

# PROPOSIÇÃO DE UM MODELO CONTÍNUO PARA UM SISTEMA DISCRETO DE PARTÍCULAS

Luciana de Matos<sup>1</sup>

## Resumo

*Materiais compósitos são estudados detalhadamente por alguns ramos da ciência, engenharia e indústria devido à sua importante aplicabilidade. Eles combinam as vantagens das propriedades individuais de seus constituintes homogêneos em um único material. Isto motiva o estudo das propriedades macroscópicas do compósito através das propriedades físicas e geométricas dos seus constituintes. Dentre os compósitos, alguns materiais microestruturais discretos como materiais nanocristalinos e granulares também têm sido estudados com a finalidade de se buscar um modelo contínuo adequado. Neste artigo alguns conceitos do método de homogeneização são aplicados no modelamento de tais estruturas discretas.*

*Palavras-chave: Compósitos. Homogeneização. Materiais Microestruturais. Modelo Discreto.*

## PROPOSITION OF A CONTINUOUS MODEL FOR A DISCRETE SYSTEM OF PARTICLES

### Abstract

*Composite materials are studied in detail because of their wide applicability in many branches of science, engineering, and industry, as they combine the advantages of the individual properties of their constituents into a single composite material. This motivates the study of the composite's macroscopic properties via the physical and geometrical properties of its constituents. Among the composites, special attention has been paid to discrete microstructured materials, such as nanocrystalline and granular materials, in order to find the corresponding adequate continuum models. Here, some ideas of the homogenization method are applied in the modeling of such discrete structures.*

*Keywords: Composites. Homogenization. Microstructured Materials. Discrete Model.*

## 1 INTRODUÇÃO

Materiais heterogêneos são encontrados nas formas natural ou sintética. Exemplos típicos são ligas metálicas, misturas de polímeros, meios porosos e fissurados, materiais policristalinos e compósitos.

Dentre estes materiais, os compósitos são considerados especiais, pois combinam as vantagens das propriedades individuais de seus constituintes homogêneos em um único material. Desta forma, obtém-se um material com maior resistência, rigidez, redução de peso, flexibilidade de projeto, ganho em propriedades ópticas, etc.

Com isso, alguns ramos da ciência, engenharia e indústria têm grande interesse em investigá-los a fim de obter novas aplicações. Na área da óptica, por exemplo, a obtenção de um material que ofereça boa qualidade óptica é atraente. Com este objetivo, WUNG et al. (1991) apresentam a preparação de um compósito constituído do polímero orgânico poly(p-phenylene vinylene) (PPV) em

---

<sup>1</sup> Doutoranda em Física – Grupo de Óptica do IFSC-USP, luciana.de.matos@gmail.com

combinação com vidro de sílica empregando o processo solução-gel. Embora a sílica seja um excelente meio fotônico, seu coeficiente óptico não-linear de terceira ordem, fundamental para todo chaveamento óptico, é extremamente baixo. Por isso, a vantagem de combiná-lo com o PPV que possui alta qualidade óptica e o coeficiente de terceira ordem relativamente alto. Os autores declaram que este compósito se mostra promissor para aplicações como guias de ondas ópticas.

Estudos teóricos têm sido propostos para construção de modelos que possam determinar as propriedades macroscópicas ou globais de compósitos, como documentado em BENSOUSSAN et al. (1978), SANCHEZ-PALENCIA (1980), POBEDRYA (1984), BAKHVALOV; PANASENKO (1989), PANASENKO (2005) e outros. Estes métodos consistem em caracterizar o compósito por um elemento de volume representativo (ou, célula unitária periódica) que contém todas as propriedades físicas e geométricas do compósito original. Este elemento deve ter dimensões muito menores do que a característica macroscópica do problema. Este processo de passar da escala microscópica para a escala macroscópica chama-se homogeneização (BAKHVALOV; PANASENKO, 1989).

Baseando-se nestes conceitos, torna-se desejável buscar modelos adequados para descrever materiais com microestruturas discretas como os materiais granulares ou nanocristalinos, os quais são considerados casos especiais de materiais compósitos (PANASENKO, 2008). Esses materiais, formados por um grande número de partículas, são representados por uma rede regular, ou, quase regular destas partículas. Muitas vezes o modelo correspondente resulta em um grande número de equações para serem resolvidas.

Atualmente é reconhecido que os efeitos microestruturais têm um papel significativo no comportamento mecânico de materiais granulares. É o caso quando a escala espacial de excitação é da ordem da escala característica da microestrutura. Devido a isto, é importante buscar um modelo diferente do contínuo clássico. Exemplos importantes destes efeitos são dispersão e propagação de ondas nos materiais granulares. MÜHLHAUS e OKA (1996) apresentam um modelo contínuo generalizado para meio granular por homogeneização direta usando as equações de movimento obtidas pelo modelo discreto. Eles partiram do modelo de oscilador de Fermi-Pasta-Ulam (FPU) para estudar a propagação de ondas longitudinal em um meio granular. O modelo FPU consiste de  $N$  partículas de massas igualmente espaçadas, cada uma tendo massa  $m$ , as quais estão conectadas por molas elásticas não lineares. Deste modelo discreto eles deduzem um modelo contínuo por substituição de quocientes de diferenças por quocientes diferenciais ou expansão de Taylor, respectivamente. Finalmente, eles obtêm as relações de dispersão para a propagação de ondas longitudinais e de cisalhamento nos materiais granulares. METRIKINE e ASKES (2002) propõem um novo formalismo para obter modelos de elasticidade de gradientes de alta ordem a partir de uma microestrutura discreta. Eles consideram uma cadeia unidimensional e longa de partículas e molas. Eles assumem que cada mola possui o mesmo coeficiente elástico  $k$  e cada partícula possui a mesma massa  $m$ . Analisando o comportamento dinâmico deste sistema de partículas-molas e usando as equações de movimento discreto, eles chegam a uma equação de movimento contínua e, a partir desta equação, deduzem uma expressão que descreve a propagação de ondas de dispersão de alta frequência associada com o parâmetro de distância entre as partículas da cadeia. Finalmente, eles aplicam o modelo para analisar a propagação de ondas harmônicas em uma barra com microestrutura.

Neste contexto, este artigo utiliza conceitos do método de homogeneização no estudo de um modelo discreto. Este artigo baseia-se no trabalho apresentado na Seção 5 de Panasenکو (2008). O artigo está estruturado como segue: Na Seção 2 é descrito o método de homogeneização para um modelo discreto unidimensional; na Seção 3 são apresentados dois exemplos para mostrar a consistência do método; na Seção 4 são apresentadas algumas conclusões.

## 2 HOMOGENEIZAÇÃO DE UM MODELO DISCRETO

Nesta seção, um modelo contínuo é derivado de um modelo discreto através do método de homogeneização. Partimos de um modelo discreto muito simples o qual baseia-se em uma malha de pontos unidimensional. Fisicamente, podemos visualizar este modelo discreto como uma rede unidimensional de partículas iguais e conectadas com molas elásticas iguais, ou, uma cadeia de partículas atômicas linear.

Assumimos que cada partícula interage somente com suas partículas vizinhas. A posição de equilíbrio é definida pela coordenada  $x_j = jh$ , com  $j = 0, \dots, n$ , em que  $h = 1/n$  com  $n \gg 1$ . Assim,  $h$  é um parâmetro pequeno e positivo, chamado passo da rede de partículas, conforme ilustrado na Figura 1.

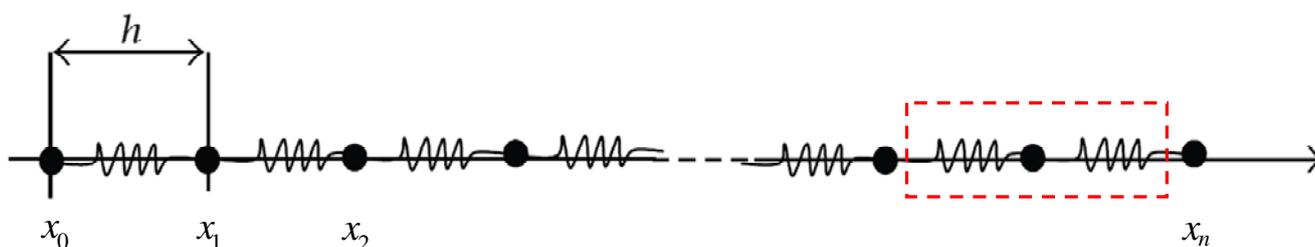


Figura 1 – Uma cadeia de partículas unidimensional elasticamente acoplada.

Assumimos que o deslocamento do ponto  $x_j$  é  $y_j$ . Analisando a variação espacial em torno do ponto  $x_j$  e usando o método das diferenças finitas centrais, podemos escrever a equação

$$-\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} = f(x_j), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad (1)$$

com  $f(x)$  sendo uma função conhecida, a qual representa uma distribuição de forças. Esta equação é uma aproximação da segunda derivada espacial do deslocamento. Ela descreve a interação da partícula  $x_j$  com suas duas partículas vizinhas conectadas por molas elásticas iguais. Pode-se considerar uma força elástica, por exemplo, quando se quer estudar, em uma primeira aproximação, o comportamento vibracional de moléculas, ou, átomos em um sólido.

Assumindo ainda que as partículas das extremidades estejam fixas, impomos as condições de contorno

$$y_0 = 0 \text{ e } y_n = 0. \quad (2)$$

Considerando um grande número de partículas e diminuindo as distâncias entre elas, ou seja, fazendo  $h$  muito pequeno, podemos considerar um modelo unidimensional contínuo. Para isto, é necessário introduzir uma função suave e contínua  $u$  no domínio  $[0,1]$  de forma que seus valores  $u(x_j)$  aproximem os valores de  $y_j$ , os quais lembramos do exposto acima, são os deslocamentos das partículas no sistema discreto. Agora expandimos  $u$  utilizando a série de Taylor em uma vizinhança de  $x_j$  de tamanho  $2h$ . Aqui, define-se célula unitária como uma partícula com duas molas adjacentes, conforme ilustrado pelo retângulo tracejado na Figura 1.

$$u(x_{j\pm 1}) = u(x_j \pm h) \approx u(x_j) \pm hu'(x_j) \pm \frac{h^2}{2}u''(x_j) \pm \frac{h^3}{6}u'''(x_j) \pm \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_j). \quad (3)$$

Substituindo a Eq. (3) na Eq. (1) e definindo  $y_j = u(x_j)$ , obtemos

$$\begin{aligned} -\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))}{h^2} &= -\frac{1}{h^2} \left[ u(x_j) + hu'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) + \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + \frac{h^4}{24} u^{(4)}(t_+) - 2u(x_j) \right. \\ &\quad \left. + u(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) - \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + \frac{h^4}{24} u^{(4)}(t_-) - 2u(x_j) \right] \\ &= -\frac{1}{h^2} \left[ \frac{2h^2}{2} u''(x_j) + \frac{h^4}{24} u^{(4)}(t_+) + \frac{h^4}{24} u^{(4)}(t_-) \right] \\ &= -u''(x_j) + \frac{h^2}{24} (u^{(4)}(t_+) - u^{(4)}(t_-)) \end{aligned} \quad (4)$$

onde  $t_{\pm}$  é a coordenada de um ponto entre  $x_j$  e  $x_j \pm h$ , isto é, entre  $x_j$  e  $x_{j\pm 1}$ .

Note da Eq. (4) que o segundo termo da última igualdade é de ordem  $O(h^2)$ , ou seja,

$$-\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))}{h^2} = -(u''(x_j) + O(h^2)). \quad (5)$$

Comparando a Eq. (5) com a Eq. (1), podemos dizer que a equação diferencial

$$-u''(x) = f(x), \quad x \in [0, 1], \quad (6)$$

aproxima a Eq. (1) com um erro de ordem  $O(h^2)$ . Temos, portanto, uma equação diferencial de segunda ordem para o problema homogeneizado. Aqui, assumimos que  $f(x)$  é uma função duas vezes diferenciável e independente de  $h$ . Logo, o problema de contorno consiste em achar o campo de deslocamento  $u : (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$  que satisfaça a Eq. (6) e as condições de contorno

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0. \quad (7)$$

Estas condições correspondem às condições (2).

Observe do exposto acima que o nível de precisão da aproximação entre os sistemas discreto, modelado pelas Eqs. (1) e (2), e contínuo, modelado pelas Eqs. (6) e (7), depende do número de termos na série de Taylor.

### 3 APLICAÇÃO DO MÉTODO

Com a finalidade de visualizar a consistência do método de homogeneização aplicado em modelos discretos, comparamos a solução exata do problema homogeneizado dado pelas Eqs. (6) e (7) com a solução do problema discreto dado pelas Eqs. (1) e (2) para dois casos da função  $f(x)$ , a saber,  $f(x) = x$  e  $f(x) = \cos(2\pi x)$ . O objetivo é estudar o comportamento da solução do problema discreto com respeito à variação do número de partículas. Os resultados são apresentados nas Figuras 2 e 3, respectivamente.

#### 3.1 Exemplo 1

Substituindo  $f(x) = x$  na Eq. (6), a solução que satisfaz as condições (7) é dado por

$$u(x) = -\frac{1}{6}(x^3 - x). \quad (8)$$

Por outro lado, utilizamos as condições de contorno (2) e o método de eliminação de Gauss para resolver o sistema de  $n-1$  equações lineares (1) para as  $n-1$  incógnitas  $y_j$ ,  $j=1,2,\dots,n-1$ , do modelo discreto para um número crescente de partículas  $n=2,4,10,16$ , onde lembramos do início desta seção que  $h=1/n$ . Os resultados obtidos possibilitaram gerar os gráficos mostrados na Figura 2, onde a coordenada  $x$  está no eixo das abscissas e os deslocamentos contínuo  $u$  e discreto  $y_i$ ,  $i=1,2,\dots,n-1$ , estão no eixo das ordenadas.

Observa-se da Figura 2 que, para  $n=16$ , os valores discretos  $y_j$  e calculados para  $u(x)$  nas coordenadas correspondentes  $x_j$  estão de muito bom acordo, confirmando a consistência do método de homogeneização quando o número de partículas é suficientemente grande.

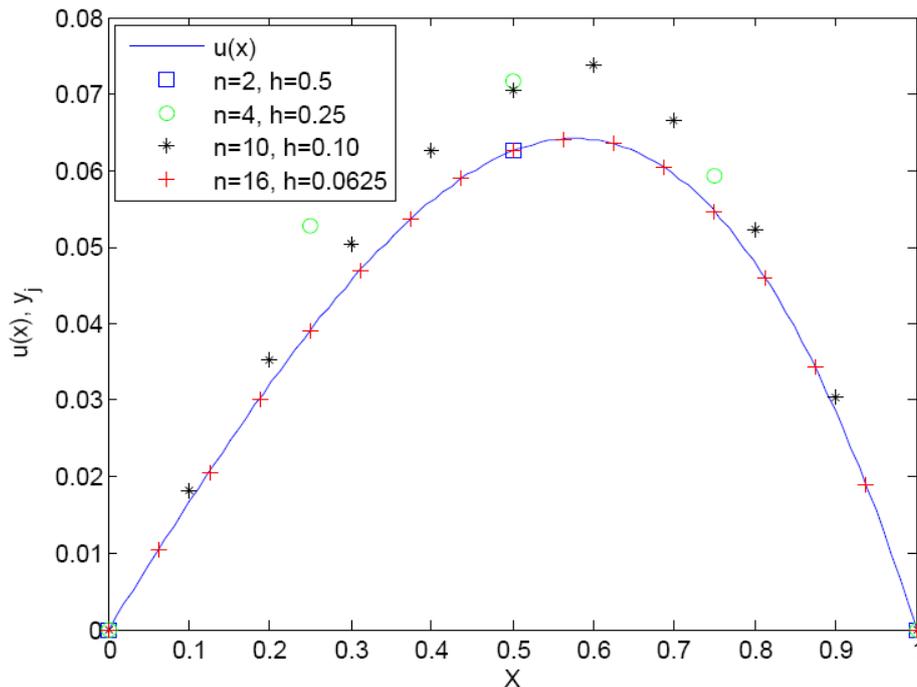


Figura 2 – Gráfico de deslocamento versus coordenada  $x$  para o caso  $f(x) = x$  e para um número crescente de partículas.

### 3.2 Exemplo 2

Substituindo  $f(x) = \cos(2\pi x)$  na Eq. (6) e resolvendo esta equação juntamente com as condições (7) obtemos

$$u(x) = \frac{1}{4\pi^2} (\cos 2\pi x - 1). \quad (9)$$

Por outro lado, utilizamos as condições de contorno (2) e o método de eliminação de Gauss para resolver o sistema de  $n-1$  equações lineares (1) para as  $n-1$  incógnitas  $y_j$ ,  $j=1,2,\dots,n-1$ , do modelo discreto para um número crescente de partículas  $n=2,4,8,16$ , onde lembramos do início desta seção que  $h=1/n$ . Os resultados obtidos possibilitaram gerar os gráficos mostrados na Figura 3. Novamente, a coordenada  $x$  está no eixo das abscissas e os deslocamentos contínuo  $u(x)$  e discreto  $y_j$ ,  $j=1,2,\dots,n-1$ , estão no eixo das ordenadas.

Similarmente ao observado na Seção 3.1, o modelo contínuo aproxima bem o modelo discreto para um número elevado de partículas. Aqui, no entanto, o erro  $|u(x) - y_j|$ ,  $j = 1, 2, \dots, n-1$ , é maior do que o erro correspondente do Exemplo 1 para o mesmo número de partículas  $n$ .

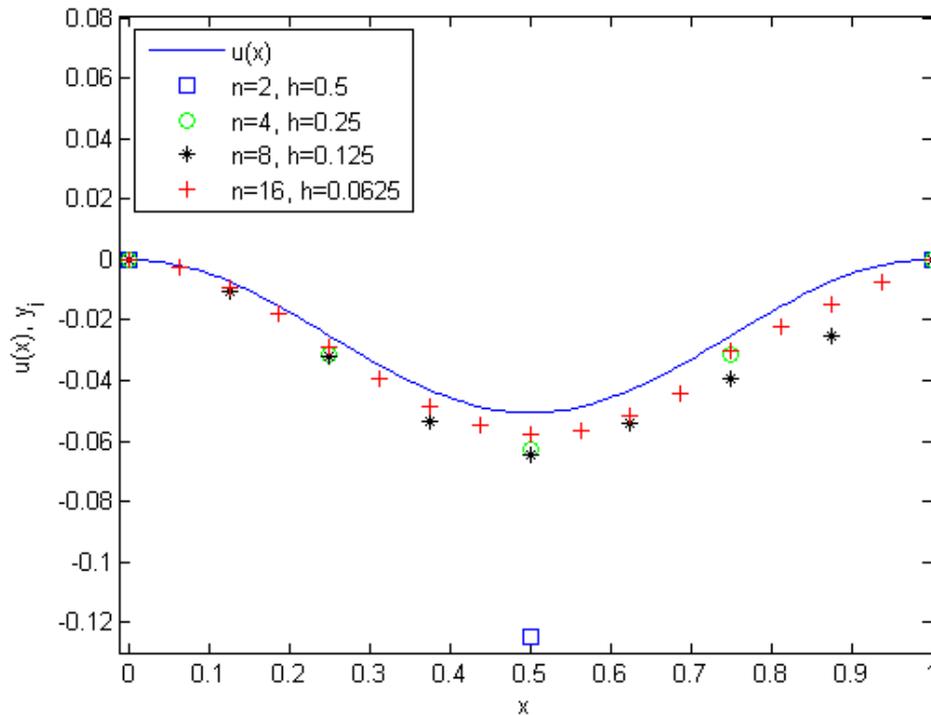


Figura 3 – Gráfico de deslocamento versus coordenada  $x$  para o caso  $f(x) = \cos(2\pi x)$  e para um número crescente de partículas.

## 4 CONCLUSÕES

A partir do problema descrito na seção 5 do artigo de Panasenko (2008) foi realizada uma revisão bibliográfica. Nesta revisão foram encontrados trabalhos que estão sendo realizados na área de mecânica dos sólidos. Por exemplo, METRIKINE e ASKES (2002) estudam o comportamento dinâmico de materiais microestruturais através da formulação de um modelo contínuo, SUIKER; BORST, (2005) e ADRIANOV et. al. (2010) estudam a propagação de ondas em materiais granulares analisando a relação de dispersão nestes meios através do modelo de homogeneização.

Os gráficos mostrados nas Figuras 2 e 3 ilustram bem a aproximação das soluções dos problemas discretos à solução do problema homogeneizado e isso não é mostrado nos artigos da literatura consultada.

Demonstra-se que a diferença entre a solução do problema discreto e a solução do problema contínuo é da ordem de  $O(h^2)$ , a qual justifica o princípio de homogeneidade equivalente do processo de homogeneização. Pode-se concluir que a homogeneização é uma ferramenta rigorosa para modelar materiais com características discretas.

## 5 AGRADECIMENTOS

A autora agradece ao Professor Dr. Julián Bravo Castellero pelo valioso conhecimento adquirido através de suas aulas, além da revisão ao texto. Ao Professor Dr. Adair Roberto Aguiar e ao

Dr. Leslie Darien Pérez Fernández pelas sugestões e revisão cuidadosa do texto. Agradece também à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP pelo apoio financeiro ao projeto com processo de nº. 07/54195-6. Professor Julián recebeu apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) na modalidade Bolsista CAPES/Brasil do Programa Professor Visitante do Exterior – PVE, Ofício/CGI/CAPES Nº 0452-11/2010.

## 6 REFERÊNCIAS

- ADRIANOV, I.V.; AWREJCEWICZ, J.; WEICHERT, D. Improved Continuous Models for Discrete Media, **Mathematical Problems in Engineering**, v. 2010, p. 1-35, 2009.
- BAKHVALOV, N.; PANASENKO, G. **Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media – Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials**. Kluwer, Dordrecht, 1989.
- BENSOUSSAN, A.; LIONS, J. L.; PAPANICOLAU, G. **Asymptotic analysis for periodic structures**. North Holland, Amsterdam, 1978.
- METRIKINE, A. V.; ASKES, H. One-dimensional dynamically consistent gradient elasticity models derived from a discrete microstructure. Part 1: Generic formulation, **European Journal of Mechanics A/Solids**, v. 21, p. 555-572, 2002.
- MÜHLHAUS, H.-B.; OKA, F. Dispersion and wave propagation in discrete and continuous models for granular materials, **Int. J. Solids Structures**, v.33, n. 19, p. 2841-2858, 1996.
- PANASENKO, G. **Multi-scale modelling for structures and composites**. Springer, Dordrecht, 2005.
- PANASENKO, G.P. Homogenization for Periodic Media: from Microscale to Macroscale, **Physics of Atomic Nuclei**, v. 71, n. 4, p. 681-694, 2008.
- POBEDRYA, B. E. **Mechanics of Composite materials**. Moscow State University Press, Moscow, 1984.
- SANCHEZ-PALENCIA, E. **Non-homogeneous media and vibration theory**. Lectures Notes in Physics 127, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- SUIKER, A.S.J., AND BORST, R. Enhanced continua and discrete lattices for modeling granular assemblies, **Phil. Trans. R. Soc. A.**, v. 363, p. 2543-2580, 2005.
- WUNG et al. Poly(p-phenylene vinylene) - silica composite: a novel sol-gel processed non-linear optical material for optical waveguides, **Polymer**, v. 32, n. 4, p. 605-608, 1991.

