de Hertz e validação dessa metodologia pode ser observado em (SILVA, et al., 2019), (SILVA, 2018).

Os ensaios básicos, como a granulometria e peso específico, são de extrema importância para o tratamento micromecânico, pois irá identificar a curva de concepção da mesma, podendo ser um parâmetro de entrada para diversos modelos, eliminando a utilização do diâmetro médio normatizado.

Pode-se classificar a obtenção das propriedades mecânicas do agregado miúdo (areias), com uma dificuldade intermediária, pois exigem um aparato experimental bastante calibrado. Se partir para opção de inferência e aproximação de agregados da literatura, a obtenção é extremamente simples, porém pode introduzir um erro na modelagem.

Os agregados graúdos, contemplam uma fase do concreto que também é difícil de computar. Existem poucos ensaios que consideram as partículas em seus diâmetros de serviço, sendo na

maioria das vezes utilizadas rochas mães sãs, para obtenção de informação das rochas em seu estado de serviço (NBR:10341, 2006), (ASTM:D2938-95, 2002).

Contudo, existem diversos fatores que influenciam nas propriedades do agregado, como defeitos na rocha mãe (fraturas, fissuras, vazios, juntas), a petrografia, intemperismo, anisotropia do maciço, estado de tensões, além do processo de cominuição empregado para se obter os agregados em diâmetros de serviço.

Contornando essas dificuldades, Silva (2018) desenvolveu uma metodologia para avaliação das propriedades mecânicas dos agregados naturais, com excelentes resultados experimentais. Com o avanço e normatização de processos de avaliação dos agregados naturais, pode-se entender que é possível estimar com relativa precisão as propriedades dele.

A zona de transição interfacial (ZTI), é descrita na literatura como sendo a fase mais fraca quando se trata de concreto comum, bem como a fase mais complexa de se avaliar, modelar e ensaiar. Mehta e Monteiro (1994) explicita que em termos micromecânicos, cada fase que compõe o concreto tem grande influência no resultado, ainda que em sua macro estrutura o concreto possa ser considerado um material bifásico, constituído de inclusões (agregado graúdo) disperso em uma matriz (argamassa).

A literatura é vasta sobre pesquisas a respeito dessa fase do concreto (propriedades mecânicas, geométricas), formada a partir do empacotamento do cimento e do efeito parede devido à partícula de agregado ser maior do que a do cimento (PROKOPSKIA e HALBINIAKB, 2000), (LIAO, et al., 2004), (SCRIVENER, et al., 2004). De fato, na ausência dessas características geométricas e mecânicas, existem estudos que estimam faixas usuais para espessura da ZTI e suas propriedades mecânicas variando em função da pasta de cimento adotada (LU e TORQUATO, 1992), (GARBOCZI e BENTZ, 1997).

Alguns estudos mais recentes mostram também a possibilidade de se negligenciar a zona de transição em condições construtivas específicas, como em concreto de alto desempenho, leve, ou quando o agregado é poroso e absorve a parte da água de hidratação (LI, et al., 2018). De fato, o estudo e modelagem da ZTI ainda é uma área aberta na engenharia pela difícil caracterização.

Geralmente para se caracterizar com precisão a ZTI, utilizam-se ensaios de nanoindentação, além de método específico que adota ensaios de tração para romper o corpo de prova na interface argamassa-agregado. Cabe ainda salientar que a ZTI pode modificar o comportamento do concreto de frágil e elástico para quase dúctil (SHARMA e BISHNOI, 2020).

Outra fase do concreto bastante conhecida e estudada é a argamassa. De uma forma mais rigorosa, já é um compósito que possui diversas outras fases, a saber: pasta de cimento, agregado miúdo e zona de transição associada ao agregado miúdo, poros. Notadamente utiliza-se e caracteriza-se a argamassa como sendo apenas uma fase, por possuir ensaios normatizados e de fácil execução.

A utilização da argamassa como a matriz do compósito, suprime a necessidade de avaliar as fases que a compõe, sendo essa uma hipótese simplificadora para estudo e modelagem do concreto (nível 5).

Como dito inicialmente por De Larrard (1999), antes do concreto apresentar seus problemas complexos de interface, hidratação, pega, reologia, dentre outros, ressalta-se um problema relacionado com a otimização dos tamanhos dos grãos no problema de empacotamento.

Esse problema geométrico está diretamente relacionado a compacidade associada a eles. Como os grãos, sejam de agregado graúdo ou de agregado miúdo, não conseguem uma compactação de 100%, sempre existiram vazios nesse arranjo, que será preenchido pela pasta. De posse da mistura e suas respectivas propriedades (massa unitária e massa específica) é possível estimar a quantidade de vazios. O empacotamento visa estabelecer o melhor arranjo geométrico para minimizar a quantidade de pasta de cimento e os vazios.

Quando se fala de otimização geométrica das fases do concreto, explicita-se o problema que é diretamente função da geometria dos sistemas particulados que compõe o compósito, bem como dos volumes e frações volumétricas de cada fase. Trata-se de um problema que influencia diretamente na dosagem do concreto.

## 2.1. MODELOS DE OTIMIZAÇÃO DE SISTEMAS PARTICULADOS

Pode-se destacar alguns modelos para avaliação e otimização geométrica das fases do concreto, a saber: Modelos de Otimização de Curvas Granulométricas, Modelo de Empacotamento Compressível, Modelos Simplificados de Avaliação da Interface, Modelo de Lu e Torquato, Modelos de Porosidade.

Em 1937, White e Walton publicaram o trabalho denominado “*Particle packing and particle shape*”, sendo esse um dos trabalhos pioneiros no desenvolvimento da ciência do empacotamento de grãos. Nesse trabalho, os autores indicam que os vazios deixados pelos empacotamentos dos grãos é função da forma, do tamanho e da proporção em relação ao volume dos grãos, dentro do sistema.

As partículas são representadas por esferas de mesmo diâmetro, podendo ser empacotadas em cinco arranjos diferentes: cúbico, escalonado, duplamente escalonado, piramidal e tetraédrico (WHITE e WALTON, 1937). Para cada arranjos podem ser calculado a quantidade de vazios, sendo, essa teoria, a base para elaboração de teorias posteriores.

Uma boa definição de empacotamento foi dada em 1967:

“A ciência do empacotamento pode ser definida a correta seleção da proporção e dos tamanhos adequados do sistema partículas, de forma que os vazios maiores serão preenchidos por partículas menores e os vazios resultantes desse empacotamento sejam preenchidos por partículas ainda menores e assim por diante. (MCGEARY, 1961)”.

Ainda no trabalho de Mcgeary (1961), conceitos como efeito do recipiente (posteriormente, denominado efeito parede) e o empacotamento de misturas binárias, caracterizadas por diferentes tamanhos de partículas, são apresentados.

O estudo da ciência de empacotamento com a finalidade de aumentar a resistência do concreto vem crescendo a cada ano, destacando a aplicação em novos tipos de concretos como autoadensável, por exemplo. Diante desse campo de otimização, alguns pesquisadores chegaram à conclusão de que a resistência máxima do concreto é obtida quando a densidade de

empacotamento for máxima (DE LARRARD e SEDRAN, 1994) e que concretos de alto desempenho necessitam de uma alta densidade de empacotamento de seus grãos.

Um viés sustentável foi proposto por Fennis e Walraven (2012) associando a otimização da mistura (empacotamento), à redução no consumo de cimento diminuindo a emissão de CO<sub>2</sub>. Nesse mesmo trabalho tem-se uma proposta de divisão dos métodos de otimização de sistemas particulados a saber: Modelos de Curvas de Otimização, Modelo de Empacotamento de Partículas e Modelo dos Elementos Discretos.

### 2.1.1. Modelos de Curvas de Otimização

As curvas de otimização são modelos matemáticos que tentam ajustar uma família de curvas granulométricas em uma única curva otimizada representativa (ORTEGA, et al., 1997), (CASTRO e PANDOLFELLI, 2009), (FENNIS e WALRAVEN, 2012). Define-se uma classe granular  $i$ , como sendo um conjunto de grãos unidimensionais de diâmetro  $d_i$ , sendo:

$$d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_i \geq d_{i+1} \geq \dots \geq d_n \quad (1)$$

Castro e Pandolfelli (2009) explicita duas abordagens dentro dos modelos que avaliam as curvas de otimização, distribuindo os mesmos em modelos discretos e modelos contínuos. Nos modelos discretos as partículas são consideradas individualmente, enquanto nos modelos contínuos as partículas são tratadas como uma distribuição contínua. Os principais modelos representativos de otimização de curvas são: Modelo de Fuller (FULLER e THOMSON, 1907), Modelo de Andreasen e Andersen (ANDREASEN e ANDERSEN, 1930), Modelo de Furnas (FURNAS, 1931), Modelo de Alfred (FUNK e DINGER, 1994), Modelo de Bolomey (FARIAS, 2006), Modelo de Talbot e Richardt (FARIAS, 2006), (TUTIKIAN e HELENE, 2011).

Em 1907, Fuller e Thomson publicaram o trabalho “*The Laws of Proportioning Concrete*”, pioneiro no desenvolvimento do estudo de curvas granulométricas otimizadas para concreto. A curva proposta por Fuller e Thomson está definida na Equação (2).

$$P(d) = \left[ \frac{d_i}{d_{m\acute{a}x}} \right]^q \quad (2)$$

Onde  $P(d)$  é a porcentagem volumétrica de partículas menores que  $d_i$  (partícula corrente avaliada),  $d_{m\acute{a}x}$  o diâmetro da maior partícula e  $q$  é o coeficiente de distribuição, que no caso proposto por Fuller e Thomson era igual a 0,5.

Talbot e Richart em 1923 defendia que a quantidade de vazios e os espaços ocupados pela água e ar eram determinantes para resistência do concreto e não essencialmente o fator água cimento como defendia Abrams (TUTIKIAN e HELENE, 2011). Em sua proposta de empacotamento de sistemas particulados e minimização dos vazios pode ser observado na equação abaixo:

$$P(d) = \left[ 1 - \frac{d_i^n - 0,15^n}{d_{m\acute{a}x}^n - 0,15^n} \right] \quad (3)$$

Sendo o valor de  $n = 0,5$  para agregado britado e  $n = 0,8$  para agregado natural (FARIAS, 2006).

Mais adiante, em 1926, Bolomey contribui com a melhoria da equação de Fuller e Thomson, propondo uma curva teórica modificada que garantia uma melhor trabalhabilidade, uma mistura plástica e compactável manualmente (FARIAS, 2006), (TUTIKIAN e HELENE, 2011).

$$P(d) = A + (100 - A) \sqrt{\frac{d_i}{d_{m\acute{a}x}}} \quad (4)$$

Os valores para A na curva de Bolomey também depende da natureza do agregado: natural ou britado, mas também depende da característica de consistência do concreto (Tabela 1).

**Tabela 1:** Valores de A da curva de Bolomey.

| Natureza do Agregado | Característica de consistência |          |         |
|----------------------|--------------------------------|----------|---------|
|                      | Seca                           | Plástica | Fluída  |
| <b>Natural</b>       | 6 - 8                          | 10       | 12      |
| <b>Britado</b>       | 8 - 10                         | 12 - 14  | 14 - 16 |

**Fonte:** (FARIAS, 2006).

A mesma equação proposta por Fuller e Thomson também foi proposta por Andreasen e Andersen em 1930, contudo, o coeficiente de distribuição era uma variável do problema que estava entre  $[0,33 - 0,5]$  gerando diversas curvas (ANDREASEN e ANDERSEN, 1930). Posteriormente, por meio de simulações computacionais foi observado que o valor de 0,37 para o coeficiente de distribuição pode favorecer o empacotamento máximo para distribuições infinitas, enquanto para valores abaixo de 0,37 verifica-se uma porosidade residual (CASTRO e PANDOLFELLI, 2009).

Funk e Dinger (1994) descobrem que a ausência de partículas infinitamente pequenas pode acarretar desvios consideráveis no empacotamento dos grãos, propondo uma correção no modelo de Andreasen e Andersen. Nessa problemática, foi incorporado ao modelo de Andreasen um valor mínimo do tamanho das partículas, sendo esse modelo conhecido como modelo de Alfred observado na Equação (5).

$$P(d) = \left[ \frac{d_i^q - d_{min}^q}{d_{máx}^q - d_{min}^q} \right] \quad (5)$$

Tendo  $P(d)$ ,  $d_i$ ,  $d_{min}$ ,  $d_{máx}$ ,  $q$ , definição igual às citadas anteriormente. Cabe notar que se  $d_{min} = 0$ , a Equação (5) será reduzida a Equação (2).

No caso de modelos discretos, destaca-se o modelo de Furnas (FURNAS, 1931), onde as partículas irão obter o máximo empacotamento quando as partículas menores ocuparem os vazios deixados pelas partículas maiores. A equação do modelo de Furnas pode ser observada abaixo.

$$P(d) = \left[ \frac{d_i^{\log r} - d_{min}^{\log r}}{d_{máx}^{\log r} - d_{min}^{\log r}} \right]^q \quad (6)$$

Sendo  $d_{min}$  o diâmetro da menor partícula e  $r$  a razão entre os volumes de partículas retidas em uma malha de peneira e o volume de uma malha imediatamente inferior.

### 2.1.2. Modelo de Empacotamento de Partículas

Segundo Fennis e Walraven (2012) os modelos de empacotamento de partículas têm como premissa fundamental avaliar a geometria e a densidade de empacotamento das curvas que compõe a mistura, de modo que a maioria dos modelos matemáticos que se enquadram nessa categoria são funções dessas duas variáveis.

Na mesma década do desenvolvimento das curvas de otimização, algumas contribuições ao empacotamento de partículas foram fundamentais para o desenvolvimento dessa área. Destacam-se os trabalhos de Westman e Hugill em 1930 que desenvolveram um algoritmo de empacotamento de partículas. Nesse algoritmo utiliza-se uma família de partículas, porém não é considerado interação entre elas (FENNIS e WALRAVEN, 2012).

Logo após, em 1931, Furnas desenvolve em paralelo ao seu modelo clássico de otimização de curvas, um método para calcular a densidade de empacotamento máximo de uma família de partículas, bem como também publica uma equação que descreve os primeiros efeitos de interação entre elas (FENNIS e WALRAVEN, 2012).

Ainda no contexto histórico descrito por Fennis e Walraven (2012), data-se de 1967, a implementação realizada por Ben Aim e Le Goff da interação entre partículas grandes e pequenas, conhecido hoje como efeito parede. Esse feito é fundamental para o cálculo da densidade de empacotamento dos sistemas particulados e também o mesmo efeito é um dos responsáveis pela zona de transição interfacial no concreto.

Com a inserção das interações nas partículas (efeito parede e efeito de afastamento), diversos modelos de empacotamento de sistemas particulados foram propostos nas décadas seguintes, tendo como destaque o modelo desenvolvido por (DE LARRARD e SEDRAN, 1994) conhecido por método do empacotamento compressível (MEC), sendo ainda hoje um dos métodos mais utilizados.

O modelo de empacotamento compressível (MEC) segue uma criteriosa observação de fenômenos naturais, levantando hipóteses e modelos matemáticos para solução das conjecturas levantadas, tudo comprovado experimentalmente para diversas dosagens de concreto.

Para Silva (2004) o modelo de De Larrard (1999) ainda incorpora nas suas formulações a inclusão de novos materiais, que são atualmente contidos no concreto, como as adições. Esse modelo pode ser implementado computacionalmente, e com algumas manipulações algébricas pode ser acoplado a modelos de homogeneização, ou seja, pode-se inferir as propriedades do compósito ao nível de otimização geométrica dos particulados.

Como dito anteriormente, o método do empacotamento compressível está fundamentado na premissa do conhecimento das geometrias dos sistemas particulados, bem como da densidade de empacotamento. Em se tratando de misturas polidispersas (usuais em concreto), a equação de recorrência para o MEC pode ser vista na Equação (7).

$$\gamma_i = \frac{\beta_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left[ 1 - \beta_i + b_{ij}\beta_i \left( 1 - \frac{1}{\beta_j} \right) \right] y_j - \sum_{j=i+1}^n \left[ 1 - a_{ij} \frac{\beta_i}{\beta_j} \right] y_j}$$

$$\gamma = \min(\gamma_i) \quad (1 \leq i \leq n)$$

$$a_{ij} = \sqrt{1 - \left( 1 - \frac{d_j}{d_i} \right)^{1,02}}$$

$$b_{ij} = 1 - \left( 1 - \frac{d_i}{d_j} \right)^{1,50}$$
(7)

Sendo  $\beta_i$  a compacidade virtual da classe tomada individualmente,  $a_{ij}$  o efeito de afastamento,  $b_{ij}$  o efeito de parede,  $d_i$  e  $d_j$  os respectivos diâmetros usados para avaliar o empacotamento. Um detalhamento um pouco mais profundo acerca do método do empacotamento compressível pode ser observado no Apêndice A.

Com a compacidade definida, encontra-se o ponto de otimização entre os sistemas particulados definindo-se as frações volumétricas associadas às classes granulométricas. Com isso, pode-se estimar as frações volumétricas associadas aos agregados miúdos e graúdos e conseqüentemente, avaliar a fração volumétrica da pasta de cimento. Novamente, como o ponto ótimo será encontrado, garante-se que o volume de pasta será reduzido.

Semelhante aos modelos de otimização de curvas granulométricas, os vazios podem ser avaliados conhecendo as massas unitárias e específicas e a dosagem calculada. Mais adiante, será observado que as frações volumétricas dessas fases serão *input* para os modelos de

homogeneização que, desta feita, podem ser acoplados para tirar maior proveito do empacotamento de grãos.

As demais fases representadas, como as zonas de transição interfacial, geradas tanto no agregado miúdo, como graúdo, podem ser computadas com outros modelos que estimam essas frações volumétricas a partir da curva granulométrica dos agregados miúdos e graúdos. As seções a seguir versarão sobre como definir as frações dessas respectivas fases.

### **2.1.3. Modelo de Elementos Discretos**

Muitos problemas dispostos nas diversas áreas da ciência podem ser entendidos pela mecânica dos meios contínuos, dentre eles problemas físicos de sólidos deformáveis, rígidos e fluídos. Métodos numéricos clássicos podem ser empregados com eficiência dentro dessa perspectiva de meios contínuos, destacando o método dos elementos finitos (COOK, et al., 1989), (BATHE, 1996), (ASSAN, 1999), (ZIENKIEWICZ e TAYLOR, 2000) e o método dos elementos de contorno (BREBIA, 1978), (VENTURINI, 1982), (VENTURINI, 1988).

O modelo dos elementos discretos ou método dos elementos discretos (MED), (CUNDALL e STRACK, 1979) tem uma aplicação direta quando os problemas apresentam descontinuidades importantes para análise. Diversos problemas podem ser empregados com a utilização de métodos discretos, a saber: escoamento, geomecânica, empacotamento, fraturamento, etc. Simplificadamente, pode-se entender a eficácia do método dos elementos discretos quando aplicado a problemas que envolve sistemas particulados.

Em sua premissa básica, o método dos elementos discretos avalia os sistemas particulados um a um, atribuindo graus de liberdade de rotação, translação, computando força, velocidade e o contato entre essas partículas e como influenciam no problema global. A formulação lagrangeana do método dos elementos discretos é baseado na mecânica Newtoniana (CINTRA, 2016).

A fundamentação do método dos elementos discreto é creditada ao trabalho de Cundall e Strack (1979), mas como dito nas seções anteriores a aplicação em sistemas particulados é anterior.

Computacionalmente pode-se destacar a aplicação em empacotamento ao trabalho de Powell concomitante com o desenvolvimento do MED (POWELL, 1979).

Para um conhecimento mais aprofundado, explicitando todo estado da arte, tipos de formulações, limitações, técnicas computacionais avançadas de otimização e paralelização desses problemas pode ser observada a descrição Cintra (2016), Lopes et al. (2020). Nesse contexto, toda perspectiva de acoplamento entre os modelos de otimização de sistemas particulados (incluindo o MED) e a micromecânica dos campos médios pode ser empregada.

## **2.2. MODELOS DE AVALIAÇÃO DE FRAÇÕES VOLUMÉTRICAS DE INTERFACES**

Na seção anterior observaram-se modelos empregados para avaliação ótima das frações volumétricas de agregados, pasta e vazios. A ideia consiste em minimizar a fase da pasta de cimento e conseqüentemente os vazios, definindo o *input* de frações de cada uma das fases otimizada.

O passo seguinte consiste em avaliar modelos que consigam estimar as frações volumétricas associadas às respectivas zonas de transição interfacial associadas aos agregados miúdos e graúdos. Para avaliação da zona de transição, tem-se como base as curvas granulométricas otimizadas na seção anterior.

### **2.2.1. Modelo de Lu e Torquato**

O modelo de Lu e Torquato (1992) tem como premissa a avaliação de superfícies em uma mistura de partículas polidispersas para qualquer tipo de material. Adota-se no modelo, esferas com diâmetros diferentes, estimando o volume da fração volumétrica que envolve o sistema polidisperso.

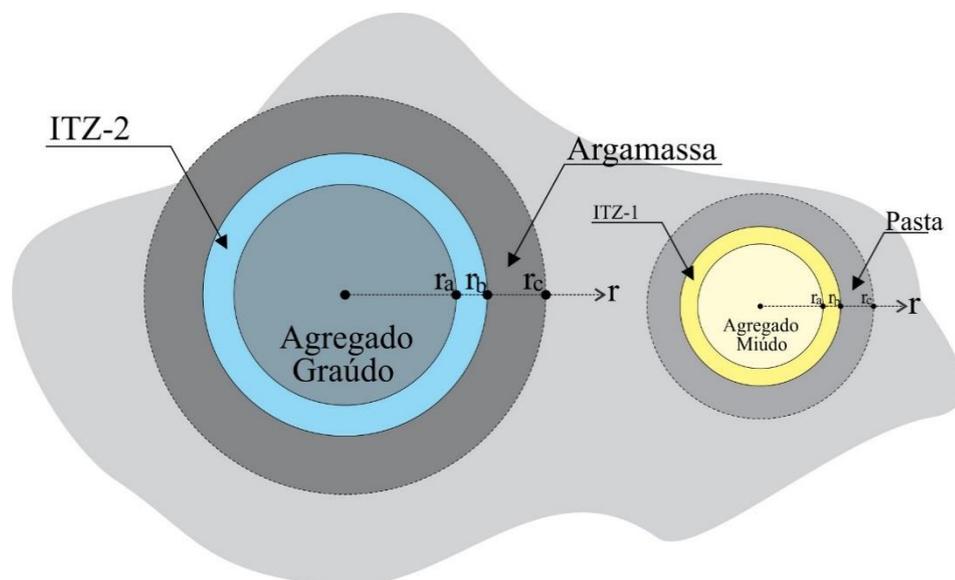
Os trabalhos de Garboczi e Bentz (1997), Dridi (2013), Chen, et al., (2016) adaptam a ideia original de Lu e Torquato para o problema da zona de transição interfacial do concreto, considerando a polidispersão inerente à curva granulométrica dos agregados graúdos e miúdos.

De posse de uma curva granulométrica, pode-se estimar as frações volumétricas das três fases estimadas do concreto. Pode-se entender o concreto como as fases de agregado graúdo-argamassa-zona de transição interfacial (ZTI-1) e agregado miúdo-pasta-zona de transição interfacial (ZTI-2). A avaliação da zona de transição interfacial pode ser aplicada tanto para o agregado graúdo imerso em uma matriz de argamassa, como o agregado miúdo imerso em uma matriz de pasta.

A Figura 4 ilustra a ideia básica do modelo de Lu e Torquato em função dos respectivos raios  $r_a$ ,  $r_b$  e  $r_c$ , sendo o primeiro: o raio do agregado, o segundo: o raio da zona de transição e o terceiro: o raio da matriz de argamassa. A mesma ideia pode ser aplicada a fase referente ao agregado miúdo.

Nota-se que o modelo de Lu e Torquato, a curva granulométrica é fator importante, pois não se trata de um raio fixo.

**Figura 4:** Modelo de Lu e Torquato para três fases.



**Fonte:** Autor.

A fração volumétrica referente à fase matriz, seja ela, argamassa ou pasta, pode ser observado na Equação (8):

$$f_m = (1 - f_i) e^{-\pi\rho(\alpha e_{zti} + \beta e_{zti}^2 + \gamma e_{zti}^3)} \quad (8)$$

$$\alpha = \frac{4\bar{R}^2}{1 - f_i} \quad (9)$$

$$\beta = \frac{4\bar{R}}{1 - f_i} + \frac{12\varepsilon^2 \bar{R}^2}{(1 - f_i)^2} \quad (10)$$

$$\gamma = \frac{4}{3(1 - f_i)} + \frac{8\varepsilon^2 \bar{R}}{(1 - f_i)^2} \quad (11)$$

Em que  $f_m$  é a fração volumétrica da matriz,  $f_i$  é a fração volumétrica das inclusões (agregados miúdo e graúdo),  $\rho$  é o número total de agregados por unidade de volume,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\varepsilon_2$  são funções do raio médio dos agregados  $\bar{R}$  e do raio médio ao quadrado  $\bar{R}^2$ , que dependem da distribuição granulométrica. A fração volumétrica das inclusões  $f_i$  é conhecida, bem como a espessura da zona de transição interfacial ( $e_{Zti}$ ).

$$\rho = \sum_{i=1}^M \frac{9f_i \bar{f}_i}{4\pi(r_{k+1}^3 - r_k^3)} \ln\left(\frac{r_{k+1}}{r_k}\right) \quad (12)$$

$$\bar{R} = \sum_{i=1}^M \frac{9f_i \bar{f}_i}{4\pi\rho(r_{k+1}^3 - r_k^3)} (r_{k+1} - r_k) \quad (13)$$

$$\bar{R}^2 = \sum_{i=1}^M \frac{9f_i \bar{f}_i}{4\pi\rho(r_{k+1}^3 - r_k^3)} \frac{1}{2} (r_{k+1}^2 - r_k^2) \quad (14)$$

$$f_{Zti} = 1 - f_i - f_m \quad (15)$$

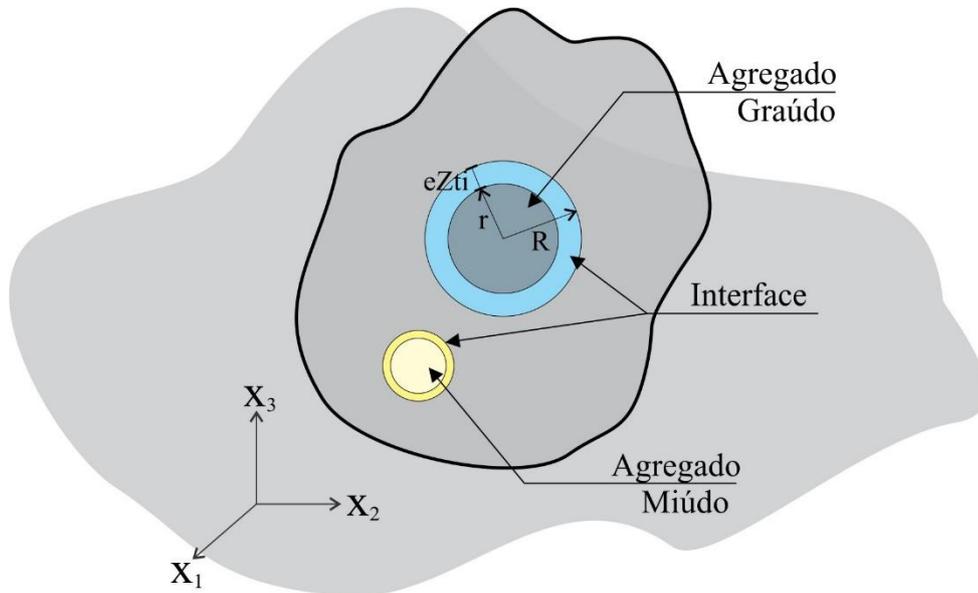
Em que  $\bar{f}_i$  é a fração volumétrica dos agregados com raio variando de  $r_{k+1}$  a  $r_k$ ,  $f_{Zti}$  é a fração volumétrica da zona de transição interfacial. O modelo de Lu e Torquato, é mais preciso do que o modelo simplificado, levando a uma maior zona de transição interfacial. Para um equacionamento completo do modelo, recomenda-se o trabalho original (LU e TORQUATO, 1992), ou a adequação ao problema do concreto (DRIDI, 2013), (GARBOCZI e BENTZ, 1997).

### 2.2.2. Modelo Simplificado para estimativa da ZTI

O modelo simplificado desenvolvido neste trabalho, tem como hipóteses, que as partículas de inclusões são esféricas, possuem diâmetro médio e é função também da fração volumétrica da inclusão e da espessura estimada da zona de transição.

Suponha uma inclusão, imersa em uma matriz revestida por uma camada em toda sua superfície, como mostrado na Figura 5.

**Figura 5:** Modelo geométrico adotado para estimativa da zona de transição interfacial.



**Fonte:** Autor.

Sendo assim, o volume de uma inclusão (admitindo que a mesma é uma esfera), pode ser escrito na forma:

$$V_i^{[1]} = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad (16)$$

O índice [1], indica que esse é o volume representativo de uma inclusão, que em função do diâmetro do agregado a equação pode ser reescrita:

$$V_i^{[1]} = \frac{1}{6}\pi\varnothing^3 \quad (17)$$

Onde  $\varnothing$  é o diâmetro da inclusão (agregado). Pode-se estimar o volume da zona de transição como sendo o volume da esfera maior, subtraído do volume do agregado, sendo assim a zona de transição em uma inclusão será

$$V_{Zti}^{[1]} = \frac{4}{3}\pi \left[ \frac{1}{2}\varnothing + e_{Zti} \right]^3 - \frac{1}{6}\pi\varnothing^3 \quad (18)$$

Sendo  $e_{Zti}$  a espessura da zona de transição.

Para obter a fração volumétrica da zona de transição interfacial, é necessário conhecer o volume total ( $V_t$ ), a fração volumétrica das inclusões ( $V_i$ ), a espessura da zona de transição ( $e_{zti}$ ) e o diâmetro do agregado ( $\emptyset$ ). Conhecido o volume total em análise, seja um corpo de prova cilíndrico, ou qualquer volume que se deseja avaliar a zona de transição, a primeira etapa é definir o número de inclusões no volume, que pode ser encontrada pela equação:

$$n = \frac{V_t}{V_i} f_i \quad (19)$$

O número de inclusões é função da fração volumétrica das inclusões no volume, bem como do volume total. Com isso a fração volumétrica da zona de transição pode ser encontrada:

$$f_{zti} = \frac{6f_i \left[ \frac{4}{3} \pi \left[ \frac{1}{2} \emptyset + e_{zti} \right]^3 - \frac{1}{6} \pi \emptyset^3 \right]}{\pi \emptyset^3} \quad (20)$$

Contudo, o modelo simplificado proposto, foi desenvolvido para uma inclusão, ou seja, necessita-se de algum modelo que avalie a curva granulométrica e retorne como estimativa o diâmetro médio das inclusões, para isso existem na literatura diversos métodos, sendo alguns discutidos nas seções seguintes.

#### 2.2.2.1. Diâmetro Médio Ponderado

O primeiro modelo apresentado, trata-se do modelo de 1949 desenvolvido por Van Bosel, que leva em consideração a curva granulométrica dos agregados, ponderando a porcentagem retida em cada diâmetro, sendo a curva granulométrica dada por:

$$\emptyset_1 < \emptyset_2 < \emptyset_3 < \dots < \emptyset_n \quad (21)$$

O diâmetro médio  $\bar{D}_i$  é calculado para cada intervalo  $i$  de peneiras como sendo:

$$\bar{D}_i = \frac{\emptyset_i + \emptyset_{i+1}}{2} \quad (22)$$

E suas respectivas massas retidas em porcentagem:

$$\frac{m_1}{m}, \frac{m_2}{m}, \frac{m_3}{m}, \dots, \frac{m_n}{m} \quad (23)$$

A Equação (24), mostra a ponderação do diâmetro do agregado proposta por Van Bosel:

$$\phi = \sum_{i=1}^n \bar{D}_i \frac{m_i}{m} \quad (24)$$

O diâmetro médio  $\phi$ , é alvo de muitos estudos que leva em consideração a distribuição da curva granulométrica.

#### 2.2.2.2. Diâmetro Médio Geométrico

É comum encontrar na literatura, o diâmetro médio geométrico como o mais adequado para se avaliar o diâmetro de uma curva granulométrica, principalmente quando existem acúmulos em peneiras de extremidade.

Ambos os métodos são utilizados até o momento, sendo todo equacionamento básico idêntico. Desta forma, as Equações (21), (22) e (23), são semelhantes para ambos os métodos, ainda que existam métodos que possam avaliar a Equação (22), o que se altera de fato é a Equação (24), que para o modelo geométrico é expressa por:

$$\phi = e^{\frac{\sum_{i=1}^n \ln(\bar{D}_i) \frac{m_i}{m}}{\sum_{i=1}^n \frac{m_i}{m}}} \quad (25)$$

As duas estratégias de se avaliar o diâmetro médio do agregado são viáveis e bastante utilizadas, contudo, quando acoplada ao modelo simplificado, ainda possui a limitação de ser conservador na avaliação da fração volumétrica da zona de transição interfacial.

### 2.3. MICROMECAÂNICA DOS CAMPOS MÉDIOS

Dentre os modelos de homogeneização encontrados na literatura, podem ser observados os modelos baseados na micromecânica dos campos médios, na teoria da elasticidade e na

mecânica dos sólidos, subdividindo ainda em modelos que visam avaliar apenas os limites (Modelo de Reuss, Voigt, Hashin-Shtrikman) e os demais modelos empregados para avaliar a homogeneização do compósito (Mori-Tanaka, Auto Consistente, Auto Consistente Generalizado dentre outros).

Contudo, para iniciar o estudo de homogeneização é extremamente importante a definição de um elemento que consiga representar a macroescala em uma escala reduzida, definido como elemento de volume representativo (EVR).

No contexto da construção civil, é explícita a demanda pelo entendimento do concreto em sua microestrutura. Recentes avanços demonstram que a abordagem micromecânica para determinação das propriedades efetivas para o concreto é um tema de interesse da comunidade científica (BARBOSA, 2003), (DRIDI, 2013), (ZHANG, et al., 2017), (CHEN, et al., 2016), (LI, et al., 2018), (LI, et al., 1999).

### **2.3.1. Elemento de Volume Representativo**

Dado um corpo admitido homogêneo e contínuo em sua macroestrutura, quando reduzido a uma escala suficientemente pequena, o mesmo não se comporta como material homogêneo, e sim heterogêneo, além de apresentar descontinuidades.

A literatura traz diversas definições sobre qual volume será representativo de sua macroescala em sua microescala como visto em (HASHIN, 1983), (DRUGAN e WILLIS, 1996), (OSTOJA-STARZEWSKI, 2002), (STROVEN, et al., 2004), (DRAGO e PINDERA, 2006), (PICHLER e HELLMICH, 2011).

Hashin (1983) admite que um volume é representativo quando contém todas as fases que caracterizam a microestrutura do material heterogêneo em estudo. É importante conter um número suficiente dessas fases para que as propriedades médias correspondentes ao elemento de volume representativo independam das condições de contorno aplicadas.

Drugan e Willis (1996) indica que o EVR está associado ao menor volume que consegue representar as propriedades médias do compósito.

Ostoja-Starzewski (2002) define EVR em duas situações: quando o sistema é periódico em sua microestrutura e existe uma célula que o representa, e no segundo caso quando existe um volume (grande o suficiente) que consegue incorporar em sua microestrutura diversas fases, possuindo propriedades homogêneas.

Stroven et al. (2004) discorre acerca de diversas definições a respeito do EVR, propondo inclusive uma forma de mensuração do mesmo, considerando a dispersão estatística associada a uma propriedade específica, quando se reduz a escala da mesma.

O referencial supracitado sobre EVR difere um pouco, porém o EVR sempre é considerado inferior a macroescala do compósito, e de modo a representar suas fases, além de possuir pouca dispersão em relação à avaliação de suas propriedades quando seu volume é perturbado (STROVEN, et al., 2004).

Drago e Pindera (2006) definiram EVR como sendo um sistema heterogêneo em sua microestrutura, e quando aplicada as condições de contorno específicas para cada volume representativo, a resposta não difere do material em sua macroescala. Drago e Pindera (2006) explicitaram ainda o conceito de célula unitária de repetição, bastante utilizado quando o problema possui condição de contorno periódica. Na micromecânica, a análise de um elemento de volume representativo utiliza os teoremas da tensão e da deformação média e a proposta de Hill, baseada numa equivalência energética entre as condições de contorno homogêneas em tensão e em deformação.

Em sua revisão sobre EVR, os mesmos, citam diversos trabalhos que visavam a caracterização do elemento de volume representativo, em especial para concretos, uma vez que procuravam saber se os espécimes ensaiados de fato poderiam representar o compósito. Esses trabalhos estabeleciam uma análise paramétrica do volume e suas fases submetidas a diversas condições de contorno homogêneas. O que buscavam essas investigações eram definir o número de inclusões contidas no EVR que fossem suficientes para avaliação das propriedades do compósito.

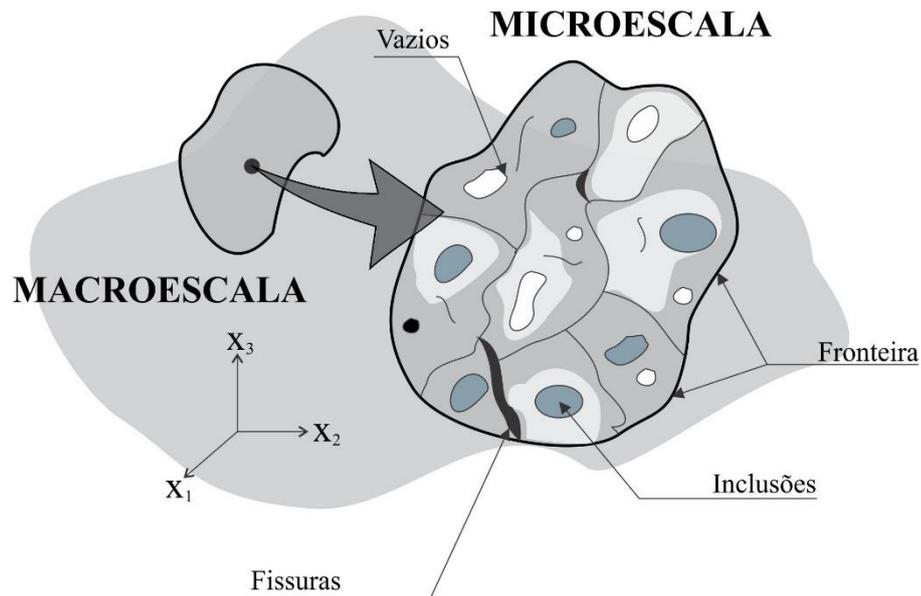
Pichler e Hellmich (2011) define elemento de volume representativo em função das escalas de análise. De uma forma simplificada as definições supracitadas continuam válidas, porém pode-

se ter um elemento representativo dentro de um outro elemento representativo para poder avaliar suas propriedades em uma escala ainda menor.

Suponha que um elemento de volume representativo na escala  $A$ , composto por  $n_1, n_2, \dots, n_m$  fases, de forma que ao se reduzir a escala de análise para  $B$ , é possível que algumas de suas  $n_1, n_2, \dots, n_m$ , fases tenham que ser representadas por outras  $k_1, k_2, \dots, k_m$ , fases, expandindo o leque para análise multiescala, bem definida no concreto por exemplo (PICHLER e HELLMICH, 2011) e abordada nesse trabalho.

Suponha agora que o volume em estudo é um EVR. A Figura 6 ilustra a transformação de um elemento em sua macroescala, admitido homogêneo em suas propriedades mecânicas, para um elemento em sua microescala, onde se podem observar claramente os elementos constituintes desse EVR: fissuras, inclusões, fronteira, etc.

**Figura 6:** Elemento de volume representativo (EVR).



**Fonte:** Autor.

### 2.3.2. Considerações Iniciais sobre Homogeneização de Compósitos

As análises micromecânicas são normalmente conduzidas com base no conceito de um EVR. Para entender as definições da micromecânica, o material compósito pode ser entendido como sendo a soma do volume da matriz com o somatório do volume de todas as parcelas de

inclusões, podendo ser vazios, materiais, fissuras, etc (CHRISTENSEN e LO, 1979). A Equação (26), a seguir, representa essa definição.

$$V = V_m + \sum_{\alpha=1}^n V_i \quad (26)$$

Onde:

$V_m$  é o volume da matriz,

$V_i$  é o volume das inclusões e

$V$  o volume total do elemento representativo.

Ao tomar-se a razão entre o volume da matriz e o volume total, bem como o volume das inclusões e o volume total, têm-se as frações volumétricas a seguir, considerando as Equações (27) e (28), respectivamente.

$$f_m = \frac{V_m}{V} \quad (27)$$

$$f_i = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^n V_i \quad (28)$$

As frações volumétricas são extremamente importantes neste tipo de análise. A mais simplificada propõe uma média ponderada em função das frações, das propriedades para análise global, também conhecida como Regra da Mistura. Com o passar do tempo, diversos métodos foram desenvolvidos para a resolução do problema micromecânico, destacando-se o Método da Inclusão Equivalente, desenvolvido por Eshelby (1957) em seu trabalho "*The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*", uma das grandes contribuições para o desenvolvimento da micromecânica de meios efetivos.

A partir do método proposto por Eshelby, outros métodos foram desenvolvidos, destacando-se: Auto Consistente (BENVENISTE, 1987), Mori-Tanaka (MORI e TANAKA, 1973), Esquema Diferencial (WALPOLE, 1969), entre outros.

No contexto da construção civil, é explícita a demanda pelo entendimento do concreto em sua microestrutura. Recentes avanços demonstram que a abordagem micromecânica para determinação das propriedades efetivas para o concreto é um tema de interesse da comunidade

científica (BARBOSA, 2003), (DRIDI, 2013), (ZHANG, et al., 2017), (CHEN, et al., 2016), (LI, et al., 2018), (LI, et al., 1999).

### 2.3.3. Relações Básicas da Homogeneização de Compósitos

O estudo da micromecânica dos meios efetivos, admite a hipótese de que as tensões e deformações representativas de um material compósito (matriz + inclusões), podem ser representadas pela média das tensões e deformações nos volumes representativos de cada fase. Partindo desse princípio, tem-se que a tensão média total, na matriz e nas inclusões podem ser expressas por:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V} \int_V \sigma(x) dv \quad (29)$$

$$\bar{\sigma}_m = \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \sigma(x) dv \quad (30)$$

$$\bar{\sigma}_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \sigma(x) dv \quad (31)$$

Sabendo que:

$$\int_V \sigma(x) dv = \int_{V_m} \sigma(x) dv + \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \sigma(x) dv \quad (32)$$

Substituindo a Eq.(32), na Eq.(29) tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \frac{1}{V} \left[ \int_{V_m} \sigma(x) dv + \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \sigma(x) dv \right] \\ \bar{\sigma} &= \frac{1}{V} \left[ V_m \bar{\sigma}_m + \sum_{i=1}^n V_i \bar{\sigma}_i \right] \\ \bar{\sigma} &= f_m \bar{\sigma}_m + \sum_{i=1}^n f_i \bar{\sigma}_i \end{aligned} \quad (33)$$

Chegando a uma expressão que se pode determinar a tensão média total em função das tensões na matriz e nas inclusões e suas respectivas frações volumétricas.

**Hipótese 1:** Admitindo-se que  $V$  é um volume representativo, pode-se afirmar que a tensão total média  $\bar{\sigma}$  é igual a tensão efetiva no material  $\langle \sigma \rangle$ . De modo semelhante tem-se a deformação média total, na matriz e nas inclusões dadas pelas equações:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon(x) dv \quad (34)$$

$$\bar{\varepsilon}_m = \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \varepsilon(x) dv \quad (35)$$

$$\bar{\varepsilon}_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \quad (36)$$

Sabendo que:

$$\int_V \varepsilon(x) dv = \int_{V_m} \varepsilon(x) dv + \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \quad (37)$$

Substituindo a Eq.(37), na Eq.(34) tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{V} \left[ \int_{V_m} \varepsilon(x) dv + \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \right] \\ \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{V} \left[ V_m \bar{\varepsilon}_m + \sum_{i=1}^n V_i \bar{\varepsilon}_i \right] \\ \bar{\varepsilon} &= f_m \bar{\varepsilon}_m + \sum_{i=1}^n f_i \bar{\varepsilon}_i \end{aligned} \quad (38)$$

**Hipótese 2:** Admitindo-se que  $V$  é um volume representativo, pode-se afirmar que a deformação total média  $\bar{\varepsilon}$  é igual a deformação efetiva no material  $\langle \varepsilon \rangle$ .

**Hipótese 3:** Admitindo-se que a matriz e as inclusões são materiais elásticos. Assim pode-se afirmar que:

$$\langle \sigma \rangle = \bar{\mathbb{C}} : \langle \varepsilon \rangle \quad (39)$$

$$\langle \sigma_m \rangle = \mathbb{C}_m : \langle \varepsilon_m \rangle \quad (40)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \mathbb{C}_i : \langle \varepsilon_i \rangle \quad (41)$$

Onde,  $\bar{\mathbb{C}}$ ,  $\mathbb{C}_m$  e  $\mathbb{C}_i$ , são respectivamente o tensor constitutivo global, o tensor constitutivo da matriz e o tensor constitutivo das inclusões, sendo os mesmos tensores de quarta ordem. Se o material for elástico linear, o tensor constitutivo global  $\bar{\mathbb{C}}$  é constante. Admitindo que o material é elástico linear, a Equação (39), pode ser reescrita na forma:

$$\langle \varepsilon \rangle = \bar{\mathbb{D}} : \langle \sigma \rangle \quad (42)$$

Onde  $\mathbb{D}$ , é o tensor de flexibilidade de quarta ordem. Nessas condições pode-se escrever as equações abaixo.

$$\langle \varepsilon_m \rangle = \mathbb{D}_m : \langle \sigma_m \rangle \quad (43)$$

$$\langle \varepsilon_i \rangle = \mathbb{D}_i : \langle \sigma_i \rangle \quad (44)$$

Os tensores de concentração de um compósito, são tensores que relacionam as tensões e deformações medias no compósito com a matriz e as inclusões. Tome-se agora a Equação (33), podendo ser reescrita em termos das tensões efetivas, da matriz e das inclusões:

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= f_m \langle \sigma_m \rangle + \sum_{i=1}^n f_i \langle \sigma_i \rangle \\ f_m \langle \sigma_m \rangle &= \langle \sigma \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \langle \sigma_i \rangle \end{aligned} \quad (45)$$

Substituindo as Equações (39) a (41), obtêm-se:

$$f_m \mathbb{C}_m : \langle \varepsilon_m \rangle = \bar{\mathbb{C}} : \langle \varepsilon \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{C}_i : \langle \varepsilon_i \rangle \quad (46)$$

Substituindo o valor da Equação (35) na Equação (37) em termos efetivos tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{V_m} \varepsilon(x) dv &= \int_V \varepsilon(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \\ \langle \varepsilon_m \rangle &= \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \varepsilon(x) dv \\ \langle \varepsilon_m \rangle &= \frac{1}{V_m} \left[ \int_V \varepsilon(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \right] \end{aligned} \quad (47)$$

De posse da Equação (46) e (47) chega-se à:

$$(48)$$

$$f_m \mathbb{C}_m: \frac{1}{V_m} \left[ \int_V \varepsilon(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \varepsilon(x) dv \right] = \bar{\mathbb{C}}: \langle \varepsilon \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{C}_i: \langle \varepsilon_i \rangle$$

Com um pouco de algebrismo pode-se chegar à:

$$(\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_m): \langle \varepsilon \rangle = \sum_{i=1}^n f_i (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m): \langle \varepsilon_i \rangle \quad (49)$$

Partindo agora da Equação (38), em termos da deformação efetiva, tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= f_m \langle \varepsilon_m \rangle + \sum_{i=1}^n f_i \langle \varepsilon_i \rangle \\ f_m \langle \varepsilon_m \rangle &= \langle \varepsilon \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \langle \varepsilon_i \rangle \end{aligned} \quad (50)$$

Substituindo as Equações (43), (42) e (44), tem-se:

$$f_m \mathbb{D}_m: \langle \sigma_m \rangle = \bar{\mathbb{D}}: \langle \sigma \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{D}_i: \langle \sigma_i \rangle \quad (51)$$

Substituindo o valor da Equação (30) na Equação (32) em termos efetivos tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{V_m} \sigma(x) dv &= \int_V \sigma(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \sigma(x) dv \\ \langle \sigma_m \rangle &= \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \sigma(x) dv \\ \langle \sigma_m \rangle &= \frac{1}{V_m} \int_V \sigma(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \sigma(x) dv \end{aligned} \quad (52)$$

Com as Equações (51) e (52) chega-se

$$f_m \mathbb{D}_m: \left[ \frac{1}{V_m} \int_V \sigma(x) dv - \sum_{i=1}^n \int_{V_i} \sigma(x) dv \right] = \bar{\mathbb{D}}: \langle \sigma \rangle - \sum_{i=1}^n f_i \mathbb{D}_i: \langle \sigma_i \rangle \quad (53)$$

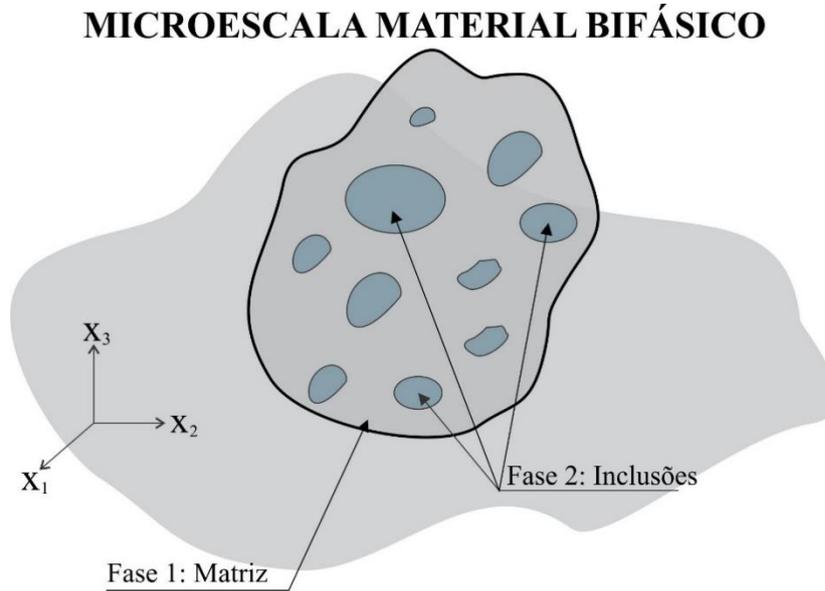
Novamente, com um pouco de algebrismo, chega-se:

$$(\bar{\mathbb{D}} - \mathbb{D}_m): \langle \sigma_m \rangle = \sum_{i=1}^n f_i (\mathbb{D}_i - \mathbb{D}_m): \langle \sigma_i \rangle \quad (54)$$

### 2.3.4. Material Bifásico: Problema Elástico

Tome-se agora como referência a Equação (49), levando em consideração que o material é bifásico (Figura 7), ou seja,  $i = 1$ , pode-se reescrever a Equação (49) em termos da deformação efetiva na inclusão na forma:

**Figura 7:** Elemento de volume representativo para material bifásico.



**Fonte:** Autor

$$\langle \varepsilon_I \rangle = \frac{1}{f_i} (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_m) : \langle \varepsilon \rangle \quad (55)$$

Onde  $I$ , indica a inclusão  $i = 1$  no compósito. O tensor de concentração de deformação é a parcela que multiplica a deformação efetiva na Equação (55), sendo expresso por:

$$\mathbb{A}_I = \frac{1}{f_i} (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_m) \quad (56)$$

Substituindo a Equação (56) na Equação (55), chega-se a seguinte relação entre as deformações efetivas do compósito e das inclusões.

$$\langle \varepsilon_I \rangle = \mathbb{A}_I : \langle \varepsilon \rangle \quad (57)$$

Para demonstração do tensor de concentração em tensão, pode-se partir da Equação (54), reescrevendo a mesma em termos da tensão efetiva da inclusão, como mostrado na Equação (55).

$$\langle \sigma_I \rangle = \frac{1}{f_i} (\mathbb{D}_i - \mathbb{D}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{D}} - \mathbb{D}_m) : \langle \sigma \rangle \quad (58)$$

Semelhante ao tensor de concentração em deformação o tensor de concentração em tensão é a parcela que multiplica a tensão efetiva na Equação (58).

$$\mathbb{B}_I = \frac{1}{f_i} (\mathbb{D}_i - \mathbb{D}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{D}} - \mathbb{D}_m) \quad (59)$$

Substituindo a Eq.(59) na Eq.(58), chega-se a seguinte relação entre as deformações efetivas do compósito e das inclusões:

$$\langle \sigma_I \rangle = \mathbb{B}_I : \langle \sigma \rangle \quad (60)$$

Para um material bifásico a Equação (50) pode ser reescrita em termos da matriz e de uma inclusão na forma:

$$\langle \varepsilon \rangle = f_m \langle \varepsilon_m \rangle + f_I \langle \varepsilon_I \rangle \quad (61)$$

Empregando a Eq. (46), sabendo que  $f_m = 1 - f_I$ , mostra-se a relação direta entre as deformações efetivas no compósito e a matriz.

$$\langle \varepsilon_m \rangle = -\frac{1}{f_m} (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_I) : \langle \varepsilon \rangle \quad (62)$$

De maneira análoga, encontra-se o tensor de concentração em deformação na matriz:

$$\mathbb{A}_m = -\frac{1}{f_m} (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}_I) \quad (63)$$

Substituindo a Eq.(63) na Eq.(62), chega-se a seguinte relação entre as deformações efetivas do compósito e da matriz:

$$\langle \varepsilon_m \rangle = \mathbb{A}_m : \langle \varepsilon \rangle \quad (64)$$

Procedendo de maneira idêntica ao demonstrado para o tensor de concentração em deformação, encontra-se o tensor de concentração em tensão para a matriz na forma:

$$\mathbb{B}_m = -\frac{1}{f_m} (\mathbb{D}_I - \mathbb{D}_m)^{-1} : (\bar{\mathbb{D}} - \mathbb{D}_I) \quad (65)$$

$$\langle \sigma_m \rangle = \mathbb{B}_m : \langle \sigma \rangle \quad (66)$$

É interessante que se tenha uma relação entre os tensores de concentração da matriz e da inclusão. Para isso, procede-se a análise sobre a Equação (61) em termos efetivos.

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= f_m \langle \varepsilon_m \rangle + f_I \langle \varepsilon_I \rangle \\ \langle \varepsilon \rangle &= f_m \mathbb{A}_m : \langle \varepsilon \rangle + f_I \mathbb{A}_I : \langle \varepsilon \rangle \\ \langle \varepsilon \rangle &= (f_m \mathbb{A}_m + f_I \mathbb{A}_I) : \langle \varepsilon \rangle \\ \mathbb{I} &= (f_m \mathbb{A}_m + f_I \mathbb{A}_I) \end{aligned} \quad (67)$$

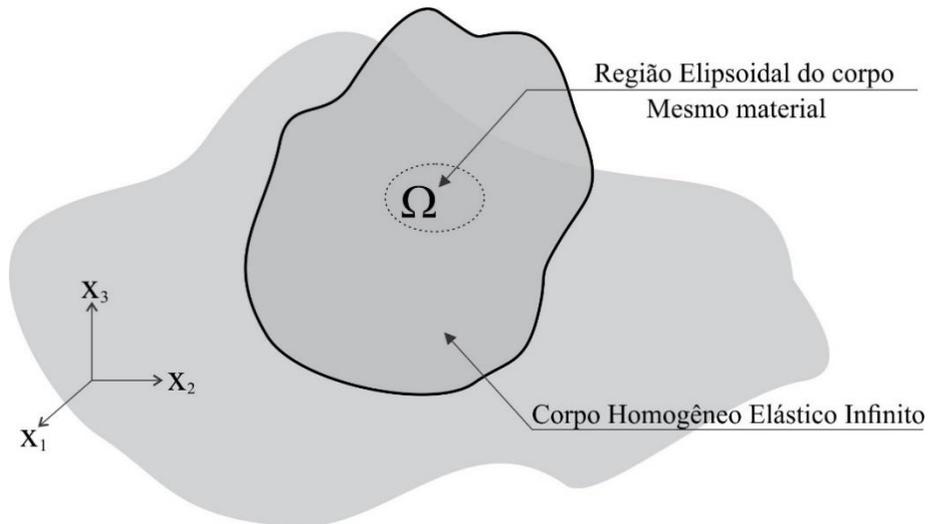
Onde  $\mathbb{I}$  é a matriz identidade. Procedendo de maneira análoga, chega-se à seguinte conclusão:

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= f_m \langle \sigma_m \rangle + f_I \langle \sigma_I \rangle \\ \langle \sigma \rangle &= f_m \mathbb{B}_m : \langle \sigma \rangle + f_I \mathbb{B}_I : \langle \sigma \rangle \\ \langle \sigma \rangle &= (f_m \mathbb{B}_m + f_I \mathbb{B}_I) : \langle \sigma \rangle \\ \mathbb{I} &= (f_m \mathbb{B}_m + f_I \mathbb{B}_I) \end{aligned} \quad (68)$$

## 2.4. O PROBLEMA DE ESHELBY

Denominado “Problema da Inclusão de Eshelby”, em 1957 J.D.Eshelby propôs determinar o campo elástico de uma inclusão elipsoidal em um sólido (Figura 8).

**Figura 8:** Problema da inclusão de Eshelby.

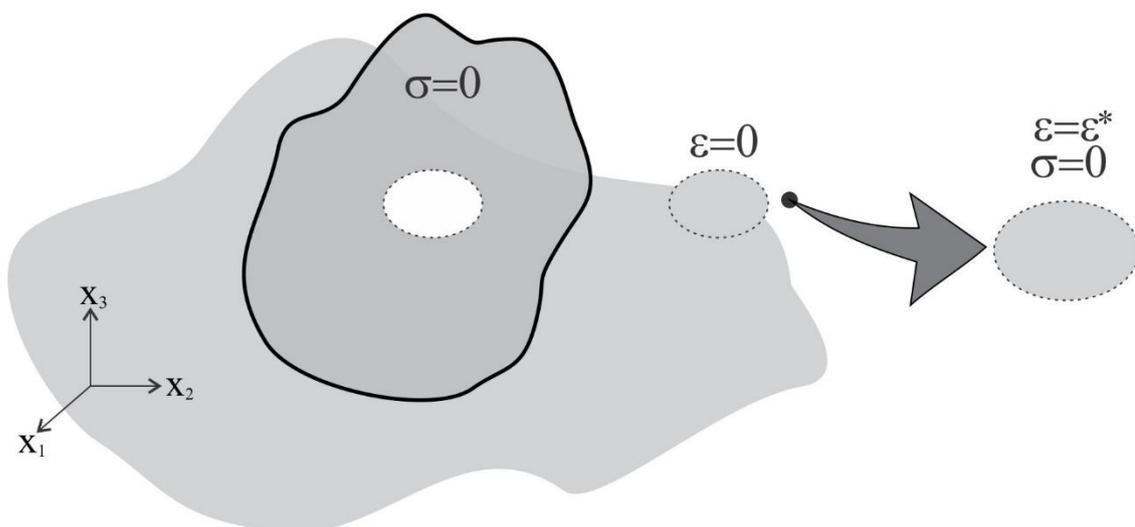


**Fonte:** Autor.

**Hipótese 4:** Admite-se que a região  $\Omega$  sofra uma transformação geométrica de forma que na ausência do material que circunda a região da elipse corresponderia a uma deformação homogênea.

Nesta hipótese Eshelby conseguiu avaliar como seriam os campos elásticos dentro e fora da região elipsoidal. Para exemplificar a estratégia de Eshelby, inicialmente, retira-se a região elipsoidal, onde a deformação inicialmente é nula e aplica-se uma deformação homogênea como mostrado na Figura 9.

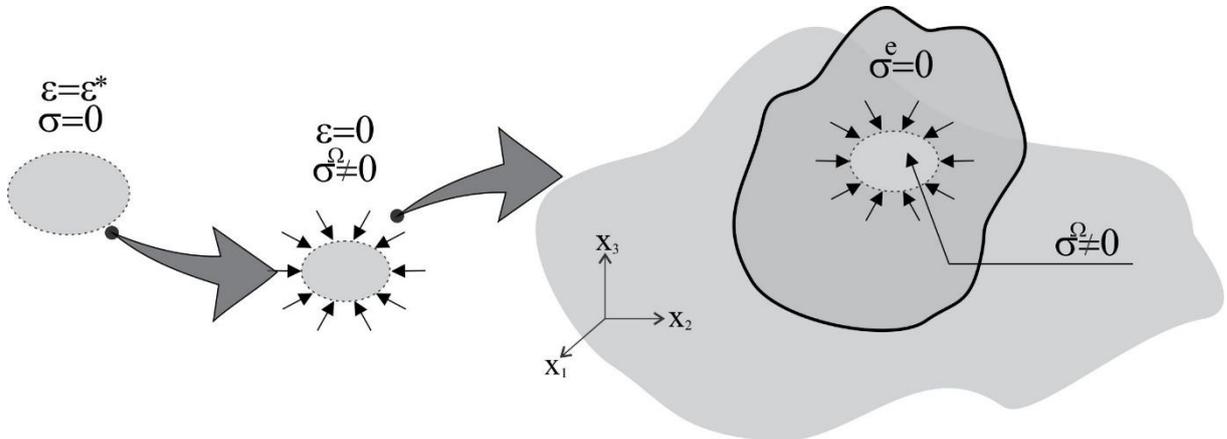
**Figura 9:** Estratégia do problema de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

O passo seguinte consiste em aplicar forças externas na região para que a mesma retorne ao volume inicial. Quando se aplica essas forças externas, o volume da região elipsoidal diminui, contudo, um campo de tensão está associado a essa força no corpo (Figura 10).

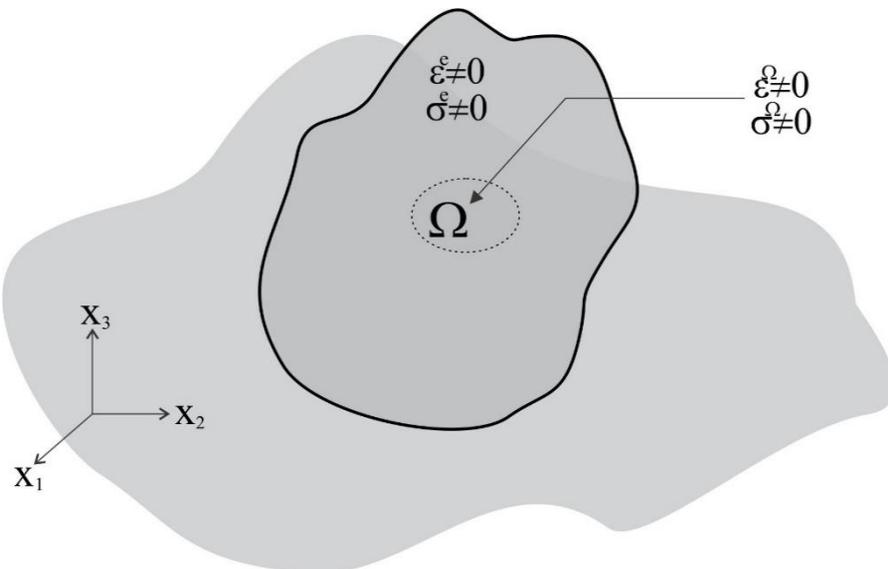
**Figura 10:** Estratégia do problema de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

O próximo passo, consiste em retornar a região elipsoidal, agora com um campo de tensão na região do elemento representativo, retirando as ações externas que circundavam a região elipsoidal, como pode ser observada na Figura 11.

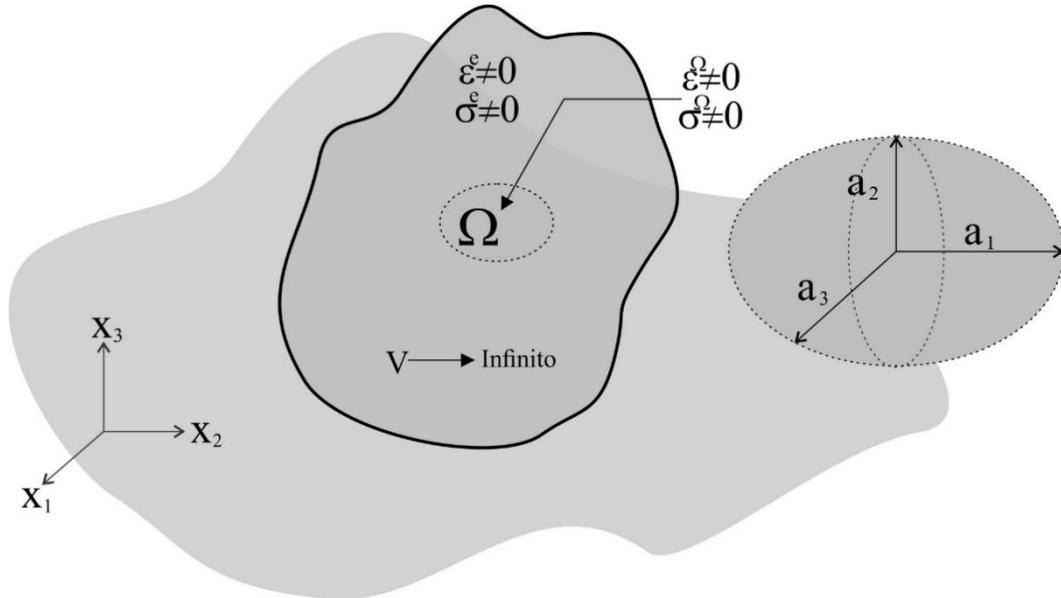
**Figura 11:** Campo de tensões e deformações do problema da inclusão de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

Eshelby afirma que dentro da inclusão elipsoidal  $\Omega$ , as tensões e deformações são constantes, porém, dependente da geometria da inclusão, como explicitado na Figura 12.

**Figura 12:** Geometria da inclusão no problema de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

Com isso, define-se a relação de Eshelby entre as deformações no elipsoide e a deformação imposta no sistema por um tensor de transformação, chamado tensor de Eshelby ( $\mathbb{S}$ ), na forma (Equação (69)):

$$\varepsilon^{\Omega} = \mathbb{S}^{\Omega} \varepsilon^* \quad (69)$$

O tensor  $\mathbb{S}$  assume algumas características a saber (ESHELBY, 1957):

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{ijkl}^{\Omega} &= \mathbb{S}_{jikl}^{\Omega} = \mathbb{S}_{ijlk}^{\Omega} \\ \mathbb{S}_{ijkl}^{\Omega} &\neq \mathbb{S}_{klij}^{\Omega} \\ \mathbb{S}_{1112}^{\Omega} &= \mathbb{S}_{1123}^{\Omega} = \dots = \mathbb{S}_{3312}^{\Omega} = \dots = 0 \\ \mathbb{S}_{1213}^{\Omega} &= \mathbb{S}_{1223}^{\Omega} = \dots = \mathbb{S}_{1323}^{\Omega} = \dots = 0 \end{aligned} \quad (70)$$

Da Equação (70), tem-se que os coeficientes acoplados extensão-cisalhamento são nulos e os coeficientes cisalhamento-cisalhamento em planos diferentes também são nulos. Na forma completa matricial o tensor  $\mathbb{S}$  de quarta ordem assume a forma:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11}^{\Omega} \\ \varepsilon_{22}^{\Omega} \\ \varepsilon_{33}^{\Omega} \\ \varepsilon_{23}^{\Omega} \\ \varepsilon_{13}^{\Omega} \\ \varepsilon_{12}^{\Omega} \\ \varepsilon_{32}^{\Omega} \\ \varepsilon_{31}^{\Omega} \\ \varepsilon_{21}^{\Omega} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} S_{1111}^{\Omega} & S_{1122}^{\Omega} & S_{1133}^{\Omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_{2211}^{\Omega} & S_{2222}^{\Omega} & S_{2233}^{\Omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_{3311}^{\Omega} & S_{3322}^{\Omega} & S_{3333}^{\Omega} & S_{2323}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{2332}^{\Omega} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{3131}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{3113}^{\Omega} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1212}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{1221}^{\Omega} \\ 0 & 0 & 0 & S_{3223}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{3232}^{\Omega} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1331}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{1313}^{\Omega} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{2112}^{\Omega} & 0 & 0 & S_{2121}^{\Omega} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11}^* \\ \varepsilon_{22}^* \\ \varepsilon_{33}^* \\ \varepsilon_{23}^* \\ \varepsilon_{13}^* \\ \varepsilon_{12}^* \\ \varepsilon_{32}^* \\ \varepsilon_{31}^* \\ \varepsilon_{21}^* \end{pmatrix}$$

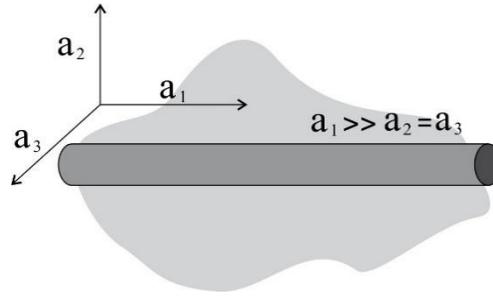
(71)

O tensor de Eshelby pode ser calculado por:

$$\begin{aligned}
S_{ijij} &= \frac{1}{2} \Psi (a_i^2 + a_j^2) I_{ij} + \frac{1}{2} \Phi (I_i + I_j) \\
\Psi &= \frac{3}{8\pi(1 - \nu_m)} \\
\Phi &= \frac{1 - 2\nu_m}{8\pi(1 - \nu_m)} \\
I_i &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^{\infty} \frac{du}{(a_i^2 + u)\Delta} \\
I_{ii} &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^{\infty} \frac{du}{(a_i^2 + u)^2 \Delta} \\
\Delta &= (a_1^2 + u)^{\frac{1}{2}} (a_2^2 + u)^{\frac{1}{2}} (a_3^2 + u)^{\frac{1}{2}} \\
S_{iijj} &= \Psi a_j^2 I_{ij} - \Phi I_i \rightarrow i \neq j \\
I_{ij} &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^{\infty} \frac{du}{(a_i^2 + u)(a_j^2 + u)\Delta} \rightarrow i \neq j
\end{aligned} \tag{72}$$

#### 2.4.1. Tensor de Eshelby para Inclusão Cilíndrica em Matriz Isótropa

Como dito anteriormente, o Tensor de Eshelby é função da geometria da inclusão, nesta forma, ao simular a inclusão comprida, pode-se admitir na elipse  $a_1 \gg a_2, a_3$  (Figura 13).

**Figura 13:** Inclusão cilíndrica no problema de Eshelby.

**Fonte:** Autor.

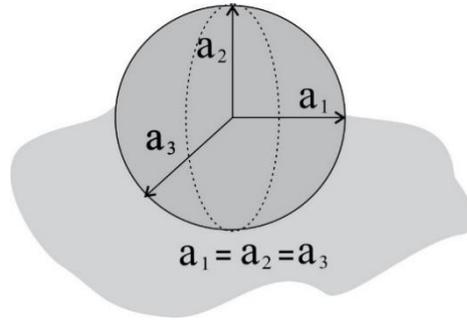
As equações para o tensor de Eshelby assumem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 S_{1111} &\approx \frac{2 - \nu_m}{1 - \nu_m} \alpha^2 \left[ \ln \frac{2}{\alpha} - \frac{5 - 2\nu_m}{2(2 - \nu_m)} \right] \\
 S_{1122} &\approx \frac{1 - 2\nu_m}{2(1 - \nu_m)} \alpha^2 \left[ \ln \frac{2}{\alpha} - \frac{3 - 4\nu_m}{2(1 - 2\nu_m)} \right] \\
 S_{2222} &\approx \frac{5 - 4\nu_m}{8(1 - \nu_m)} - \frac{1 - 2\nu_m}{4(1 - \nu_m)} \alpha^2 \left[ \ln \frac{2}{\alpha} - \frac{1 - 8\nu_m}{4(1 - 2\nu_m)} \right] \\
 S_{2211} &\approx \frac{\nu_m}{2(1 - \nu_m)} - \frac{1 + \nu_m}{2(1 - \nu_m)} \alpha^2 \left[ \ln \frac{2}{\alpha} - \frac{3 - 2\nu_m}{2(1 - \nu_m)} \right] \\
 S_{2233} &\approx \frac{1 - 4\nu_m}{8(1 - \nu_m)} - \frac{1 - 2\nu_m}{4(1 - \nu_m)} \alpha^2 \left[ \ln \frac{2}{\alpha} - \frac{5 - 8\nu_m}{4(1 - 2\nu_m)} \right] \\
 S_{1212} &\approx \frac{1}{4} \\
 S_{2323} &\approx \frac{3 - 4\nu_m}{8(1 - \nu_m)} \\
 \alpha &= \frac{a_1}{a_2}
 \end{aligned} \tag{73}$$

#### 2.4.2. Tensor de Eshelby para Inclusão Esférica em Matriz Isótropa

Para uma inclusão esférica (WALPOLE, 1969)(Figura 14) propôs uma equação que monta o tensor de Eshelby em função de dois tensores  $L$  e  $P$ .

**Figura 14:** Inclusão esférica no problema de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

Onde  $L$  é a matriz constitutiva para um material isotrópico, elástico e linear na forma:

$$L = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (74)$$

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} + \frac{\eta}{G} \right) & \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} - \frac{\eta}{2G} \right) & \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} - \frac{\eta}{2G} \right) & & & \\ 0 & \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} + \frac{\eta}{G} \right) & \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} - \frac{\eta}{2G} \right) & & & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \left( \frac{\xi}{3k} + \frac{\eta}{G} \right) & & & \\ & & & \frac{\eta}{G} & 0 & 0 \\ & & & 0 & \frac{\eta}{G} & 0 \\ & & & 0 & 0 & \frac{\eta}{G} \end{bmatrix} \quad (75)$$

$$\xi = \frac{1-\nu}{3(1-\nu)}$$

$$\eta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$$

Onde  $k$  é o módulo volumétrico e  $G$  o módulo de elasticidade transversal do material. Onde o tensor de Eshelby pode ser calculado, a saber:

$$\mathbb{S} = LP \quad (76)$$

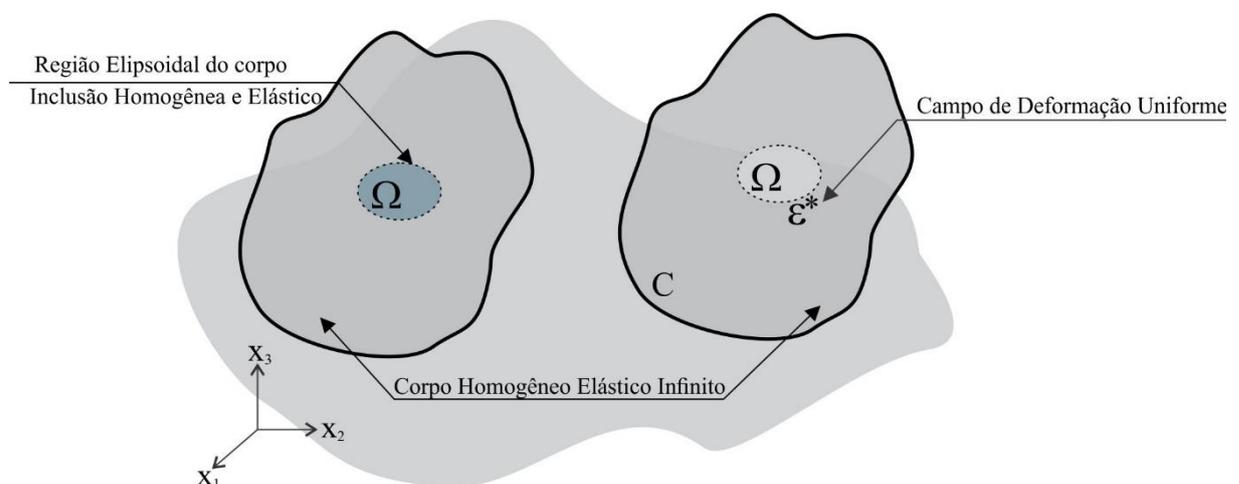
## 2.5. MÉTODO DA INCLUSÃO EQUIVALENTE

O método da inclusão equivalente de Eshelby foi proposto em 1957, mostrando que quando se impõe numa matriz infinita, um campo de tensão uniforme em uma inclusão elipsoidal, o resultado é um campo de deformação uniforme.

O problema agora consiste em determinar qual o campo de deformações uniforme  $\varepsilon^*$  que deve ser imposto na inclusão, considerando que a mesma não é constituída do mesmo material e sim de uma matriz, de modo que os campos de tensão e deformação resultante sejam iguais aos gerados na inclusão do problema original de Eshelby.

Considere um elipsoide homogêneo e elástico, envolvido por uma matriz infinita também homogênea e elástica (Figura 15).

**Figura 15:** Elipsoide de referência para o problema da inclusão de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

Os campos de tensões e deformações, tanto fora do elipsoide, quanto dentro do mesmo, podem ser obtidos em função de uma perturbação em termos de força ou deslocamentos. Admitindo uma perturbação no sistema em termos de força, tem-se:

$$t^0 = \sigma^0 n \quad (77)$$

Ao perturbar o sistema, as equações da teoria da elasticidade podem ser reescritas em função destas pequenas perturbações, como segue:

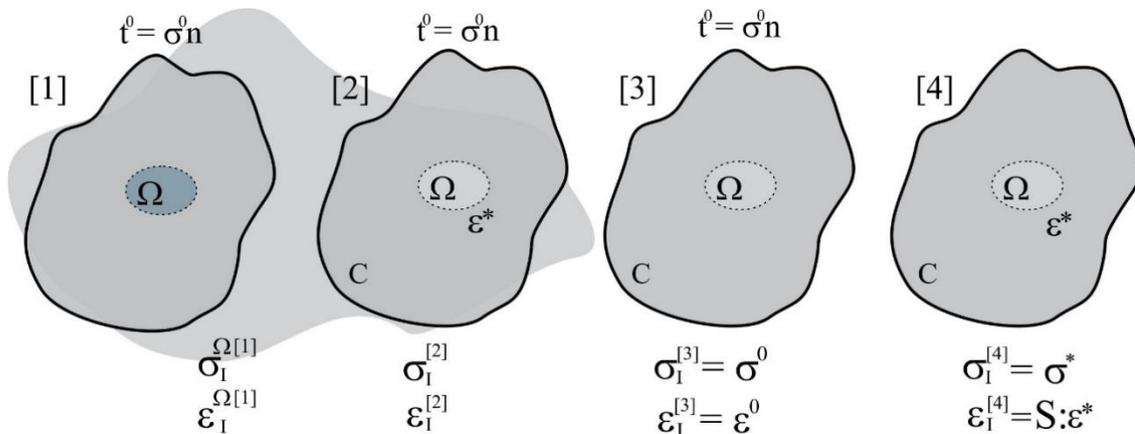
$$\begin{aligned} \sigma(x) &= \sigma^0 + \sigma_p \\ \varepsilon(x) &= \varepsilon^0 + \varepsilon_p \\ u(x) &= u^0 + u_p \end{aligned} \quad (78)$$

Onde o subscrito p, indica o acréscimo devido a perturbação no sistema. Pela teoria da elasticidade, as tensões podem ser escritas em função das deformações e seu material constitutivo. Sendo assim, a Equação (79) pode ser escrita:

$$\sigma^0 + \sigma_p = \mathbb{C}^\Omega(\varepsilon^0 + \varepsilon_p) \quad (79)$$

O problema descrito na Figura 16 pode ser dividido da seguinte forma:

**Figura 16:** Problema da inclusão de Eshelby.



**Fonte:** Autor.

Onde a tensão e deformação na inclusão para o problema equivalente de Eshelby [1], pode ser entendido como sendo:

$$\begin{aligned}
 \sigma_I^{[2]} &= \sigma_I^{[3]} + \sigma_I^{[4]} \\
 \sigma_I^{[2]} &= \sigma^0 + \sigma^* \\
 \varepsilon_I^{[2]} &= \varepsilon_I^{[3]} + \varepsilon_I^{[4]} \\
 \varepsilon_I^{[2]} &= \varepsilon^0 + \mathbb{S}^\Omega \varepsilon^*
 \end{aligned} \tag{80}$$

O campo de deformação elástico, na inclusão em [4] ( $\varepsilon_{I,el}$ ), pode ser escrito da seguinte forma:

$$\varepsilon_{I,el} = \varepsilon_I^{[4]} - \varepsilon^* \tag{81}$$

Sendo a tensão em [4]:

$$\begin{aligned}
 \sigma_I^{[4]} &= \mathbb{C}: \varepsilon_{I,el} \\
 \sigma_I^{[4]} &= \mathbb{C}: [\varepsilon_I^{[4]} - \varepsilon^*] \\
 \sigma^* &= \mathbb{C}: [\varepsilon_I^{[4]} - \varepsilon^*]
 \end{aligned} \tag{82}$$

Sabe-se que o problema descrito na Figura 16 [4], em termos de deformações é exatamente o problema de Eshelby descrito na Equação (69). Podendo agora a Equação (82) ser reescrita na forma:

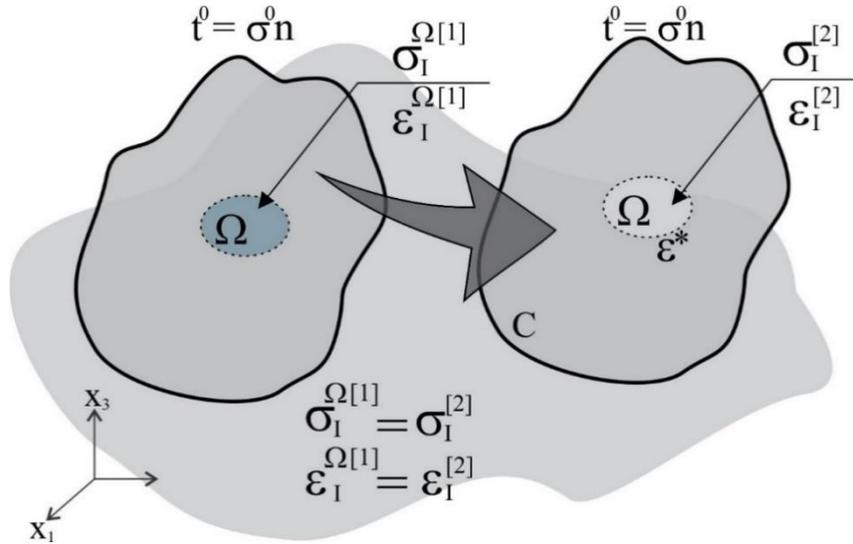
$$\begin{aligned}
 \sigma^* &= \mathbb{C}: (\mathbb{S}^\Omega \varepsilon^* - \varepsilon^*) \\
 \sigma^* &= \mathbb{C}: (\mathbb{S}^\Omega - \mathbb{I}): \varepsilon^*
 \end{aligned} \tag{83}$$

Desenvolvendo as Equações (80) e (83), chega-se a:

$$\sigma_I^{[2]} = \sigma^0 + \mathbb{C}: (\mathbb{S}^\Omega - \mathbb{I}): \varepsilon^* \tag{84}$$

Como hipótese inicial os campos de deformações e tensões na inclusão são iguais em [1] e [2], como pode ser observado na Figura 17:

**Figura 17:** Campo de tensões e deformações iguais após homogeneização.



**Fonte:** Autor.

$$\begin{aligned}
 \sigma_I^{\Omega[1]} &= \mathbb{C}^{\Omega} : \varepsilon_I^{\Omega[1]} \\
 \sigma_I^{\Omega[1]} &= \sigma_I^{[2]} \\
 \sigma_I^{[2]} &= \mathbb{C} : (\varepsilon_I^{[2]} - \varepsilon^*) \\
 \mathbb{C}^{\Omega} : \varepsilon_I^{\Omega[1]} &= \mathbb{C} : \varepsilon_I^{[2]} - \mathbb{C} : \varepsilon^* \\
 \varepsilon^* &= \mathbb{C}^{-1} : [\mathbb{C}^{\Omega} : \varepsilon_I^{\Omega[1]} - \mathbb{C} : \varepsilon_I^{[2]}] \\
 \varepsilon^* &= \mathbb{C}^{-1} : [\mathbb{C} : \varepsilon_I^{[2]} - \mathbb{C}^{\Omega} : \varepsilon_I^{\Omega[1]}] \\
 \varepsilon^* &= \mathbb{C}^{-1} : [\mathbb{C} - \mathbb{C}^{\Omega}] : \varepsilon_I^{[2]}
 \end{aligned} \tag{85}$$

Retorna-se a Equação (80), agora sabendo que  $\varepsilon_I^{\Omega[1]} = \varepsilon_I^{[2]}$

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_I^{\Omega[1]} &= \varepsilon^0 + \mathbb{S}^{\Omega} \varepsilon^* \\
 \varepsilon_I^{\Omega[1]} &= \varepsilon^0 + \mathbb{S}^{\Omega} : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^{\Omega}) : \varepsilon_I^{[2]} \\
 \varepsilon_I^{\Omega[1]} - \mathbb{S}^{\Omega} : \mathbb{C} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^{\Omega}) : \varepsilon_I^{\Omega[1]} &= \varepsilon^0 \\
 \varepsilon_I^{\Omega[1]} &= [\mathbb{I} - \mathbb{S}^{\Omega} : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^{\Omega})]^{-1} : \varepsilon^0
 \end{aligned} \tag{86}$$

Ou seja, a deformação média no compósito, pode ser calculada como sendo:

$$\varepsilon_I^{\Omega[1]} = \mathbb{A}_I : \varepsilon^0 \tag{87}$$

Sendo  $\mathbb{A}_I$ , o tensor de concentração de deformação na inclusão:

$$\mathbb{A}_I = [\mathbb{I} - \mathbb{S}^\Omega: \mathbb{C}^{-1}: (\mathbb{C} - \mathbb{C}^\Omega)]^{-1} \quad (88)$$

De forma semelhante, pode-se encontrar o tensor de concentração de tensão na inclusão, como sendo:

$$\mathbb{B}_I = [\mathbb{I} - \mathbb{S}^\Omega: \mathbb{C}^{-1}: (\mathbb{C} - \mathbb{C}^\Omega)]^{-1}: \mathbb{D} \quad (89)$$

Sendo:

$$\mathbb{D} = \mathbb{C}^{-1} \quad (90)$$

## 2.6. MODELOS DE HOMOGENEIZAÇÃO DE COMPÓSITOS

Como dito anteriormente existem modelos de homogeneização que possuem a finalidade de estabelecer limites, sendo o mais conhecido a Regra das Misturas (Modelo de Reuss e Voigt) (KAW, 2006) e os modelos de Hashin-Shtrikman, (HASHIN e SHTRIKMAN, 1962). Esses modelos não devem ser utilizados para estimar as propriedades homogeneizada dos compósitos, pois possuem diversas hipóteses simplificadoras como o campo de tensões ou deformações constantes, ou a combinação dos dois estados, outra simplificação se dá na não avaliação da interação entre as partículas dentre outras.

Para contornar as limitações dos modelos limites, destacam-se os métodos baseados no problema da inclusão equivalente de Eshelby, sendo o mais conhecido o modelo de Mori-Tanaka (MORI e TANAKA, 1973). Anterior ao trabalho de Mori-Tanaka, R. Hill propôs o modelo “Auto Consistente” (HILL, 1965), foi posteriormente expandido por Christensen e Lo (1979). Destaca-se ainda o trabalho de Benveniste (1987), com o modelo da inclusão equivalente, Hashin (1988) e seu modelo denominado de “Esquema Diferencial” e o modelo “*Double Inclusion*” (LI, et al., 1999).

Kaw (2006) divide os modelos de homogeneização de compósitos em modelos da resistência dos materiais, modelos semiempíricos e modelos da teoria da elasticidade. O presente trabalho adota como referência essa subdivisão proposta por Kaw (2006), adicionando os modelos derivados da formulação micromecânica dos campos médios.

Além dos modelos clássicos da literatura como os já citados, existem técnicas para homogeneização de compósitos que utilizam métodos numéricos e estatísticos para estimativa das propriedades, destacam-se o método dos elementos finitos, o método dos volumes finitos e diversas técnicas de regressões lineares e não-lineares. No Apêndice B pode ser observado outros modelos estabelecidos na literatura.

### **2.6.1. Modelos da Resistência dos Materiais**

#### **2.6.1.1. Regra da Mistura**

Conforme a regra da mistura, cada fase constituinte do compósito contribui para as propriedades efetivas do mesmo, sendo essa contribuição dependente apenas da fração volumétrica dos constituintes.

As formulações da regra da mistura possibilitam apenas estimativas aproximadas, uma vez que a mesma não considera em sua formulação qualquer interação entre as inclusões, bem como ela superestima a rigidez do compósito quando admite deformações iguais nas fases e subestima a mesma rigidez quando admite tensões iguais em todas as fases do compósito.

Ainda assim, com toda limitação, a regra da mistura é o primeiro contato quando se pensa em homogeneização de propriedades de compósitos, não ficando restrito às propriedades mecânicas, também observado para avaliação da condutividade térmica de compósitos, propriedades elétricas como resistência, dentre outras.

De fato, a regra da mistura em todas as suas limitações possui um vasto leque a aplicações. Se generalizar e aplicar as simplificações necessárias, a regra da mistura resume-se a avaliar a união de dois ou mais materiais associados em série e em paralelo.

#### **2.6.1.2. Modelo de Voigt**

O modelo de Voigt é o mais simples dos modelos aplicados a homogeneização de materiais compósitos. A concepção desse modelo, consiste em assumir que as deformações nas fases dos compósitos são uniformes e iguais “*isostrain*”.

Sendo a deformação constante no modelo, pode-se afirmar que:

$$F_c = F_m + F_i \quad (91)$$

Onde  $F_c$  é a força aplicada do compósito,  $F_m$  a força na matriz e  $F_i$  a força nas inclusões. Por definição  $\sigma = \frac{F}{A}$ ,

$$\sigma_c A_c = \sigma_m A_m + \sigma_i A_i \quad (92)$$

Dividindo pela área do compósito, tem-se:

$$\sigma_c = \frac{\sigma_m A_m}{A_c} + \frac{\sigma_i A_i}{A_c} \quad (93)$$

Sendo que  $\frac{A_m}{A_c}$  e  $\frac{A_i}{A_c}$ , respectivamente as frações volumétricas da matriz e das inclusões, denominadas  $f_m$  e  $f_i$ . Substituindo as frações volumétricas na Equação (33), obtém-se:

$$\sigma_c = \sigma_m f_m + \sigma_i f_i \quad (94)$$

Como o estado é de “*isostrain*”, a Equação (34) pode ser reescrita na forma:

$$E_c = E_m f_m + E_i f_i \quad (95)$$

Generalizando para um tensor constitutivo a Equação (96) pode ser escrita como:

$$\mathbb{C}^H = \mathbb{C}_m(1 - f_i) + \mathbb{C}_i f_i \quad (96)$$

A Equação (96) é conhecida como o limite superior de Voigt.

### 2.6.1.3. Modelo de Reuss

O modelo de Reuss, parte do princípio que a ligação inclusão-matriz é excelente, tendo como condição de contorno a tensões iguais ("isostress") (REUSS, 1929), tanto no compósito, na matriz e na inclusão. Nessas condições a deformação no compósito pode ser entendida como:

$$\varepsilon_c = \varepsilon_m f_m + \varepsilon_i f_i \quad (97)$$

Pela lei de Hooke,  $\sigma = E\varepsilon$ :

$$\frac{\sigma_c}{E_c} = \frac{\sigma_m}{E_m} f_m + \frac{\sigma_i}{E_i} f_i \quad (98)$$

Para o modelo de Reuss, admite-se que as tensões são todas iguais, desta forma, a Equação (98) pode ser simplificada por:

$$\frac{1}{E_c} = \frac{f_m}{E_m} + \frac{f_i}{E_i} \quad (99)$$

Explicitando o módulo de elasticidade do compósito, encontra-se:

$$E_c = \frac{E_m E_i}{E_i f_m + E_m f_i} \quad (100)$$

Generalizando para um tensor constitutivo a Equação (100) pode ser escrita como:

$$\mathbb{C}^H = \mathbb{C}_m : \mathbb{C}_i : [\mathbb{C}_i(1 - f_i) + \mathbb{C}_m f_i]^{-1} \quad (101)$$

## 2.6.2. Modelos Semiempíricos

### 2.6.2.1. Hashin-Shtrikman

Sabe-se que os limites propostos por Voigt (1889) e Reuss (1929) considera um estado de tensões ou deformações constantes, o que nem sempre representa as condições reais (HILL, 1965). Ao contrário do proposto por Voigt (1889) e Reuss (1929), Hashin e Shtrikman (1962) considera o compósito como sendo um arranjo de inclusões aleatórias dentro de uma matriz.

De acordo com as equações analíticas de Halpin-Tsae, os módulos de elasticidade volumétrico (matriz e inclusões), podem ser obtidos:

$$k_m = \left[ \frac{E_m}{3(1 - 2\nu_m)} \right] \quad (102)$$

$$k_i = \left[ \frac{E_i}{3(1 - 2\nu_i)} \right] \quad (103)$$

e o módulo cisalhante:

$$G_m = \left[ \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)} \right] \quad (104)$$

$$G_i = \left[ \frac{E_i}{2(1 + \nu_i)} \right] \quad (105)$$

O módulo de elasticidade transversal pode ser calculado como:

$$E_m = \left[ \frac{9k_m G_m}{3k_m + G_m} \right] \quad (106)$$

$$E_i = \left[ \frac{9k_i G_i}{3k_i + G_i} \right] \quad (107)$$

Para o coeficiente de Poisson:

$$\nu_m = \left[ \frac{3k_m - 2G_m}{6k_m + 2G_m} \right] \quad (108)$$

$$\nu_i = \left[ \frac{3k_i - 2G_i}{6k_i + 2G_i} \right] \quad (109)$$

Macroscopicamente, admite-se o compósito isotrópico com duas fases isotrópicas, com as inclusões mais rígidas do que a matriz que o circunda, os módulos de elasticidade e volumétrico podem ser calculados pelas Equações (110) e (111), (HASHIN e SHTRIKMAN, 1962).

$$k^- = k_m + \left[ \frac{f_i}{\left[ \frac{1}{k_i - k_m} + \frac{3(1-f_i)}{3k_m + 4G_m} \right]} \right] \quad (110)$$

$$k^+ = k_i + \left[ \frac{1-f_i}{\left[ \frac{1}{k_m - k_i} + \frac{3f_i}{3k_i + 4G_i} \right]} \right] \quad (111)$$

e o cisalhante:

$$G^- = G_m + \left[ \frac{f_i}{\left[ \frac{1}{G_i - G_m} + \frac{6(1-f_i)(k_m + 2G_m)}{5G_m(3k_m + 4G_m)} \right]} \right] \quad (112)$$

$$G^+ = G_i + \left[ \frac{1-f_i}{\left[ \frac{1}{G_m - G_i} + \frac{6f_i(k_i + 2G_i)}{5G_i(3k_i + 4G_i)} \right]} \right] \quad (113)$$

Para o compósito em seus limites, o módulo de elasticidade pode ser calculado como:

$$E_c^- = \left[ \frac{9k^- G^-}{3k^- + G^-} \right] \quad (114)$$

$$E_c^+ = \left[ \frac{9k^+ G^+}{3k^+ + G^+} \right] \quad (115)$$

De forma semelhante as Equações (116) e (117), para o coeficiente de Poisson:

$$v_c^- = \left[ \frac{3k^- - 2G^-}{6k^- + 2G^-} \right] \quad (116)$$

$$v_c^+ = \left[ \frac{3k^+ - 2G^+}{6k^+ + 2G^+} \right] \quad (117)$$

Os limites de Hashin-Shtrikman trazem informações relevantes, pois não consideram a estimativa de previsão das propriedades do compósito, mas garantem que as propriedades do compósito estarão dentro desses limites.

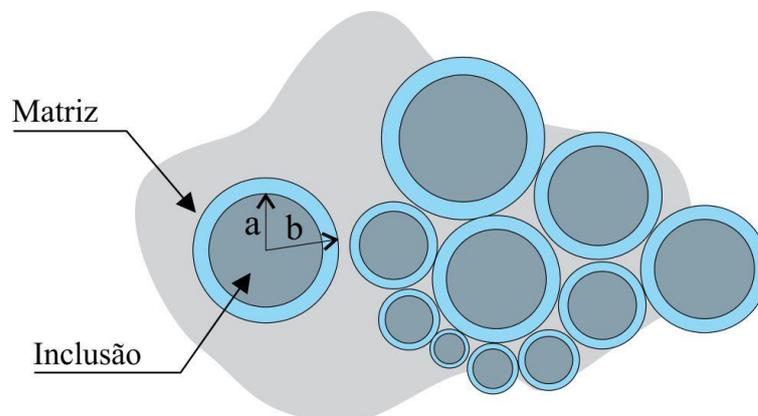
### 2.6.3. Modelos da Teoria da Elasticidade

A abordagem baseada na teoria da elasticidade, foi introduzida para estabelecer o equilíbrio de forças, compatibilidade e a lei de Hooke em três dimensões. Pode-se destacar os modelos CSA (*Composite Sphere Assemblage*), Hashin (1962) e CCA (*Composite Cylinder Assemblage*), Hashin e Rosen (1964), que são fundamentais nos modelos micromecânicos que se baseiam na teoria da elasticidade.

#### 2.6.3.1. Modelo CSA (Composite Sphere Assemblage) e CCA (Composite Cylinder Assemblage)

Hashin em 1962 propôs o modelo composto de esferas para avaliação das propriedades efetivas de materiais compósitos isotrópicos. O modelo em si é fundamentado na teoria da elasticidade e tem como referência a distribuição mostrada na Figura 18.

**Figura 18:** Modelo em esferas/cilindros (CSA/CCA).



**Fonte:** Autor.

A fração volumétrica da inclusão no modelo CSA é dada em função dos raios das esferas concêntricas por:

$$f_i = \left(\frac{a}{b}\right)^3 \quad (118)$$

Sendo o módulo volumétrico homogeneizado ( $K^H$ ) dado por:

$$K^H = \left[ K_m + \frac{f_i(K_i - K_m)(3K_m + 4G_m)}{3K_m + 4G_m + 3(1 - f_i)(K_i - K_m)} \right] \quad (119)$$

Onde  $K_m$  é o módulo volumétrico da matriz,  $K_i$  o módulo volumétrico das inclusões,  $G_m$  o módulo cisalhante da matriz. Mais adiante em 1964, Hashin e Rosen formularam o modelo CCA, que tem como premissa o comportamento transversalmente isotrópico, como estabelecido pelas equações (120, 121, 122, 123).

$$E_L^H = f_i E_i + f_m E_m + \frac{4f_i f_m (v_i - v_m)^2 G_m}{1 + \frac{3f_i G_m}{3K_m + G_m} + \frac{3f_m G_m}{3K_i + G_i}} \quad (120)$$

$$K_T^H = K_m + \frac{G_m}{3} + \frac{f_i}{\left[ \frac{3}{3K_i + G_i - 3K_m - G_m} \right] + \left[ \frac{3f_i}{3K_m + 4G_m} \right]} \quad (121)$$

$$G_L^H = \frac{(f_i G_i + f_m G_m + G_i) G_m}{f_m G_i + f_i G_m + G_m} \quad (122)$$

$$v_{LT}^H = f_i E_i + f_m E_m + \frac{3f_i f_m (v_i - v_m) G_m \left[ \frac{f_i G_m}{3K_m + G_m} + \frac{f_m G_m}{3K_i + G_i} \right]}{\left[ \frac{3}{3K_i + G_i - 3K_m - G_m} \right] + \left[ \frac{3f_i}{3K_m + 4G_m} \right]} \quad (123)$$

Sendo os subscritos  $L$  e  $T$ , respectivamente longitudinal e transversal. Esses dois modelos proposto por Hashin (1962) e Hashin e Rosen (1964) serviram para desenvolvimento do modelo de três fases de Christensen e Lo (1979).

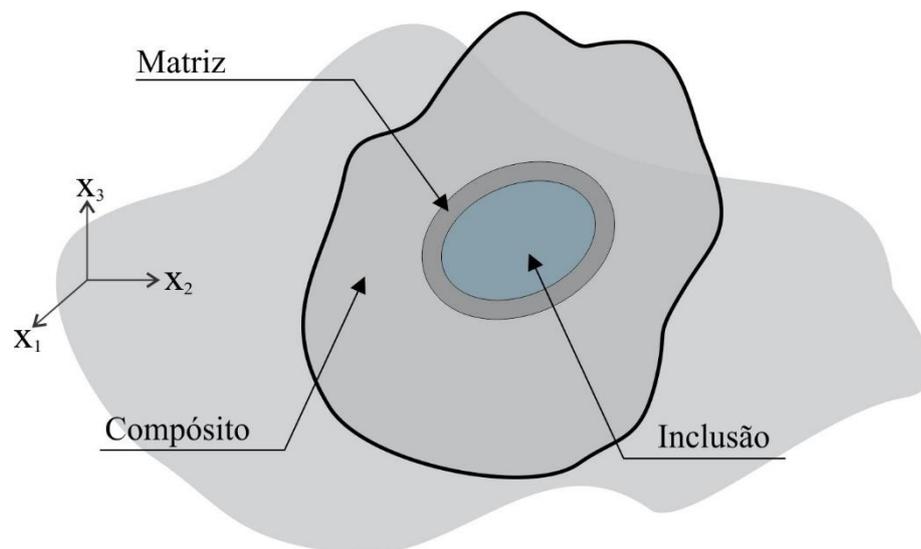
### 2.6.3.2. Modelo de Três-Fases (Auto Consistente Generalizado)

Desenvolvido por Christensen e Lo (1979), o modelo de três-fases, também conhecido como auto consistente generalizado, considera uma inclusão equivalente numa matriz que posteriormente encontra-se numa terceira camada do compósito (Figura 19).

A estratégia proposta por Christensen e Lo (1979) permite o tratamento de uma terceira fase do compósito, ainda que essencialmente o modelo possa ser considerado de duas fases, deduzido para inclusões esféricas e cilíndricas. Cabe notar que o modelo de Christensen e Lo (1979) não recorre à teoria micromecânica dos campos médios e sim da teoria da elasticidade, não tendo a necessidade de construção do tensor de Eshelby em sua formulação. Observa-se como ideia fundamental do modelo que a energia de deformação do sistema de três fases é igual à energia do sistema homogeneizado.

A Figura 19 ilustra o processo de homogeneização para o modelo auto consistente generalizado, onde  $G^*$  é o módulo cisalhante efetivo (homogeneizado) que pode ser considerado isotrópico ou transversalmente isotrópico na sua concepção inicial. Essa premissa afeta a segunda parte da formulação do modelo, que considerará um dos modelos supracitados (CSA ou CCA) para avaliação das constantes não calculadas do problema.

**Figura 19:** Processo de homogeneização do modelo Auto Consistente Generalizado.



**Fonte:** Autor.

A solução do modelo auto consistente generalizado perpassa por resolver uma equação do segundo grau, na forma:

$$A \left[ \frac{G^H}{G_m} \right]^2 + B \left[ \frac{G^H}{G_m} \right] + C = 0 \quad (124)$$

Sendo as constantes da equação supracitada,  $A$ ,  $B$  e  $C$ , dependentes das propriedades elásticas da matriz e inclusão, da fração volumétrica e da geometria da inclusão. Para inclusão esférica, as constantes são definidas pelas Equações (125), (126) e (127):

$$\begin{aligned}
 A = & 8 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (4 - 5v_m) \eta_1 f_i \left( \frac{10}{3} \right) - 2 \left[ 63 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 + 2\eta_1 \eta_3 \right] f_i \left( \frac{7}{3} \right) \\
 & + 252 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 f_i \left( \frac{5}{3} \right) \\
 & - 50 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (7 - 12v_m + 8v_m^2) \eta_2 f_i \\
 & + 4(7 - 10v_m) \eta_2 \eta_3
 \end{aligned} \tag{125}$$

$$\begin{aligned}
 B = & -2 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (1 - 5v_m) \eta_1 f_i \left( \frac{10}{3} \right) \\
 & + 2 \left[ 63 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 + 2\eta_1 \eta_3 \right] f_i \left( \frac{7}{3} \right) \\
 & - 252 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 f_i \left( \frac{5}{3} \right) - 75 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (3 - v_m) v_m \eta_2 f_i \\
 & + 1,5(15v_m - 7) \eta_2 \eta_3
 \end{aligned} \tag{126}$$

$$\begin{aligned}
 C = & 4 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (5v_m - 7) \eta_1 f_i \left( \frac{10}{3} \right) - 2 \left[ 63 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 + 2\eta_1 \eta_3 \right] f_i \left( \frac{7}{3} \right) \\
 & + 252 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) \eta_2 f_i \left( \frac{5}{3} \right) + 25 \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (v_m^2 - 7) \eta_2 f_i \\
 & + (7 + 5v_m) \eta_2 \eta_3
 \end{aligned} \tag{127}$$

Os parâmetros auxiliares  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  e  $\eta_3$  podem ser calculados como segue:

$$\eta_1 = \left( \frac{G_i}{G_m - 1} \right) (49 - 50v_i v_m) + 35 \left( \frac{G_i}{G_m} \right) (v_i - 2v_m) + 35(2v_i - v_m) \tag{128}$$

$$\eta_2 = 5v_i \left( \frac{G_i}{G_m - 8} \right) + 7 \left( \frac{G_i}{G_m + 4} \right) \tag{129}$$

$$\eta_3 = \left( \frac{G_i}{G_m} \right) (8 - 10v_m) + (7 - 5v_m) \tag{130}$$

A solução positiva da equação quadrática mostrada na Equação (124), retorna o módulo cisalhante da homogeneização, uma vez que se conhece como parâmetro de entrada o módulo cisalhante da matriz. Para encontrar o módulo volumétrico utiliza-se a Equação (119), caso o

compósito efetivo seja transversalmente isotrópico recorre-se às equações do CCA (*Composite Cylinder Assemblage*).

Uma vez encontrados os módulos cisalhantes e volumétricos podem-se retornar para o módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson, como mostram as Equações (131) e (132):

$$E^H = \left[ \frac{9K^H G^H}{G^H + 3K^H} \right] \quad (131)$$

$$\nu^H = \left[ \frac{3K^H - 2G^H}{2(G^H + 3K^H)} \right] \quad (132)$$

Para inclusões cilíndricas, deve-se recorrer ao trabalho de Christensen e Lo (1979).

#### 2.6.4. Modelos da Micromecânica dos Campos Médios

##### 2.6.4.1. Modelo da Concentração Diluída

O modelo da concentração diluída, também é conhecido na literatura como “*Dilute Suspension Model*”, tem como premissas básicas:

Considera-se a fração volumétrica das heterogeneidades, levando-se em conta sua geometria, porém, despreza-se a interação entre as heterogeneidades e sua distribuição, limitando-se a aplicação em compósitos com baixa concentração de inclusões.

Para se determinar o tensor do compósito utilizando a estratégia proposta pelo modelo da concentração diluída, utiliza-se como equação de recorrência:

$$\mathbb{C}^H = \mathbb{C}_m + f_i(\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m):\mathbb{A}_i \quad (133)$$

De uma forma simplificada, o modelo da concentração diluída é um caso particular do modelo Auto Consistente, onde o tensor de concentração  $\mathbb{A}_i$  é calculado como:

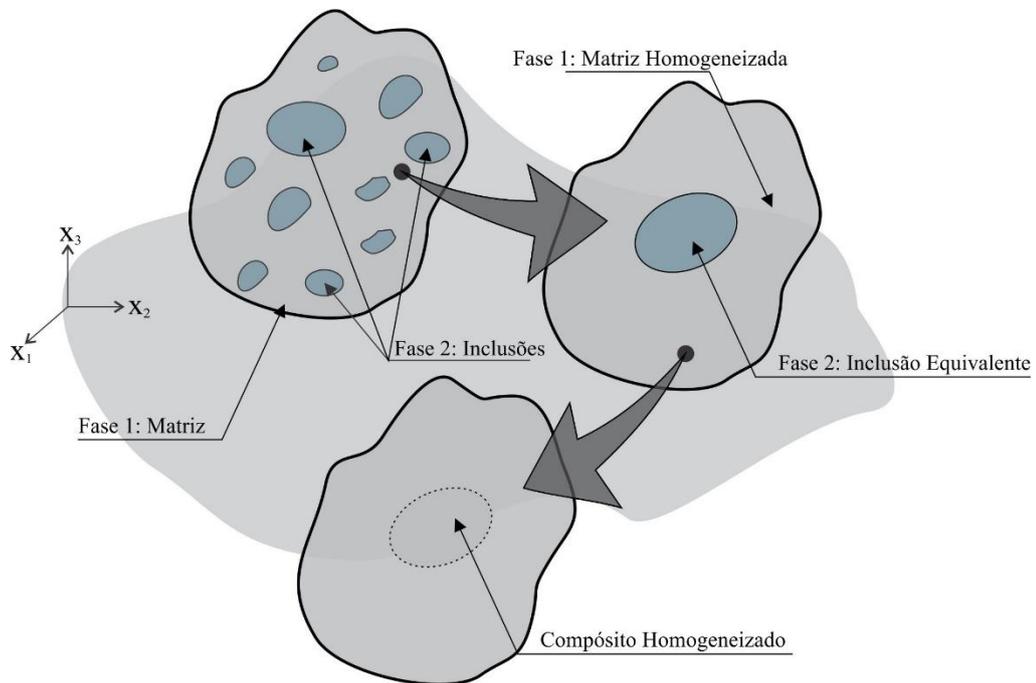
$$A_i = [I - S : C_m : (C_m - C_i)] \quad (134)$$

Nota-se que a equação do modelo é totalmente explícita e simples de se obter o resultado da homogeneização do compósito.

#### 2.6.4.2. Modelo Auto Consistente

O modelo Auto Consistente de Hill (1965) considera que o compósito é composto por várias inclusões, entretanto, no processo de homogeneização considera-se apenas uma inclusão representativa em termos da fração volumétrica envolvida por uma matriz, que posteriormente será homogeneizada considerando o método da inclusão equivalente de Eshelby. A Figura 20 ilustra bem os passos de homogeneização do modelo Auto Consistente.

**Figura 20:** Processo de homogeneização do modelo Auto Consistente.



**Fonte:** Autor.

O processo de homogeneização leva a uma equação implícita, uma vez que o princípio é substituir a matriz constitutiva do material por uma matriz constitutiva homogeneizada (COSTA, 2017). O tensor de concentração para o material homogeneizado pode ser obtido da Equação (135):

$$A_i = [I - S^H : C^{H-1} : (C^H - C_i)]^{-1} \quad (135)$$

Onde o sobrescrito H indica a homogeneização. A equação de recorrência para resolução do problema de Hill recai em uma equação implícita na forma:

$$\mathbb{C}^H = \mathbb{C}_M + f_i(\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m): \mathbb{A}_i \quad (136)$$

Como estratégia de resolução numérica do problema, tem-se no passo n+1:

$$\mathbb{C}^H_{n+1} = \mathbb{C}_m + f_i(\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m): [\mathbb{I} - \mathbb{S}^H_n: \mathbb{C}^{H^{-1}}_n: (\mathbb{C}^H_n - \mathbb{C}_i)]^{-1} \quad (137)$$

Adotando-se para iniciar as interações n=1:

$$\begin{aligned} \mathbb{S}^H &= \mathbb{S} \\ \mathbb{C}^H &= \mathbb{C}_m \end{aligned} \quad (138)$$

Por fim, adota-se como critério de convergência para o modelo Auto Consistente a Equação (139):

$$\frac{\|\mathbb{C}^H_n - \mathbb{C}^H_{n-1}\|}{\|\mathbb{C}^H_{n-1}\|} < \delta \quad (139)$$

Onde  $\delta$  é a tolerância adotada para o modelo.

#### 2.6.4.3. Modelo Esquema Diferencial

O modelo “Esquema Diferencial” (HASHIN, 1988) tem em sua concepção básica a mesma ideia imbuída no modelo Auto Consistente de Hill (1965) diferenciando-se o incremento da interação que é conduzida pela variação da fração volumétrica da inclusão.

$$\mathbb{C}^H_{n+1} = \mathbb{C}^H_n + \frac{\Delta f_i}{1 - f_i} (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}^H_n): \mathbb{A}_i^D \quad (140)$$

Onde  $A_i^D$  é função da fração volumétrica da inclusão e deve ser atualizado a cada passo pela Equação (141).

$$A_i^D = [\mathbb{I} - S^H_n : C^H_n^{-1} : (C^H_n - C_i)]^{-1} \quad (141)$$

Como estratégia inicial de interação pode-se utilizar a Equação (142).

$$\begin{aligned} S^H &= S \\ C^H_n &= C_m \end{aligned} \quad (142)$$

#### 2.6.4.4. Modelo de Mori-Tanaka

Conhecido por lema de Mori-Tanaka, o modelo desenvolvido em 1972, mostra que a deformação média em uma matriz elipsoidal circunscrita em uma inclusão de mesma geometria é nula quando se impõe um campo de deformação uniforme, semelhante à ideia de Eshelby (COSTA, 2017).

Como descrito no trabalho de Costa (2017), o modelo de Mori-Tanaka pode ser entendido em duas fases distintas, onde na primeira as inclusões são substituídas por uma única inclusão com a mesma fração volumétrica inicial das inclusões separadas, posteriormente aplica-se o método da inclusão equivalente de Eshelby para resolver o problema.

A pequena diferença para o modelo Auto Consistente está no fato de não se homogeneizar o passo intermediário, onde a matriz envolve a inclusão equivalente, sendo a mesma detentora das características iniciais da matriz.

A equação de recorrência do modelo de Mori-Tanaka, pode ser visto abaixo:

$$\begin{aligned} C^H &= C_m : \{ \mathbb{I} + f_i (S - \mathbb{I}) : [(C_m - C_i)^{-1} : C_m - S]^{-1} \} : \{ \mathbb{I} \\ &+ f_i S : [(C_m - C_i)^{-1} : C_m - S]^{-1} \}^{-1} \end{aligned} \quad (143)$$

#### 2.6.4.5. Modelo da Inclusão Equivalente - Tensão Média

O modelo da inclusão equivalente em tensões médias (BENVENISTE, 1987) foi desenvolvido baseado no modelo de Mori-Tanaka. Denominado em inglês pela sigla “*EIAS – Equivalent Inclusion – Average Stress*”, Benveniste propõe introduzir no modelo de Mori-Tanaka um tensor de concentração em função do tensor de concentração da inclusão, passando o mesmo a influenciar a homogeneização do compósito.

O modelo ainda se baseia em um sistema com várias inclusões, que é convertido em um sistema de uma única inclusão representativa, contudo, adiciona-se o efeito das interações no campo de deformações do sistema.

Benveniste (1987), propôs como equação de recorrência para o modelo a Equação (144):

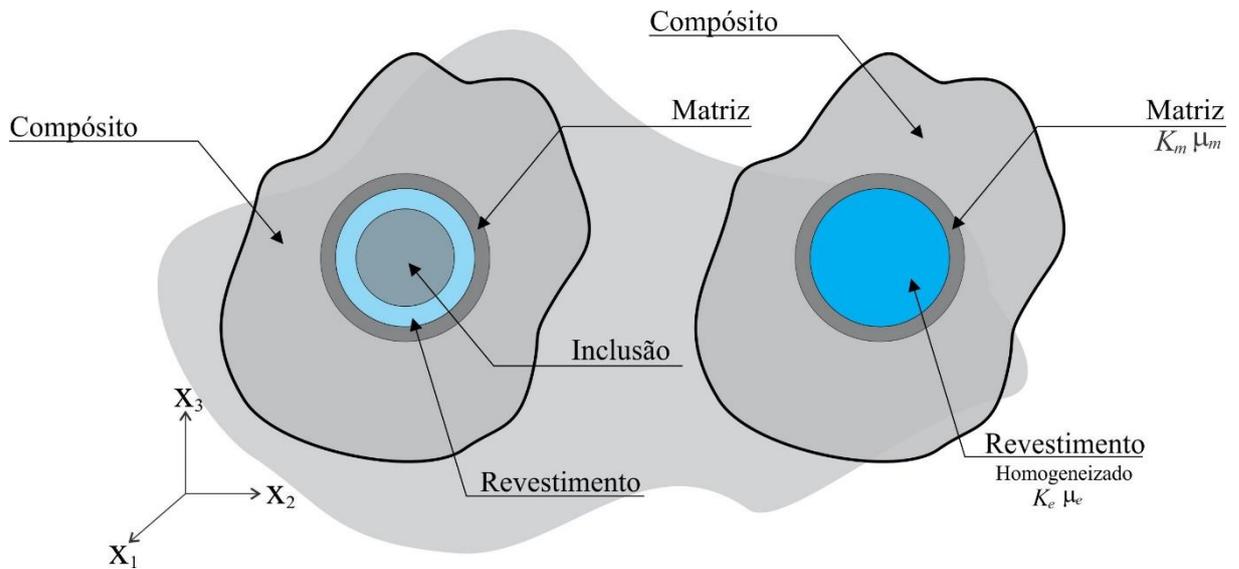
$$\mathbb{C}^H = [f_i \mathbb{C}_i \mathbb{A}_i + (1 - f_i) \mathbb{C}_m] : \mathbb{A}_m \quad (144)$$

Onde o tensor de concentração  $\mathbb{A}_i$  pode ser calculado segundo a Equação (134) e o tensor de concentração  $\mathbb{A}_m$  pode ser calculado como na Equação (145).

$$\mathbb{A}_m = [f_i \mathbb{A}_i + (1 - f_i) \mathbb{I}]^{-1} \quad (145)$$

#### 2.6.4.6. Modelo de Quatro-Fases

O modelo de três-fases, proposto por Christensen e Lo (1979) essencialmente avalia apenas duas fases, uma vez que a terceira fase já é o compósito. Para contornar essa limitação e efetivamente avaliar uma terceira fase, em 1999, Li, et al. (1999) desenvolveu o modelo de quatro-fases, que tem como base o modelo de três-fases, associado a um modelo analítico, “*Composite Sphere Assemblage (CSA)*” (HASHIN, 1962) ou “*Composite Cylinder Assemblage (CCA)*” (HASHIN e ROSEN, 1964) (Figura 21).

**Figura 21:** Processo de homogeneização do modelo de quatro-fases.

**Fonte:** Autor.

O primeiro passo consiste em relativizar a fração volumétrica de cada fase como mostra as Equações (146) e (148):

$$f_i^c = \frac{f_i}{f_i + f_r} \quad (146)$$

$$f_r^c = \frac{f_r}{f_i + f_r} \quad (147)$$

Onde  $f_i^c$ ,  $f_r^c$ , são respectivamente as frações volumétricas das inclusões e do revestimento, sendo o sobrescrito [c], indicando a correção das frações.

Sabe ainda que:

$$f_m + f_i + f_r = 1 \quad (148)$$

O procedimento simplificado consiste em homogeneizar o revestimento e a inclusão, gerando uma nova inclusão denominada de revestimento homogeneizado, como mostrado na

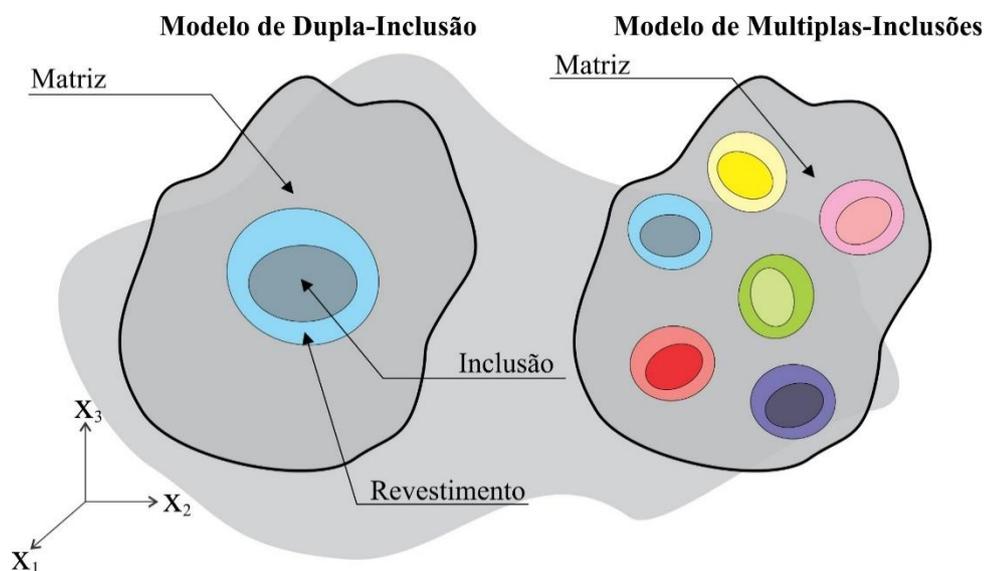
Figura 21. Pode-se utilizar o procedimento descrito para o modelo de três fases e depois aplicar a homogeneização analítica proposto por Hashin (1962).

#### 2.6.4.7. Modelo de Multi-Fases

O modelo de múltiplas fases, foi desenvolvido recentemente por Shi et al. (2020), e baseia sua formulação no trabalho de dupla inclusão de Hori e Nemat-Nasser, (1993). O modelo proposto por Shi, et al., (2020) leva em consideração a montagem do tensor de Eshelby para todas as camadas de materiais existentes na modelagem.

Considere-se um compósito com múltiplas fases, com a fração volumétrica da matriz sendo determinada por  $f_m$ , a fração volumétrica da inclusão por  $f_i$  e a camada intermediária (revestimento) definida  $f_r$ . O modelo de dupla-inclusão e de múltiplas-inclusões podem ser entendidos pela Figura 22.

**Figura 22:** Esquema dos modelos de dupla-inclusão e múltiplas-inclusões.



**Fonte:** Autor.

O balanceamento das frações volumétricas quando o sistema possui múltiplas inclusões deve satisfazer a equação:

$$f_m + \sum_{1}^n (f_i + f_r) = 1 \quad (149)$$

Quando o sistema possuir três fases distintas, a Equação (149) fica idêntica à Equação (148). Os tensores constitutivos da matriz, inclusão e revestimento são representados respectivamente

por:  $\mathbb{C}_m, \mathbb{C}_i, \mathbb{C}_r$ . Segundo Shi, et al., (2020), o tensor de concentração de deformação para três fases pode ser expresso por:

$$\mathbb{A}_i^D = I + \mathbb{S}_i : \Phi_i + \Delta\mathbb{S} : \Phi_r \quad (150)$$

para inclusão, e:

$$\mathbb{A}_r^D = I + \mathbb{S}_r : \Phi_r + \frac{f_i}{f_r} \Delta\mathbb{S} : (\Phi_i - \Phi_r) \quad (151)$$

para o revestimento, sendo  $\mathbb{S}_i$ , o tensor de Eshelby montado para inclusão, e  $\mathbb{S}_r$  o tensor de Eshelby montado com as propriedades do revestimento,  $\Delta\mathbb{S}$  é a diferença entre esses tensores na forma:

$$\Delta\mathbb{S} = \mathbb{S}_i - \mathbb{S}_r \quad (152)$$

$\Phi_i$  e  $\Phi_r$  são dois tensores de quarta ordem que são obtidos pelas equações:

$$\Phi_i = - \left[ (\mathbb{S}_i + \mathbb{A}_i) + \Delta\mathbb{S} : \left( \mathbb{S}_i + \mathbb{A}_i - \frac{f_i}{f_r} \Delta\mathbb{S} \right) : \left( \mathbb{S}_r + \mathbb{A}_r - \frac{f_i}{f_i} \Delta\mathbb{S} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (153)$$

$$\Phi_r = - \left[ \Delta\mathbb{S} + (\mathbb{S}_i + \mathbb{A}_i) : \left( \mathbb{S}_i + \mathbb{A}_i - \frac{f_i}{f_r} \Delta\mathbb{S} \right)^{-1} : \left( \mathbb{S}_r + \mathbb{A}_r - \frac{f_i}{f_i} \Delta\mathbb{S} \right) \right]^{-1} \quad (154)$$

Onde:

$$\mathbb{A}_i = (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m)^{-1} : \mathbb{C}_m \quad (155)$$

$$\mathbb{A}_r = (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_m)^{-1} : \mathbb{C}_m \quad (156)$$

Desta forma, o tensor constitutivo homogeneizado pode ser obtido por:

$$\mathbb{C}^H = \mathbb{C}_m + [f_r (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_m) : \mathbb{A}_r^D + f_i (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) : \mathbb{A}_i^D] \quad (157)$$

Todo processo de homogeneização de compósito encontrados na literatura perpassam pelo conhecimento de duas ou mais fases e suas respectivas frações volumétricas no elemento de volume representativo. A Tabela 2 ilustra as características de cada modelos.

**Tabela 2:** Características dos modelos de homogeneização.

| <b>Modelos</b>                       | <b>Características</b>   |
|--------------------------------------|--|
| <b>Reuss</b>                         | Tem como limitação a imposição de um estado de tensão constante, além de não avaliar interação entre as inclusões  |
| <b>Voigt</b>                         | Tem como limitação a imposição de um estado de deformação constante, além de não avaliar a interação entre as inclusões  |
| <b>Hashin</b>                        | Não estima campos de tensões e deformações constantes, ao invés disso estima campos auxiliares representando uma variação da solução de referência. Quando se maximiza a formulação da energia obtida encontra-se o limite superior e quando se minimiza encontra-se o limite inferior |
| <b>Mori-Tanaka</b>                   | É o modelo mais utilizado para homogeneização de compósitos, considera a interação entre as partículas e pode ser utilizado com frações volumétricas maiores   |
| <b>Concentração Diluída</b>          | Está limitado pela quantidade de fração volumétrica de inclusão no processo de homogeneização, só podendo ser aplicado a baixas taxas de inclusões   |
| <b>Auto Consistente</b>              | Avalia interação entre as partículas, contudo não consegue diferenciar matriz e inclusão na análise, é um método implícito necessitando de uma estimativa inicial  |
| <b>Auto Consistente Generalizado</b> | Baseado na teoria da elasticidade, consegue avaliar interação entre as inclusões sendo desenvolvido como modelo de três fases essencialmente só avalia duas fases. Leva em consideração a interação inclusão-matriz e entre inclusões  |
| <b>Esquema Diferencial</b>           | Diferente dos demais métodos que pressupõe uma inclusão imersa em uma matriz infinita, o esquema diferencial trabalha com doses incrementais de inclusões  |

**Fonte:** autor.

Quando se trata o concreto como compósito, o processo de homogeneização necessita ser multiescala e multifásico além do entendimento de qual modelo pode ser empregado. Mais adiante propõe-se um estudo para avaliar o emprego desses modelos na análise do concreto.

### 3. ESTUDOS DE CASOS

Esse capítulo contempla estudos que buscam validar as proposições expostas nos objetivos da tese. O primeiro estudo, pretende demonstrar que modelos micromecânicos podem ser utilizados para avaliar as propriedades do concreto. Nesse estudo optou-se por uma modelagem multiescala e múltiplos modelos, estudando o erro associado sequência de homogeneização empregada.

Uma vez identificados os modelos micromecânicos que podem ser aplicados a modelagem do concreto inicia-se o segundo estudo de caso. Nesse estudo, propõe-se verificar a maximização das fases utilizando o acoplamento entre modelos de otimização de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios.

Na etapa seguinte avalia-se a influência das zonas de transições geradas pela inclusão dos agregados na modelagem multiescala e por fim propõe-se um estudo geométrico dessas zonas de transições.

O ambiente computacional em que os estudos foram desenvolvidos foi construído com uma arquitetura orientada a objetos na forma de *framework* tomando partido dos pilares dessa estratégia, a saber: abstração, encapsulamento, herança e polimorfismo. Para um melhor entendimento computacional do problema, ao final de cada estudo de caso se expõe o diagrama de segmentos de construção dos objetos computacionais no *framework*.

#### 3.1. HOMOGENEIZAÇÃO MULTIESCALA DO CONCRETO

Este estudo de caso considera o trabalho recente de Li, et al. (2019), que contempla a avaliação por nanoindentação das zonas de transição interfacial em conjunto com modelagem micromecânica. A proposta está diretamente relacionada à construção do compósito (multiescala), bem como avaliar o erro ao se negligenciar algumas fases na modelagem.

### 3.1.1. Metodologia

O procedimento de homogeneização adotado neste estudo de caso considera as etapas de construção do material. Para se definir as propriedades homogeneizadas do concreto, consideram-se os estágios de constituição do compósito mostrado na

Desta maneira, cada passo recebe como entrada uma matriz mais uma inclusão randômica e fornece como saída o material homogeneizado. As propriedades elásticas dos materiais utilizados para a construção do compósito estão definidas na Tabela 3. Estes parâmetros foram propostos por Li, et al. (2019). A ZTI-1 (zona de transição interfacial) é a região formada pelos agregados graúdos, enquanto a ZTI-2 (zona de transição interfacial) é a região formada pela imersão dos agregados miúdos na pasta de cimento.

**Tabela 3:** Propriedade das fases do compósito.

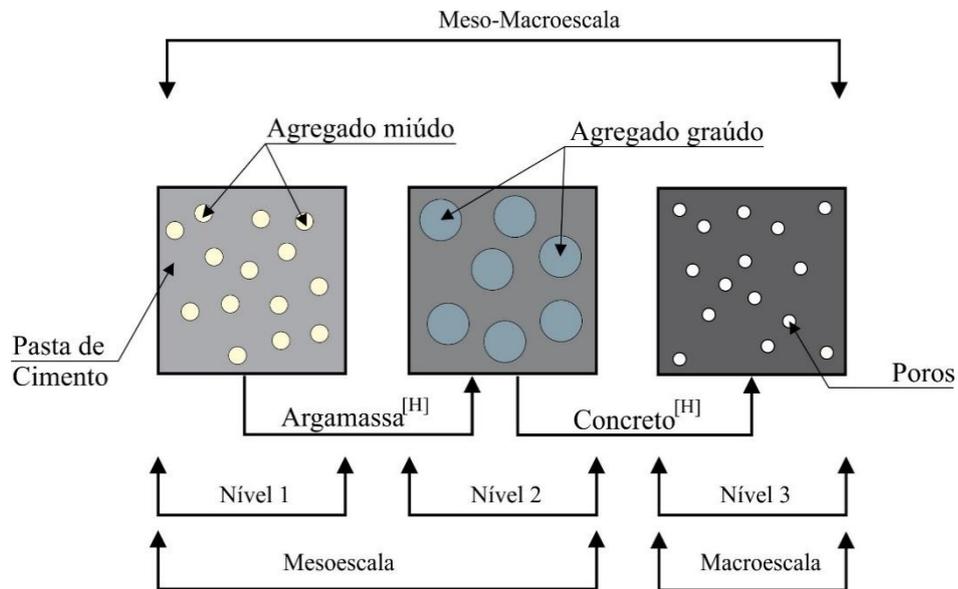
| <b>Material</b>         | <b>Módulo de Elasticidade (GPa)</b> | <b>Coefficiente de Poisson</b> | <b>Fração volumétrica (%)</b> |
|-------------------------|-------------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|
| <b>Pasta de cimento</b> | 21.34                               | 0.25                           | 15.40                         |
| <b>Agregado graúdo</b>  | 51.31                               | 0.15                           | 40.30                         |
| <b>ZTI-1</b>            | 10.17                               | 0.30                           | 2.30                          |
| <b>Agregado miúdo</b>   | 77.60                               | 0.15                           | 26.90                         |
| <b>ZTI-2</b>            | 12.70                               | 0.25                           | 15.10                         |
| <b>Concreto</b>         | 34.50                               | -                              | -                             |

**Fonte:** adaptado de (LI, et al., 2019).

Para homogeneização do concreto, utiliza-se duas formas distintas de construção do compósito. Em todas as análises, adota-se a abordagem utilizada por Li, et al. (2019) com a consideração de uma fração volumétrica de 2.42% de poros (material sem rigidez) no último nível de homogeneização.

Na primeira análise, o compósito é tratado de forma simplificada, desprezando a presença da zona de transição, e calculam-se as propriedades efetivas com modelos de duas fases, como mostrado na Figura 23.

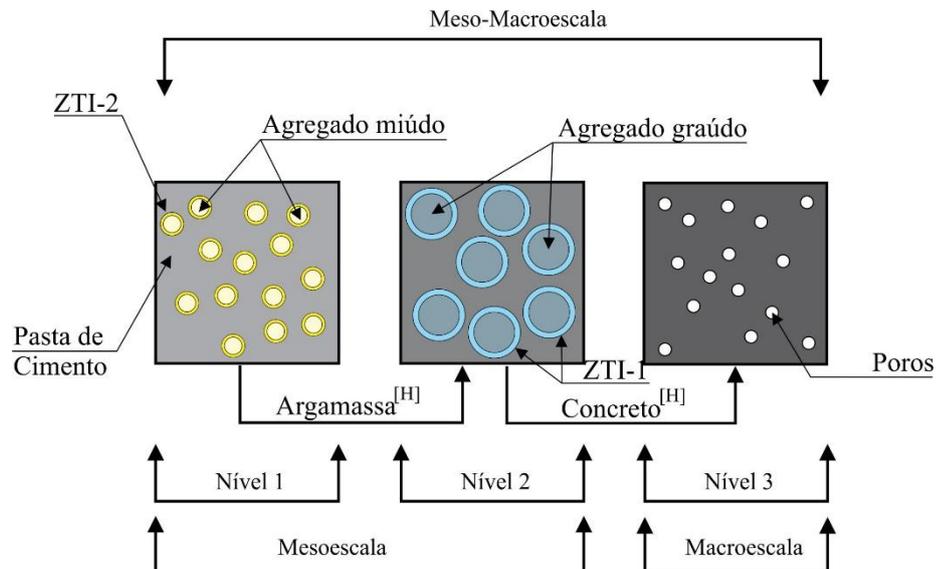
**Figura 23:** Homogeneização em três níveis sem consideração da zona de transição.



**Fonte:** Autor.

Na segunda análise são utilizados os modelos de quatro fases e múltiplas fases, propostos por Li, et al. (2019) e Shi, et al. (2020) incluindo mais duas fases na construção do compósito. A (Figura 24) ilustra esta aplicação em três níveis de homogeneização.

**Figura 24:** Homogeneização em três níveis considerando a zona de transição e modelos de três e múltiplas fases.

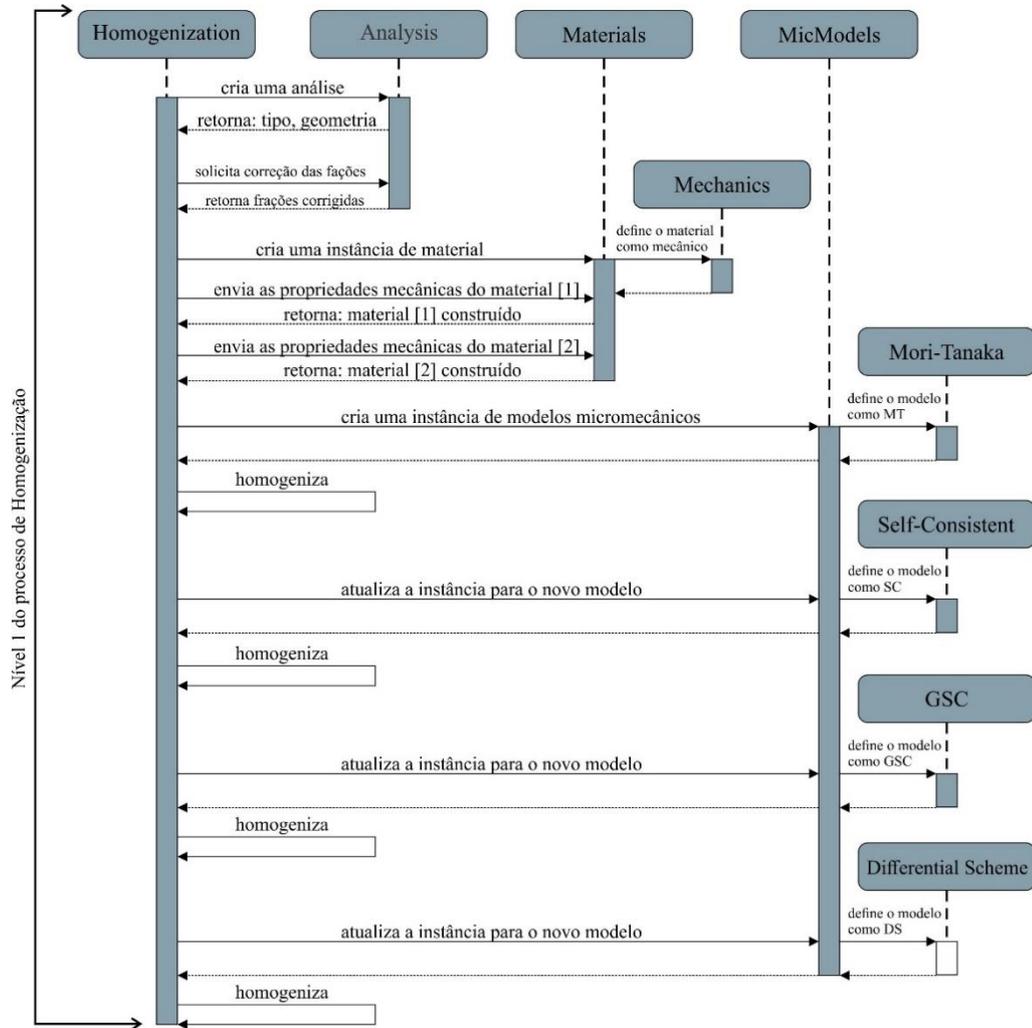


**Fonte:** Autor.

Os estudos de caso foram desenvolvidos utilizando o *framework* mostrado no Apêndice C. O *framework* está subdividido em três módulos: o de homogeneização, o de empacotamento e o

adicional que pode ser estendido para utilizar as funcionalidades dos demais módulos. Nesse estudo de caso utiliza-se apenas o módulo de homogeneização como sugere o diagrama de segmentos da Figura 25.

**Figura 25:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise sem ZTI (Nível 1).



**Fonte:** Autor.

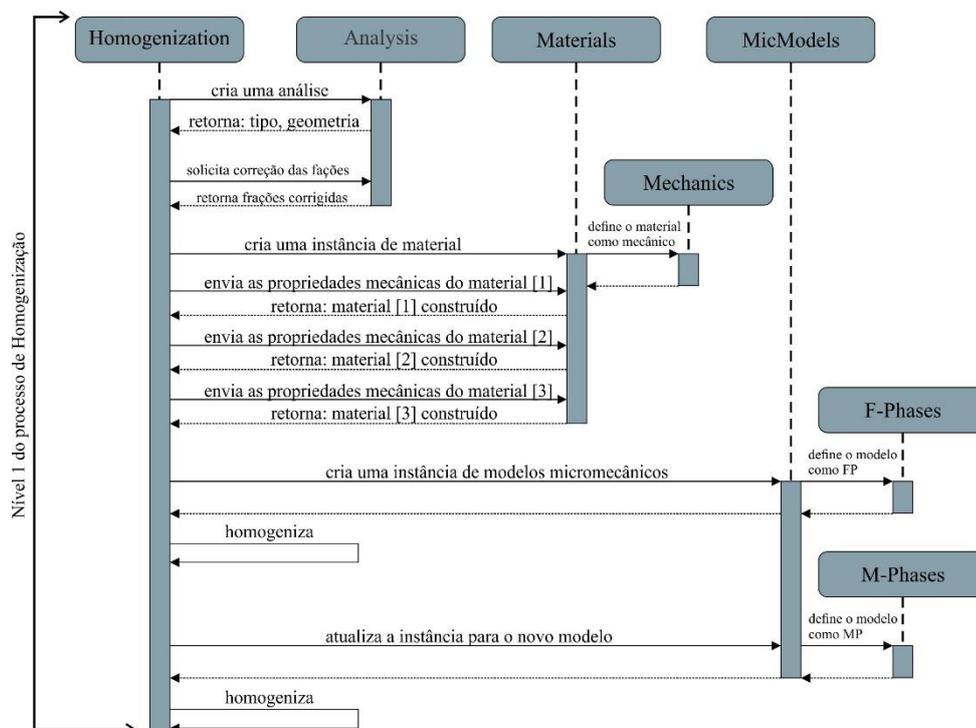
O processo de homogeneização é iniciado pela classe principal [homogenization] responsável por gerir todo processo. A partir da criação do objeto principal, cria-se os demais objetos que serão necessários para o problema, nesse caso em especial os objetos de: Análise, Materiais e Modelos Micromecânicos.

O segmento descrito na Figura 26 é repetido para os níveis seguintes, 2 e 3, atualizando as propriedades dos materiais aonde irá se utilizar as propriedades da análise anterior, novamente

corrigindo as frações e repetindo todo procedimento descrito no diagrama de segmentos. Uma descrição mais detalhada das classes do *framework* pode ser observada no Apêndice C.

Para modelagem multifásica micromecânica onde a zona de transição interfacial é considerada, o diagrama de segmentos segue a mesma estratégia, com a alteração na criação de um novo material referente a interface.

**Figura 26:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise com ZTI (Nível 1).



**Fonte:** Autor.

Novamente optou-se por explicitar apenas o nível 1 da modelagem, uma vez que os níveis seguintes seguem a mesma estratégia da arquitetura. Cabe salientar que nenhum objeto extra precisa ser criado, sendo apenas atualizados as propriedades e tipo de modelos a cada nível, tomando partido do reuso de código, polimorfia e hierarquia que são paradigmas da orientação a objetos.

### 3.1.2. Análise crítica dos resultados

Em seu trabalho Li, et al. (2019) utilizou para avaliação das propriedades mecânicas, ensaios de nanoindentação, ensaios de compressão em máquina universal com controle de

carregamento, além da avaliação da porosidade do concreto obtida por uma técnica de fluorescência introduzida no concreto e avaliada por radiação ultra violeta, sendo os poros identificados pela diferença de luz emitida e captada pela câmera do experimento. Para avaliação das frações volumétricas foram utilizados métodos simples de dosagem além da aplicação do modelo de Lu e Torquato (LU, et al., 1992) já descrito nesse trabalho.

De fato, existem muitos fatores que influenciam na zona de transição do concreto, desde o fator água-cimento, a geometria do agregado, o processo de cura, a idade, o efeito parede. É importante notar que existem diversos trabalhos na literatura que avaliam justamente essa fase do concreto, destacando os trabalhos de (GARBOCZI e BENTZ, 1997), (PROKOPSKIA e HALBINIAKB, 2000), (LIAO, et al., 2004), (SCRIVENER, et al., 2004), (BARHDADI, et al., 2007), (LI, et al., 2019), (SHARMA e BISHNOI, 2020), (ZHANG e SUN, 2019), etc.

No trabalho de Prokopskia e Halbiniakb (2000) é estimado que a espessura da zona de transição para concreto convencionais varia entre  $40\mu m$  a  $50\mu m$ , explicitando que a mesma tem fator de importância alta na resistência do concreto, já Liao, et al. (2004) cita que utilizando microscopia eletrônica de varredura foi possível a observação da ZTI variando de  $20\mu m$  a  $100\mu m$  identificando essa como uma região mais porosa.

Scrivener, et al. (2004) complementa os trabalhos de (LIAO, et al., 2004) e (PROKOPSKIA e HALBINIAKB, 2000) adicionando mais variáveis a problemática como idade do compósito, fator água-cimento, cura, efeito parede dentre outros. Scrivener estima uma espessura variando de 0 a  $50\mu m$ .

Barhdadi, et al. (2007) acompanha o trabalho de Scrivener estimando a ZTI entre  $15\mu m$  a  $40\mu m$ . Mais recente os valores estimados se repetem, de  $50\mu m$  no trabalho de (ZHANG e SUN, 2019) e entre  $20\mu m$  a  $40\mu m$  no trabalho de (SHARMA e BISHNOI, 2020).

Quando a propriedade é a fração volumétrica da ZTI a sensibilidade a respeito dessa problemática é mais complexa, contudo, no trabalho de (SCRIVENER, et al., 2004) existe uma correlação direta, mostrando que essa fração volumétrica pode assumir valores bem altos próximos de 20% para concretos avaliados em 1 dia, diminuindo para 7 a 8% quando avaliados em um período de um ano.

Barbosa (2003) propõe uma retroanálise para identificar qual fração volumétrica mais se adequa para uma modelagem de homogeneização do concreto. Em seu trabalho foram identificados valores da ordem de 11%. Trabalhos que estimam numericamente ZTI em função por exemplo da curva granulométrica chegam em valores aproximadamente de 10% (SHARMA e BISHNOI, 2020), 15% em (LI, et al., 2019), entre 10% e 20% (ZHANG e SUN, 2019).

### 3.1.3. Análise de erros e propriedades homogeneizadas via modelagem micromecânica multiescala

Para avaliação da calibração dos modelos micromecânicos com resultados experimentais, utiliza-se o conceito do erro relativo entre o resultado obtido com a análise micromecânica ( $E_c$ ) e o valor obtido em laboratório ( $E_{exp}$ ). Desta forma, apresentam-se os resultados obtidos, em termos percentuais do erro relativo, determinado por  $(E_c - E_{exp})/(E_{exp})$ .

Nas análises de erros relativos para obtenção das propriedades elásticas efetivas do concreto, considerou-se que o módulo de elasticidade longitudinal foi o obtido experimentalmente por Li, et al. (2019), em que o  $E_{exp}$  foi de 34,5 GPa.

Na simulação apresentada foi adotada como estratégia a verificação dos modelos limites, a saber: modelos de Reuss, Voigt e os limites de Hashin. Para isso, utilizou-se a construção do compósito sem zona de transição (Figura 24), com as correções das frações volumétricas para cada um dos três níveis adotados nessas duas análises iniciais expostos na Tabela 4.

**Tabela 4:** Correção das frações volumétrica nos passos de homogeneização.

| Nível 1                          |                         | Fração Volumétrica no Compósito | Fração Volumétrica no Nível de Homogeneização |
|----------------------------------|-------------------------|---------------------------------|---|
| Argamassa Homogeneizada          | Pasta de cimento        | 15,40%                          | 36,41%  |
|                                  | Agregado miúdo          | 26,90%                          | 63,59%  |
|                                  | Total                   | 42,30%                          | 100,00%                                       |
| Nível 2                          |                         | Fração Volumétrica no Compósito | Fração Volumétrica no Nível de Homogeneização |
| Concreto Homogeneizado           | Argamassa Homogeneizada | 42,30%                          | 48,79%  |
|                                  | Agregado graúdo         | 40,30%                          | 51,21%  |
|                                  | Total                   | 42,30%                          | 100,00%                                       |
| Nível 3                          |                         | Fração Volumétrica no Compósito | Fração Volumétrica no Nível de Homogeneização |
| Concreto Homogeneizado Corrigido | Concreto Homogeneizado  | 100,00%                         | 97,22%  |
|                                  | Poros                   | 2,42%                           | 2,78%   |

|  |              |         |         |
|--|--------------|---------|---------|
|  | <b>Total</b> | 102,48% | 100,00% |
|--|--------------|---------|---------|

**Fonte:** Autor.

Cabe notar que os erros em relação aos modelos analíticos analisados estão acima de 40% no último nível. Observa-se também que no último passo de homogeneização, os modelos de Reuss e Hashin Inferior, ficam mal condicionados, pois o módulo de elasticidade dos poros é nulo e no cálculo de erro relativo iria produzir erros negativos, que não faria sentido físico (Tabela 5).

**Tabela 5:** Resultados da homogeneização para os modelos limites.

| <b>Modelo</b>          | <b>Módulo de Elasticidade (GPa)</b> |                |                | <b>Erro %</b>  |
|------------------------|-------------------------------------|----------------|----------------|----------------|
|                        | <b>Nível 1</b>                      | <b>Nível 2</b> | <b>Nível 3</b> | <b>Nível 3</b> |
| <b>Reuss</b>           | 39,596                              | 44,559         | -              | -              |
| <b>Voigt</b>           | 57,324                              | 54,400         | 52,887         | 53,295         |
| <b>Hashin Superior</b> | 51,179                              | 51,262         | 48,496         | 40,569         |
| <b>Hashin Inferior</b> | 45,614                              | 48,341         | -              | -              |
| <b>Concreto</b>        | 34,50                               |                |                |                |

**Fonte:** Autor.

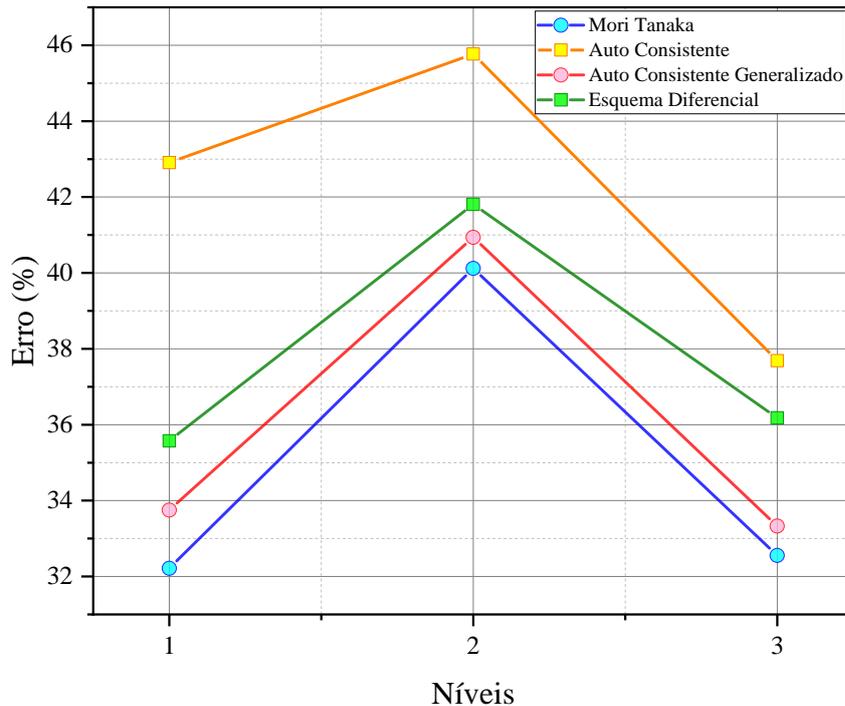
Continuando a modelagem, utilizou-se modelos bifásicos desconsiderando a zona de transição interfacial tanto no agregado miúdo quanto no agregado graúdo, obtendo-se como resultado nos passos de homogeneização os dados mostrados na (Figura 27). Quando se considera no processo de homogeneização os modelos numéricos de duas fases, percebe-se a diminuição no erro de modelagem do concreto.

Mesmo com quatro fases, que indica uma quantidade de fases regular para caracterização do concreto, os resultados não são suficientes para que se possa ter modelos de duas fases representativos (Tabela 6).

**Tabela 6:** Resultados numéricos por passos de homogeneização.

| <b>Modelo</b>                        | <b>Módulo de Elasticidade (GPa)</b> |                |                | <b>Erro %</b>  |
|--------------------------------------|-------------------------------------|----------------|----------------|----------------|
|                                      | <b>Nível 1</b>                      | <b>Nível 2</b> | <b>Nível 3</b> | <b>Nível 3</b> |
| <b>Mori-Tanaka</b>                   | 45,614                              | 48,341         | 45,671         | 32,379         |
| <b>Auto Consistente</b>              | 49,304                              | 50,290         | 47,436         | 37,496         |
| <b>Auto Consistente Generalizado</b> | 46,144                              | 48,624         | 45,937         | 33,325         |
| <b>Esquema Diferencial</b>           | 46,772                              | 48,923         | 46,981         | 36,177         |
| <b>Concreto</b>                      | 34,50                               |                |                |                |

**Fonte:** Autor.

**Figura 27:** Resultados para erro da homogeneização do Módulo de Elasticidade (sem ZTI).

**Fonte:** Autor.

Pode-se observar que a utilização dos modelos de homogeneização de duas fases não são os principais responsáveis pelo alto valor do erro relativo, com picos de até 38% aproximadamente. Este erro está diretamente associado à desconsideração da presença da zona de transição interfacial no processo de construção e análise do compósito, ainda que os modelos micromecânicos de duas fases possuam limitações para modelagem do concreto.

Para avaliação da qualidade dos modelos de duas fases, utilizou-se a mesma quantidade de níveis de homogeneização mostrado na Figura 24, porém, considerando as respectivas zonas de transição interfacial em cada etapa de homogeneização. A alteração das frações volumétricas nessa modelagem pode ser observada na Tabela 7.

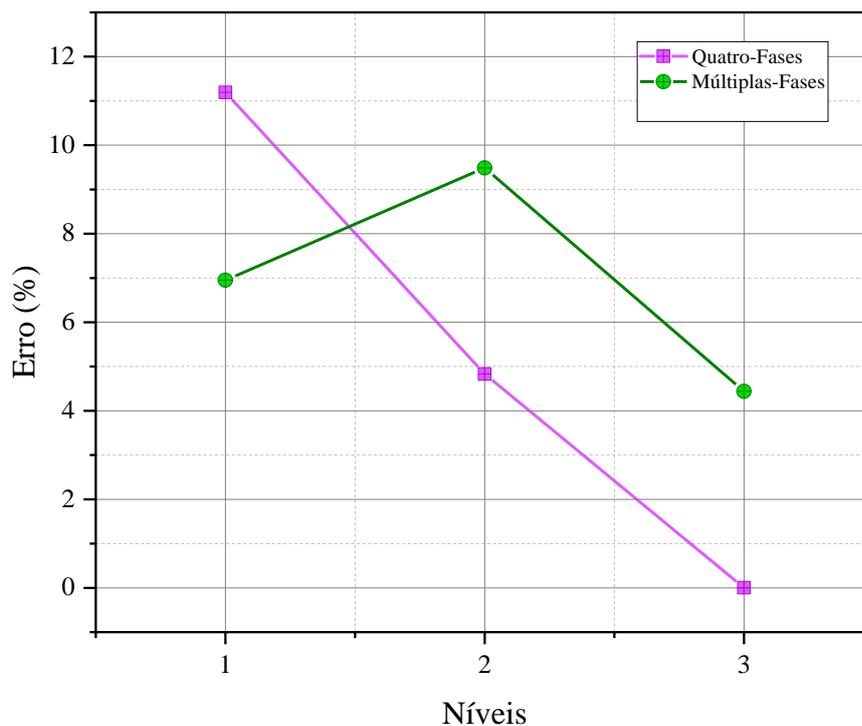
**Tabela 7:** Correção das frações volumétrica nos passos de homogeneização.

| Nível 1   |                  | Fração Volumétrica no Compósito | Fração Volumétrica no Passo de Homogeneização |
|---|------------------|---------------------------------|---|
| Argamassa Homogeneizada + Zona de Transição do Agregado Miúdo | Agregado miúdo   | 26,90%                          | 46,86%  |
|   | ZTI-2            | 15,10%                          | 26,31%  |
|   | Pasta de cimento | 15,40%                          | 26,83%  |
|   | Total            | 57,40%                          | 100,00%                                       |
| Nível 2   |                  | Fração Volumétrica no Compósito | Fração Volumétrica no Passo de Homogeneização |

|  |  |  |  |
|--|--|--|--|
| <b>Concreto Homogeneizado + Zona de Transição do Agregado Graúdo</b> | <b>Agregado graúdo</b>   | 40,30%                                 | 40,30%   |
|  | <b>ZTI-1</b>   | 2,30%                                  | 2,30%  |
|  | <b>Argamassa Homogeneizada + Zona de Transição do Agregado Miúdo</b> | 57,40%                                 | 57,40%   |
|  | <b>Total</b>   | 100,00%                                | 100,00%  |
| <b>Nível 3</b>   |  | <b>Fração Volumétrica no Compósito</b> | <b>Fração Volumétrica no Passo de Homogeneização</b> |
| <b>Concreto Corrigido</b>  | <b>Concreto Homogeneizado + Zona de Transição do Agregado Graúdo</b> | 100,00%                                | 97,64%   |
|  | <b>Poros</b>   | 2,42%                                  | 2,36%  |
|  | <b>Total</b>   | 102,48%                                | 100,00%  |

No último nível de homogeneização foi utilizado o modelo de Mori-Tanaka para consideração do compósito com os poros. Os resultados encontrados reduziram os erros anteriores de 38% para abaixo de 5%, com o modelo de quatro fases chegando a um erro insignificante, indicando um ganho substancial ao se utilizar um modelo mais robusto de homogeneização. A Figura 28, ilustra o decréscimo do erro relativo a cada passo de homogeneização.

**Figura 28:** Resultados para erro da homogeneização do Módulo de Elasticidade (com ZTI).



**Fonte:** Autor.

A Tabela 8, ilustra o erro na utilização do modelo de quatro e múltiplas fases.

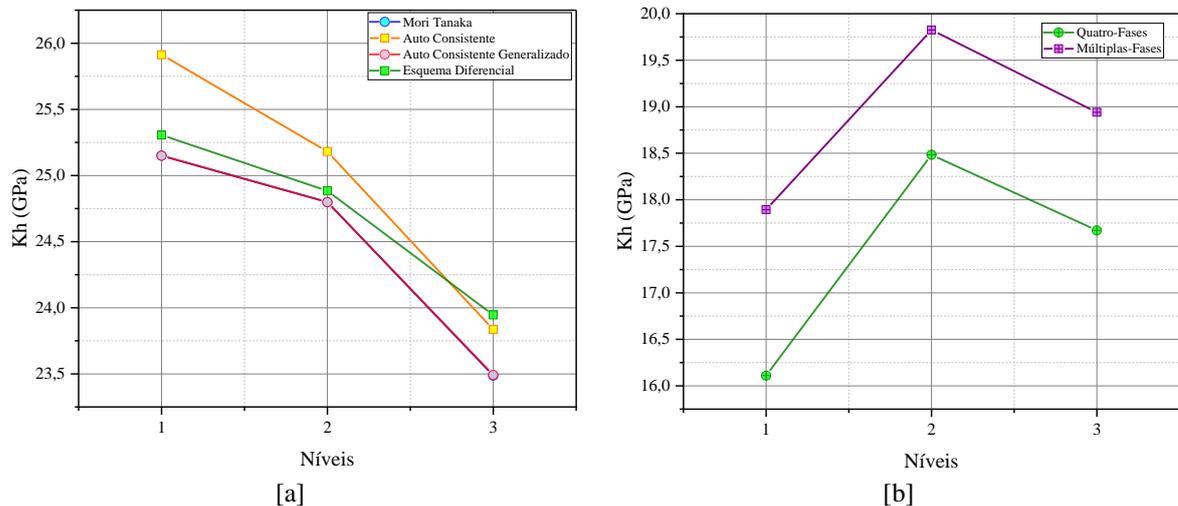
**Tabela 8:** Resultados numéricos por passos de homogeneização.

| Modelo          | Módulo de Elasticidade (GPa) |         |         | Erro %  |
|-----------------|------------------------------|---------|---------|---------|
|                 | Nível 1                      | Nível 2 | Nível 3 | Nível 3 |
| Quatro-Fases    | 30,638                       | 36,167  | 34,501  | 0,0031  |
| Múltiplas-Fases | 32,101                       | 37,774  | 36,302  | 4,441   |
| Concreto        | 34.50                        |         |         |         |

Fonte: Autor.

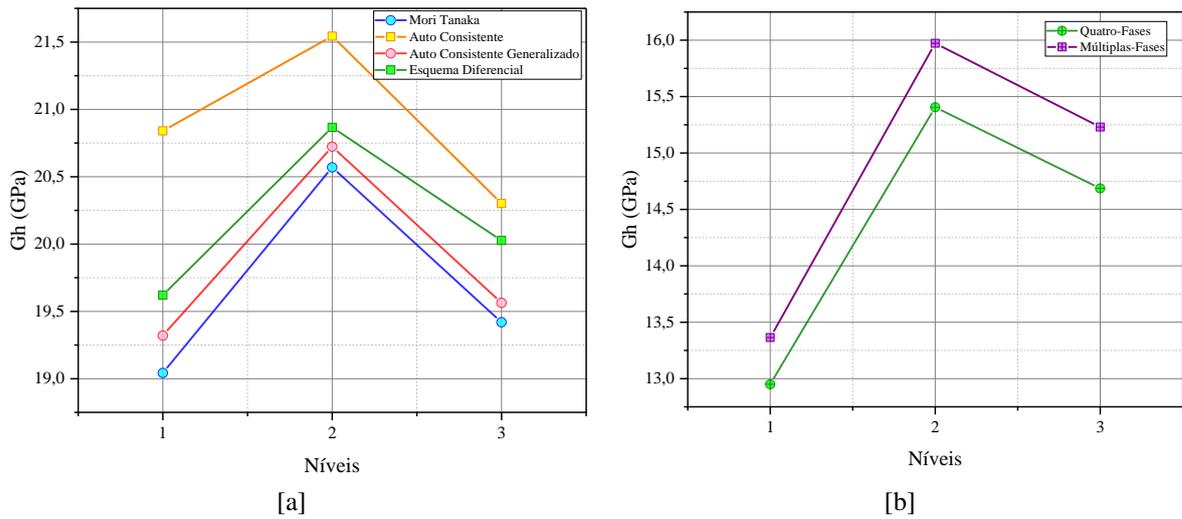
Como era esperado, modelos mais robustos de homogeneização, aliado a mais fases experimentadas, consegue resultados mais satisfatórios. O erro abaixo de 1% indica que modelos micromecânicos conseguem prever com precisão as propriedades homogeneizadas de compósitos cimentícios. Outras propriedades mecânicas do compósito em questão como módulo volumétrico, cisalhante e coeficiente de Poisson homogeneizados podem ser observados em: Figura 29, Figura 30, Figura 31, respectivamente.

**Figura 29:** Módulo volumétrico homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI).



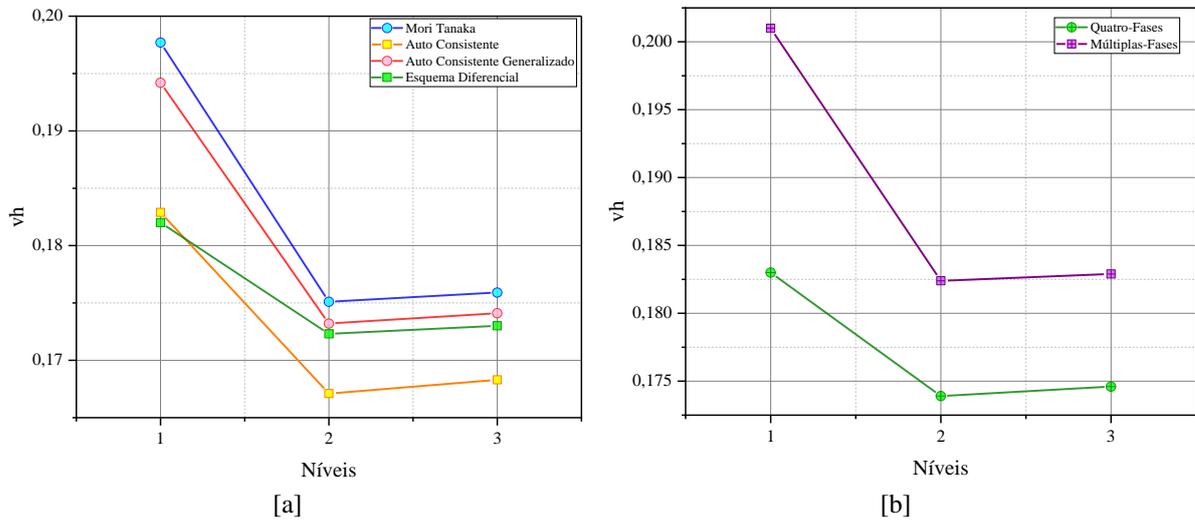
Fonte: Autor.

**Figura 30:** Módulo cisalhante homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI).



**Fonte:** Autor.

**Figura 31:** Coeficiente de Poisson homogeneizado para: [a] modelos bifásicos (sem ZTI), [b] múltiplas fases (com ZTI).



**Fonte:** Autor.

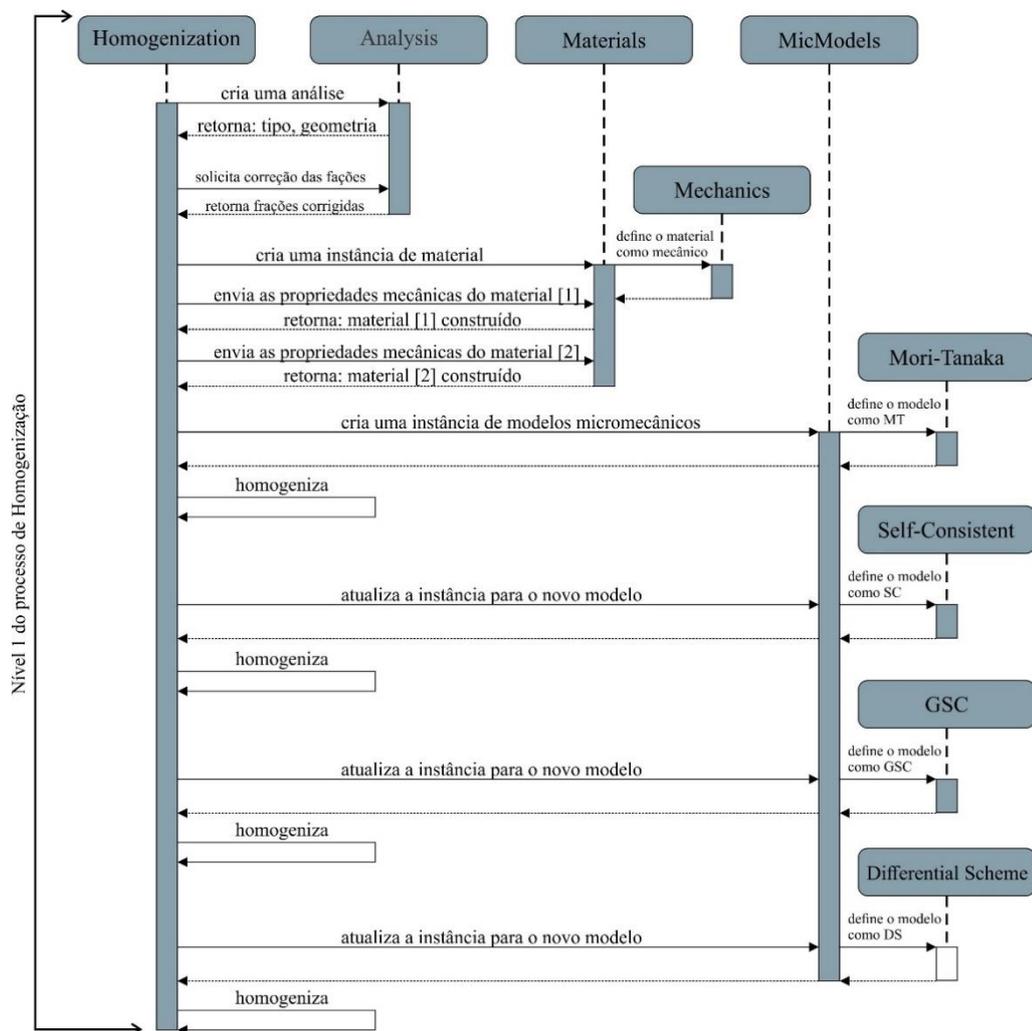
Retornando para primeira análise, cabe frisar que a negligência da zona de transição influencia diretamente na modelagem desse tipo de concreto, não podendo ser retirada da análise. Para concretos convencionais não é recomendado a utilização de modelos de duas fases, pois não se consegue introduzir a zona de transição interfacial na análise ainda que se queira.

Aumentar os níveis de modelagem multiescala micromecânica seria uma hipótese para utilização de modelos de duas fases, porém poderia ocorrer alguns problemas como: as

inclusões não serem esféricas, a matriz não ser infinita o que iria de encontro a formulação micromecânica.

Como pode ser observado no Apêndice C o *framework* está subdividido em três módulos: o de homogeneização, o de empacotamento e o adicional que pode ser estendido para utilizar as funcionalidades dos demais módulos. Nesse estudo de caso utiliza-se apenas o módulo de homogeneização como sugere o diagrama de segmentos da Figura 32.

**Figura 32:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise sem ZTI (Nível 1).



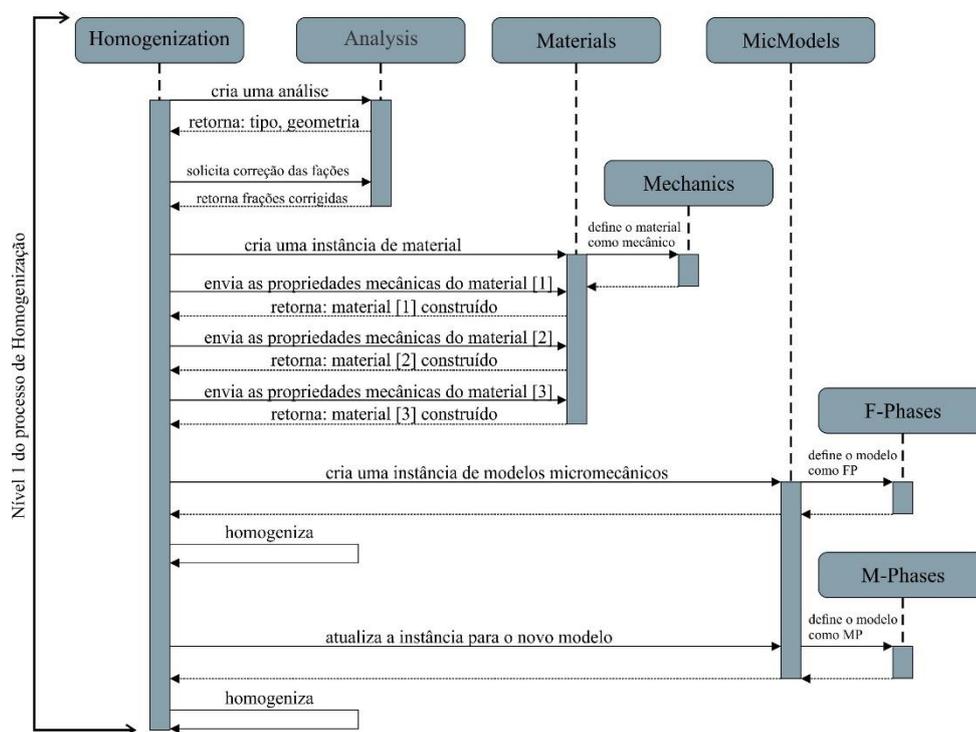
**Fonte:** Autor.

O processo de homogeneização é iniciado pela classe principal [homogenization] responsável por gerir todo processo. A partir da criação do objeto principal, cria-se os demais objetos que serão necessários para o problema, nesse caso em especial os objetos de: Análise, Materiais e Modelos Micromecânicos.

O segmento descrito na Figura 32 é repetido para os níveis seguintes 2 e 3, atualizando as propriedades dos materiais aonde irá se utilizar as propriedades da análise anterior, novamente corrigindo as frações e repetindo todo procedimento descrito no diagrama de segmentos. Uma descrição mais detalhada das classes do *framework* pode ser observada no Apêndice C.

Para modelagem multifásica micromecânica onde a zona de transição interfacial é considerada, o diagrama de segmentos segue a mesma estratégia, com a alteração na criação de um novo material referente a interface (Figura 33).

**Figura 33:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise com ZTI (Nível 1).



**Fonte:** Autor.

### 3.2. ACOPLAMENTO ENTRE MODELOS DE OTIMIZAÇÃO DE SISTEMAS PARTICULADOS E MICROMECAÂNICA

Partindo do pressuposto encontrado no estudo de caso anterior, modelos de quatro fases (LI, et al., 1999) e múltiplas fases (SHI, et al., 2020) são os mais apropriados para homogeneização do concreto, a proposta desse estudo consiste em utilizar a modelagem anterior acoplada a modelos de otimização de sistemas particulados.

A proposta se justifica porque, como dito anteriormente, uma forma de maximizar a propriedades do concreto está justamente no arranjo adequado das partículas constituintes, de forma que os grãos menores ocupem os vazios deixados pelos arranjos dos grãos maiores.

Quanto mais empacotado estiver os sistemas particulados, menor será a fase de pasta de cimento, possivelmente aumentando as propriedades mecânicas do compósito homogeneizado, como era previsto por De Larrard (1999).

O acoplamento dos modelos de otimização de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios ainda se localizam na região da mesoescala a macroescala, contudo, pode-se explicitar que toda formulação micromecânica pode ser aplicada na microescala (SIVENTHIRARAJAH, et al., 2021).

Nesse estudo de caso, tem-se como premissa que o concreto pode ser modelado via micromecânica dos campos médios, com erros acessíveis ao se utilizar modelos mais robustos e uma boa experimentação de suas respectivas fases, como provado no estudo de caso anterior.

### 3.2.1. Metodologia

A metodologia aplicada ao problema do acoplamento se inicia com a composição granulométrica dos sistemas particulados do compósito (agregado graúdo e agregado miúdo). Nessa etapa da análise concebe-se uma curva granulométrica global que leve em consideração as frações volumétricas definidas no problema inicial, onde a fração dos agregados graúdos é de  $f_{ag} = 40,30\%$  e dos agregados miúdos é de  $f_{am} = 26,90\%$ .

As curvas representativas dessas frações foram construídas a partir das proporções originais e estão apresentadas na Tabela 9, levando em consideração uma distribuição normal aleatória.

**Tabela 9:** Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos.

| Distribuição |        |         |         |        |         |
|--------------|--------|---------|---------|--------|---------|
| 25mm         | 19mm   | 12,5mm  | 9,5mm   | 6,3mm  | 4,75mm  |
| 1,693%       | 7,214% | 10,720% | 13,944% | 6,730% | 2,233%  |
| 2,36mm       | 1,18mm | 0,60mm  | 0,30mm  | 0,15mm | 0,075mm |
| 2,825%       | 6,214% | 7,209%  | 7,613%  | 0,807% | 0,000%  |

**Fonte:** Autor.

A Tabela 10 mostra a distribuição granulométrica dos agregados graúdos associados a fração do mesmo no compósito.

**Tabela 10:** Distribuição granulométrica dos agregados graúdos.

| Distribuição |        |         |         |        |
|--------------|--------|---------|---------|--------|
| 25mm         | 19mm   | 12,5mm  | 9,5mm   | 6,3mm  |
| 1,693%       | 7,214% | 10,720% | 13,944% | 6,730% |
| Total        | 40,30% |         |         |        |

**Fonte:** Autor.

A distribuição granulométrica dos agregados miúdos pode ser observada na Tabela 11.

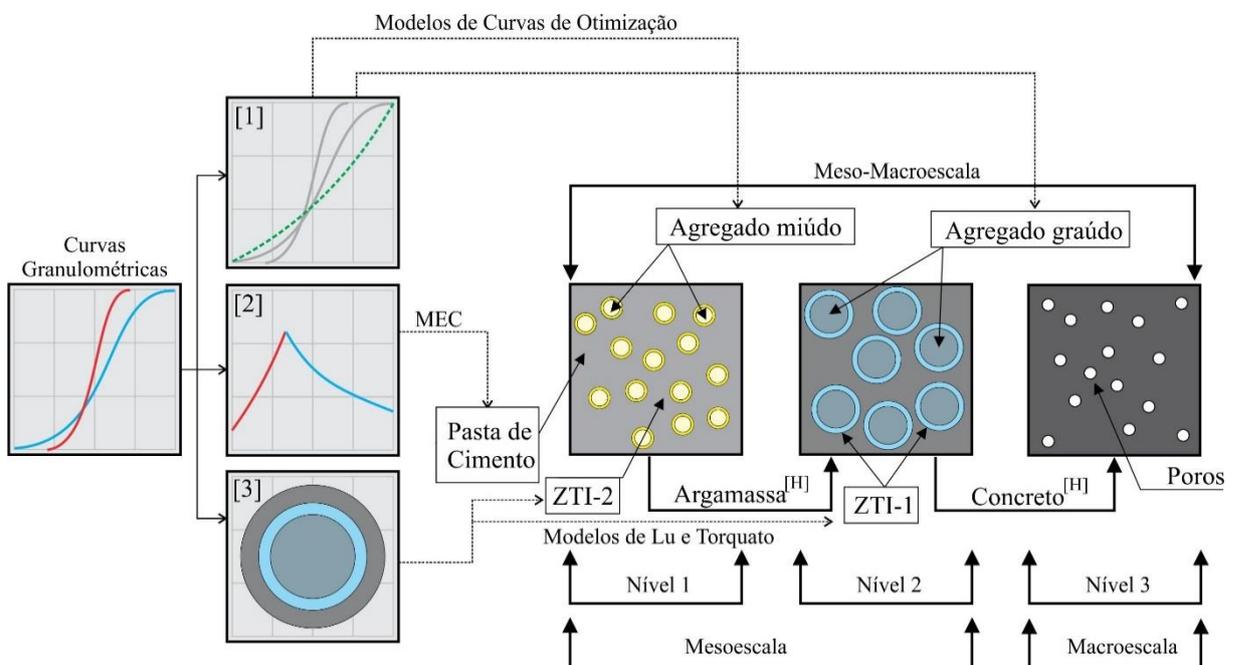
**Tabela 11:** Distribuição granulométrica dos agregados miúdo.

| Distribuição |        |        |        |        |        |         |
|--------------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|
| 4,75mm       | 2,36mm | 1,18mm | 0,60mm | 0,30mm | 0,15mm | 0,075mm |
| 2,233%       | 2,825% | 6,214% | 7,209% | 7,613% | 0,807% | 0,000%  |
| Total        | 26,90% |        |        |        |        |         |

**Fonte:** Autor.

A Figura 34 ilustra o fluxo de otimização e construção das frações volumétricas a partir das curvas granulométricas definidas no problema.

**Figura 34:** Esquema do acoplamento entre modelos de otimização de sistemas particulados e micromecânica.



**Fonte:** Autor.

No primeiro passo pode-se optar por trabalhar com a curva granulométrica global, transformando uma série de curvas em uma representativa, ou trabalhar com uma curva otimizada baseada nos modelos de curvas de otimização. Com a curva representativa, consegue-se saber a fração volumétrica dos agregados graúdos e miúdos, simplesmente verificando a porcentagem retida acumulada na peneira de 6.3mm para o agregado graúdo, sendo o restante agregado miúdo.

O passo [2] está relacionado em estabelecer, a partir da curva granulométrica representativa, qual o grau de compactação do sistema pelo método do empacotamento compressível. A compactação considera os efeitos de parede e afastamento das partículas, definindo no sistema o ponto ótimo, separando os agregados da pasta de cimento, nesse caso a ideia é minimizar a pasta de cimento.

O passo [3] consiste em estabelecer as frações volumétricas das zonas de transição associadas as curvas granulométricas do agregado graúdo e miúdo. Nessa etapa o cálculo da fração volumétrica da zona de transição interfacial depende da espessura estabelecida da ZTI. Nessa análise foi adotado uma espessura de zona de transição de  $40\mu m$ , com base na literatura sobre o tema.

De posse de rearranjo de frações volumétricas, procede-se a homogeneização do concreto como definido no estudo de caso anterior, corrigindo os valores encontrados em função do erro estabelecido para o modelo.

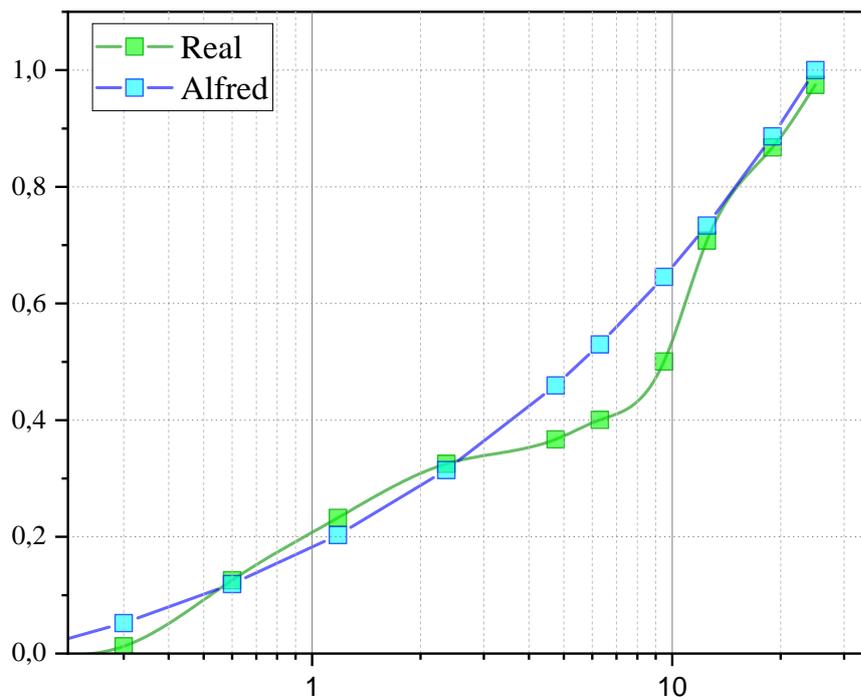
### **3.2.2. Otimização das curvas granulométricas**

Como dito anteriormente, é possível realizar o acoplamento com a curva granulométrica real, ou optar pela utilização de algum método de otimização das curvas granulométricas. Nesse estudo de caso utilizou-se o método de Alfred sendo a porcentagem passante dada na Tabela 12 e mostrado na Figura 35.

**Tabela 12:**  $P(d)$  para o modelo de Alfred e Real.

|               | $P(d)$ |        |        |        |        |         |
|---------------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|
|               | 25mm   | 19mm   | 12,5mm | 9,5mm  | 6,3mm  | 4,75mm  |
| <b>Real</b>   | 0,974  | 0,867  | 0,707  | 0,500  | 0,400  | 0,367   |
| <b>Alfred</b> | 1      | 0,886  | 0,733  | 0,645  | 0,529  | 0,459   |
|               | 2,36mm | 1,18mm | 0,60mm | 0,30mm | 0,15mm | 0,075mm |
| <b>Real</b>   | 0,325  | 0,232  | 0,125  | 0,012  | 0      | 0       |
| <b>Alfred</b> | 0,314  | 0,203  | 0,118  | 0,051  | 0      | 0       |

**Fonte:** Autor.

**Figura 35:** Modelo de Alfred para otimização das curvas granulométricas.

**Fonte:** Autor.

### 3.2.3. Compacidade e frações volumétricas otimizadas

As frações volumétricas calculadas pelos passos [1], [2] e [3] serão descritas para estabelecer a correlação entre as mesmas quando ela representar uma fração volumétrica global  $[G]$ , ou seja, a fração de uma fase do compósito e local  $[L]$ , calculada por um modelo de otimização que precisa ser corrigida para se transformar em uma fase do compósito.

No passo [1] da otimização, como descrito acima, estabelece uma curva granulométrica global que é a união entre as curvas de agregados miúdos e graúdos. Ao se computar a massa retida

em cada uma das séries de peneiras padrão, pode-se encontrar as frações locais correspondentes aos agregados graúdos  $f_{ag}^{[L]}$  e miúdos  $f_{am}^{[L]}$ .

O passo [2] está relacionado com o método do empacotamento compressível, sendo o mesmo responsável por estabelecer a compacidade do sistema particulado. Cabe notar que a compacidade indica o ponto ótimo entre os grãos, de forma que a fração volumétrica da pasta pode ser encontrada por:

$$f_p^{[L]} = 1 - \gamma \quad (158)$$

Onde  $f_p^{[L]}$  é a fração volumétrica da pasta de cimento e  $\gamma$  é a compacidade do sistema particulado. É importante frisar que a fração de pasta encontrada pelo MEC, não será a fração volumétrica do processo de homogeneização, uma vez que dentro dessa fração estão também as frações volumétricas referentes a zona de transição interfacial.

A compacidade  $\gamma$  definido no MEC é numericamente igual a fração volumétrica dos agregados graúdos e miúdos na forma:

$$\begin{aligned} \gamma &= f_a^{[G]} \\ f_a^{[G]} &= 1 - f_p^{[L]} \end{aligned} \quad (159)$$

Sendo  $f_a^{[G]}$ , também dado por:

$$f_a^{[G]} = f_{am}^{[G]} + f_{ag}^{[G]} \quad (160)$$

Para calcular as frações volumétricas globais de agregado miúdo e graúdo basta aplicar a Equação (161):

$$\begin{aligned} f_{am}^{[G]} &= f_a^{[G]} f_{am}^{[L]} \\ f_{ag}^{[G]} &= f_a^{[G]} f_{ag}^{[L]} \end{aligned} \quad (161)$$

O último passo de otimização consiste em avaliar as ZTIs do sistema particulado. Para avaliação das frações volumétricas da zona de transição, utiliza-se a curva granulométrica global, subdividida entre os diâmetros que representam os agregados graúdos e os diâmetros que representam os agregados miúdos. O modelo utilizado para avaliar as ZTIs foi o modelo de Lu e Torquato (1992), que tem como dado de entrada a fração volumétrica das inclusões globais

dado na Equação (161). De posse das frações globais dos agregados, pode-se aplicar o modelo de Lu e Torquato para computar as frações volumétricas da zona de transição referentes a cada sistema particulado:  $f_{zti1}^{[L]}$  (agregado graúdo) e  $f_{zti2}^{[L]}$  para (agregado miúdo).

O processo agora consiste em transformar essas frações locais em globais que serão aplicadas no processo de homogeneização. Para corrigir as frações das zonas de transições e da pasta de cimento, basta utilizar as equações seguintes:

$$\begin{aligned} f_{zti1}^{[G]} &= f_{zti1}^{[L]} f_p^{[L]} \\ f_{zti2}^{[G]} &= f_{zti2}^{[L]} f_p^{[L]} \\ f_p^{[G]} &= f_p^{[L]} - f_{zti1}^{[G]} - f_{zti2}^{[G]} \end{aligned} \quad (162)$$

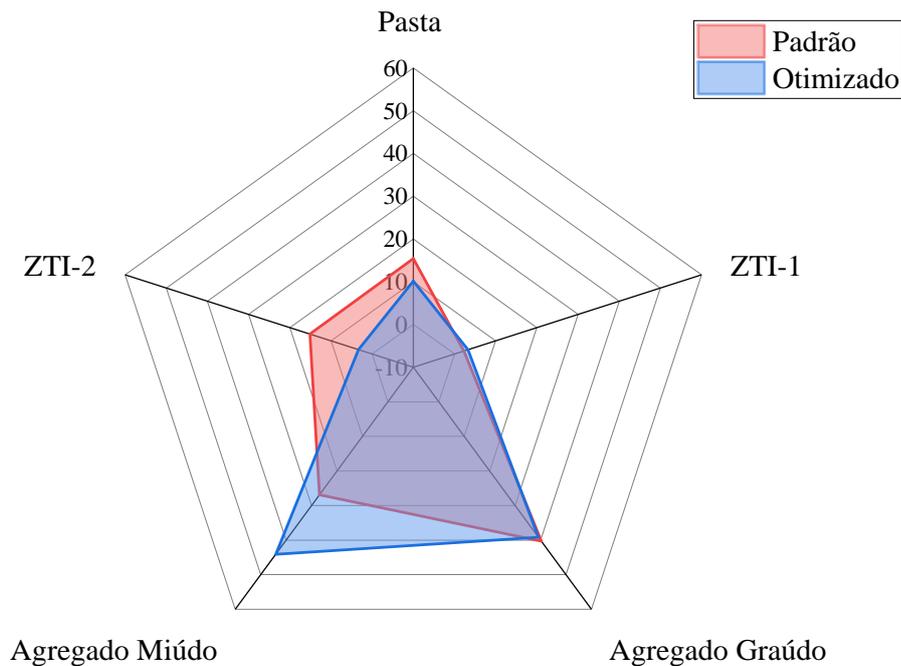
A Tabela 3, mostra os valores encontrados no processo de otimização de sistemas particulados empregados nesse estudo de caso.

**Tabela 13:** Propriedade das fases do compósito otimizada.

| Material         | Fração volumétrica (%) | Fração volumétrica (%) |
|------------------|------------------------|------------------------|
|                  | Li et al (2019)        | Otimizado              |
| Pasta de cimento | 15.40                  | 10,14                  |
| Agregado graúdo  | 40.30                  | 39,15                  |
| ZTI-1            | 2.30                   | 3,29                   |
| Agregado miúdo   | 26.90                  | 44,09                  |
| ZTI-2            | 15.10                  | 3,33                   |

**Fonte:** Autor.

A fração volumétrica de vazios é obtida em função da densidade real do compósito e a densidade aparente. Como se conhece as frações volumétricas otimizadas, bem como as massas específicas, pode-se calcular a fração volumétrica de vazios, que nessa análise foi de aproximadamente 2,03%. Uma forma visual de compreender as fases otimizadas pode ser observado na Figura 36.

**Figura 36:** Comparação entre as frações padrão e otimizado.

**Fonte:** Autor.

### 3.2.4. Análise das propriedades otimizadas e homogeneizadas via modelagem micromecânica multiescala

Os resultados obtidos com o processo de otimização e posterior homogeneização (acoplamento) foram bastante significativos e promissores, com um ganho substancial, visto que nenhuma propriedade original do compósito foi alterada, nem a metodologia de homogeneização. A Tabela 14 mostra os valores obtidos no processo de homogeneização sem otimização e com a otimização das respectivas fases do compósito.

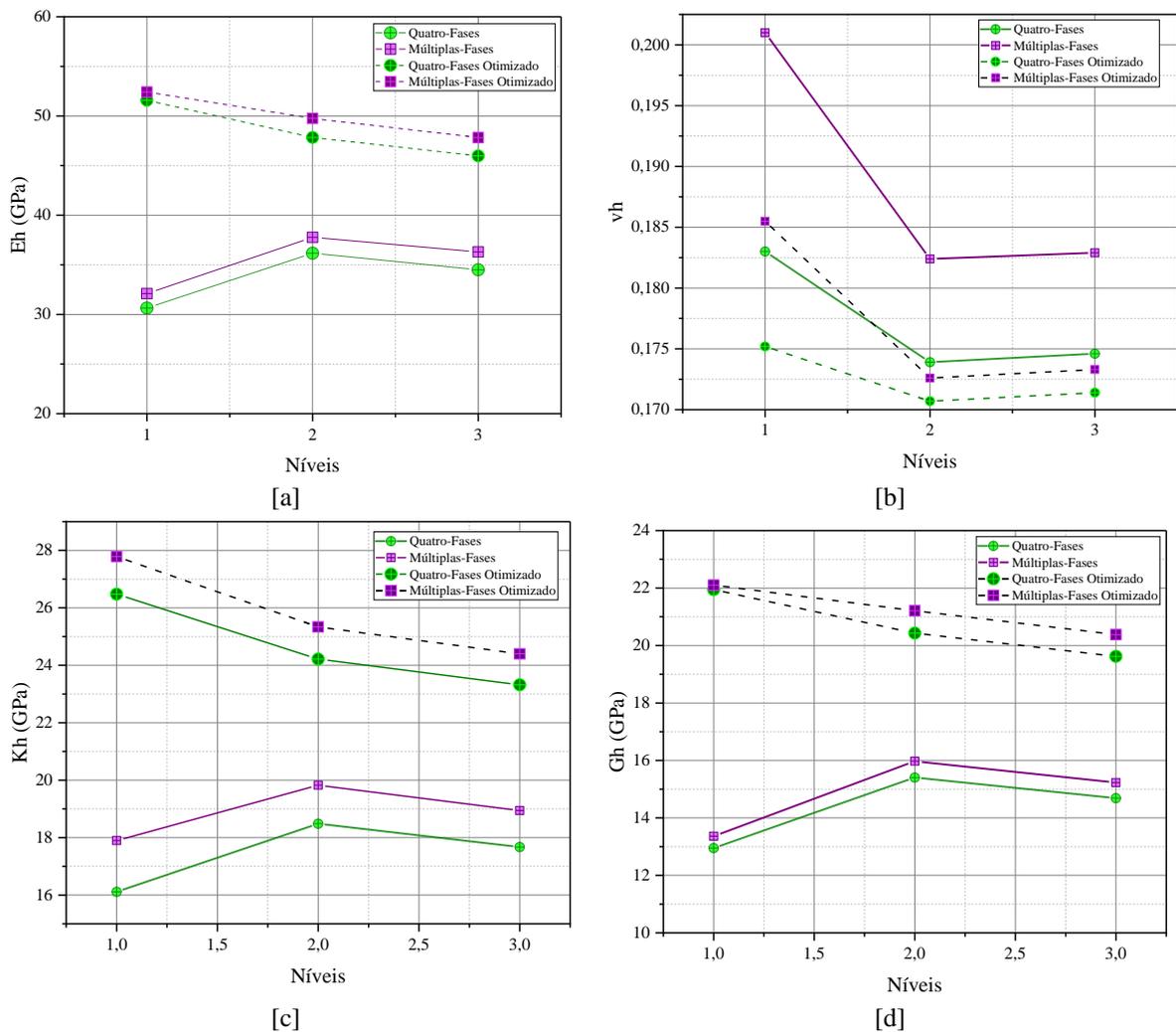
**Tabela 14:** Resultados numéricos por passos de homogeneização.

| Modelo                           | Módulo de Elasticidade (GPa) |         |         | Coeficiente de Poisson  |         |         |
|----------------------------------|------------------------------|---------|---------|-------------------------|---------|---------|
|                                  | Nível 1                      | Nível 2 | Nível 3 | Nível 1                 | Nível 2 | Nível 3 |
| <b>Quatro-Fases</b>              | 30,638                       | 36,167  | 34,501  | 0,1830                  | 0,1739  | 0,1746  |
| <b>Múltiplas-Fases</b>           | 32,101                       | 37,774  | 36,302  | 0,2010                  | 0,1824  | 0,1829  |
| <b>Quatro-Fases Otimizado</b>    | 51,508                       | 47,836  | 45,974  | 0,1752                  | 0,1707  | 0,1714  |
| <b>Múltiplas-Fases Otimizado</b> | 52,413                       | 49,759  | 47,822  | 0,1855                  | 0,1726  | 0,1733  |
| Modelo                           | Módulo de Volumétrico (GPa)  |         |         | Módulo Cisalhante (GPa) |         |         |
|                                  | Nível 1                      | Nível 2 | Nível 3 | Nível 1                 | Nível 2 | Nível 3 |
| <b>Quatro-Fases</b>              | 16,110                       | 18,483  | 17,671  | 12,949                  | 15,405  | 14,685  |
| <b>Múltiplas-Fases</b>           | 17,894                       | 19,825  | 18,940  | 13,364                  | 15,973  | 15,230  |
| <b>Quatro-Fases Otimizado</b>    | 26,475                       | 24,213  | 23,319  | 21,943                  | 20,430  | 19,623  |
| <b>Múltiplas-Fases Otimizado</b> | 27,784                       | 25,337  | 24,397  | 22,104                  | 21,213  | 20,379  |

**Fonte:** Autor.

Observando-se que o processo de homogeneização proposto no estudo de caso anterior levou a erros de 0,0031% para o modelo de quatro fases e 4,44% para modelo de múltiplas fases, observa-se também um incremento no módulo de elasticidade de aproximadamente 25% o que é bastante significativo. A Figura 37 mostra o comparativo das principais propriedades mecânicas na modelagem padrão e otimizada.

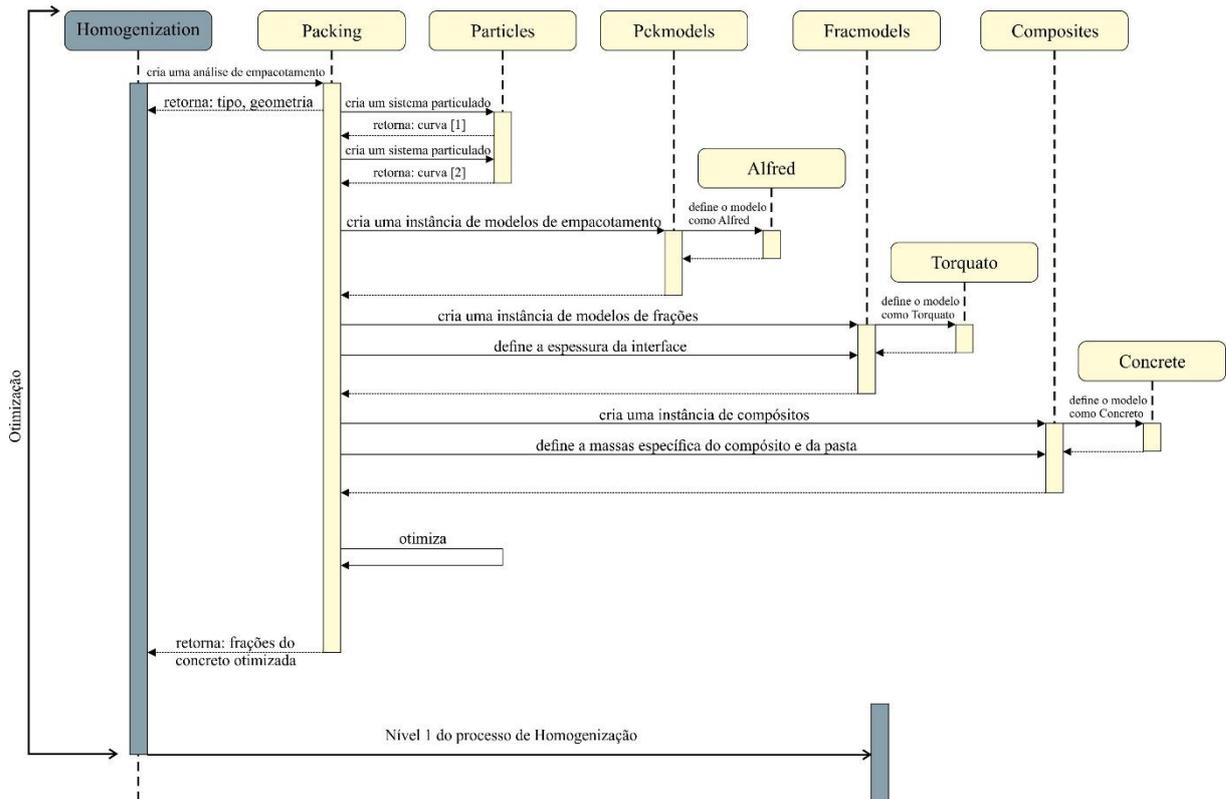
**Figura 37:** Propriedades otimizadas: [a] módulo de elasticidade, [b] coeficiente de Poisson, [c] módulo volumétrico, [d] módulo cisalhante.



**Fonte:** Autor.

Para o acoplamento entre os modelos de otimização de sistemas particulados e o processo de homogeneização de compósitos, foram utilizados os dois módulos padrão do *framework*, a saber: módulo de otimização e módulo de homogeneização como pode ser observado na Figura 38.

**Figura 38:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para o acoplamento entre otimização e homogeneização.



**Fonte:** Autor.

O diagrama de segmentos ilustra bem como é o desenvolvimento do *framework*, tomando partido da modelagem anterior a partir do nível 1 do passo de homogeneização. Como dito anteriormente, os módulos básicos são totalmente independentes, sendo o input da homogeneização exatamente o resultado do processo de otimização. Novamente explicita-se a reutilização de códigos e programação, aproveitando o paradigma da programação orientada a objetos.

### 3.3. INFLUÊNCIA DOS MODELOS DE OTIMIZAÇÃO NA DISTRIBUIÇÃO DAS PARTÍCULAS NAS CURVAS GRANULOMÉTRICAS

Uma vez feita a avaliação do processo de homogeneização escolhidos os modelos melhor representativos, bem como as modificações nas propriedades do concreto com o acoplamento dos modelos de otimização, o próximo passo é avaliar como os modelos acoplados podem ser aplicados para maximizar as propriedades mecânicas do compósito.

Nessa etapa da modelagem, ainda são considerados os valores definidos por (LI, et al., 2019) em seu trabalho experimental (PICHLER e HELLMICH, 2011), (BERNARD, et al., 2003), (CHEN, et al., 2016), (SIVENTHIRARAJAH, et al., 2021).

Uma etapa adicional à otimização foi incorporada por meio da construção das curvas granulométricas a partir de curvas de densidade de probabilidade (MONTGOMERY e RUNNER, 2002). Foi considerado o modelo mais efetivo de homogeneização já calibrado, o modelo de quatro fases, bem como a sequência de homogeneização, acoplamento e quantificação das frações volumétricas mostradas no estudo de caso anterior.

### 3.3.1. Metodologia

Para esse estudo de caso foram consideradas duas etapas distintas. A primeira etapa responsável por avaliar os modelos de otimização das curvas granulométricas a saber: Alfred, Andreasen, Bolomey, Fuller, Talbot e Richart, estudando o impacto nas propriedades mecânicas do compósito. A segunda etapa da análise consiste em variar as curvas granulométricas segundo uma distribuição estatística.

A segunda etapa do estudo está relacionada com a curva granulométrica exposta no problema. As curvas analisadas foram obtidas definindo uma função de densidade de probabilidade a partir dos parâmetros estatísticos básicos de média e desvio padrão, para uma variável aleatória contínua.

Foram escolhidos três modelos para adequação das concentrações de grãos em cada peneira, sendo eles: distribuição Normal (curva padrão), distribuição Gama (curvas com concentração de partículas grossas), extremo valor ou Gumbel (curvas com concentração de partículas finas).

Matematicamente o modelo da função de distribuição Normal pode ser expresso segundo uma variável aleatória  $X$  contínua com média  $\mu$  e desvio padrão  $\sigma$ , sendo:

$$\begin{aligned} -\infty < x < \infty \\ \sigma > 0 \end{aligned} \tag{163}$$

A função densidade de probabilidade será dada por (CASELLA e BERGER, 2002), (MONTGOMERY e RUNNER, 2002):

$$f_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (164)$$

Com valor esperado  $E(X) = \mu$  e variância  $V(X) = \sigma^2$ .

As funções de extremo valor, muito aplicadas a problemas de máximos e mínimos, estabelece nesse problema a ideia de construção de curvas a partir do acúmulo de valores nos pontos mais extremos da distribuição. As funções de extremos dependem de parâmetros de forma, além da média dos dados estudados, contudo é possível aproximar os valores de forma para o desvio, com bons resultados de distribuição.

A função densidade de probabilidade para Gumbel é dada por (MONTGOMERY e RUNNER, 2002), (CASELLA e BERGER, 2002), (ARAÚJO, et al., 2010):

$$f_x(x) = \frac{1}{\beta} e^{\left(\frac{x-\alpha}{\beta}\right)^2} - e^{-e^{-\left(\frac{x-\alpha}{\beta}\right)}} \quad (165)$$

Onde  $\alpha$  é o parâmetro de posição e  $\beta$  o parâmetro de escala. É possível gerar eventos de máximos e mínimos controlando o sinal positivo ou negativo do segundo expoente da equação supracitada. Outra função de extremos é a função Gama, sendo sua função densidade de probabilidade dada por (CASELLA e BERGER, 2002), (MONTGOMERY e RUNNER, 2002):

$$f_x(x) = \frac{1}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\frac{x}{\beta}} \quad (166)$$

Onde:

$$\Gamma(\alpha) = (\alpha - 1)! \quad (167)$$

Para todos os inteiros positivos, com valor esperado  $E(X) = \alpha\beta$  e  $V(X) = \alpha\beta^2$ .

### 3.3.2. Análise dos modelos de curvas de otimização granulométrica

A Tabela 15 ilustra a porcentagem passante nas respectivas peneiras padrão para cada um dos modelos de otimização de curvas estudado nessa problemática.

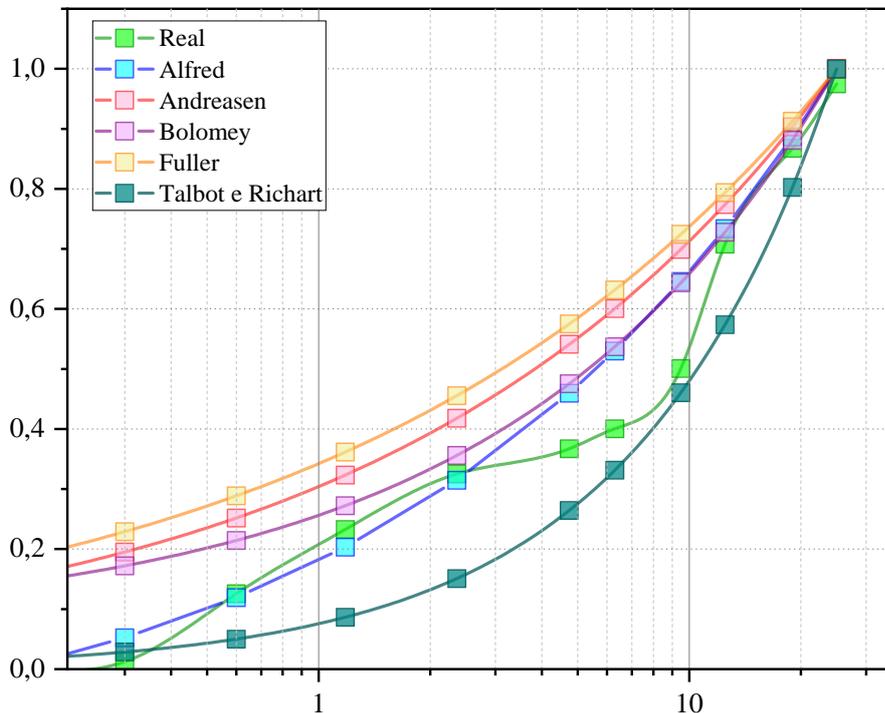
**Tabela 15:** P(d) para diversos modelos de otimização de curvas granulométricas.

| Modelos                 | P(d)   |        |        |        |        |         |
|-------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|
|                         | 25mm   | 19mm   | 12,5mm | 9,5mm  | 6,3mm  | 4,75mm  |
| <b>Real</b>             | 0,974  | 0,867  | 0,707  | 0,500  | 0,400  | 0,367   |
| <b>Alfred</b>           | 1      | 0,886  | 0,733  | 0,645  | 0,529  | 0,459   |
| <b>Andreasen</b>        | 1      | 0,903  | 0,773  | 0,699  | 0,600  | 0,540   |
| <b>Bolomey</b>          | 1      | 0,880  | 0,727  | 0,643  | 0,536  | 0,475   |
| <b>Fuller</b>           | 1      | 0,921  | 0,793  | 0,724  | 0,631  | 0,574   |
| <b>Talbot e Richart</b> | 0,999  | 0,802  | 0,573  | 0,460  | 0,331  | 0,264   |
| Modelos                 | P(d)   |        |        |        |        |         |
|                         | 2,36mm | 1,18mm | 0,60mm | 0,30mm | 0,15mm | 0,075mm |
| <b>Real</b>             | 0,325  | 0,232  | 0,125  | 0,012  | 0      | 0       |
| <b>Alfred</b>           | 0,314  | 0,203  | 0,118  | 0,051  | 0      | 0       |
| <b>Andreasen</b>        | 0,417  | 0,323  | 0,251  | 0,194  | 0,150  | 0,116   |
| <b>Bolomey</b>          | 0,355  | 0,272  | 0,214  | 0,171  | 0,142  | 0,120   |
| <b>Fuller</b>           | 0,455  | 0,361  | 0,288  | 0,228  | 0,181  | 0,144   |
| <b>Talbot e Richart</b> | 0,150  | 0,086  | 0,049  | 0,028  | 0,016  | 0,008   |

Fonte: Autor.

O aspecto das curvas otimizadas pode ser observado na Figura 39.

**Figura 39:** Modelos para otimização das curvas granulométricas.



Fonte: Autor.

### 3.3.3. Compacidade e frações volumétricas otimizadas

O processo de obtenção da compacidade da mistura, bem como das frações volumétricas obtidas por cada modelo, é o mesmo descrito no estudo de caso anterior, sendo as frações volumétricas otimizadas para cada modelo exposto na Tabela 16.

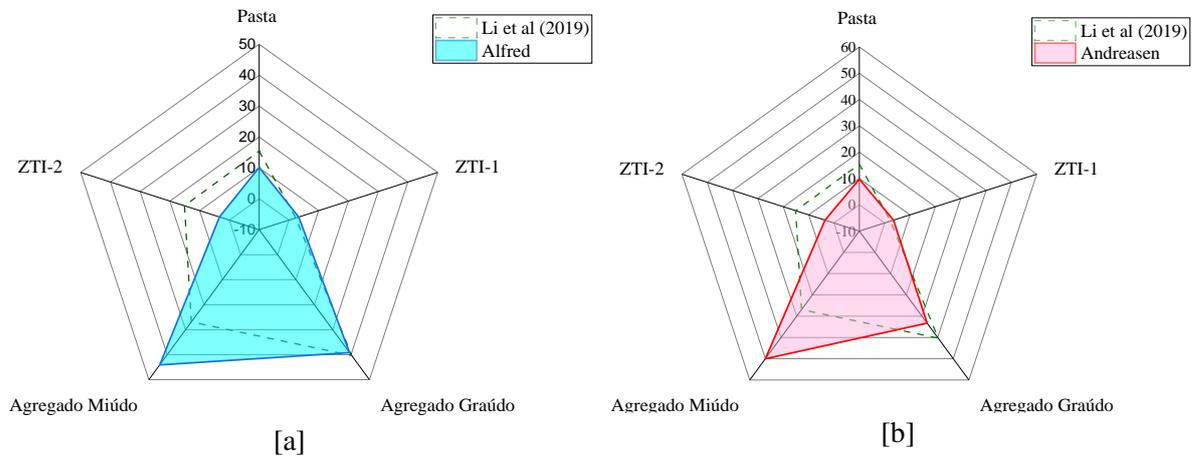
Tabela 16: Frações volumétricas para diversos modelos de curvas de otimização.

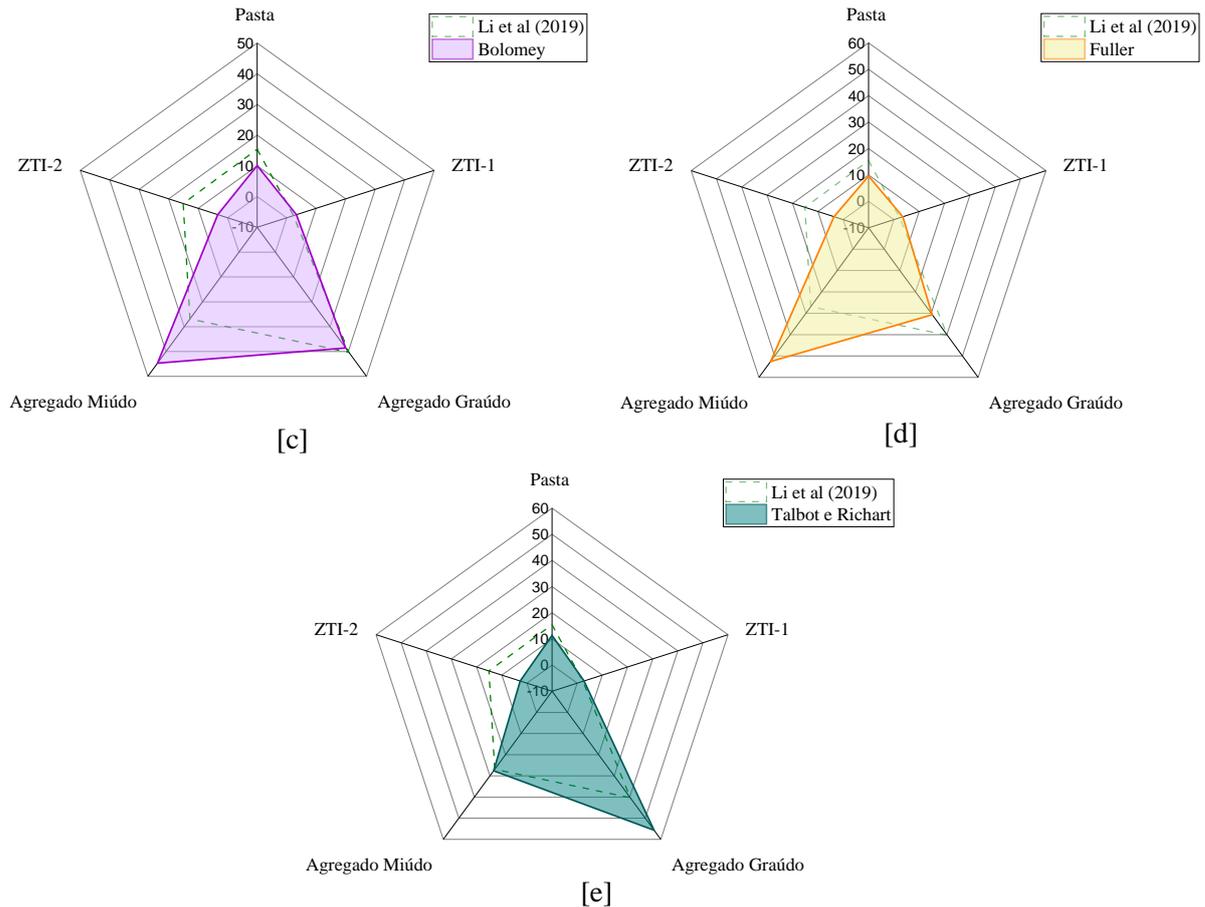
| Material         | Li et al (2019) | Alfred | Andreasen | Bolomey | Fuller | Talbot e Richart |
|------------------|-----------------|--------|-----------|---------|--------|------------------|
| Pasta de cimento | 15.40           | 10,14  | 9,74      | 10,09   | 9,58   | 11,33            |
| Agregado graúdo  | 40.30           | 39,15  | 33,26     | 38,56   | 30,67  | 55,67            |
| ZTI-1            | 2.30            | 3,29   | 3,46      | 3,31    | 3,52   | 2,73             |
| Agregado miúdo   | 26.90           | 44,09  | 49,99     | 44,69   | 52,58  | 27,58            |
| ZTI-2            | 15.10           | 3,33   | 3,55      | 3,35    | 3,65   | 2,69             |

Fonte: Autor.

Visualmente as frações volumétricas, otimizadas pelos modelos empregados, podem ser observadas na Figura 40.

Figura 40: Comparação entre as frações padrão e otimizado para todos os modelos. [a] Alfred, [b] Andreasen, [c] Bolomey, [d] Fuller, [e] Talbot e Richart.





**Fonte:** Autor.

Para o modelo de Alfred [a], as frações volumétricas de agregados graúdos permaneceram na mesma ordem daquela apresentada por Li et al. (2019), porém houve um acréscimo substancial nas frações referentes aos agregados miúdos, fato, que foi acompanhado pelos modelos Andreasen [b], Bolomey [c], Fuller [d]. Como exceção, observa-se o modelo de Talbot e Richart [e], com o qual os valores foram na mesma ordem de grandeza de Li et al. (2019).

Uma grande diferença foi encontrada nos valores de zona de transição interfacial dos agregados miúdos, que decresceu de 15% aproximadamente para valores entre 3 e 4% utilizando o modelo de Lu e Torquato para quantificação dessa fase. Como a região da ZTI é a mais frágil no processo de homogeneização, é intuitivo que os valores das propriedades mecânicas serão maximizados.

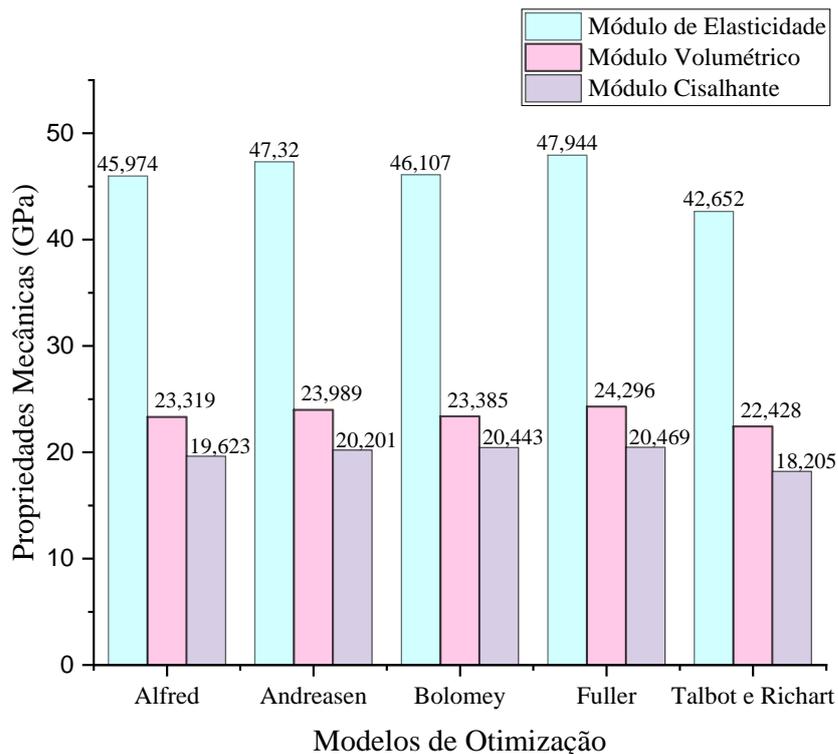
### 3.3.4. Avaliação do desempenho dos modelos de otimização de sistemas particulados nas propriedades mecânicas do compósito homogeneizado

De forma semelhante ao estudo de caso anterior, ao se homogeneizar o compósito com o sistema otimizado, percebeu-se que para todos os modelos de otimização empregados os resultados foram superiores em comparação com a homogeneização sem otimização, demonstrando que a metodologia adotada foi eficiente.

Nessa etapa da análise foi utilizando o modelo de homogeneização de quatro fases, obtendo um incremento no módulo de elasticidade de aproximadamente 25% para o modelo de Alfred, 27% para o modelo de Andreasen, 25% para o modelo de Bolomey, 28% para o modelo de Fuller e 19% para o modelo de Talbot e Richart.

Os módulos volumétricos e cisalhante acompanharam o incremento em suas propriedades quando otimizado em relação à homogeneização sem otimização. A Figura 41, mostra os valores encontrados no último passo de homogeneização para cada um dos modelos empregados.

**Figura 41:** Propriedades mecânicas otimizadas utilizando diversos modelos.

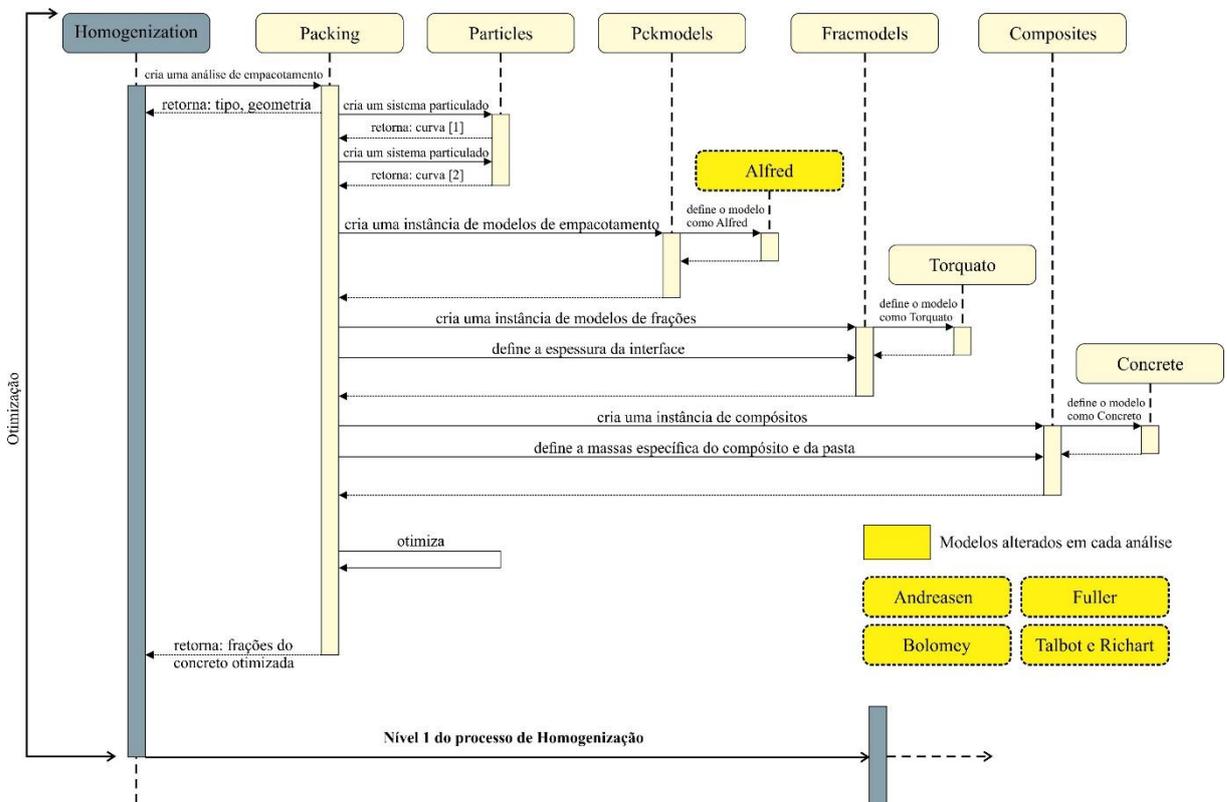


**Fonte:** Autor.

O trabalho de Li. et al. (2019) possui um alto valor da zona de transição interfacial associada aos agregados miúdos. Com o processo de otimização, a zona de transição associada aos agregados miúdos foi reduzida, fazendo com que parte dessa fração volumétrica fosse associada aos materiais mais rígidos, elevando o módulo de elasticidade do concreto.

A arquitetura do *framework* nessa primeira etapa da análise é bastante semelhante à empregada no estudo de caso anterior, sendo o diagrama de segmentos assumindo a mesma sequência de modelagem, com alteração apenas na classe referente aos modelos de otimização empregado em cada análise. Na Figura 42 destaca-se exatamente qual classe deve ser alterada para modelagem da problemática em questão.

**Figura 42:** Diagrama de segmentos do estudo a influência dos modelos de otimização de curvas granulométricas.



Fonte: Autor.

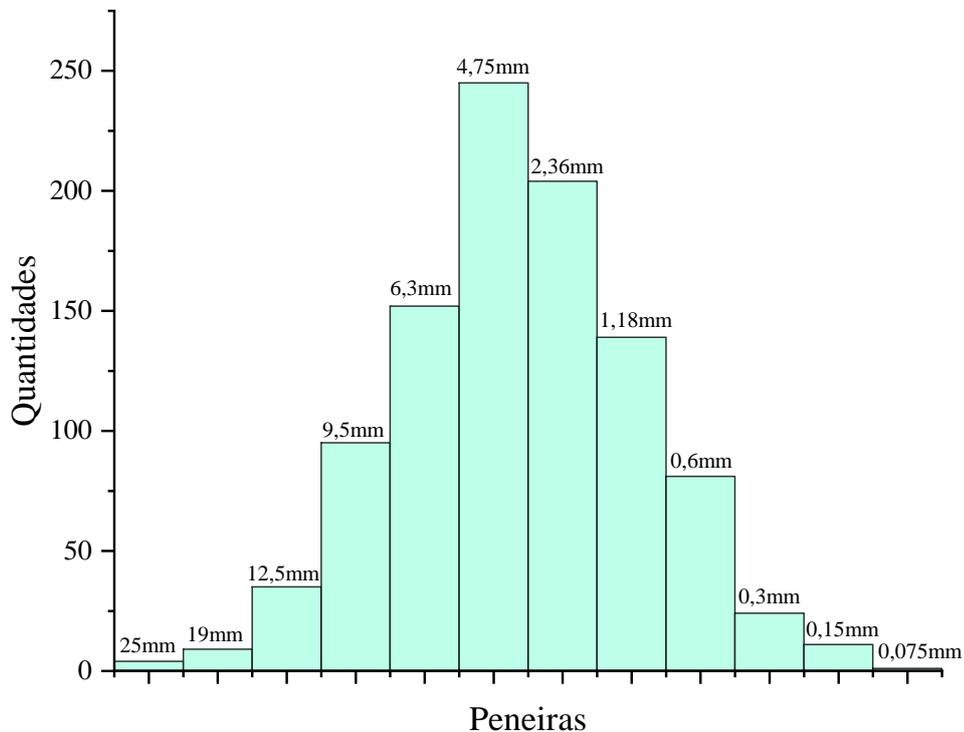
Novamente cabe um destaque na arquitetura de software desenvolvida, tirando partido das modelagens anteriores, com uma pequena alteração em um objeto do *framework* consegue-se desenvolver uma nova análise.

### 3.3.5. Avaliação da influência do diâmetro dos grãos nas propriedades mecânicas dos compósitos homogeneizados

Como dito anteriormente, para determinar a concentração dos grãos em cada peneira, foram empregadas funções de distribuição de probabilidades.

Inicialmente foi considerado uma distribuição normal de grãos, com a geração aleatória de 1000 números entre 0 e 1, com média de 0,5 e desvio padrão de 0,2. Os valores encontrados foram distribuídos em doze intervalos que correspondem às peneiras, sendo os valores menores que 0,0833 correspondentes à peneira de 0,075mm e valores maiores 0,9163 correspondentes à peneira de maior abertura 25mm e assim por diante. A distribuição normal da análise pode ser observada na Figura 43. A Tabela 9 mostra os valores em percentual distribuído em cada uma das peneiras da série padrão.

**Figura 43:** Distribuição Normal dos agregados na mistura.



**Fonte:** Autor.

**Tabela 17:** Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Normal aleatória.

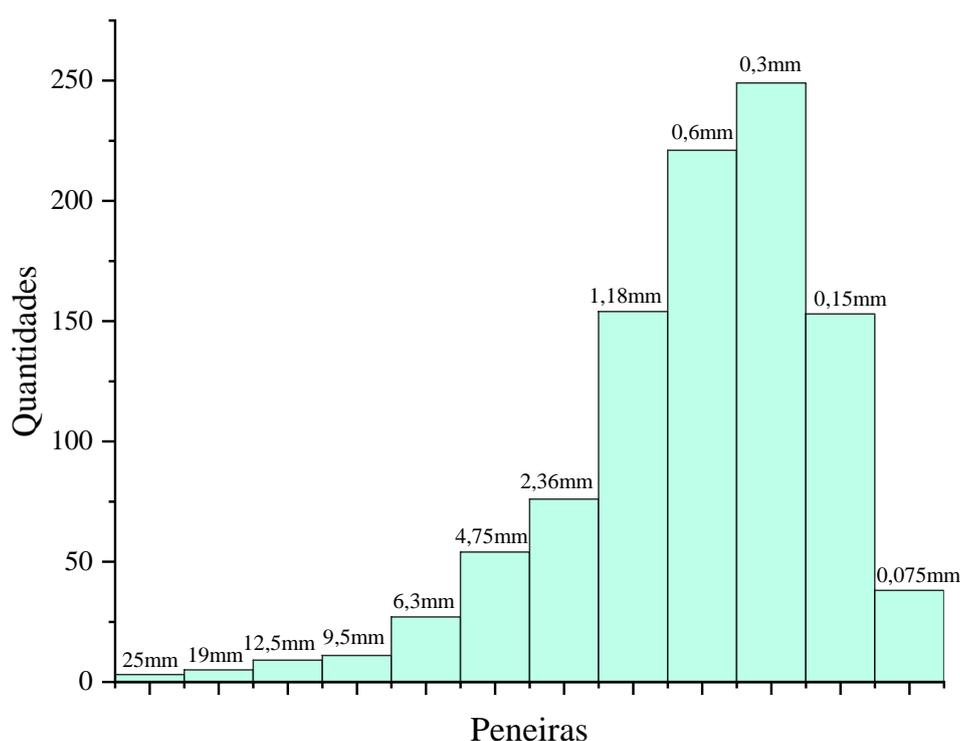
| Distribuição |        |        |        |         |         |
|--------------|--------|--------|--------|---------|---------|
| 25mm         | 19mm   | 12,5mm | 9,5mm  | 6,3mm   | 4,75mm  |
| 0,400%       | 0,900% | 3,500% | 9,500% | 15,200% | 24,500% |
| 2,36mm       | 1,18mm | 0,60mm | 0,30mm | 0,15mm  | 0,075mm |

|         |         |        |        |        |        |
|---------|---------|--------|--------|--------|--------|
| 20,400% | 13,900% | 8,100% | 2,400% | 1,100% | 0,100% |
|---------|---------|--------|--------|--------|--------|

**Fonte:** Autor.

A segunda distribuição aleatória considera uma concentração de agregados miúdos com percentagem retida nas peneiras de menor abertura. A função densidade de probabilidade foi gerada com 1000 números aleatórios, sendo os parâmetros de posição e escala respectivamente 0,5 e 0,2. A Figura 44 e a Tabela 18 ilustram respectivamente a função densidade de probabilidade e as percentagens em cada classe de peneiras para essa distribuição.

**Figura 44:** Distribuição Gumbel dos agregados na mistura.



**Tabela 18:** Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Gumbel aleatória.

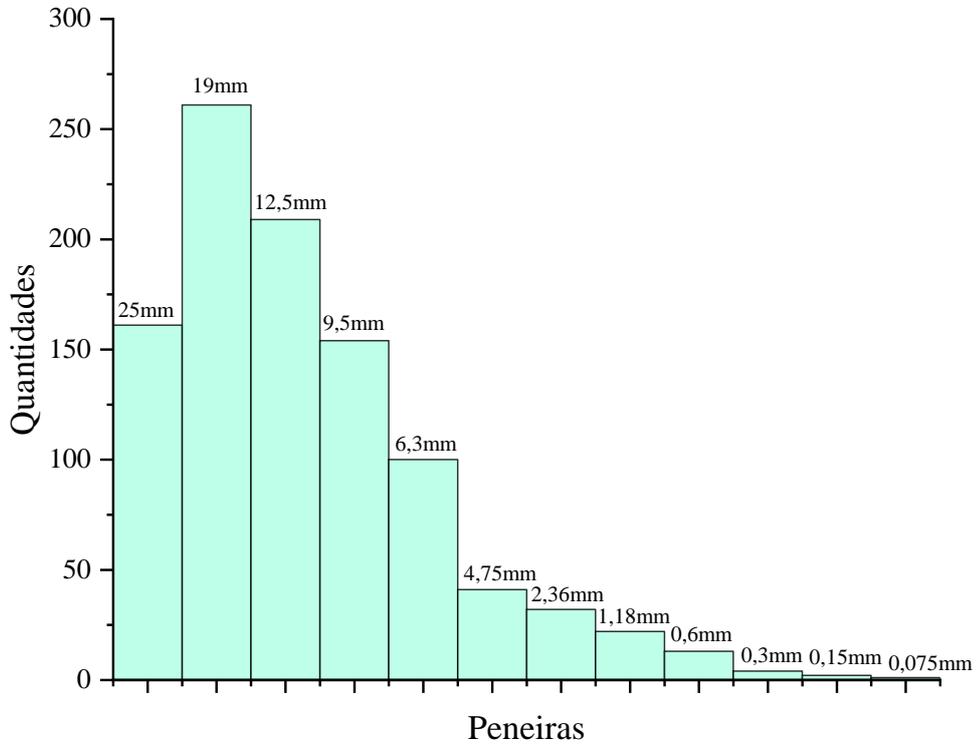
| <b>Distribuição</b> |               |               |               |               |                |
|---------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------|
| <b>25mm</b>         | <b>19mm</b>   | <b>12,5mm</b> | <b>9,5mm</b>  | <b>6,3mm</b>  | <b>4,75mm</b>  |
| 0,300%              | 0,500%        | 0,900%        | 1,100%        | 2,700%        | 5,400%         |
| <b>2,36mm</b>       | <b>1,18mm</b> | <b>0,60mm</b> | <b>0,30mm</b> | <b>0,15mm</b> | <b>0,075mm</b> |
| 7,600%              | 15,400%       | 22,100%       | 24,900%       | 15,300%       | 3,800%         |

**Fonte:** Autor.

A última distribuição analisada busca uma concentração de partículas retidas nas peneiras de maior valor. Para simular essa concentração, utilizou-se 1000 números aleatórios em uma distribuição Gama (Figura 45), com fatores de posição e forma de 2 e 1 respectivamente.

Os fatores de posição e forma na função de probabilidade foram calibrados para que a curvatura da curva fosse suave, uma vez que o interesse está na distribuição harmônica dos grãos (Figura 45). Os valores percentuais de cada peneira utilizado nessa modelagem está representado na Tabela 19.

**Figura 45:** Distribuição Gama dos agregados na mistura.



**Fonte:** Autor.

**Tabela 19:** Distribuição granulométrica dos agregados graúdos e miúdos para distribuição Gama aleatória.

| <b>Distribuição</b> |               |               |               |               |                |
|---------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------|
| <b>25mm</b>         | <b>19mm</b>   | <b>12,5mm</b> | <b>9,5mm</b>  | <b>6,3mm</b>  | <b>4,75mm</b>  |
| 16,100%             | 26,100%       | 20,900%       | 15,400%       | 10,000%       | 4,100%         |
| <b>2,36mm</b>       | <b>1,18mm</b> | <b>0,60mm</b> | <b>0,30mm</b> | <b>0,15mm</b> | <b>0,075mm</b> |
| 3,200%              | 2,200%        | 1,300%        | 0,400%        | 0,200%        | 0,100%         |

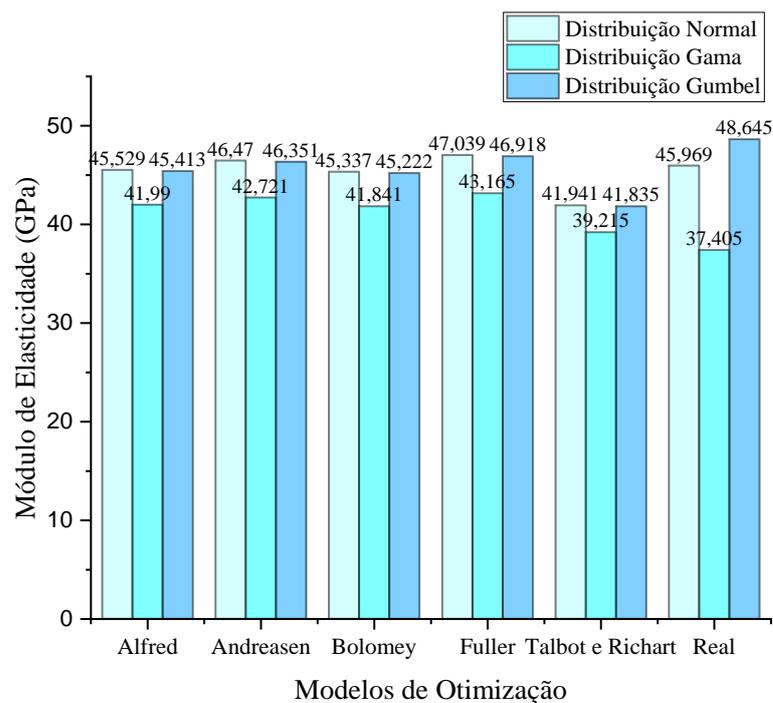
**Fonte:** Autor.

Para estimativa dos resultados homogeneizados foram utilizados uma modelagem otimizando as curvas granulométricas e utilizando a curva e frações reais oriundas da simulação estatística. Os valores de módulo de elasticidade (Figura 46), módulo cisalhante (Figura 47) e módulo volumétrico (Figura 48) quando o sistema é otimizado não varia muito para as distribuições Normal e Gumbel para as curvas apresentadas, porém, quando não se otimiza a curva

granulométrica distribuindo os agregados conforme apresentado na curva estatística, há um crescimento na função Gumbel, onde se concentra a maioria de agregados miúdos.

Esse melhor desempenho da função Gumbel está diretamente relacionado com o módulo de elasticidade adotado para os agregados miúdos serem maiores do que o adotado para o agregado graúdo, aliado ao poder de empacotamento das partículas menores no caso do método do empacotamento compressível.

**Figura 46:** Módulo de elasticidade x distribuições de estatística da granulometria



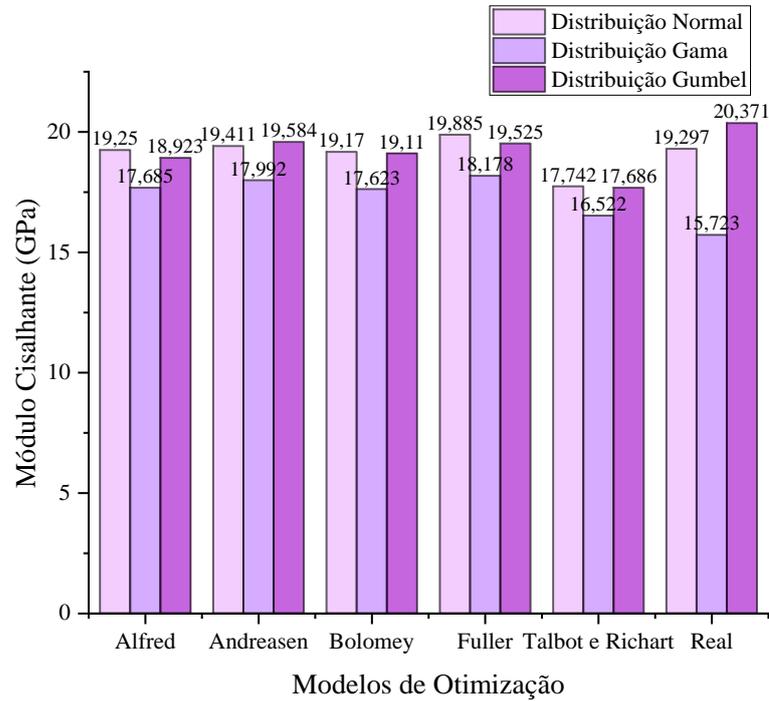
**Fonte:** Autor.

Ao se avaliar a função Gama, nota-se uma queda significativa nas propriedades mecânica do compósito homogeneizado, sendo razoavelmente entendido pela compacidade do sistema que será menor, maximizando a pasta de cimento, além da maior fração volumétrica ser a de agregado graúdo como mostra a Figura 49.

É importante mencionar que os valores homogeneizados para otimização totalmente acoplada (modelos de otimização de curvas, método do empacotamento compressível e modelos de estimativa de frações volumétricas) conseguem encontrar resultados melhores do que a homogeneização multiescala do compósito.

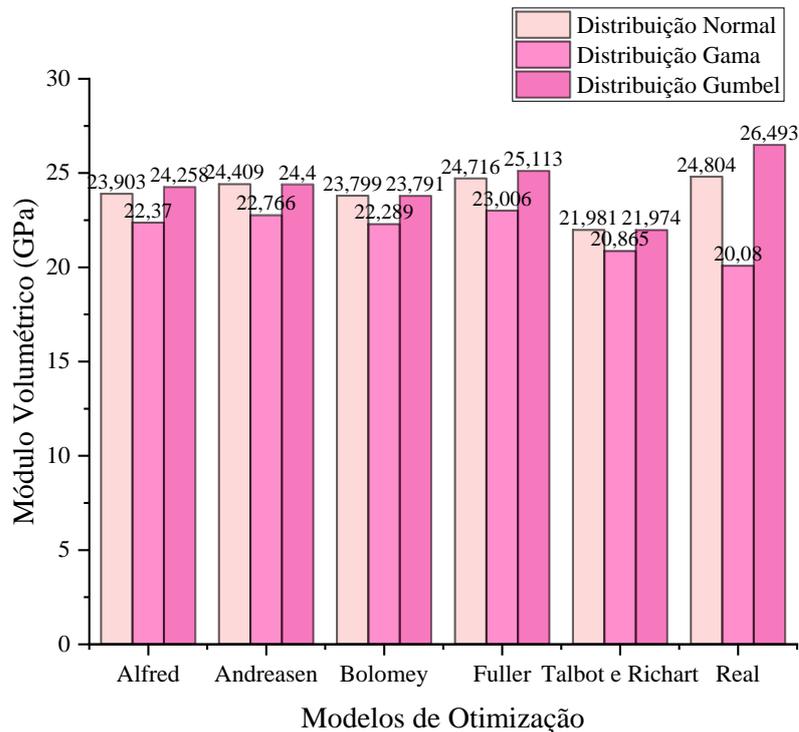
Os módulos cisalhante e volumétrico acompanham o mesmo raciocínio destinado ao módulo de elasticidade e podem ser observados (Figura 47) e (Figura 48).

**Figura 47:** Módulo cisalhante x distribuições de estatística da granulometria



**Fonte:** Autor.

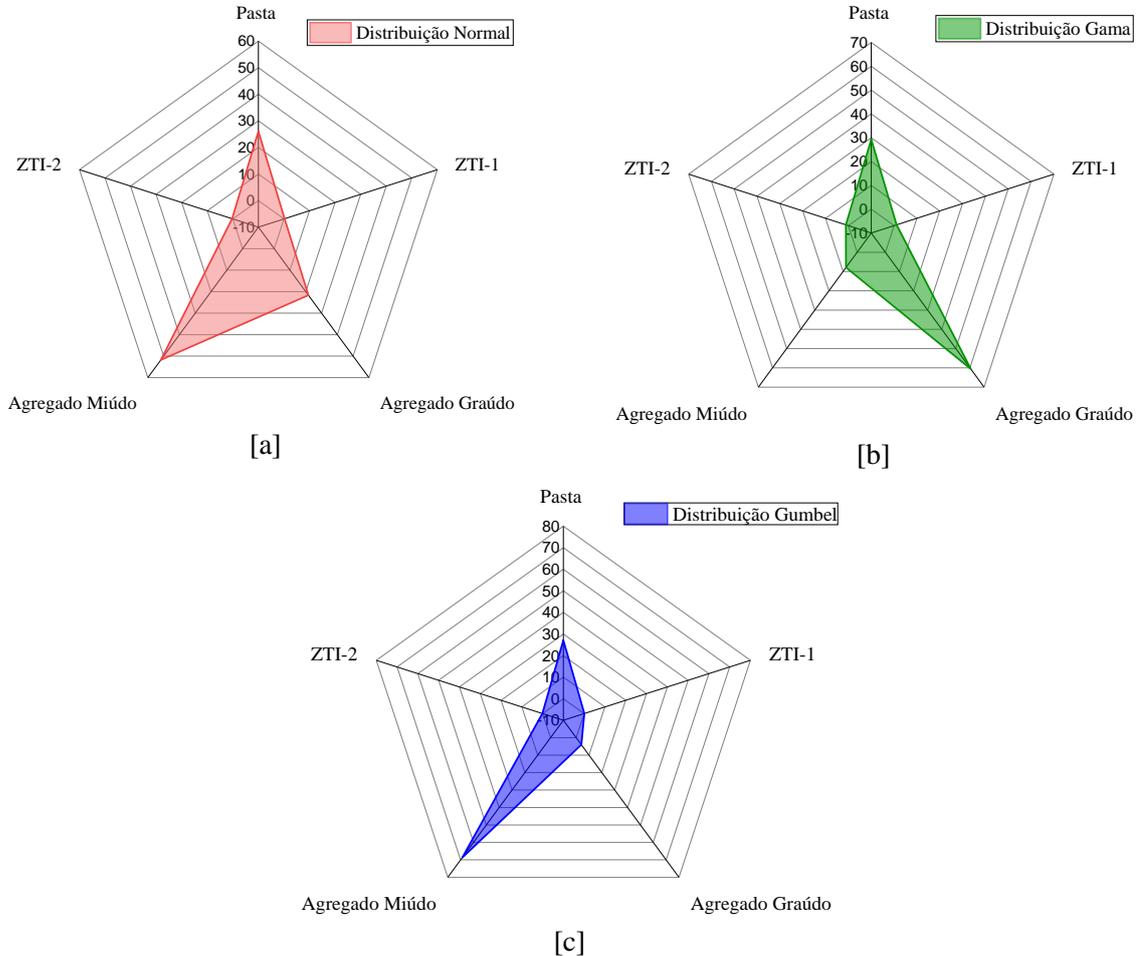
**Figura 48:** Módulo volumétrico x distribuições de estatística da granulometria



**Fonte:** Autor.

Na Figura 49 pode ser observado como a distribuição de fases ocorreu para as respectivas curvas granulométricas geradas pelas distribuições estatísticas.

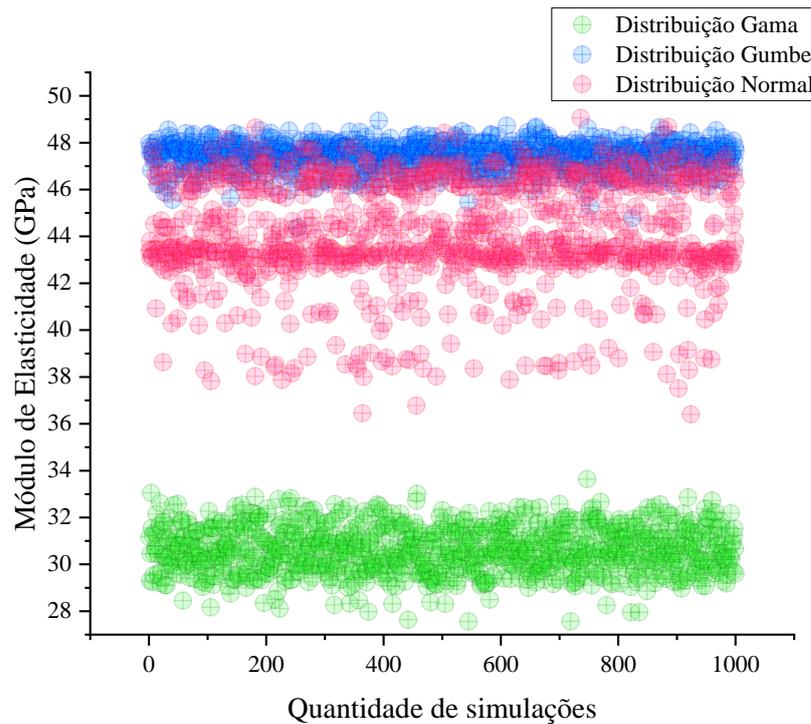
**Figura 49:** Comparação entre as frações para curva estatística. [a] Normal, [b] Gama, [c] Gumbel.



**Fonte:** Autor.

A análise em questão está correlacionando as curvas granulométricas a uma variável aleatória gerada segundo os parâmetros supracitados, contudo, apenas uma curva não seria suficiente para avaliar como se comporta o modelo proposto. Para se ter um embasamento mais profundo, gerou-se mil simulações atualizando a variável aleatória (curva granulométrica) para uma estimativa de distribuição real das frações (sem otimizar as curvas), sendo o resultado mostrado na Figura 50.

**Figura 50:** Simulações para variável aleatória (curva granulométrica). Normal, Gama, Gumbel.



**Fonte:** Autor.

Os parâmetros calibrados para as distribuições Gama e Gumbel retorna uma dispersão menor em relação aos parâmetros utilizados na distribuição Normal, porém essa variação pode ser controlada na geração da curva, não sendo um problema para utilização da mesma.

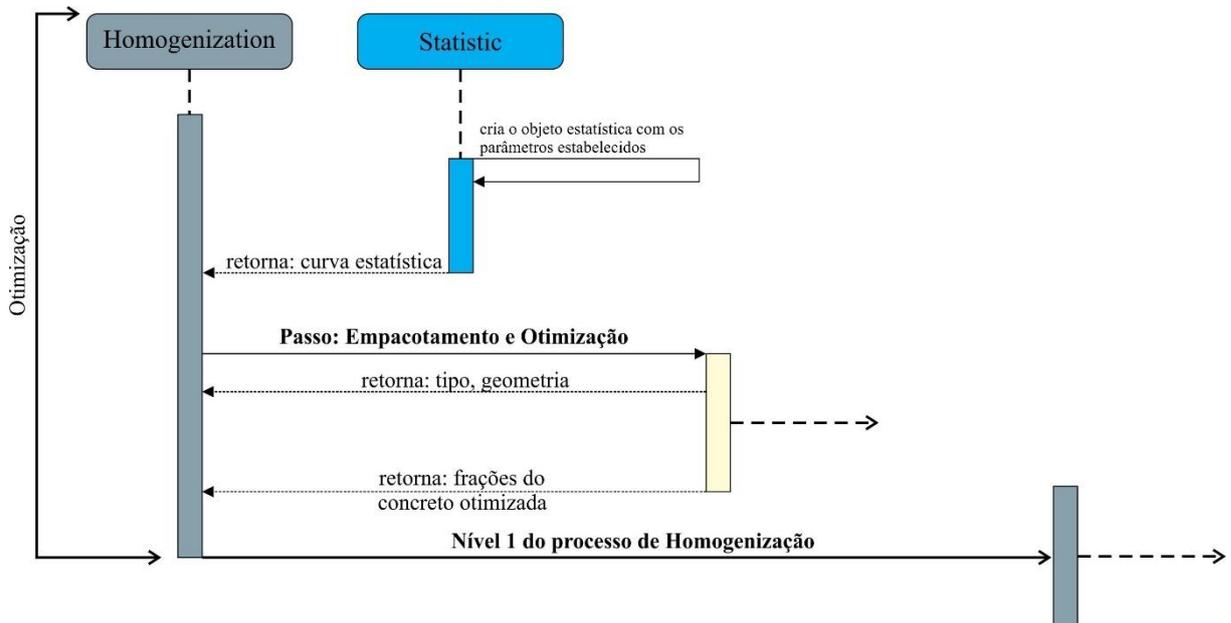
Os valores médios da distribuição Normal ficaram em torno de 43GPa, para a distribuição Gama em torno de 31GPa e para distribuição Gumbel em torno de 48GPa. É interessante verificar que a curva escolhida para a distribuição Gama, retornou um valor de extremo de 37GPa, podendo ser considerado um *outlayer*.

Cabe lembrar que a homogeneização é função das frações volumétricas e das respectivas propriedades das fases. No estudo de caso em questão adotou-se  $E_{am} > E_{ag}$  estabelecido experimentalmente por (LI, et al., 2019) sendo os resultados obtidos na análise específico para os parâmetros estabelecidos como input.

A arquitetura do *framework* para análise em questão é semelhante ao descrito na Figura 38, com a inserção de um módulo de estatística que não faz parte das classes de objeto padrão. Esse

módulo extra é responsável pela criação das curvas granulométricas estatísticas que posteriormente irão alimentar os objetos de empacotamento. A Figura 51 define onde os objetos devem ser criados e inseridos ao problema básico.

**Figura 51:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise estatística das curvas granulométricas.



**Fonte:** Autor.

### 3.4. ANÁLISE PARAMÉTRICA DA INFLUÊNCIA DA ZONA DE TRANSIÇÃO NAS PROPRIEDADES DO CONCRETO

Este estudo de caso traz uma análise sobre a influência da zona de transição nas propriedades mecânicas do compósito. Parte-se do princípio que os modelos adequados para homogeneização do concreto são os de quatro-fase e o de múltiplas fases como demonstrado nos estudos anteriores.

A vasta literatura sobre essa fase do concreto indica que não existe um consenso sobre a espessura da zona de transição interfacial, ainda que existam limites já comprovados e mencionados anteriormente. Da mesma forma, não existem ensaios normatizados, bem como informações generalizadas sobre a formação da mesma e suas propriedades.

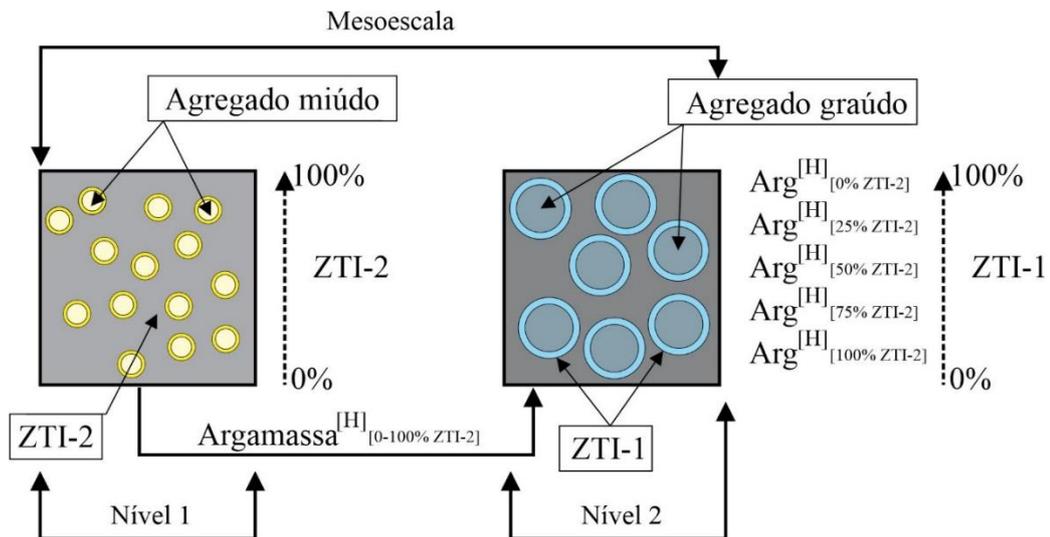
Visando contribuir com esse campo da pesquisa ainda aberto, propõe-se avaliar parametricamente a zona de transição interfacial geradas pelos agregados no compósito, utilizando modelagem multiescala e homogeneização.

### 3.4.1. Metodologia

O procedimento adotado neste estudo consiste em avaliar parametricamente a zona de transição interfacial, construindo o compósito com procedimento multiescala, considerando as propriedades experimentais e os valores representativos propostos em Li et al. (2019).

A modelagem multiescala será dividida em dois níveis, sendo o primeiro nível responsável pela homogeneização da argamassa onde se inclui a fração volumétrica da zona de transição do agregado miúdo (ZTI-2) como mostrado na Figura 52. Adota-se uma escala paramétrica de estudo que varia de 0% de ZTI-2 a 100% da fração volumétrica.

**Figura 52:** Análise da influência da ZTI para homogeneização em dois níveis utilizando frações experimentais de Li et al (2019).



**Fonte:** autor.

Uma vez avaliada a influência da zona de transição (ZTI-2) no processo de construção da argamassa homogeneizada, parte-se para segunda etapa da análise (nível 2) que consiste em avaliar cinco argamassas com frações de ZTI-2 definidas em função de um percentual em relação ao valor experimental, para os agregados graúdos. Foram adotados os valores: 0%, 25%,

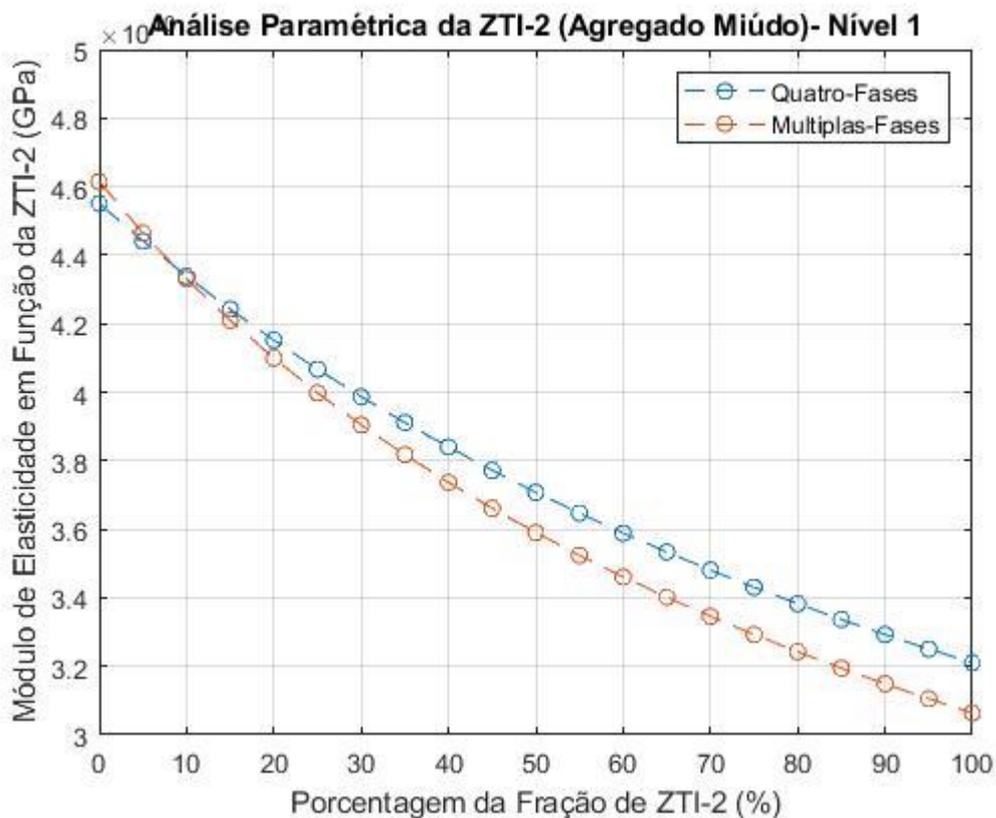
50%, 75% e 100%. Com isso constrói-se o concreto homogeneizado parametrizado em relação a ZTI-1.

### 3.4.2. Análise da influência das ZTIs no compósito experimental

Os valores experimentais apresentados por Li et al. (2019) são 15,10% para as zonas de transição dos agregados miúdos (ZTI-2) e 2,30% para as zonas de transição dos agregados graúdos (ZTI-1) de 2,30%.

A Figura 53 mostra a influência da zona de transição na homogeneização da argamassa com a análise variando a ZTI-2 de 0% até um valor de 100% da zona de transição dos agregados miúdos, correspondendo a fração volumétrica de 15,10% proposta experimentalmente por Li et al. (2019).

Figura 53: Análise da paramétrica da ZTI-2.



Fonte: autor.

Observa-se que a medida em aumenta a zona de transição interfacial, o valor das propriedades mecânicas homogeneizadas diminui, fato este já demonstrado no processo de homogeneização da argamassa (Figura 53), e ainda uma acentuada diminuição nos valores encontrados, com o refinamento dos modelos, como mostrado na Tabela 20.

**Tabela 20:** Módulo de elasticidade em função da ZTI-2.

| <b>Referência</b> | <b>Modelo</b>   | <b>0%<br/>ZTI-2</b> | <b>25%<br/>ZTI-2</b> | <b>50%<br/>ZTI-2</b> | <b>75%<br/>ZTI-2</b> | <b>100%<br/>ZTI-2</b> | <b>Total</b> |
|-------------------|-----------------|---------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|--------------|
| <b>E (GPa)</b>    | Quatro-fases    | 4,6144              | 3,9981               | 3,5903               | 3,2927               | 3,0638                |              |
|                   | Múltiplas-fases | 4,5509              | 4,0669               | 3,7077               | 3,4305               | 3,2101                |              |
| <b>Variação</b>   | Quatro-fases    | -                   | -13,35 %             | -10,19%              | -8,28%               | -6,95%                | -38,79%      |
|                   | Múltiplas-fases | -                   | -10,64%              | -8,83%               | -7,48%               | -6,42%                | -33,36%      |

**Fonte:** autor.

Ao se introduzir 25% de zona de transição na modelagem observa-se uma redução de aproximadamente 13,35% em relação à medida de 0% de ZTI-2, sendo repetido para cada fração mensurada na análise. Quando se introduz 50% de ZTI-2 reduz-se o módulo de elasticidade mensurado para 25% de ZTI-2 em aproximadamente 10,19%, considerando a homogeneização com modelo de quatro-fases.

Em relação à homogeneização com o modelo de múltiplas-fases, as reduções se repetem com a mesma ordem de grandeza. Nota-se que a medida em que se introduz a zona de transição as reduções também diminuem, isso se dá pelo fato de que os módulos homogeneizados são mais próximos em relação às análises anteriores.

No final da homogeneização da argamassa encontra-se a inclusão de 100% da zona de transição referente aos agregados miúdos (ZTI-2), sendo os valores encontrados nessa etapa exatamente iguais aos encontrados na modelagem multiescala para o compósito mostrado nos estudos anteriores para o nível 1.

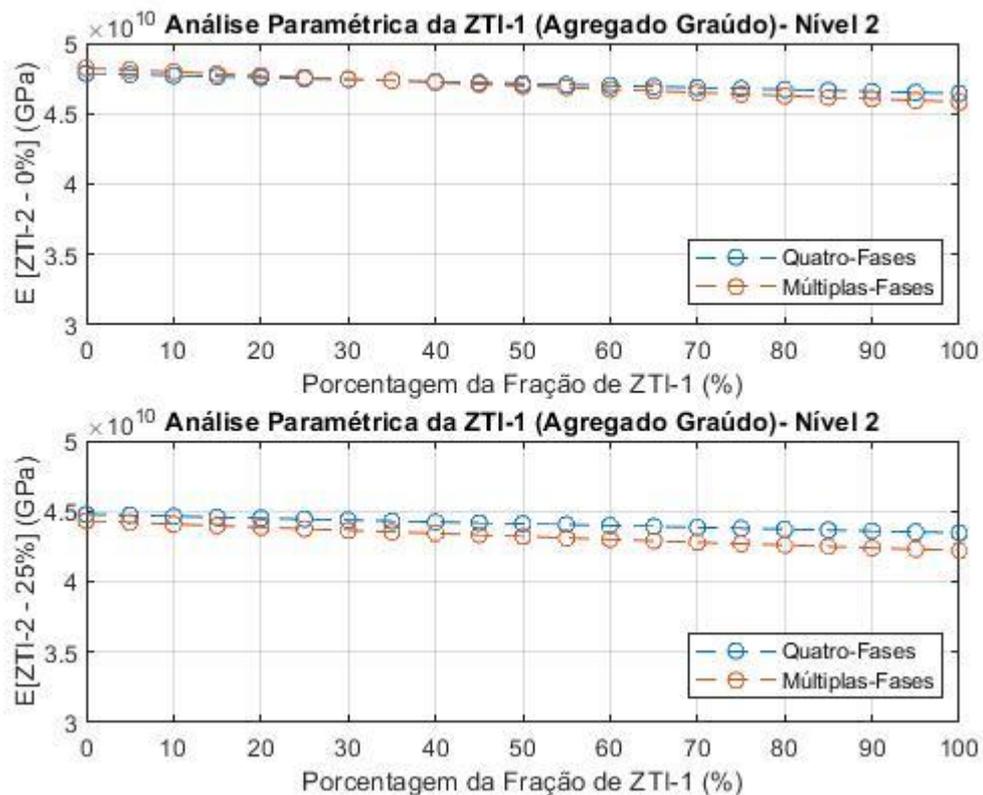
Ao final da modelagem multiescala do nível 1, encontrou-se uma redução acumulada no módulo de elasticidade de 38,79% utilizando modelo de quatro-fases, enquanto para o modelo de múltiplas-fases houve uma redução acumulativa de 33,36%.

A etapa seguinte consiste em tomar como referência as argamassas homogeneizadas com frações de 0%, 25%, 50%, 75% e 100% de inclusão de ZTI-2 e proceder à modelagem

multiescala do concreto homogeneizado fazendo a variação agora da zona de transição interfacial dos agregados graúdos de 0% a 100% da fração proposta por Li et al. (2019). Ressalta-se que a fração volumétrica experimental proposta por Li et al. (2019) foi de 2,30% para os agregados graúdos, sendo significativamente menor do que a dos agregados miúdos.

A Figura 54 mostra os valores encontrados para o concreto homogeneizado com argamassas de 0% e 25% de ZTI-2 por ambos os modelos de homogeneização. Nesse momento é possível observar que houve uma redução pouco significativa nas propriedades mecânicas.

**Figura 54:** Análise da paramétrica da ZTI-1 [0% e 25% de ZTI-2].



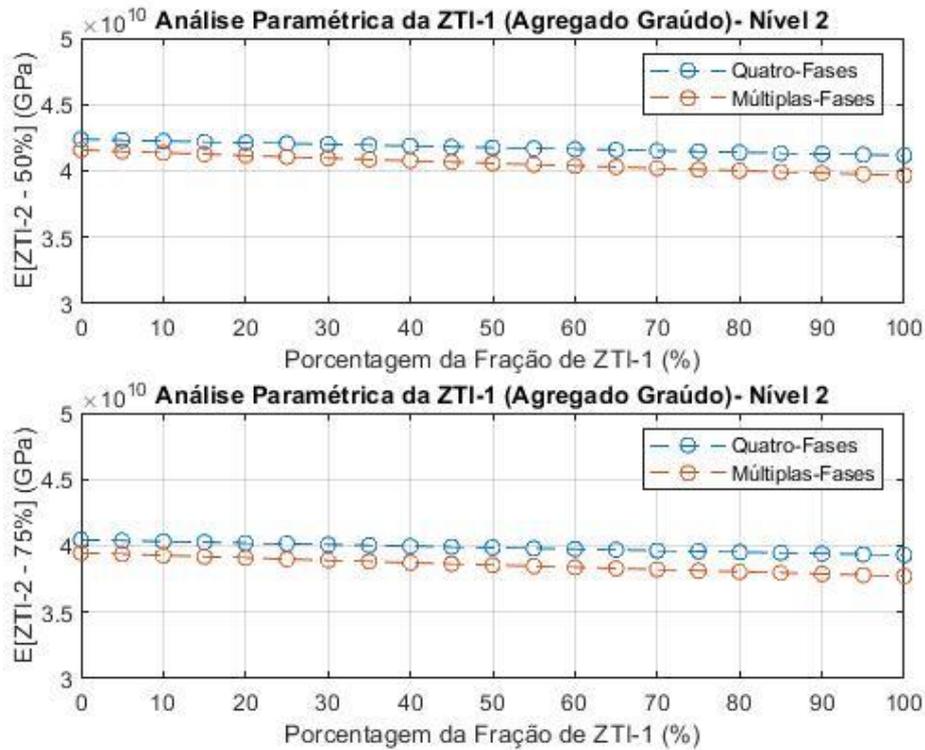
**Fonte:** autor.

Comparando-se a Figura 54 com a Figura 55, percebe-se que existe pouca influência da variação do percentual da zona de transição referente aos agregados miúdos.

Outro fator importante está relacionado com as frações volumétricas da zona de transição modelada, ou seja, quanto maior a zona de transição, mais influência ela terá na propriedade homogeneizada do compósito. Essa conclusão parece simples, contudo, ao se analisar a Tabela

21 verifica-se que pequenas zonas de transição influenciam pouco na variação da homogeneização, levando a uma conclusão importante sobre a mesma, o fato de se poder negligenciar as ZTI em concretos de alto desempenho onde a zona de transição possui propriedades mecânicas próximas da pasta.

**Figura 55:** Análise da paramétrica da ZTI-1 [50% e 75% de ZTI-2].



**Fonte:** autor.

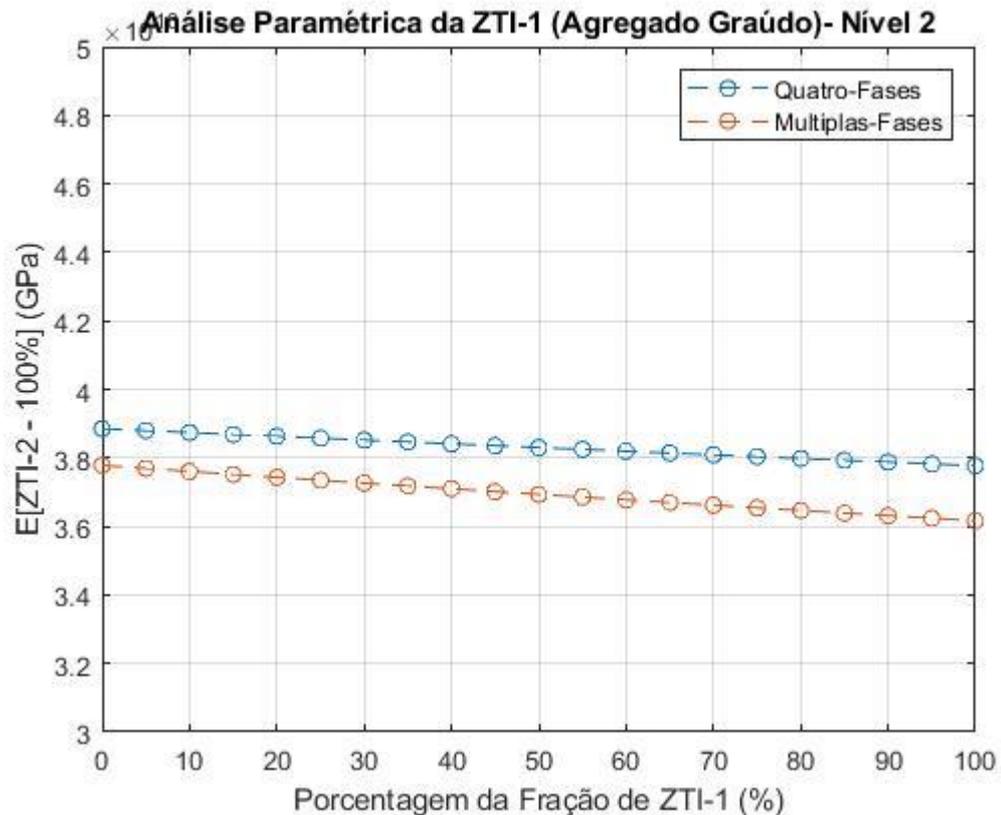
**Tabela 21:** Módulo de elasticidade em função da ZTI-2 e ZTI-1.

| Referência                          | Modelo          | 0%<br>ZTI-1 | 25%<br>ZTI-1 | 50%<br>ZTI-1 | 75%<br>ZTI-1 | 100%<br>ZTI-1 | Total  |
|-------------------------------------|-----------------|-------------|--------------|--------------|--------------|---------------|--------|
| <b>E (GPa)</b><br><b>ZTI-2: 0%</b>  | Quatro-fases    | 4,8235      | 4,7585       | 4,6970       | 4,6386       | 4,5831        | -      |
|                                     | Múltiplas-fases | 4,7865      | 4,7491       | 4,7132       | 4,6781       | 4,6436        | -      |
| <b>Varição</b><br><b>ZTI-2: 0%</b>  | Quatro-fases    | -           | -1,35 %      | -1,29%       | -1,24%       | -1,20%        | -5,07% |
|                                     | Múltiplas-fases | -           | -0,78%       | -0,76%       | -0,74%       | -0,74%        | -3,01% |
| <b>E (GPa)</b><br><b>ZTI-2: 25%</b> | Quatro-fases    | 4,4618      | 4,3747       | 4,3207       | 4,2693       | 4,2204        | -      |
|                                     | Múltiplas-fases | 4,4775      | 4,4439       | 4,4109       | 4,3786       | 4,3469        | -      |
| <b>Varição</b><br><b>ZTI-2: 25%</b> | Quatro-fases    | -           | -1,95%       | -1,23%       | -1,19%       | -1,15%        | -3,01% |
|                                     | Múltiplas-fases | -           | -0,75%       | -0,74%       | -0,73%       | -0,72%        | -2,94% |
| <b>E (GPa)</b><br><b>ZTI-2: 50%</b> | Quatro-fases    | 4,1569      | 4,1056       | 4,0569       | 4,0105       | 3,9663        | -      |
|                                     | Múltiplas-fases | 4,2376      | 4,2063       | 4,1756       | 4,1455       | 4,116         | -      |
| <b>Varição</b><br><b>ZTI-2: 50%</b> | Quatro-fases    | -           | -1,23%       | -1,19%       | -1,14%       | -1,10%        | -4,66% |
|                                     | Múltiplas-fases | -           | -0,74%       | -0,73%       | -0,72%       | -0,71%        | -2,90% |
| <b>E (GPa)</b><br><b>ZTI-2: 75%</b> | Quatro-fases    | 3,9466      | 3,8996       | 3,855        | 3,8126       | 3,772         | -      |
|                                     | Múltiplas-fases | 4,0445      | 4,0151       | 3,9863       | 3,9581       | 3,9303        | -      |
| <b>Varição</b>                      | Quatro-fases    | -           | -1,19%       | -1,14%       | -1,10%       | -1,06%        | -4,49% |

|                    |                 |        |        |        |        |        |        |
|--------------------|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| <b>ZTI-2: 75%</b>  | Múltiplas-fases | -      | -0,73% | -0,72% | -0,71% | -0,70% | -2,85% |
| <b>E (GPa)</b>     | Quatro-fases    | 3,9466 | 3,8996 | 3,855  | 3,8126 | 3,772  | -      |
| <b>ZTI-2: 100%</b> | Múltiplas-fases | 4,0445 | 4,0151 | 3,9863 | 3,9581 | 3,9303 | -      |
| <b>Variação</b>    | Quatro-fases    |        | -1,19% | -1,14% | -1,10% | -1,06% | -4,50% |
| <b>ZTI-2: 100%</b> | Múltiplas-fases |        | -0,73% | -0,72% | -0,71% | -0,70% | -2,85% |

Fonte: autor.

Figura 56: Análise da paramétrica da ZTI-1 [100% de ZTI-2].

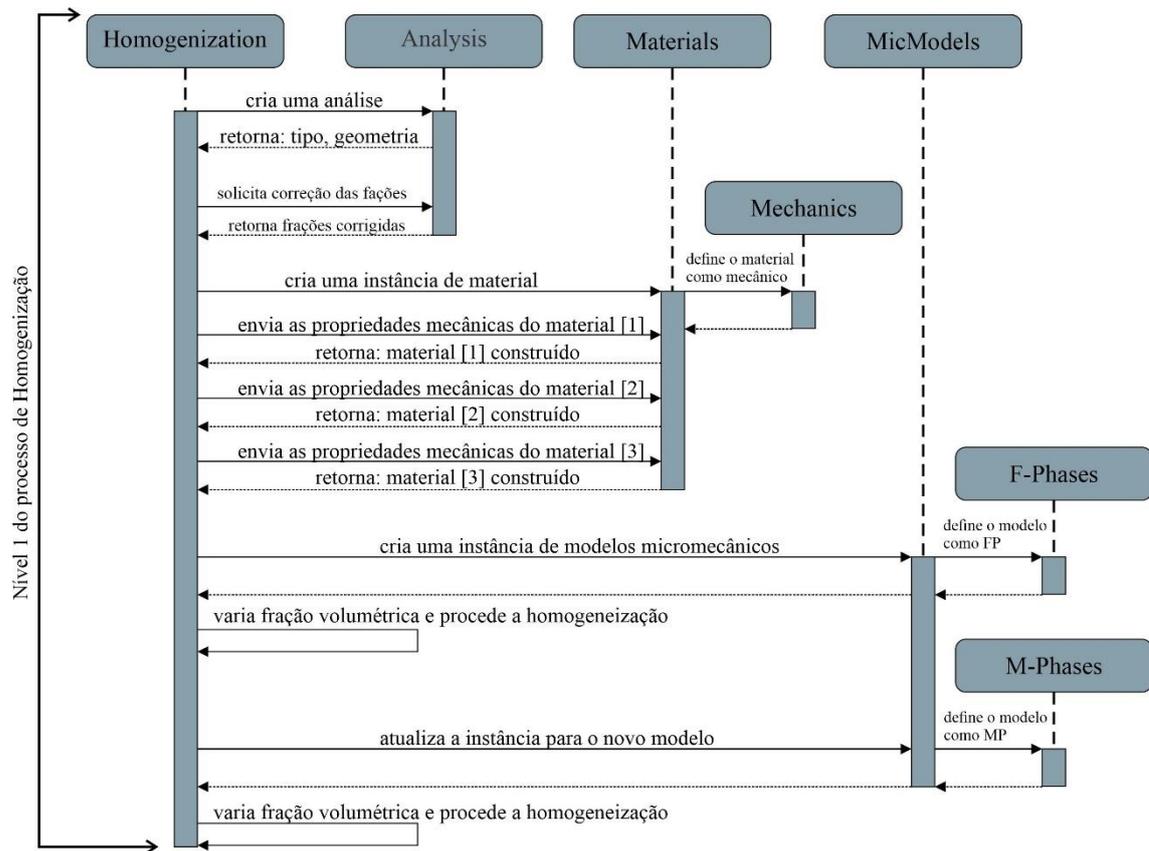


Fonte: autor.

A Figura 56 ilustra o último passo da modelagem multiescala levando em consideração uma porcentagem de inclusão da ZTI-2 de 100% em uma variação de ZTI-1. De forma semelhante às análises anteriores, percebe-se a pouca influência quando a fração estudada é baixa, nesse caso, foi de 2,30%.

Para análise da zona de transição interfacial, utiliza-se apenas o módulo de homogeneização como pode ser observado no diagrama de segmentos da Figura 38.

**Figura 57:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise da influência da zona de transição interfacial.



**Fonte:** Autor.

O primeiro passo da análise é construir um objeto da classe de homogeneização que será responsável pela análise dos dois níveis propostos. Nota-se que a mudança para a análise multiescala está apenas na variação da zona de transição associada a análise.

Uma vez construído todos os objetos da análise, o processo de homogeneização é semelhante ao digrama de segmentos para três níveis anteriormente mencionados. Como não é necessário a correção, o nível 3 da modelagem é descartado, resultando apenas a homogeneização da argamassa e do concreto e a verificação da influência das zonas de transições interfaciais.

### 3.5. ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS CURVAS GRANULOMÉTRICAS NAS FRAÇÕES VOLUMÉTRICAS DAS ZONAS DE TRANSIÇÕES INTERFACIAIS

Continuando as contribuições acerca da zona de transição interfacial, propõe-se um estudo geométrico da influência da mesma, variando as curvas granulométricas como na primeira parte

do estudo e posteriormente realizando uma análise paramétrica das frações volumétricas dos agregados no compósito.

Como se trata de um problema puramente geométrico, os resultados obtidos servem para extrapolação da análise, uma vez que o modelo simplificado mensura a zona de transição considerando a curva granulométrica como esferas, ficando como sugestão o desenvolvimento de modelos baseados em elipsoides.

### 3.5.1. Metodologia

O procedimento metodológico consiste em fixar uma fração volumétrica para os agregados da análise e gerar curvas granulométricas aleatórias com a respectiva fração fixada. Uma vez gerada a curva, procede-se a mensuração da zona de transição interfacial gerada por esses agregados.

O problema consiste em distribuir as porcentagens retidas em cada peneira nas respectivas frações volumétricas definida no problema. Para um melhor entendimento da metodologia adota-se o termo global quando for referido o compósito e local quando estiver trabalhando as partículas.

Sabe-se que o problema é função da fração volumétrica de inclusões  $f_a^{[G]}$ , da fração volumétrica dos agregados miúdos  $f_{am}^{[G]}$ , fração dos agregados graúdos  $f_{ag}^{[G]}$  e das curvas granulométricas  $\phi_{am}^{[L]}$  e  $\phi_{ag}^{[L]}$  (miúdo e graúdo respectivamente).

Para transformar a curva granulométrica dos agregados em uma curva representativa das frações globais utiliza-se a Equação (168).

$$\begin{aligned}\phi_{am}^{[G]} &= \phi_{am}^{[L]} f_{am}^{[G]} \\ \phi_{ag}^{[G]} &= \phi_{ag}^{[L]} f_{ag}^{[G]}\end{aligned}\tag{168}$$

Com as curvas globais, agora é possível computar uma a uma as contribuições de cada diâmetro da curva granulométrica utilizando a Equação (20), sendo o resultado obtido somando todas as

contribuições e multiplicando (termo a termo) pela curva global granulométrica de cada agregado.

$$\begin{aligned} f_{zti2}^{[L]} &= \phi_{am}^{[G]} \cdot \phi_{am}^{[G]} \\ f_{zti1}^{[L]} &= \phi_{ag}^{[G]} \cdot \phi_{ag}^{[G]} \end{aligned} \quad (169)$$

A fração volumétrica global é determinada somando as parcelas de cada diâmetro da curva granulométrica.

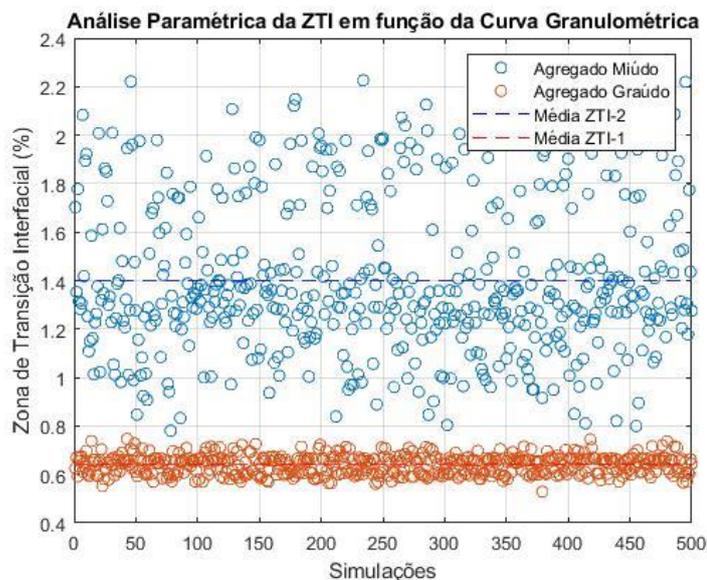
$$\begin{aligned} f_{zti2}^{[G]} &= \sum_{i=1}^n f_{zti2}(i)^{[L]} \\ f_{zti1}^{[G]} &= \sum_{i=1}^m f_{zti1}(i)^{[L]} \end{aligned} \quad (170)$$

Onde  $n$  é a quantidade de peneiras de agregados miúdo e  $m$  a quantidade de peneiras de agregados graúdos na série estudada.

### 3.5.2. Análise da influência das curvas granulométricas nas frações de ZTIs

Realizou-se 500 simulações de curvas granulométricas com distribuição normal de média 0,5 e desvio padrão de 0,2, considerando uma fração volumétrica total de agregados de 60% sendo 40% de agregados graúdos e 20% de agregados miúdos com uma espessura de zona de transição e  $40\mu m$ . A Figura 58 ilustra a dispersão das zonas de transições interfaciais dos agregados miúdos e graúdos.

**Figura 58:** ZTI em função da curva granulométrica.



**Fonte:** autor.

Nessas condições de aleatoriedade percebe-se uma média 0,64% para zona de transição referente aos agregados graúdos e 1,40% para a zona de transição dos agregados miúdos. Como as curvas foram geradas aleatoriamente, percebe-se alguns *outliers* na dispersão devido ao desvio padrão adotado.

Nota-se ainda que o modelo empregado (simplificado) é mais conservador em relação aos valores de ZTIs uma vez que é computado valores para cada diâmetro e os vazios gerados pelo empacotamento dessa classe granulométrica não é preenchido por outras partículas. Contudo, a principal contribuição dessa análise está no fato de se verificar a influência da curva granulométrica adotada com uma variação razoável entre os resultados obtidos, chegando à conclusão importante em uma análise de homogeneização explicitar a curva granulométrica adotada no problema, independente do modelo de avaliação que irá ser utilizado.

### 3.5.3. Análise da influência das frações de agregados nas ZTIs

Uma vez definido a influência das curvas granulométricas parte-se para verificação do comportamento das zonas de transição interfaciais quando se varia as frações de agregados graúdos e miúdos na análise.

Nessa hipótese parte-se ainda de uma fração global de 60% de agregados miúdos e graúdos e faz-se uma parametrização na forma:

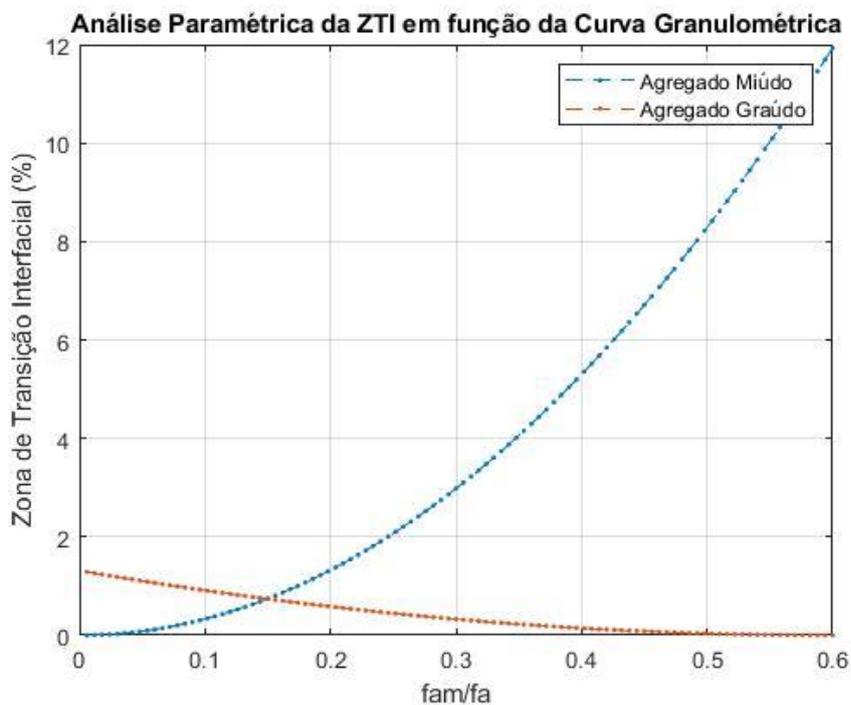
$$\begin{aligned} f_{am}^{[G]} &= \delta f_a^{[G]} \\ f_{ag}^{[G]} &= f_a^{[G]} - f_{am}^{[G]} \end{aligned} \quad (171)$$

O parâmetro  $\delta$  varia de 0 a 1, sendo  $\delta = 0$  correspondente a fração volumétrica de agregado miúdos também igual a zero e a fração de agregado graúdo de 60% como definido inicialmente. Já quando  $\delta = 1$  tem-se o inverso, os agregados miúdos chegam ao valor máximo de 60% enquanto os agregados graúdos assumem o valor nulo.

A Figura 59 ilustra a evolução das zonas de transição parametrizada para 60% de agregados no compósito. Nota-se que ao se aumentar os valores de agregado miúdos na mistura incrementa-se significativamente o valor da zona de transição interfacial referente a essa fase.

Uma importante investigação se dá na quantidade máxima de agregados miúdos no compósito de forma que maximize as propriedades mecânicas homogeneizadas.

**Figura 59:** Análise paramétrica da ZTI.

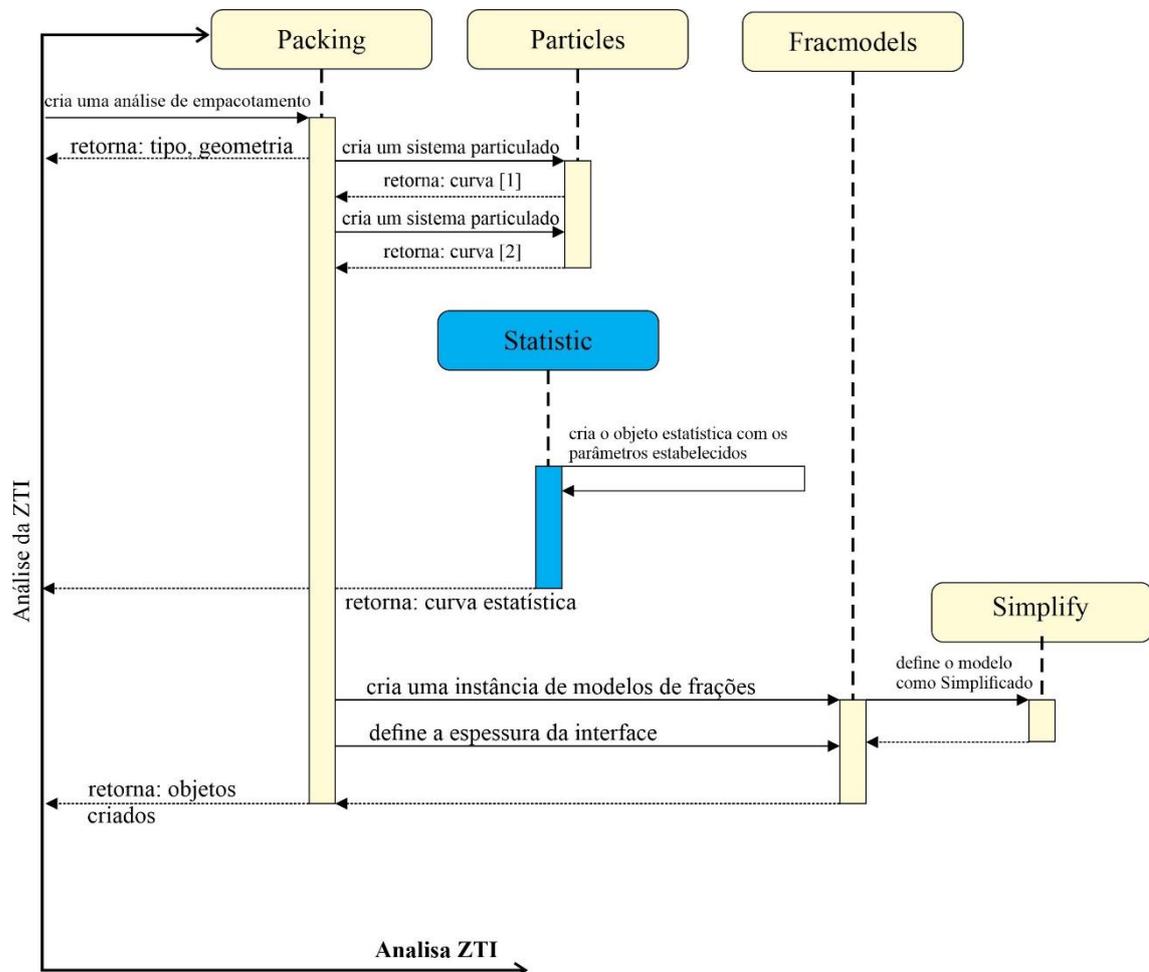


**Fonte:** autor.

No valor de  $\delta = 0,2$  encontra-se aproximadamente os valores obtidos na análise anterior de 0,64% em média para zona de transição dos agregados graúdos e 1,40% para zona de transição dos agregados miúdos.

Nesse problema a utilização do *framework* também é simplificada uma vez que não haverá homogeneização do compósito. Desta feita parte-se do problema de empacotamento, necessitando a utilização dos módulos de empacotamento e de estatística como pode ser observado na Figura 60.

**Figura 60:** Diagrama de segmentos do estudo de caso para análise geométrica da influência da zona de transição interfacial.



**Fonte:** Autor.

O passo inicial é a criação de um objeto de empacotamento, ainda que não vá utilizar os modelos de empacotamento eles estão interligados na arquitetura orientada a objetos proposta. Os

objetos associados a classe principal de empacotamento, para essa análise são os de criação das partículas e os modelos de frações simplificados.

Novamente o módulo de estatística se faz necessário devido à necessidade de criação de curvas granulométricas aleatórias. O problema geométrico pode ser estudado apenas com o instanciamento dessas classes supracitadas explicitado no diagrama de segmentos da Figura 60.

#### 4. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Tomando-se como referências todas as análises realizadas no trabalho, pode-se iniciar esse capítulo com a afirmação de que é possível determinar as propriedades mecânicas do concreto por meio da micromecânica, após um processo de homogeneização de sua estrutura. Contudo, algumas limitações são perceptíveis como explicitado adiante.

Os modelos que consideram o estado de deformações e de tensões constantes, não se aplicam à modelagem de qualquer compósito. Esses modelos estabelecem limites aos quais as propriedades homogeneizadas estarão inseridas. Pode-se incluir dentro dessas condições a Regra das Misturas e os limites de Hashin.

Os demais modelos de homogeneização, como os advindos da teoria da elasticidade, bem como os modelos baseados a micromecânica dos campos médios, são capazes de avaliar as propriedades mecânicas do concreto sendo o erro diretamente proporcional a quantidade de fases modeladas.

A avaliação de propriedades do concreto convencional com modelos de duas fases, induz a erros significativos e nem com processo multiescala é possível introduzir a zona de transição interfacial ao problema.

Ao se tentar modelar a zona de transição como inclusão, recairia no problema de a inclusão não atender as geometrias de construção do tensor de Eshelby (esférica, elipsoide, disco), sendo a mesma um anel esférico. Por outro lado, ao se tentar modelar a mesma como sendo a matriz do problema, recaí em uma limitação da matriz na micromecânica dos campos médios ser admitida infinita e a zona de transição possui fração volumétrica muito pequena, inviabilizando essa perspectiva.

As análises desenvolvidas demonstraram que ao se introduzir a zona de transição interfacial ao problema, houve uma minimização do erro em relação ao ensaio experimental, quando foram adotados modelos de homogeneização de quatro e múltiplas fases, sendo essa a recomendação proposta por esse trabalho.

Quando se pensa em otimizar as propriedades do concreto, o acoplamento com modelos de otimização de sistemas particulados se mostrou eficiente, conseguindo excelentes resultados apenas empacotando os grãos. Os resultados obtidos com a otimização dos grãos foram acoplados a diversos modelos de homogeneização e aplicados ao concreto de forma satisfatória.

Uma conclusão preliminar é que ao modificar a curva granulométrica, os resultados da homogeneização do compósito serão alterados, seguindo intuitivamente o grau de empacotamento que os grãos finos conseguem estabelecer no sistema, aumentando os resultados das propriedades finais.

Para o melhor entendimento da influência das curvas granulométricas, fixaram-se as frações volumétricas de agregados, verificando que curvas com maiores concentrações de partículas nas extremidades da curva granulométrica geram resultados diferenciados de uma distribuição normal, sendo maior ao ter uma maior concentração de finos.

As curvas granulométricas também são responsáveis por influenciar as frações volumétricas das zonas de transições interfaciais e conseqüentemente os valores das propriedades mecânicas do concreto homogeneizado. Alguns fatores que influenciam na modelagem multiescala do concreto corroboram para importância de se construir e explicitar qual curva granulométrica está sendo empregada na análise.

Apesar da modelagem indicar que curvas granulométricas com concentração de agregados miúdos maximizam as propriedades mecânicas, uma reflexão acerca do compósito deve ser levantada, pois, como se trata de concreto, muitos outros fatores devem ser considerados para se projetar um compósito com essas características como: retração, fluência, trabalhabilidade dentre outros.

Outro resultado importante está na consideração de que as curvas granulométricas também influenciam nas frações volumétricas das zonas de transições interfaciais geradas pelos agregados graúdo e miúdos.

A análise paramétrica proposta neste trabalho demonstra que quanto maior a fração volumétrica de agregados miúdos na análise, aumenta-se consideravelmente os valores associados a zona de transição dos agregados miúdos.

O acoplamento das diversas técnicas foi viabilizado pela construção de um *framework* com arquitetura computacional favorável para a problemática, baseada em uma programação orientada a objetos, facilitando o seu reuso e implementação de novas funcionalidades, sem precisar alterar o código base.

A associação dos modelos de otimização geométrica de sistemas particulados com a homogeneização de compósitos implementados no *framework* propicia uma nova dosagem do concreto maximizando suas propriedades mecânicas. Apesar do acoplamento indicar essa maximização das propriedades mecânicas, uma reflexão acerca do compósito deve ser levantada, pois, como se trata de concreto, muitos outros fatores devem ser considerados para se projetar um compósito com essas características como: retração, fluência, trabalhabilidade dentre outros.

Algumas perspectivas podem ser levantadas para utilização em escala industrial das contribuições deixadas nesse trabalho. A proposta de otimização e modelagem multiescala, foram comparadas experimentalmente com um trabalho encontrado na literatura, fazendo-se necessário, ensaios com novos concretos, incluindo concretos de alto desempenho e se é possível a negligência da zona de transição.

Quando se pensa em dosagem e usinagem de concreto em larga escala, diversos materiais são coletados nos mesmos locais em uma região, ou seja, sendo bem caracterizado os agregados miúdos e graúdos de uma região, pode-se ter essa ferramenta como análise prévia das propriedades do compósito apenas definindo suas frações na composição, isso diminui significativamente a necessidade de rompimento de corpos de prova que consomem tempo de recurso.

Esse trabalho começa a preencher uma lacuna interessante na proposta de acoplamento, uma vez que foi desenvolvido o acoplamento entre modelos de otimização de curvas granulométricas e empacotamento compressível a modelos de homogeneização, porém é

possível acoplar outros métodos numéricos como o método dos elementos discretos, descrito sucintamente no decorrer do texto.

#### 4.1. SUGESTÕES

A primeira sugestão a trabalhos futuros versa por uma proposta de avaliação da resistência do concreto, utilizando modelagem micromecânica e passos de homogeneização. Servindo com inspiração, destacam-se os trabalhos de Yang e Huang (1996) e Caporale, et al. (2014).

Já foi mostrado anteriormente que ao se considerar o concreto como material bifásico, negligenciando fases importantes na construção do mesmo, introduz à modelagem erros significativos, tornando o procedimento não adequado. Caporale (2014) bebendo das ideias iniciais de Yang e Huang (1996), propôs um modelo de avaliação do concreto com critérios de falha para o mesmo. Neste trabalho, o concreto é tratado em um modelo de quatro fases, generalizando a formulação em tensões da micromecânica (CAPORALE, et al., 2014).

Os campos abertos para esse problema encontram-se na metodologia de análise que foi estabelecida para material bifásico, apesar de expandida para qualquer modelo micromecânico ainda pode ser insuficiente diante de outras fases que o concreto possui. No modelo em tensões proposto é impossível de se introduzir a zona de transição (modelos bifásicos). Outra vertente se encontra nas tensões avaliadas que são tensões médias. Sugere-se ainda expandir matematicamente a formulação para modelos de três fases.

A segunda sugestão está em tentar transformar um problema global em um problema local onde pode-se homogeneizar pontualmente uma geometria qualquer a partir da geração de uma malha regular. Todos os conceitos e metodologias descrito nesse trabalho podem ser aplicados, pois simplificarmente, os nós da malha seriam as inclusões e os elementos conectados a esse nó seriam a matriz. Resumidamente, para cada nó se transformaria em um problema da inclusão equivalente de Eshelby.

Os campos abertos para esse problema encontram-se na metodologia de análise, tem como destaque que o problema é totalmente dependente da malha gerada, devendo haver um controle na malha e no refinamento de maneira a não gerar contato entre as inclusões; Problemas

computacionais podem ser incluídos como o ajuste dos nós de interface uma vez que parte dele não deve ser analisado. Entretanto a maior contribuição estaria em identificar possíveis aplicações, sendo uma possível aplicação na análise da segregação do concreto.

A terceira e última sugestão dessa tese consiste em fazer uma retroanálise, utilizando multiescala do compósito via micromecânica a partir da definição das propriedades finais do mesmo. Ao se definir a resistência característica do concreto  $f_{ck}$ , existem normativas como NBR, ACI, Fib Model Code, Eurocode que consegue estimar o módulo de elasticidade desse compósito.

A partir dessa informação e de como se constrói o concreto via multiescala é possível estimar as frações volumétricas de cada fase: agregado graúdo, miúdo e pasta de cimento podendo realizar a dosagem do concreto por micromecânica.

Os campos abertos para esse problema encontram-se na metodologia de análise, tem como destaque que a fração volumétrica é um tensor (processo inverso), necessitando uma melhor interpretação desse resultado obtido. Existe a necessidade de se avaliar as equações de recorrência desses modelos, matematicamente podendo alguns modelos serem extremamente complexos de explicitar o valor da fração volumétrica, principalmente quando estiver estratégias numéricas de resolução.

Como se trata de um campo de dosagem com métodos clássicos estabelecidos na literatura, sugere-se validação experimental para diversos traços de concreto.

## REFERÊNCIAS

- ANDREASEN, A.H.M. e ANDERSEN, J. 1930.** Über die Beziehung zwischen Kornabstufung. *Colloid & Polymer Science*. 3, 1930, Vol. 50, pp. 217-228.
- ARAÚJO, Eliakim Martins, SILVA, Italo Nunes; OLIVEIRA, Joaquim Branco de; CAVALCANTE JR., Edmilson Gomes; ALMEIDA, Bruno Marçal de. 2010.** Aplicação de seis distribuições de probabilidade a séries de temperatura máxima em Iguatu - CE. *Revista Ciência Agronômica*. 1, Ceará de 2010, Vol. 41.
- ASSAN, A.E. 1999.** *Método dos Elementos Finitos – Primeiros Passos*. Campinas, São Paulo : Editora da Unicamp, 1999.
- ASTM:D2938-95. 2002.** *Standard Test Method for Unconfined Compressive Strength of Intact Rock Core Specimens*. West Conshohocken, PA : Specimens (Withdrawn 2005), 2002.
- BARBOSA, Anderson Henrique. 2003.** *Contribuição sobre a obtenção do Módulo de Elasticidade do Concreto*. Recife-PE : Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, 2003.
- BARHDADI, El H., LINPINSKI, Paul e CHERKAUOUI, Mohamed. 2007.** Four Phase Model: A New Formulation to Predict the Effective Elastic Moduli of Composites. *Journal of Engineering Materials and Technology*. 2007, Vol. 129, pp. 313-320.
- BATHE, K. J. 1996.** *Finite element proceddures* . New Jersey : Prentice-hall, 1996.
- BEBER, Andrei José. 2008.** Comportamento Estrutural de Vigas de Concreto Armado Reforçadas com Compósitos de Fibra de Carbono. *Tese de Doutorado em Engenharia Civil*. s.l., Porto Alegre-RS : Universidade Federal do Rio GRande do Sul - UFRGS, 2008.
- BENVENISTE, Y. 1987.** A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*, v.6, Issue 2. June de 1987, pp. 147-157.
- BERNARD, O, ULM, Franz-Josef e LEMARCHAND, Eric. 2003.** A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials. *Cement and Concrete Research*. 33, 2003, pp. 1293–1309.
- BEUSHAUSEN, Hans e DITTMER, Thomas. 2015.** The influence of aggregate type on the strength and elastic modulus of high strength concrete. *Construction and Building Materials*. 74, 2015, pp. 132–139.
- BREBIA, C.A. 1978.** *The boundary element method for engineers*. London : Pretence Press, 1978.
- CAPORALE, A., LUCIANO, R. e FEO, L. 2014.** Damage mechanics of cement concrete modeled as a four-phase. *Composites: Part B*. 2014, pp. 124-130.
- CASELLA, George e BERGER, Roger L. 2002.** *Statistical Inference*. Pacific Grove, EUA : Duxbury Thomson Learning, Second Ed., 2002.
- CASTRO, A. L. e PANDOLFELLI, V. C. 2009.** Concepts of particle dispersion and packing for special concretes production. *Cerâmica*. 55, 2009, pp. 18-32 .

**CHEN, H., YEN, T. e CHEN, K. 2003.** Evaluating Elastic Modulus of Lightweight Aggregate. *ACI Materials Journal*. 2003, pp. 108-1012.

**CHEN, Q., et al. 2016.** “A Multiphase Micromechanical Model for Hybrid Fiber Reinforced Concrete Considering the Aggregate and ITZ. *Construction and Building Materials*,. April de 2016, Vol. 114, pp. 839-850.

**CHRISTENSEN, R.M. e LO, . K.H. 1979.** Solutions for Effective Shear Properties in Three Phase Sphere and Cylinder Models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v.27, Issue 4. August de 1979, pp. 315-330.

**CINTRA, D. T. 2016.** Metodologia de paralelização híbrida do DEM com controle de balanço de carga baseado em curva de Hilbert. Recife : Tese de Doutorado em Engenharia Civil, Universidade Federal de Alagoas, 2016.

**CONSTANTINIDES, Georgios e ULM, Franz-Josef. 2004.** The effect of two types of C-S-H on the elasticity of cement-based materials: Results from nanoindentation and micromechanical modeling. *Cement and Concrete Research*. 34, 2004, pp. 67–80.

**COOK, R. D., MALKUS, D. S. e PLESHA, M. E.. 1989.** *Concepts and applications of finite element analysis. Third edition.* New York : John Wiley & Sons, 1989.

**COSTA, E. J. H. 2017.** Homogeneização de Compósitos Reforçados por Fibras. *Dissertação, Engenharia Civil*. Maceió, Alagoas : Universidade Federal de Alagoas, 2017.

**CUNDALL, P. A. e STRACK, O. D. L. 1979.** A discrete numerical method for granular assemblies. *Geotéchnique*. 1979, Vol. No. 1, 29, pp. 47-65.

**DE LARRARD, F. 1999.** *Concrete Mixture Proportioning: Cientific Approach*. London, England : PINI, 1999. ISBN 0367863561.

**DE LARRARD, F. e SEDRAN, T. 1994.** Optimization of ultra-high-performance concrete by the use of a packing model. *Cement and Concrete Research*. 24, 1994, Vol. 6, pp. 997-1009.

**DRAGO, Anthony e PINDERA, Marek-Jerzy. 2006.** Micro-macromechanical analysis of heterogeneous materials: Macroscopically homogeneous vs periodic microstructures. *Composites Science and Technology*. 2006, pp. 1243-1263.

**DRIDI, W. 2013.** Analysis of Effective Diffusivity of Cement Based Materials by Multi-Scale Modelling. *Materials and Structures*. 1-2, 2013, Vol. 46, pp. 313-326.

**DRUGAN, W.J. e WILLIS, J.R. 1996.** A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites, *J. Mech. Phys. Solids* 44 (1996) 497–524. *J. Mech. Phys. Solids*. 44, 1996, pp. 497–524.

**ECKARDT, S. e KÖNKE, C. 2007.** Adaptive damage simulation of concrete using heterogeneous multiscale models. *Journal of Algorithms & Computational Technolog.* 2007, Vol. 2.

**ECKARDT, Stefan. 2009.** *Adaptive heterogeneous multiscale models for the nonlinear simulation of concrete*. Weimar : Dissertation, Bauhaus-Universität Weimar, 2009.

**ESHELBY, J.D. 1957.** The determination of the elastic Field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *R.E.Peierls, F.R.D.* 1 de March de 1957, Vol. 241, pp. 376-396.

**FARIAS, L. A. F., 2006.** *Implementação do método de dosagem científica para o concreto compactado com rolo (CCR) de barragens.* Goiania : Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Goiás, 2006.

**FENNIS, S. A. A. M. e C., WALRAVEN J. 2012.** Using particle packing technology for sustainable concrete mixture design. *HERON.* 2, 2012, Vol. Vol. 57, pp. 73-101.

**FERREIRA, Fábio Martins Gonçalves. 2005.** *Desenvolvimento e Aplicações de um Framework Orientado a Objetos para Análise Dinâmica de Linhas de Ancoragem e de Risers.* Maceió-AL : Dissertação de Mestrado, Engenharia Civil, Universidade Federal de Alagoas, 2005.

**FULLER, W. e THOMSON, S. 1907.** (1907) The Laws of Proportioning Concrete. *Transactions of the American Society of Civil Engineers.*, LIX, 1907, pp. 67-143.

**FUNK, J.E. e DINGER, D.R. 1994.** Predictive Process Control of Crowded Particulate Suspensions. *Applied to Ceramic Manufacturing.* . Boston: Kluwer Academic Publishers., 1994.

**FURNAS, C.C. 1931.** Grading Aggregates - I. - Mathematical Relations for Beds of Broken Solids of Maximum Density. *Industrial and Engineering Chemistry.* 23, 1931, pp. 1052–1058.

**GARBOCZI, E. J. e BENTZ, D. P. 1997.** Analytical Formulas for Interfacial Transition Zone Properties. *Advanced Cement Based Materials.* 1997, Vol. 6, pp. 99-108.

**GÖBEL, L., et al. 2018.** Viscoelastic Behavior of Polymer-Modified Cement Pastes: Insight from Downscaling Short-Term Macroscopic Creep Tests by Means of Multiscale Modeling. *Applied Sciences.* . 487, 2018, Vol. 8. .

**HÄFNER, Stefan, et al. 2006.** Mesoscale modeling of concrete: Geometry and numerics. *Computers and Structures.* 84, 2006, pp. 450–461.

**HASHIN, Z. 1983.** Analysis of composite materials—a survey. , *ASME J. Appl. Mech.* 1983, Vol. 50, pp. 481–505.

**HASHIN, Z. e ROSEN, B. W. 1964.** The Elastic Moduli of Fiber-Reinforced Materials. *Journal of Applied Mechanics.* 1964, Vol. 31, pp. 223-232.

**HASHIN, Z. e SHTRIKMAN, S. 1962.** On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *J Mech Phys Solids.* 1962, Vol. 10, pp. 335–342.

**HASHIN, Z. 1962.** The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials. *Journal of Applied Mechanics.* 1962, Vol. 29, pp. 143-150.

**HASHIN, Zvi. 1988.** The differential scheme and its application to cracked materials. *Journal of the mechanics and Physics of Solids,* v.36, Issue 6. 1988, pp. 719-734.

**HILL, R. 1965.** A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.* 4, August de 1965, Vol. 13, pp. 213-222.

- HORI, Muneo e NEMAT-NASSER, Sia. 1993.** Double-inclusion model and overall moduli. *Mechanics of Materials*. 1993, Vol. 14, pp. 189-206.
- KAW, Autar. 2006.** Mechanics of Composite Materials. New York : Taylor & Francis Group, LLC, 2nd ed., 2006.
- LARRARD, F. D. 1999.** *Concrete Mixture Proportioning: Cientific Approach*. London, England : PINI, 1999. ISBN 0367863561.
- LI, D., et al. 2018.** Prediction of cracking, yield and ultimate strengths based on the concrete three-phase micromechanics model. *Construction and Building Materials*. 2018, Vol. 193, pp. 416-425.
- LI, G., ZHAO, Y, e PANG, S. 1999.** Four-phase sphere modeling of effective bulk modulus of concrete. *Cement and Concrete Research*. Feb. de 1999, Vol. vol. 29, no. 6, pp. 839-845.
- LI, Yaqiang, LI, Yue e Wang, RUI. 2019.** Quantitative evaluation of elastic modulus of concrete with. *Construction and Building Materials*. 2019, Vol. 212, pp. 295–303.
- LIAO, Kuo-Yu, et al. 2004.** A study on characteristics of interfacial transition zone in concrete. *Cement and Concrete Research*. 34, 2004, pp. 977 – 989.
- LONDERO, C., et al. 2017.** Determinação da densidade de empacotamento de sistemas granulares compostos a partir da areia normal do IPT: comparação entre modelos de otimização de distribuição granulométrica e composições aleatórias. *Cerâmica, São Paulo*. jan./mar. de 2017, Vol. 63, pp. 22-33.
- LOPES, G. O., CINTRA, D.T. e LIRA, W.M. 2020.** A geometric separation method for non-uniform disk packing with prescribed filling ratio and size distribution. *Computational Particle Mechanics*. 2020.
- LU, Binglin e TORQUATO, S. 1992.** Nearest-surface Distribution Functions for Polydispersed Particle Systems. *PHYSICAL REVIEW A*. 1992, Vols. 5529-5544, pp. 45-.
- MCGEARY, R.K. 1961.** Mechanical packing of spherical particles. *Journal of the American Ceramic Society*. 44, 1961, Vol. 10, pp. 513-522.
- McLAUGHLIN, R. 1977.** A study of the differential scheme for composite materials. *International Journal of Engineering Science*. 4, 1977, pp. 237-244.
- MEDDAH, Mohammed Seddik, ZITOUNI, Salim e BEIÂABES, Saïd. 2010.** Effect of content and particle size distribution of coarse aggregate on the compressive strength of concrete. *Construction and Building Materials*. 24, 2010, pp. 505–512.
- MEHTA, P. Kumar e MONTEIRO, Paulo J. M. 1994.** *Concreto: Estrutura, Propriedades e Materiais*. São Paulo : PINI, 1994. ISBN 8572660402.
- MONTGOMERY, Douglas C. e RUNNER, George C. 2002.** Applied statistics and probability for engineers. United States of America : 3rd ed, 2002.
- MORI, T e TANAKA, K. 1973.** Average Stree in Matrix and Average Energy of Materials with mis-Fitting Inclusions. *Act. Metall*. 1973, pp. 571-574.

**NBR:10341. 2006.** *Agregado graúdo para concreto - Determinação do módulo de deformação estático e do diagrama tensão-deformação em rocha matriz - Método de ensaio.* Rio de Janeiro : s.n., 2006.

**NGUYEN, Vinh Phu, STROEVEN, Martijn e SLUYS, Lambertus Johannes. 2012.** Multiscale failure modeling of concrete: Micromechanical modeling, discontinuous homogenization and parallel computations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2012, pp. 201–204 .

**ODEGARD, G. 2004.** Constitutive modeling of piezoelectric polymer composites. *Acta Materialia.* 2004, Vol. 52, pp. 5315–5330.

**OLIVEIRA, F. C. 2020.** *Propriedades mecânicas de pastas de cimento: microestrutura, variabilidade e análises probabilísticas.* São Paulo : Dissertação de Mestrado, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, 2020.

**OLIVEIRA, F.C, et al. 2020.** Weibull Probabilistic Analyses on Tensile Strength of Limestone Calcined Clay (LC3) and Portland Cement Pastes. *S. Bishnoi (Ed.), Calcined Clays Sustain. Concr., Springer Singapore.* 2020, pp. 417–424.

**ORTEGA, F. S., et al. 1997.** The Influence of Alfred and Andreasen Models on the Microstructure and Green Density of Ceramic Compacts Obtained by Slip Casting and Dry Pressing. [ed.] 283-284. *Cerâmica.* 43 , 1997.

**OSTOJA-STARZEWSKI, M. 2002.** Microstructural randomness versus representative volume element in thermomechanics. *ASME J. Appl.Mech.* 69. 2002, Vol. 69, pp. 25-35.

**PICHLER, Bernhard. e HELLMICH, Christian. 2011.** Upscaling quasi-brittle strength of cement paste and mortar: A multi-scale engineering mechanics model. *Cement and Concrete Research.* 2011, pp. 467–476.

**POWELL, M. J. 1979.** Computer-simulated random packing of spheres. *Powder Technology.* 25, 1979, pp. 45-52.

**PROKOPSKIA, G. e HALBINIAKB, J. 2000.** Interfacial transition zone in cementitious materials. *Cement and Concrete Research.* 30, 2000, pp. 579 - 583.

**REUSS, A. 1929.** Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.* 1929, Vol. 9, pp. 49–58.

**RODRIGUES, Eduardo Alexandre. 2015.** *Um modelo multiescala concorrente para representar o processo de fissuração do concreto.* São Paulo : Tese de Doutorado. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2015.

**SCRIVENER, KAREN L., CRUMBIE, ALISON K. e LAUGESEN, PETER. 2004.** The Interfacial Transition Zone (ITZ) Between Cement Paste and Aggregate in Concrete. *INTERFACE SCIENCE.* 12, 2004, pp. 411–421.

**SHARMA, M. e BISHNOI, S. 2020.** Influence of properties of interfacial transition zone on elastic modulus of concrete: Evidence from micromechanical modelling. *Construction and Building Materials.* 2020, Vol. 246, pp. 1-11.

- SHI, Chunxiang, FAN, Houfu e LI, Shaofan. 2020.** Interphase Model for Effective Moduli of. *Journal of Eng. Mechanic.* 2020, pp. 141-153.
- SILVA, Alex Sandro Malaquias da. 2004.** *Dosagem de Concreto pelos Métodos de Empacotamento Compressível e AITCIN-FAURY Modificado.* Rio de Janeiro : Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE-UFRJ, 2004.
- SILVA, Nátalia Vieira da. 2018.** *Método de Determinação de Resistência à Tração e Módulo de Elasticidade de Agradados Graúdos Naturais.* São Paulo : Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo - USP, 2018.
- SILVA, Natália Vieira da., et al. 2019.** Improved method to measure the strength and elastic modulus of single aggregate particles. 2019.
- SILVA, R. M. S. e MARQUES, S.P.C. 2011.** Study on Effective Properties of Piezoelectric Composites Using Micromechanical Models. In: *CILAMCE - Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering.* Ouro Preto. : XXXII - CILAMCE, 2011.
- SIVENTHIRARAJAH, K, YODA, Y e ELAKNESWARAN, Y. 2021.** A two-stage model for the prediction of mechanical properties of cement paste. *Cement and Concrete Composites.* 2021, Vol. 115.
- SOUZA, H. M., et al. 2015.** Predição da composição do clínquer industrial utilizando minimização da energia livre de Gibbs. *Cerâmica.* 61, 2015, pp. 23-30.
- STROVEN, M., ASKES, H. e SLUYS, L.J. 2004.** Numerical determination of representative volumes for granular materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 2004, pp. 3221–3238.
- TUTIKIAN, B. F. e HELENE, P. 2011.** Dosagem dos Concretos de Cimento Portland. *ISAIA, G. C. Concreto: Ciência e Tecnologia, IBRACON.* 2011.
- VAN MIER, J.G.M. 1997.** Fracture process of concrete: Discontinuous crack growth and crack interface for fracture models. *CRC Press.* 1997.
- VENTURINI, W.S. 1982.** *Application of the boundary formulation to solve geomechanics problems.* Southampton : Phd Tesis, University of Southampton, 1982.
- . 1988. *Um estudo sobre o método dos elementos de contorno e suas aplicações em problemas de engenharia.* São Paulo : Tese de Livre Docência, 1988.
- VOIGT, W. 1889.** Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Ann Phys.* 1889, Vol. 274, pp. 573–587.
- WALPOLE, L.J. 1969.** On the overall elastic moduli of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids,* v.17, Issue 4. September de 1969, pp. 235-251.
- WHITE, H. E. e WALTON, S. F. 1937.** Particle Packing and Particle Shape. *J. Am. Ceram. Soc.* 20, 1937, pp. 156-166.
- WU, Ke-Ru, et al. 2011.** Effect of coarse aggregate type on mechanical properties of high-performance concrete. *Cement and Concrete Research.* 31, 2011, pp. 1421–1425.
- YANG, C.C. e HUANG, R. 1996.** A Two-Phase Model for Predicting the Compressive Strength of Concrete. *Cement and Concrete Research.* 1996, pp. 1567-1577.

**ZHANG, Jianjian e SUN, Guowen. 2019.** Modeling and Software Development of the Interfacial Transition Zone of Ellipsoidal Aggregate in Cement-Based Composites. *Journal of Wuhan University of Technology-Mater Sci Ed.* 3, 2019, Vol. 34, pp. 648-654.

**ZHANG, Y., et al. 2017.** A multi-level micromechanical model for elastic properties of hybrid fiber reinforced concrete. *Construction and Building Materials.* Oct. de 2017, Vol. vol. 152, pp. 804-817.

**ZIENKIEWICZ, O.C. e TAYLOR, R.L. 2000.** *The Finite Element Method – Vol. 1: The Basis.* Massachusetts : Butter-worth-Heinemann, Oxford, 2000. Vol. 5.

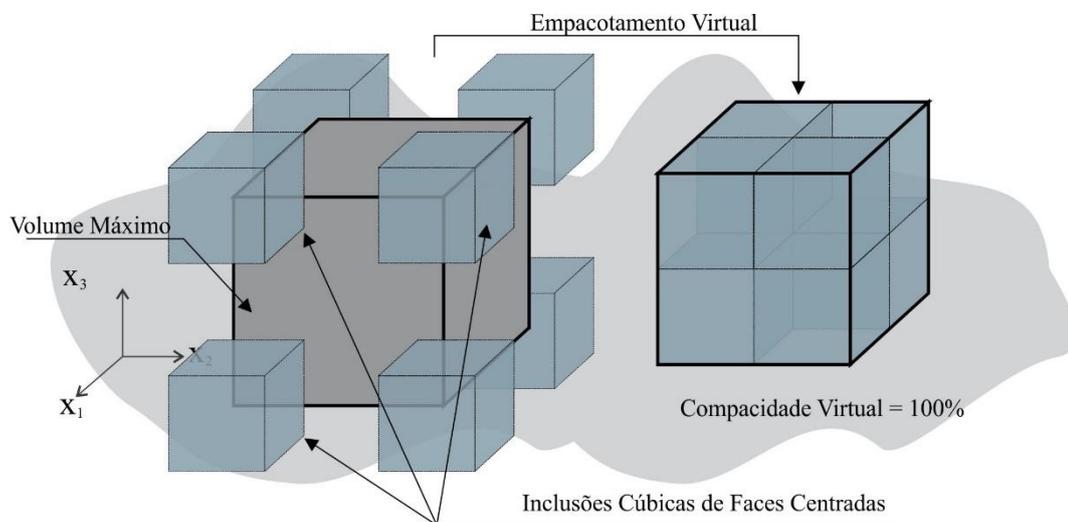
## A. APÊNDICE: MÉTODO DO EMPACOTAMENTO COMPRESSÍVEL

### A.1. COMPACIDADE VIRTUAL

Para iniciar o estudo do modelo de empacotamento compressível, é importante realizar definições acerca do problema geométrico, que posteriormente será utilizado como parâmetros ótimos geométricos.

A primeira definição se encontra no empacotamento virtual, que consiste em arranjar geometrias de forma a conseguir o máximo de material e o mínimo de vazios. Imagine-se que as geometrias sejam quadradas como mostrado na Figura 61.

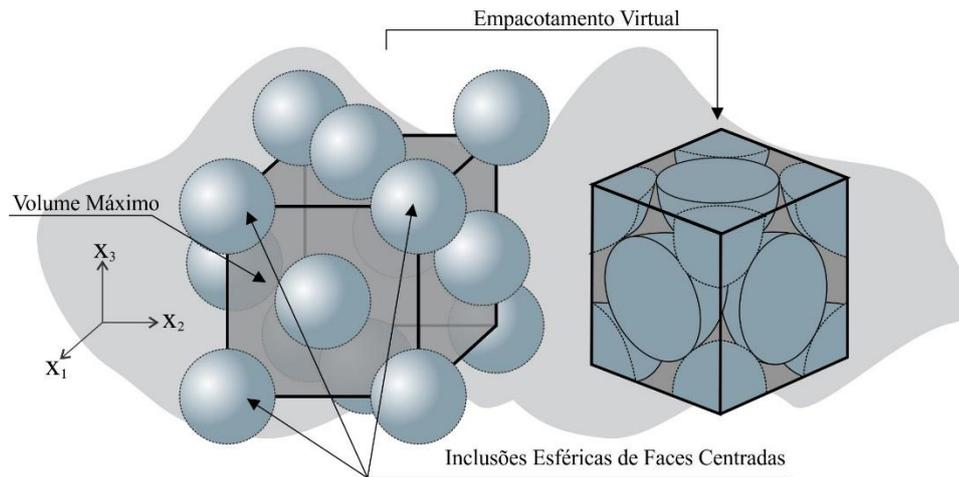
**Figura 61:** Modelo de empacotamento virtual para partículas cúbicas.



**Fonte:** Autor, Adaptado de (LARRARD, 1999).

Consegue-se, um arranjo para essas partículas de modo que não exista nenhum índice de vazios, levando a uma compacidade virtual máxima, ou seja, 100%. Quando se altera o arranjo geométrico para esferas de faces centradas, consegue-se uma compacidade máxima de 74%, como pode ser visto na Figura 62.

**Figura 62:** Modelo de empacotamento virtual para partículas esféricas.



**Fonte:** Autor, Adaptado de (LARRARD, 1999).

Em qualquer empacotamento, que não seja cúbico de faces centradas haverá regiões que ocorrerão vazios, sendo a fração volumétrica de vazios dada por:

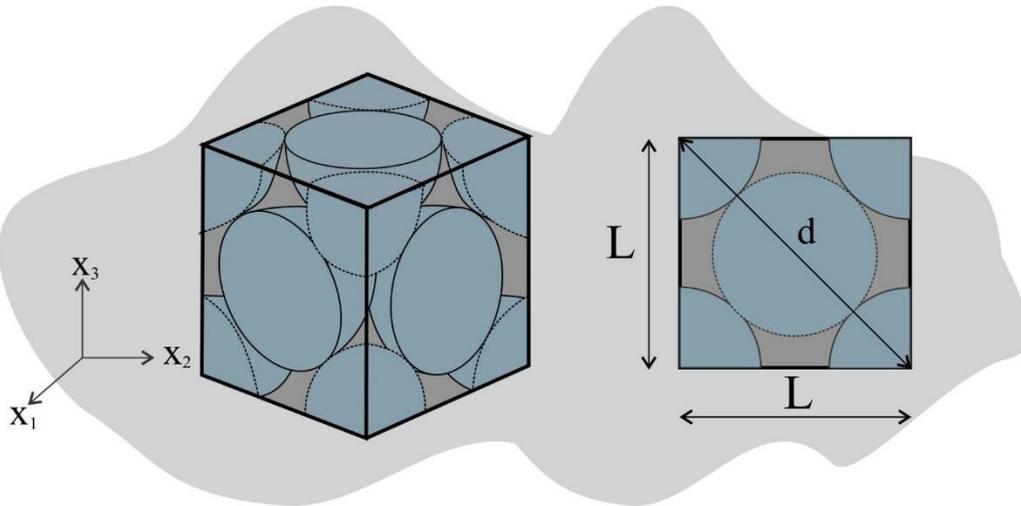
$$f_{\emptyset} = \frac{V_{\emptyset}}{V_t} \quad (172)$$

Onde  $V_t$  é o volume total e  $V_{\emptyset}$  o volume de vazios expressado por:

$$V_{\emptyset} = V_t - V_g \quad (173)$$

Sendo  $V_g$ , o volume de grão no sistema. O valor descrito acima de 74%, condiz com um sistema que as esferas possuem o mesmo raio e um arranjo de faces centradas. Para calcular a fração volumétrica de vazios e o índice de compacidade desse sistema, observe a Figura 63.

**Figura 63:** Modelo de empacotamento virtual para partículas esféricas.



**Fonte:** Autor, Adaptado de (LARRARD, 1999).

Primeiramente encontra-se o valor da aresta do cubo em função do raio das esferas inscritas, da seguinte forma:

$$L = 2r\sqrt{2} \quad (174)$$

De posse da Equação (174), consegue-se definir o volume de vazios do sistema considerando que no arranjo existem quatro esferas, chega-se ao volume de vazios como sendo:

$$V_{\emptyset} = 5,871R^3 \quad (175)$$

Para determinar a fração volumétrica de vazios, recorre-se a Equação (172).

$$f_{\emptyset} = \frac{V_{\emptyset}}{V_t} = \frac{5,871R^3}{(2r\sqrt{2})^3} = 0,2595 = 25,95\% \quad (176)$$

Cabe agora definir o fator de empacotamento (compacidade virtual), que nada mais é que a razão entre o volume dos grãos no sistema, pelo volume total. Note que nesse momento ainda não existe uma mistura, sendo monodispersa na forma:

$$C = \frac{V_g}{V_t} = \frac{4 \frac{4}{3} \pi r^3}{(2r\sqrt{2})^3} = 0,7405 = 74,05\% \quad (177)$$

Esse valor é a máxima compacidade de um sistema monodisperso, com partículas de raios iguais. Se observarmos que em sistemas reais, não existem esferas perfeitas, de raios iguais, a compacidade virtual dada na Equação (177), sempre será maior que a compacidade real do sistema. Cabe salientar que ainda existe uma relação direta entre a fração volumétrica de vazios e a compacidade virtual do sistema, expresso na forma:

$$C = 1 - f_{\emptyset} \quad (178)$$

Uma dedução mais detalhada desse equacionamento pode ser observada no trabalho de Silva (2004).

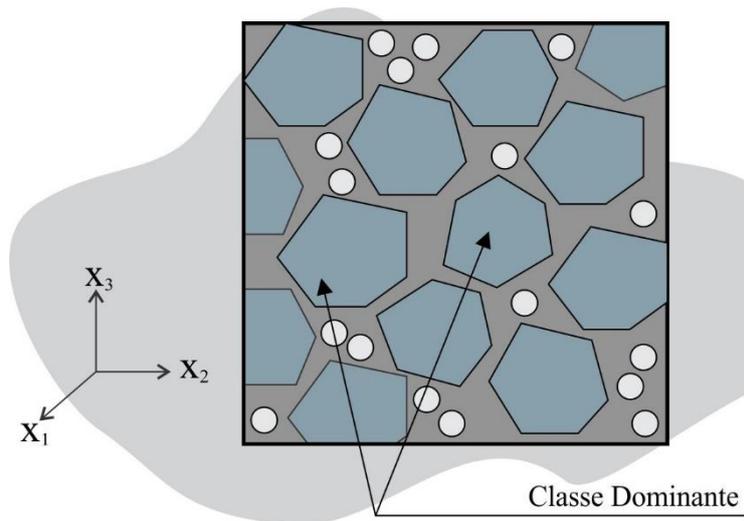
Como demonstrado anteriormente, a máxima compacidade virtual (empacotamento), possui um valor de 74,05%, para um sistema ótimo. Contudo, em um sistema real, parte-se da premissa que as partículas são geometricamente diferentes. Quando se pensa em concreto uma forma simples de caracterização se dá pelo ensaio de granulometria, verificando as porcentagens retidas e passantes em uma série de peneiras.

Silva (2004) define uma classe granular  $i$ , como sendo um conjunto de grãos unidimensionais de diâmetro  $d_i$ , sendo:

$$d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_i \geq d_{i+1} \geq \dots \geq d_n \quad (179)$$

A compacidade da classe  $i$ , tomada individualmente é chamada de  $\beta_i$ , tendo a mesma definição de compacidade virtual definida para um sistema de uma classe com o mesmo tamanho de grão. Nota-se que o valor máximo se aplica a compacidade da classe individual, para o maior valor de um arranjo de esferas e faces centradas.

Nesse ponto, cabe entender que o sistema possui  $n$  classes de grãos com  $\beta_i$  diferentes, e cabe agora definir no sistema, qual classe é dominante no processo de empacotamento. Define-se como classe de grãos dominantes aquela classe granular  $i$ , se a mesma assegurar a continuidade sólida do sistema (SILVA, 2004), como mostrado na Figura 64.

**Figura 64:** Classe granular dominante.

**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

## A.2. MISTURA DE DUAS FASES

Para entender o modelo de empacotamento compressível, parte-se de uma mistura com duas classes distintas com diâmetros respectivos  $d_1$  e  $d_2$  com  $d_1 \geq d_2$ . É importante salientar que se pode definir e dosar diversas misturas de duas fases ou uma mistura polifásica.

$$f_1 = \frac{V_1}{V_1 + V_2} \quad (180)$$

e

$$f_2 = \frac{V_2}{V_1 + V_2} \quad (181)$$

Sendo:

$$f_2 = 1 - f_1 \quad (182)$$

Onde  $V_1$  é o volume das partículas de diâmetro  $d_1$  no sistema e  $V_2$  o volume das partículas de diâmetro  $d_2$ . Nesse caso entende-se por compacidade virtual de cada classe, a sua respectiva fração volumétrica em um volume unitário. No caso da classe 1 tem-se:

$$y_1 = \frac{f_1}{f_1 + f_2} \quad (183)$$

Já classe 2, a compacidade será dada por:

$$y_2 = \frac{f_2}{f_1 + f_2} \quad (184)$$

A compacidade virtual de empacotamento da mistura de duas fases é dada por:

$$\gamma = f_1 + f_2 \quad (185)$$

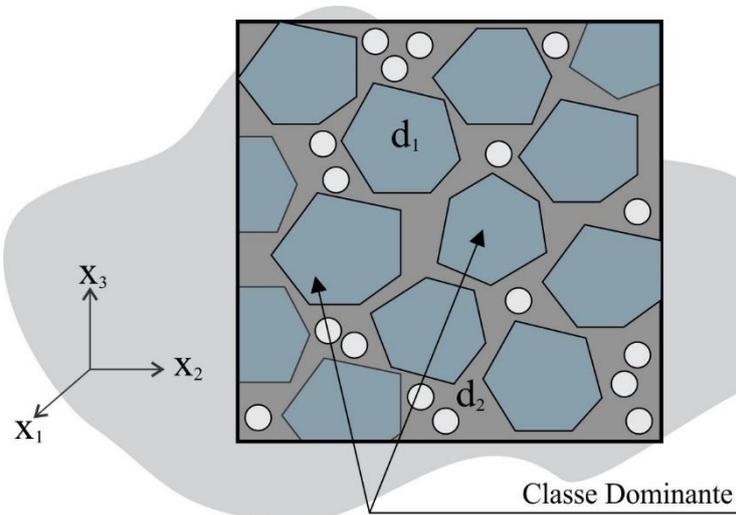
Nesse caso:

$$y_1 + y_2 = 1 \quad (186)$$

### A.2.1. Mistura de duas fases sem interação das partículas, classe 1 dominante

Uma mistura pode ser considerada sem interação quando o diâmetro da classe 1 é muito maior do que da classe 2, ou seja,  $d_1 \gg d_2$ , com dominâncias alternadas. Segundo Silva (2004), nessa condição o empacotamento da mistura bifásica, o grão de menor diâmetro não influencia no empacotamento da classe com maior diâmetro. Nesse caso, não existe efeito de afastamento entre as partículas e a compacidade virtual da classe dominante pode ser entendida como a máxima compacidade (Figura 65).

**Figura 65:** Classe granular 1 dominante para  $d_1 \gg d_2$ .



**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

Silva (2004) descreve como funciona as interações e as consequências de cada classe dominante. Nesse primeiro caso, pode-se admitir que a classe dominante é a classe 1, desta feita, pode-se escrever a equação da compacidade virtual como sendo igual a  $\beta_1$  (compacidade da classe tomada individualmente). Esse parâmetro pode ser estimado experimentalmente, a saber:

$$\beta = 1 - \frac{m - \rho}{m} \quad (187)$$

Onde  $m$  é massa específica do material,  $\rho$ , a massa unitária da classe. No caso da dominância classe 1 a fração volumétrica é igual a compacidade dela sem interação da matriz na forma:

$$f_1 = \beta_1 \quad (188)$$

Substituindo na Equação (185), tem-se a compacidade da mistura como sendo:

$$\gamma = \beta_1 + f_2 \quad (189)$$

Da Equação (183), encontra-se o valor da fração volumétrica da classe 2 em função da compacidade e da fração volumétrica da classe 1 na forma:

$$f_2 = -\frac{y_2 f_1}{y_2 - 1} \quad (190)$$

Substituindo a Equação (189), na Equação (185), com um pouco de algebrismo, chega-se à compacidade da mistura bifásica com classe 1 dominante:

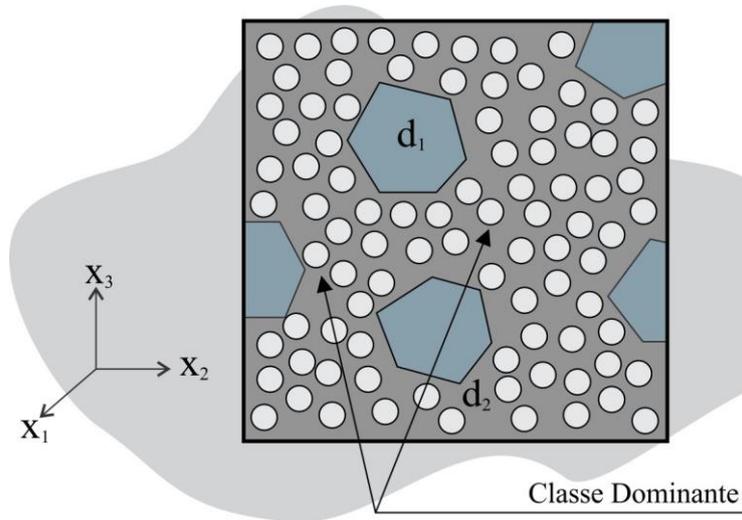
$$\gamma^{[1]} = \frac{-\beta_1}{y_2 - 1} \quad (191)$$

Sendo o sobrescrito [1], indicando que a classe dominante é a classe 1.

### A.2.2. Mistura de duas fases sem interação das partículas, classe 2 dominante

Nessa condição, a classe 2 dispersa envolve por completo as partículas da classe 1 do sistema bifásico, ainda se tem como hipótese condicionante que o  $d_1 \gg d_2$ , porém, as partículas menores não ficam mais flutuante nos vazios deixados entre as partículas de inclusão como visto na Figura 64. A Figura 66, ilustra claramente essa condição supracitada.

**Figura 66:** Classe granular 2 dominante para  $d_1 \gg d_2$ .



**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

Nessa condição, a classe dominante é a de menor diâmetro, porém ela não possui compacidade virtual máxima no arranjo, pois os grãos da classe de maior diâmetro influenciam diretamente no empacotamento virtual da classe dominante.

Pode-se escrever a equação da fração volumétrica da matriz como sendo:

$$f_2 = \beta_2(1 - f_1) \quad (192)$$

A Equação (191) indica, que à medida que as partículas da classe 1 são retiradas da mistura, a compacidade da classe 2 irá se tornar máxima. Explicitando o valor da fração volumétrica das classes 1 na Equação (183), tem-se:

$$f_1 = -\frac{y_1 f_2}{y_1 - 1} \quad (193)$$

Substituindo a Equação (192) na (191), encontra-se:

$$f_2 = \beta_2 \left(1 + \frac{y_1 f_2}{y_1 - 1}\right) \quad (194)$$

Substituindo a Equação (193), na Equação (185), com um pouco de algebrismo, chega-se à compacidade da mistura bifásica com a classe 2, dominante:

$$\gamma^{[2]} = \frac{-\beta_2}{\beta_2 y_1 - y_1 + 1} \quad (195)$$

Sendo o sobrescrito [2], indicando que a classe dominante é a classe 2.

### A.2.3. Ponto ótimo para mistura de duas fases sem interação das partículas

Para encontrar o ponto ótimo, basta igualar as duas equações  $\gamma^{[1]} = \gamma^{[2]}$ , explicitando o valor da compacidade virtual e conseqüentemente da fração volumétrica que aconteça compacidade máxima na forma.

$$\frac{-\beta_1}{y_2 - 1} = \frac{-\beta_2}{\beta_2 y_1 - y_1 + 1} \quad (196)$$

Sabe-se da Equação (186) que:

$$y_2 = 1 - y_1 \quad (197)$$

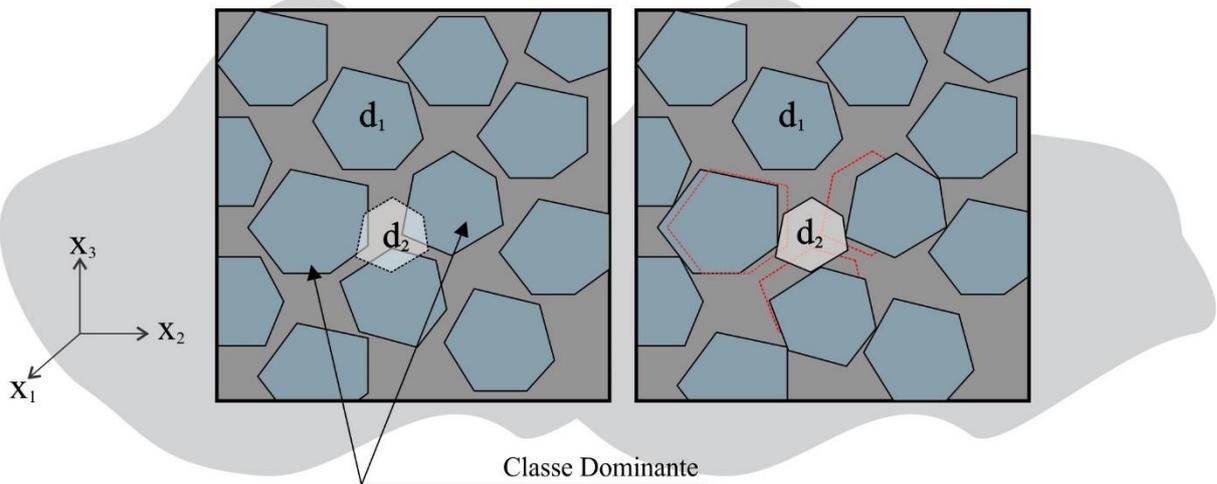
Substituindo a Equação (195) na (196), explicitando o valor da compacidade da classe 1 e sabendo que a compacidade individual de cada classe é igual a sua respectiva fração volumétrica, obtêm-se a fração volumétrica ótima da classe 1 como sendo:

$$y_1 = f_1 = \frac{-\beta_1}{\beta_1\beta_2 - \beta_1 - \beta_2} \quad (198)$$

#### A.2.4. Mistura de duas fases com interação das partículas, efeito de afastamento

Os efeitos descritos nas duas próximas seções, acontecem quando  $d_1 > d_2$ , mas não o suficientemente pequeno. O afastamento entre grãos ocorre quando a classe dominante é a classe 1, e os grãos da classe 2 não ficam dispersos nos vazios deixados pela classe 1. A Figura 67, ilustra o efeito de afastamento.

**Figura 67:** Classe granular dominante (Inclusão) para  $d_1 \gg d_2$ , efeito de afastamento.



**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

O efeito de afastamento descrito na Figura 67, introduz na equação de compacidade (195) o termo  $b_{21}$ .

$$\gamma^{[1]} = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{a_{12}\beta_1}{\beta_2}\right)y_2} \quad (199)$$

O coeficiente  $a_{12}$ , introduz o efeito de afastamento que os grãos da classe 2 exercem sobre os grãos da classe 1. Os valores de  $a_{12}$ , variam de  $a_{12} = 0$  (quando  $d_1 \gg d_2$ , isso considera que não haverá interação entre as partículas) e  $a_{12} = 1$ , (quando  $d_1 = d_2$ , isso considera que não haverá interação total entre as partículas).

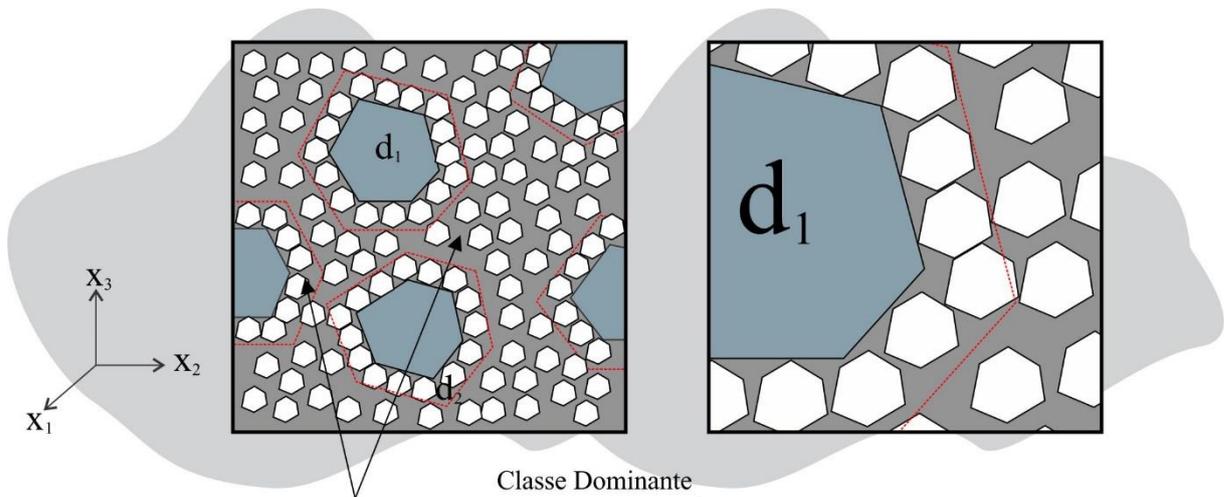
Silva (2004) equaciona o efeito de afastamento em função do índice de vazios e da compacidade virtual, além de explicitar uma forma alternativa em função dos grãos da mistura que traz uma razoável aproximação e pode ser entendido por:

$$a_{12} = \sqrt{1 - \left(1 - \frac{d_2}{d_1}\right)^{1,02}} \quad (200)$$

### A.2.5. Mistura de duas fases com interação das partículas, efeito de parede

O efeito parede acontece quando um grão da classe 1 está inserido em um empacotamento de grãos da classe 2. A Figura 68, ilustra o efeito de parede na mistura.

**Figura 68:** Classe granular dominante (Matriz) para  $d_1 \gg d_2$ , efeito de parede.



**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

O efeito de parede descrito na Figura 68, introduz na equação de compacidade (195) o termo  $a_{12}$ .

$$\gamma^{[2]} = \frac{\beta_2}{1 - \left[1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right] y_1} \quad (201)$$

coeficiente  $b_{21}$ , varia de  $b_{21} = 0$  (quando  $d_1 \gg d_2$ , isso considera que não haverá interação com efeito parede) e  $b_{21} = 1$  (quando  $d_1 = d_2$ , isso considera que haverá interação total com efeito parede). Novamente, existe um equacionamento que leva em consideração o índice de

vazios para determinação desse parâmetro  $b_{21}$ , que pode ser visto em Silva (2004). De forma semelhante ao efeito de afastamento, (SILVA, 2004), traz uma equação alternativa para o coeficiente de parede, a saber:

$$b_{21} = 1 - \left(1 - \frac{d_2}{d_1}\right)^{1,50} \quad (202)$$

#### A.2.6. Ponto ótimo para mistura de duas fases com interação das partículas e efeitos de afastamento e parede

Para encontrar o ponto ótimo, basta igualar as duas equações  $\gamma^{[1]} = \gamma^{[2]}$ , explicitando o valor da compacidade virtual e conseqüentemente da fração volumétrica que acontece a compacidade máxima na forma.

$$\frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{a_{12}\beta_1}{\beta_2}\right)y_2} = \frac{\beta_2}{1 - \left[1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2\left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right]y_1} \quad (203)$$

Sabe-se da Equação (186) que:

$$y_2 = 1 - y_1 \quad (204)$$

Substituindo a Equação (195) na (196), explicitando o valor da compacidade das inclusões e sabendo que a compacidade individual de cada classe é igual a sua respectiva fração volumétrica, obtêm-se a fração volumétrica ótima da classe 1 como sendo:

$$y_1 = f_1 = \frac{\left[1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2\left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right]\beta_1 - \beta_1 + \beta_2}{\left[1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2\left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right]\beta_1 - a_{12}\beta_1 + \beta_2} \quad (205)$$

### A.3. MISTURA POLIDISPERSAS

Para misturas que possuem mais de duas fases, ou seja, polidispersas, pode-se utilizar, como referencial de expansão, todo fundamental teórico exposto e desenvolvido para uma mistura

bifásica. Desta feita, para misturas polidispersas, com a classe dominante [i], a densidade de empacotamento pode ser escrita como:

$$\gamma_i = \frac{\beta_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left[ 1 - \beta_i + b_{ij} \beta_i \left( 1 - \frac{1}{\beta_j} \right) \right] y_j - \sum_{j=i+1}^n \left[ 1 - a_{ij} \frac{\beta_i}{\beta_j} \right] y_j}$$

$$\gamma = \min(\gamma_i) \quad (1 \leq i \leq n) \quad (206)$$

$$a_{ij} = \sqrt{1 - \left( 1 - \frac{d_j}{d_i} \right)^{1,02}}$$

$$b_{ij} = 1 - \left( 1 - \frac{d_i}{d_j} \right)^{1,50}$$

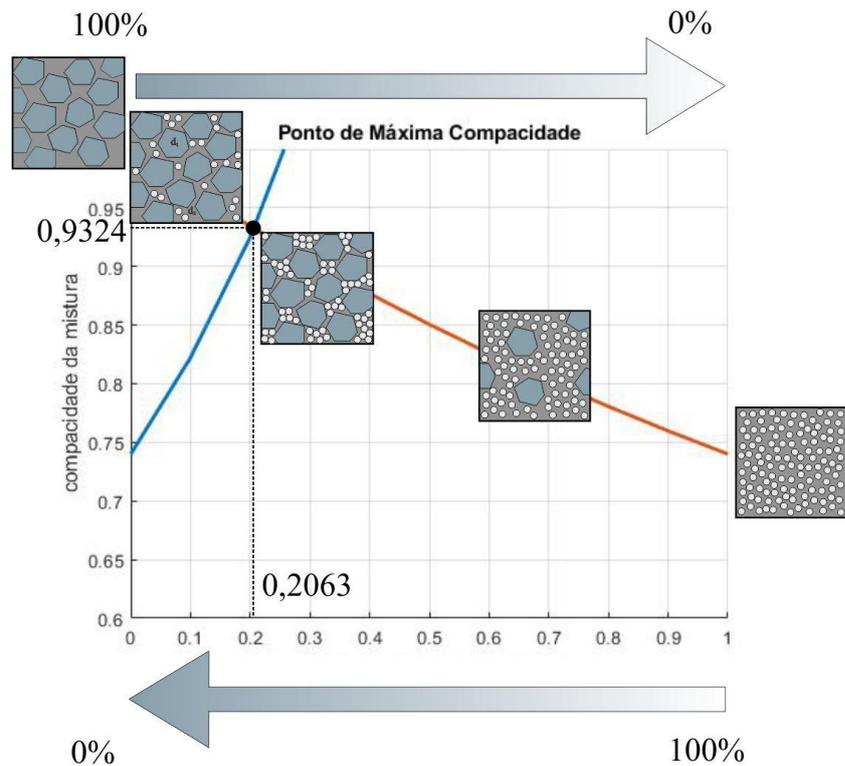
Como o escopo do trabalho trata do concreto como compósito, o domínio de misturas bifásicas é dominante em termos dos grãos de agregados graúdos e miúdos, recomenda-se para melhor entendimento e desenvolvimento das equações de misturas polidispersas os trabalhos de (LARRARD, 1999), (SILVA, 2004), (LONDERO, et al., 2017).

#### A.4. COMPACIDADE

Nesse tópico, será avaliado alguns parâmetros supracitados, como a compacidade máxima, para um arranjo de esferas com faces centradas, para verificar a influência dos parâmetros na compacidade da mistura bifásica.

Para se encontrar o melhor arranjo e conseqüentemente a máxima compacidade, toma-se como referência as Equações (198) e (199), para  $d_1 \gg d_2$  e sem efeito de interações de afastamento e parede. Para o efeito máximo, considera-se os valores das compacidades virtuais individuais de cada classe como sendo  $\beta_1 = \beta_2 = 0,74$  e  $a_{12} = b_{21} = 0,00$ .

O melhor arranjo de grãos se dá quando a quantidade de inclusões é de 20,63%, obtendo uma compacidade da mistura de 93,24%.

**Figura 69:** Compacidade em função da fração fina.

**Fonte:** Autor, Adaptado de (SILVA, 2004).

#### A.4.1. Compacidade real

O modelo de empacotamento real, difere do modelo virtual, no ponto em que a curva virtual maximiza os valores de empacotamento e das respectivas frações volumétricas. A predição a partir dos modelos de compacidade virtual geram o melhor e maior valor que a mistura e o arranjo alcançaram.

Como pode ser visto anteriormente, a compacidade virtual, preocupa-se apenas com a geometria do problema e como a variação geométrica interfere no mesmo, já na compacidade real, além da geometria, preocupa-se ainda com a energia de compactação aplicada no processo de fabricação, sendo mais um parâmetro de análise.

Nesse momento pode-se introduzir a variável (K), denominada de índice de compactação, que representa a energia empregada em um processo de compactação e empacotamento de grãos. Silva (2004) descreve essa variável como sendo desenvolvida a partir dos modelos de viscosidade, e pode ser entendida por:

$$K = \sum_{i=1}^n \frac{\frac{y_i}{\beta_i}}{\frac{1}{C} - \frac{1}{\gamma_i}} \quad (207)$$

Para mistura bifásica:

$$K = \frac{y_1}{\beta_1 \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{\gamma_1} \right)} + \frac{y_2}{\beta_2 \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{\gamma_2} \right)} \quad (208)$$

A Equação (217) é implícita em C, uma vez que o protocolo de energia associado ao problema é definido e os demais parâmetros podem ser encontrados aplicando as equações de empacotamento virtual.

**Tabela 22:** Valores de índice de compactação.

|                              | <b>Tipo</b>                         | <b>K</b> |
|------------------------------|-------------------------------------|----------|
| <b>Empacotamento Seco</b>    | Simple                              | 4,1      |
|                              | Apiloamento                         | 4,5      |
|                              | Vibração                            | 4,75     |
|                              | Vibração<br>+Compressão de<br>10kPa | 9        |
|                              | Proctor Teste                       | 12       |
| <b>Empacotamento Molhado</b> | Demanda de Água                     | 6,7      |
| <b>Empacotamento Virtual</b> |                                     | Infinito |

**Fonte:** Larrard (1999).

Explicitando o valor de C na Equação (207), encontra-se uma equação proporcional a quantidade de elementos na mistura, no caso de uma mistura bifásica o grau da equação é [2], no caso de misturas polidispersas o grau equivale a [n]. Sendo o valor real C encontrado da seguinte maneira:

$$C = \min (C_i) \quad (209)$$

## B. APÊNDICE: MODELOS PARA HOMOGENEIZAÇÃO DE OUTRAS PROPRIEDADES DE COMPÓSITOS

### B.1. ELÁSTICOS

Como mostrado anteriormente no texto, o problema mecânico tem como fundamentação a lei de Hooke que relaciona constitutivamente os tensores de tensão, deformação e constitutivo. A depender do tipo de material o tensor constitutivo pode variar. De uma forma genérica a equação constitutiva para material elástico pode ser dada por:

$$\sigma_{ij} = C_{ijmn}\varepsilon_{mn} \quad (210)$$

Complementando os modelos elásticos suprimidos acima, destacam-se os modelos derivados da regra da mistura. O modelo analítico de Counto (CHEN, et al., 2003), (BARBOSA, 2003), os contornos das fases são assumidos prismáticos e concêntricos, já o modelo proposto por Hirsch leva em consideração a combinação dos modelos de Voigt e Reuss, juntando os modelos em série e paralelo. O valor de  $x$ , no modelo de Hirsch indica a influência de cada parcela em série e em paralelo no modelo.

A ideia do modelo de Popovic (CHEN, et al., 2003) consiste em uma vez garantido os limites superior e inferior delimitado pela regra da mistura, onde garante-se que o valor real do compósito homogeneizado estará dentro desse limite, assume-se a média aritmética dos valores encontrados por Reuss e Voigt. O Modelo de Hansen admite o contorno esférico concêntrico para a geometria da matriz e inclusões. As equações de recorrência dos modelos supracitados podem ser observadas na Tabela 23.

**Tabela 23:** Modelos de homogeneização elástica.

| Modelos | Equações de Recorrência $C^H$   |
|---------|---|
| Counto  | $C_m \cdot \left[ (C_m \sqrt{f_i} - C_i \sqrt{f_i} - C_m) : (C_m \sqrt{f_i} - C_m f_i - C_i \sqrt{f_i} + C_i f_i - C_m)^{-1} \right]$ |
| Hirsch  | $\left\{ (1-x) \left[ \frac{1-f_i}{C_m} + \frac{f_i}{C_i} \right] + \left[ \frac{x}{(1-f_i)C_m + C_i f_i} \right] \right\}^{-1}$      |

|                |  |
|----------------|--|
| <b>Popovic</b> | $\frac{\mathbb{C}_m : \mathbb{C}_i : [\mathbb{C}_i(1 - f_i) + \mathbb{C}_m f_i]^{-1} + \mathbb{C}_m(1 - f_i) + \mathbb{C}_i f_i}{2}$ |
| <b>Hansen</b>  | $[\mathbb{C}_m(1 - f_i) + \mathbb{C}_i(1 + f_i)] : [\mathbb{C}_i(1 - f_i) + \mathbb{C}_m(1 + f_i)]^{-1}$                             |

## B.2. CONDUTIVIDADE TÉRMICA

O problema de condutividade térmica é regido pela lei de Fourier, onde  $q_i$  é o fluxo de calor que cruza uma determinada área na sua respectiva direção,  $K_{ij}$  é o tensor de condutividade térmica e  $T_j$  é o gradiente de temperatura, na forma:

$$q_i = K_{ij} T_j \quad (211)$$

Partindo das hipóteses de compósitos bifásicos, constrói-se as equações de recorrências para avaliação dos modelos de homogeneização para condutividade térmica (Tabela 24). A formulação dos modelos pode ser observados em (ESHELBY, 1957), (MORI e TANAKA, 1973), (McLAUGHLIN, 1977), (CHRISTENSEN e LO, 1979), (BENVENISTE, 1987), (HORI e NEMAT-NASSER, 1993).

**Tabela 24:** Modelos de homogeneização da condutividade térmica.

| <b>Modelos</b>                       | <b>Equações de Recorrência <math>\mathbb{K}^H</math></b>  |
|--------------------------------------|---|
| <b>Mori-Tanaka</b>                   | $\mathbb{K}_m : [\mathbb{I} + f_i(\mathbb{S} - \mathbb{I}) : [(\mathbb{K}_m - \mathbb{K}_i)^{-1} : \mathbb{K}_m - \mathbb{S}]^{-1}] : [\mathbb{I} + f_i \mathbb{S} : [(\mathbb{K}_m - \mathbb{K}_i)^{-1} : \mathbb{K}_m - \mathbb{S}]^{-1}]^{-1}$ |
| <b>Auto Consistente Generalizado</b> | $\frac{1}{4} [(3f_i - 1)\mathbb{K}_i + (3(1 - f_i) - 1)\mathbb{K}_m + \sqrt{(3f_i - 1)\mathbb{K}_i + (3(1 - f_i) - 1)\mathbb{K}_m}^2 + 8\mathbb{K}_m : \mathbb{K}_i]$   |
| <b>Concentração Diluída</b>          | $\mathbb{K}_m + f_i(\mathbb{K}_i - \mathbb{K}_m) : [\mathbb{I} + (\mathbb{S} : \mathbb{K}_m^{-1}) : (\mathbb{K}_i - \mathbb{K}_m)]^{-1}$  |
| <b>Série</b>                         | $\mathbb{K}_i f_i + \mathbb{K}_m(1 - f_i)$  |
| <b>Paralelo</b>                      | $[\mathbb{K}_i^{-1} f_i + \mathbb{K}_m^{-1}(1 - f_i)]^{-1}$   |
| <b>Maxwell-Eucken</b>                | $\mathbb{K}_m : (2\mathbb{K}_m + \mathbb{K}_i - 2(\mathbb{K}_m - \mathbb{K}_i)f_i) : (2\mathbb{K}_m + \mathbb{K}_i + (\mathbb{K}_m - \mathbb{K}_i)f_i)^{-1}$  |

|                 |  |
|-----------------|--|
| <b>Campbell</b> | $\mathbb{K}_m: \left( 2(1 - f_i^{\frac{1}{3}}) - (1 - f_i^{\frac{1}{3}})^2 \right) + \left( \mathbb{K}_m: \mathbb{K}_i: \left( 1 - (1 - f_i^{\frac{1}{3}}) \right)^2 \right): (\mathbb{K}_i: (1 - f_i^{\frac{1}{3}}): \mathbb{K}_m: (1 - (1 - f_i^{\frac{1}{3}})))^{-1}$ |
| <b>Hashin -</b> | $\mathbb{K}_m: \mathbb{K}_i + 2\mathbb{K}_m: (\mathbb{K}_m(1 - f_i) + \mathbb{K}_i f_i): [2\mathbb{K}_m + \mathbb{K}_m f_i + \mathbb{K}_i(1 - f_i)]^{-1}$  |
| <b>Hashin +</b> | $[\mathbb{K}_m: \mathbb{K}_i + 2\mathbb{K}_i: (\mathbb{K}_m(1 - f_i) + \mathbb{K}_i f_i): [2\mathbb{K}_i + \mathbb{K}_i(1 - f_i) + \mathbb{K}_m f_i)]^{-1}$  |

Onde o tensor de Eshelby para o problema de condutividade térmica com inclusão esférica é dado por:

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (212)$$

Ressalta-se que todos os métodos ignoram a distribuição espacial das heterogeneidades, ou seja, assume-se que há uma distribuição uniforme das inclusões. Entretanto, as formas e orientações das heterogeneidades são levadas em consideração por meio do tensor de Eshelby.

### B.3. PIEZOELÉTRICOS

O problema piezoelétrico é um problema acoplado eletromecânico, governado pelas equações constitutivas que relacionam os tensores de tensão  $\sigma_{ij}$  e de deslocamento elétrico  $D_i$  com o tensor de deformação  $\varepsilon_{mn}$  e o campo elétrico  $E_n$  na forma:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijmn} \varepsilon_{mn} + e_{nij} E_n \\ D_i &= e_{imn} \varepsilon_{mn} - \kappa_{in} E_n \end{aligned} \quad (213)$$

Onde  $C_{ijmn}$ ,  $e_{nij}$  e  $\kappa_{in}$  são respectivamente o tensor constitutivo elástico semelhante ao encontrado nas seções anteriores, o tensor piezoelétrico e o tensor de permissividade. As equações constitutivas exposta em (213) pode ser reescrita na forma:

$$\Sigma_{ij} = \Gamma_{imn} Z_{mn} \quad (214)$$

matricialmente,

$$\Sigma = \Gamma Z \quad (215)$$

Sendo:

$$\Sigma^T = [\sigma_{11} \quad \sigma_{22} \quad \sigma_{33} \quad \sigma_{23} \quad \sigma_{13} \quad \sigma_{12} \quad D_1 \quad D_2 \quad D_3] \quad (216)$$

$$Z^T = [\varepsilon_{11} \quad \varepsilon_{22} \quad \varepsilon_{33} \quad \gamma_{23} \quad \gamma_{13} \quad \gamma_{12} \quad E_1 \quad E_2 \quad E_3] \quad (217)$$

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{e}^T \\ \mathbf{e} & \boldsymbol{\kappa} \end{bmatrix} \quad (218)$$

Na equação (218) o  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{e}$  e  $\boldsymbol{\kappa}$ , são matrizes (6x6), (3x6) e (3x3) respectivamente. Para um material transversalmente isotrópico a matriz  $\Gamma$  será dado por:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{31} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{32} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{33} \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & -\kappa_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 & 0 & -\kappa_2 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\kappa_3 \end{bmatrix} \quad (219)$$

Utilizando a teoria micromecânica é possível que os campos médios piezoelétricos podem ser entendidos por (ODEGARD, 2004):

$$\bar{\Sigma} = \sum_{i=1}^n f_i \Sigma \quad (220)$$

$$\bar{Z} = \sum_{i=1}^n f_i Z \quad (221)$$

Os modelos de homogeneização para materiais piezoelétricos podem ser observados na Tabela 25 e o tensor de Eshelby pode ser consultado em (SILVA e MARQUES, 2011).

**Tabela 25:** Modelos de homogeneização para materiais piezoelétricos

| Modelos                     | Equações de Recorrência $\Gamma^H$  |
|-----------------------------|---|
| <b>Mori-Tanaka</b>          | $\Gamma_m + f_i(\Gamma_i - \Gamma_m): [\mathbb{I} + (\mathbb{S}: \Gamma_m^{-1}): (\Gamma_i - \Gamma_m)]^{-1}: [(1 - f_i)\mathbb{I} + f_i[\mathbb{I} + (\mathbb{S}: \Gamma_m^{-1}): (\Gamma_i - \Gamma_m)]^{-1}]^{-1}$ |
| <b>Auto Consistente</b>     | $\Gamma_m + f_i(\Gamma_i - \Gamma_m): \mathbb{A}$ $\mathbb{A} = [\mathbb{I} + (\mathbb{S}^*: \Gamma^{*-1}): (\Gamma_i - \Gamma^*)]^{-1}$ $\sqrt{\frac{\ \Gamma^*\  - \ \Gamma_m\ }{\ \Gamma_m\ }} \leq tol$           |
| <b>Concentração Diluída</b> | $\Gamma_m + f_i(\Gamma_i - \Gamma_m): [\mathbb{I} + (\mathbb{S}: \Gamma_m^{-1}): (\Gamma_i - \Gamma_m)]^{-1}$   |

Os materiais cimentícios estudados como compósito nesse trabalho não possuem característica de material piezoelétrico, contudo é importante mencionar que a arquitetura proposta no *framework* descrito no Apêndice C, permite a análise de outros compósitos e a apreciação de outros processos de homogeneização é simples de se implementar.

### C. APÊNDICE: DETALHAMENTO DO *FRAMEWORK* ORIENTADO A OBJETOS

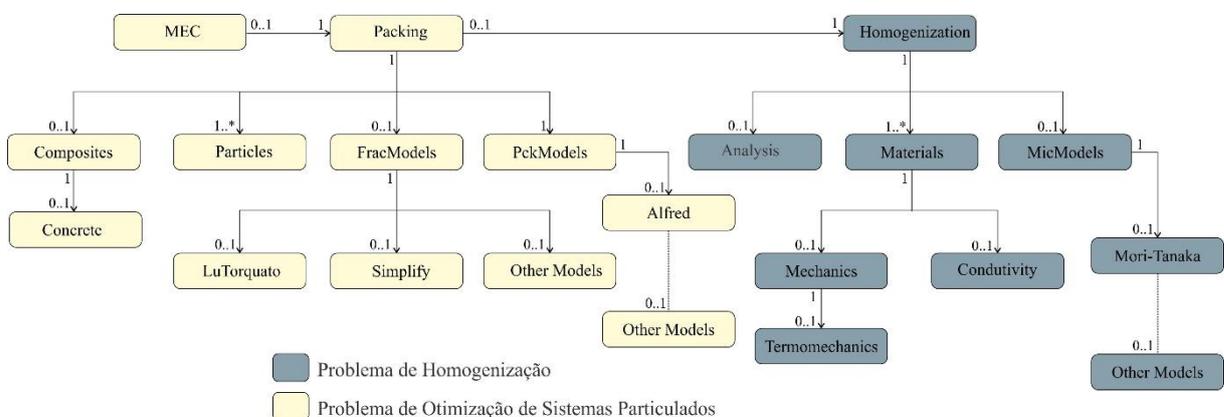
Nesse apêndice será discutido e detalhado o *framework* orientado a objeto desenvolvido para proceder o acoplamento entre modelos de otimização de sistemas particulados e a micromecânica dos campos médios.

A ideia que está por trás de um *framework* encontra-se na busca de solução para uma família de problemas semelhantes, utilizando um conjunto de classes e interfaces para possível resolução desses problemas além de atingir um dos principais pilares da engenharia de software que é o reuso (FERREIRA, 2005).

Para alcançar a premissa supracitada, tem-se a orientação a objetos que fornece subsídios para a reutilização, extensibilidade, além de funcionalidades que podem ser implementadas como: herança, polimorfismo, encapsulamento.

Ferreira (2005) explica detalhadamente todos os mecanismos associados à linguagem de orientação a objetos, sendo mostrado com um pouco mais de detalhe no Apêndice C. Nessa etapa de discussão é importante frisar que a escolha de criação de um *framework* levou em consideração todos os conceitos supracitados, conseguindo um resultado satisfatório na concepção e projeto dessa arquitetura. A Figura 70, ilustra o diagrama de classe proposto.

**Figura 70:** Diagrama de classes do *framework*.



**Fonte:** Autor.

## C.1. CONCEITOS INICIAIS

Entende-se por classe uma entidade que possui uma identidade própria, ele é composto por seus atributos tendo seu comportamento representados pelos métodos, que por sua vez é um conjunto de operações necessárias para caracterizar completamente a classe. Cada classe descreve um conjunto de objetos, sendo cada objeto uma instância da classe (FERREIRA, 2005).

Uma das principais propriedades da programação orientada a objetos é o encapsulamento, que é uma ferramenta que evite que pequenas modificações afete as classes que compõe a arquitetura global do sistema.

Herança, é outro conceito importante, pois a mesma permite que uma classe, herde atributos e métodos da classe superior ou mãe, não se fazendo necessário descrevê-las nas classes filhas. Outra propriedade importante da herança se dá quando é importante que a classe filha implemente métodos específicos.

Polimorfismo é mais uma das funcionalidades da programação orientada a objetos, estando associado a um mesmo nome ser atribuído a diversos métodos.

Abstração também é um conceito importante para que as classes comportem as propriedades de herança, exercendo um papel fundamental no encapsulamento e principalmente no acesso a cada uma das classes. É com abstração que se consegue definir se os atributos e métodos são públicos ou privados por exemplo.

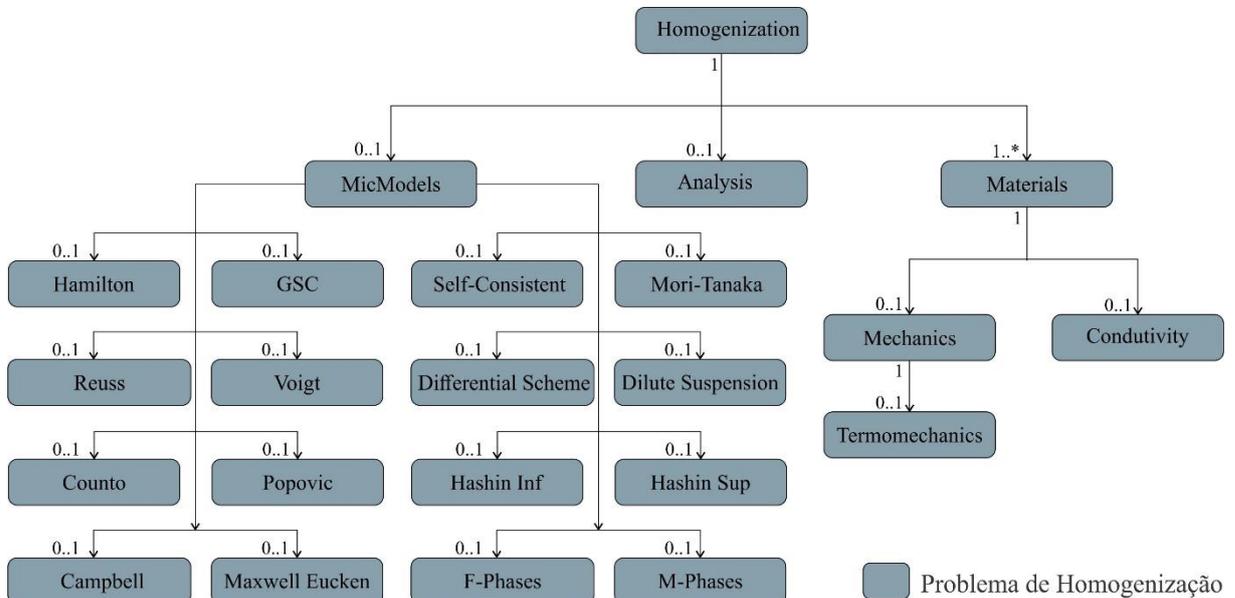
## C.2. CLASSES

### C.2.1. Módulo Base

Nessa seção serão descritas as classes bases que compõem o *framework*, observadas na Figura 70. Será dada ênfase nos principais atributos e métodos de cada classe, bem como as propriedades da programação orientada a objetos de fato ajuda na expansão do *framework*.

A modelagem de cada problema proposto nesse trabalho inicia-se com o instanciamento da classe principal do *framework* que é a classe [homogenization] sendo a mesma a classe principal do programa Figura 71.

**Figura 71:** Diagrama de classes para o módulo de homogeneização.



**Fonte:** Autor.

Em um processo de homogeneização de materiais compósitos é necessário definir qual tipo de análise será realizada, qual tipo de material será computado no problema e qual modelo micromecânico será utilizado para resolver o problema, desta feita é importante a definição de classes que representem essas necessidades a saber: [analysis], [materials], [micmodels].

**Classe analysis:** a classe de análise é responsável por definir que tipo de análise será realizada, podendo as mesmas serem: mecânicas, condutividade térmica, termomecânica, piezoelétrica, etc, sendo essas informações descritas dentro da classe [materials].

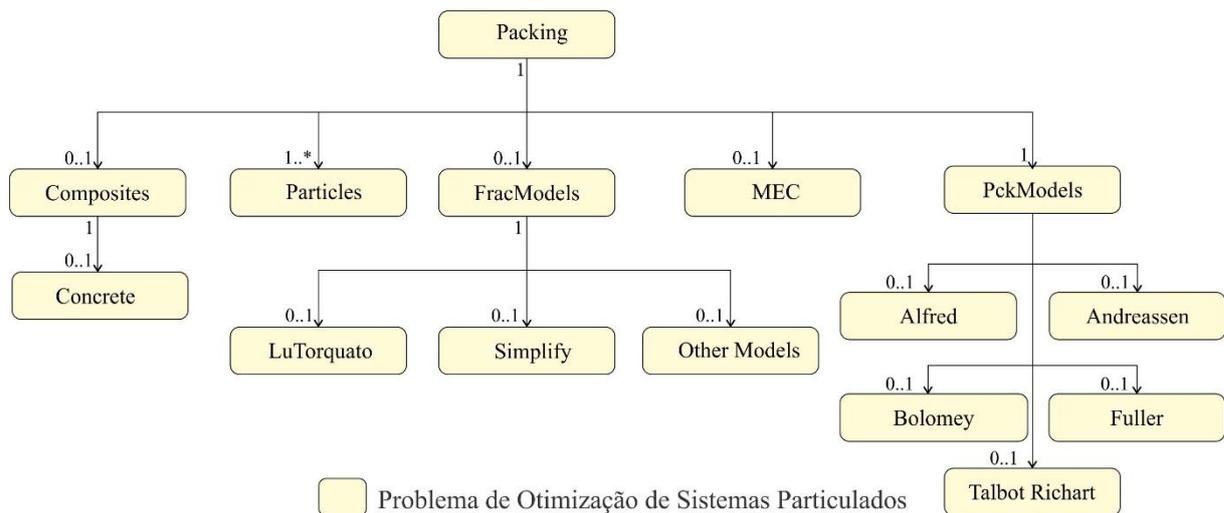
**Classe materials:** a classe de materiais explicita que tipo de material está sendo analisado como dito acima, cada tipo de material irá direcionar as equações de recorrência para resolvê-los pelos modelos micromecânicos na classe [micmodels].

Classe `micmodels`: a classe de modelos micromecânicos é uma superclasse que tem como classes filhas todos os modelos micromecânicos citados nesse trabalho, sendo cada um desse uma classe específica. Existem modelos que são universais em sua formulação como os modelos que calculam propriedades mecânica e de condutividade térmica: `[reuss]`, `[voigt]`, `[counto]`, `[popovic]`, `[hashin_inf]`, `[hashin_sup]`, `[moritanaka]`, `[gsc]`, `[selfconsitent]`, modelos exclusivos de propriedades mecânicas como: `[f-phases]`, `[m-phases]`, `[differential_scheme]`, `[dilutesuspension]` e modelos exclusivos de condutividade como: `[campbell]`, `[maxwelleucken]`, `[hamilton]`.

Qualquer inserção de novos modelos é simples de ser realizada pois a arquitetura de herança, encapsulamento e polimorfismo está implementada nesses conjuntos de classes.

Esse módulo básico é bem estruturado, com instanciamento das classes bem definido ao ponto de poder ser implementados classes fora dos módulos básicos para resolver problemas específicos. Essa funcionalidade foi testada e não necessitou modificar uma linha de código da implementação base.

De forma semelhante ao módulo de homogeneização, tem-se o módulo de otimização que contempla a classe principal `[packing]` (Figura 72), que resolve três problemas distintos: problema de empacotamento de grãos, problema de compacidade (método do empacotamento compressível) e avaliação das interfaces, sendo representado pelas classes filhas: `[mec]`, `[fracmodels]`, `[pckmodels]`. Uma classe comum a todas as análises supracitadas é a classe de partículas `[particles]`, responsável por criar um conjunto de curvas granulométricas que serão analisadas no problema.

**Figura 72:** Diagrama de classes para o módulo de otimização.

**Fonte:** Autor.

Classe [mec]: a classe de empacotamento compressível é responsável por a partir de uma curva granulométrica definir qual a capacidade do sistema granulométrico. Essa informação é extremamente importante na otimização do concreto, porém a classe foi implementada de forma a responder individualmente.

Classe [pckcmodels]: a classe empacotamento de curvas granulométricas é semelhante à classe de modelos micromecânicos citados acima. Essa classe é responsável por otimizar um conjunto de curvas granulométricas utilizando os modelos: Alfred [alfred], Andreasen [Andreasen], Bolomey [bolomey], Fuller [fuller], Talbot e Richart [talbotrichart]. De forma semelhante ao método do empacotamento compressível, a otimização das curvas também pode ser realizada individualmente.

Classe [fracmodels]: a classe de modelos de avaliação de interface é responsável por estimar a fração volumétrica da interface associada a uma curva granulométrica global ou otimizada. Os modelos implementados são: Lu e Torquato [torquato], Simplificado [simplify].

Quando se trata de um problema de acoplamento, todos os objetos de otimização são instanciados, alimentando uma classe que fará a interligação entre a otimização e a homogeneização que é a classe [composites].

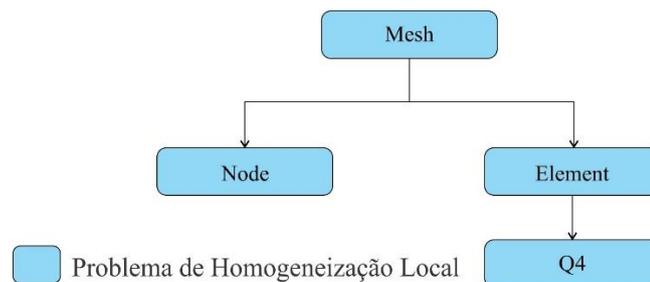
Classe [composites]: a classe compósito foi criada, uma vez que pode existir cálculos específicos para as fases do concreto que não se aplicam a outros compósitos, desta feita essa superclasse possui como filha uma classe [concrete]. O concreto em especial, utiliza todas as classes de otimização e computa as fases de uma forma específica, porém pode ser criados novos compósitos que receberão os resultados de otimização e procederam os cálculos de forma particular.

### C.2.2. Módulo Extra

Como mostrado nas sugestões, a extensão de problemas é extremamente simples, não necessitando a modificação dos módulos bases da proposta. No problema de homogeneização local, propôs-se a utilização de uma malha de elementos quadrangulares e homogeneizar os nós da malha.

O diagrama de classes implementado para essa sugestão, pode ser observado na Figura 73.

**Figura 73:** Diagrama de classes para o módulo de homogeneização local.



**Fonte:** Autor.

Classe [mesh]: a classe de malha gerencia toda leitura do arquivo neutro e criação dos objetos relacionados com os elementos finitos. No caso em especial existe um pré-processamento da malha de elementos finitos para ser introduzida no problema de homogeneização. Nessa proposta implementou-se o modelo de “Neutral File”, desenvolvido pela Tecgraf – PUC-Rio.

Classe [node]: a classe referente aos nós armazena toda geometria do nó e a conectividade dos elementos unidos a ele. Essa informação é importante para definir a fração volumétrica da inclusão e a área da matriz.

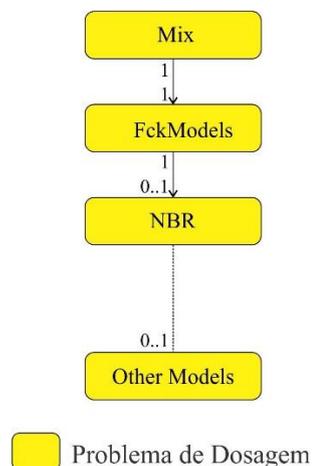
Classe [element]: a classe de elementos é bem simples nesse contexto, ela apenas é responsável por gerenciar o material associado à análise bem como a conectividade com seus respectivos nós.

Classe [Q4]: a classe de elementos quadrilaterais de quatro nós, foi implementada para dar oportunidade futura de acréscimo de novos elementos como triangulares ou alguma análise mais profunda como elementos de interface.

Como dito anteriormente apenas a construção do problema foi alterada, porém devido a orientação a objetos nenhum método das classes bases sofreram alteração.

Por fim, ainda no capítulo de sugestões foi proposto um problema de dosagem de concreto via micromecânica. Para execução e solução da proposta utilizou-se o diagrama de classes abaixo:

**Figura 74:** Diagrama de classes para o módulo de dosagem.



**Fonte:** Autor.

Classe [mix]: é a classe responsável por controlar o problema de dosagem, com ela o sistema é capaz de identificar que o problema de homogeneização será inverso e utilizará as equações de recorrência corretas.

Classe [FckModels]: a classe de modelos de resistência, escolhe entre diversos modelos, dentre eles os modelos de estimativa de módulo de elasticidade descrito pela NBR, ou um modelo genérico onde apenas atribui um valor de referência para essa variável. Dentro dessa classe pode ser implementado diversos modelos como mostrado no capítulo de sugestões.

Para o problema de modelagem houve a necessidade de implementar nas classes bases de modelos micromecânicos as equações de recorrência das frações volumétricas, sendo essa a única alteração no código que não impactou em nada todos os problemas construídos e analisados anteriormente.