

## MAXIMIZAÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE PRODUTOS CERÂMICOS NO DESENVOLVIMENTO DE NOVOS MATERIAIS – SIMULAÇÃO MATEMÁTICA

J. V. Nardi <sup>1</sup>, A. V. Nardi <sup>2</sup>

Rua Lauro Bustamante, 36, Itaguaçu, CEP 88.085-590, Florianópolis - SC - Brasil  
[nardijv@gmail.com](mailto:nardijv@gmail.com)

<sup>1</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Santa Catarina  
Florianópolis - SC

<sup>2</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Santa Catarina  
Criciúma - SC

### RESUMO`

*Em laboratório foram estudadas percentagens de misturas compostas por dois componentes cerâmicos pulverizados e um líquido para a hidratação da mistura, que reagindo quimicamente formam um cimento cerâmico. As misturas foram compactadas em moldes cilíndricos e após 28 dias de cura testadas as resistências à compressão. Aplicando o Método dos Mínimos Quadrados nos dados obtidos em laboratório, obtém-se a representação matemática da resistência à compressão em função dos teores das componentes de cada mistura. O modelo matemático adotado foi o quadrático. Através de software a equação permite a simulação de gráficos superficial e espacial, nos quais são apresentadas as variações dos valores das proporções das componentes e da característica mecânica estudada. A grande vantagem desse procedimento é a utilização de reduzido número de corpos de prova, e o principal resultado é a determinação das percentagens das componentes que maximizam o valor da propriedade mecânica estudada.*

Palavra chave: simulação matemática, novos materiais, maximização das propriedades mecânicas, ajustes de equações, cimento cerâmico, resistência à compressão.

### INTRODUÇÃO

A simulação matemática obtida dos dados laboratoriais tem permitido uma visualização geral das propriedades mecânicas de novos materiais. A metodologia de superfície de resposta têm sido testada em projetos de misturas com grande sucesso, tendo como fator positivo o pequeno número de ensaios laboratoriais<sup>(1),(2),(3)</sup>.

Existem software de ajustes de equações que possibilitam a criação dessas superfícies e que permitem visualizar o comportamento do produto final<sup>(4)</sup>. Neste trabalho faz-se uso dessa ferramenta.

## MODELO MATEMÁTICO TEÓRICO

O modelo matemático escolhido para representar a superfície de resposta da propriedade mecânica estudada foi o quadrático, como mostrado na Eq. (A).

$$R_{CE} = b_1X + b_2Y + b_3Z + b_{12}XY + b_{13}XZ + b_{23}YZ \quad (A)$$

Sendo:

- $R_{CE}$  a resistência à compressão axial estimada, simulada pelo modelo quadrático adotado, correspondendo a variável dependente;
- X, Y e Z as percentagens das componentes das Amostras 1, 2 e 3 na mistura, correspondendo as variáveis independentes;
- $b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{13},$  e  $b_{23}$  os coeficientes da equação; e
- $X + Y + Z = 1$ .

## PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Utiliza-se neste trabalho uma mistura ternária, constituída por dois materiais cerâmicos pulverizados e um líquido (água), que reagindo quimicamente formam um produto cimentante. A Tab. 1 mostra a composição química dos materiais pulverizados.

Tabela 1. Composição química dos materiais pulverizados utilizados.

Compostos	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	MgO	SO <sub>3</sub>	P.F.
Amostra A (%)	-	-	-	71,4	-	-	-	-	28,2
Amostra B (%)	53,6	28,60	8,33	1,35	0,10	2,32	0,91	0,82	4,01

Obs.: O resíduo insolúvel da Amostra 1 é igual a 0,38 %.

As misturas foram comprimidas de acordo com a norma DNER-DPT ME 48-64, em moldes cilíndricos com 10 cm de diâmetro e 20 cm de altura. Após 28 dias de cura os corpos de prova foram testados a resistência à compressão axial.

## RESULTADO LABORATORIAL

A Tab. 2 mostra as proporções das componentes utilizadas nas misturas e suas respectivas resistências à compressão axial ( $R_c$ ).

Tabela 2. Resultado experimental do estudo laboratorial.

X (%)	Y (%)	Z (%)	$R_c$ (kPa)	X (%)	Y (%)	Z (%)	$R_c$ (kPa)
14,82	64,23	20,95	1.002	24,03	44,63	31,34	3.349
13,50	58,51	27,99	1.883	23,17	43,03	33,80	2.631
12,43	53,88	33,69	1.423	34,25	49,47	16,28	2.015
11,91	51,63	36,46	1.190	31,88	46,03	22,09	3.074
11,46	49,66	38,88	1.058	29,84	43,10	27,06	2.917
28,86	53,61	17,53	2.980	28,87	41,71	29,42	2.458
26,66	49,50	23,84	3.962	27,99	40,44	31,57	1.985
24,87	46,18	28,95	3.778	-	-	-	-

## DETERMINAÇÃO DA EQUAÇÃO QUADRÁTICA

Os modelos quadráticos dos resultados laboratoriais são representados pela Eq. (B) segundo as pseudocomponentes e pela Eq. (C) segundo as coordenadas originais, ambos obtidos pelo método dos mínimos quadrados utilizando-se dos dados da Tab. 2.

$$R_{CE} = -2521,54X - 3624,13Y - 2884,12Z + 24181,19XY + 19652,04XZ + 18573,77YX \quad (B)$$

$$R_{CE} = -1023,47X - 348,67Y - 717,35Z + 23,88XY + 19,41XZ + 18,34YZ \quad (C)$$

Obs.: O coeficiente de correlação ( $R^2$ ) de ambas as equações é igual a 0,96.

## DETERMINAÇÃO DAS SUPERFÍCIES DE RESPOSTAS TRIANGULAR E ESPACIAL

As superfícies de respostas triangular e espacial da resistência à compressão axial esperada ( $R_{CE}$ ), gerada dos ensaios laboratoriais, dos valores da Tab. 2 e da Eq. (B), são visualizadas na Fig 1.

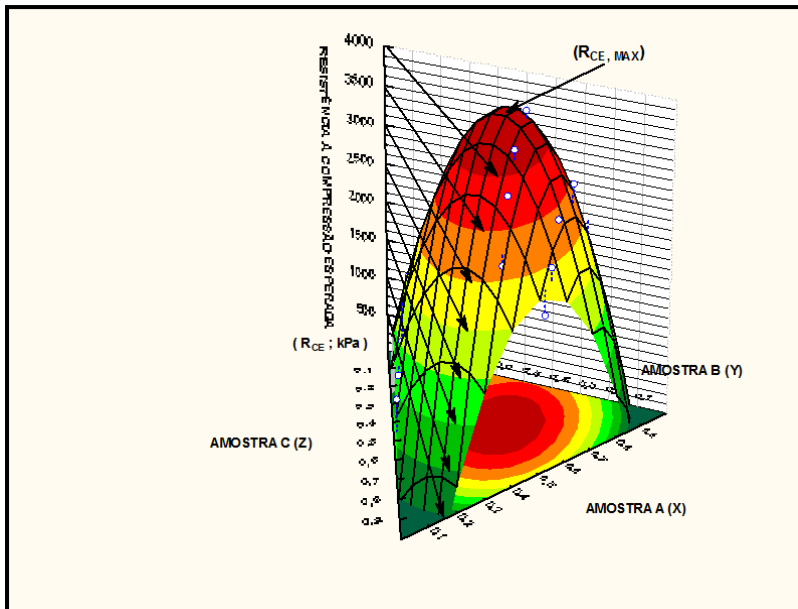


Figura 1. Representação das superfícies de respostas triangular e espacial, da resistência à compressão axial esperada.

Na base horizontal da figura acima, a superfície de resposta é representada por um sistema de eixos de coordenadas triangulares, seus lados correspondem aos eixos das componentes ternárias, onde são plotados os valores correspondentes das Amostra 1 (X), Amostra 2 (Y), Amostra 3 (Z) e das resistências à compressão axial esperada representadas na forma de curvas de níveis sobre a superfície triangular.

A superfície de resposta espacial é representada cotando-se as curvas de níveis num eixo, perpendicular à base triangular, que representa os valores estimados da resistência à compressão axial esperada ( $R_{CE}$ ).

## MAXIMIZAÇÃO DA PROPRIEDADE MECÂNICA ESTUDADA

Nos gráficos superficial e espacial, facilmente se visualizam todas as variações das percentagens das componentes estudadas e suas correspondentes resistências

esperadas. Na Fig. 2 é possível localizar, aproximadamente, os valores otimizados das percentagens das componentes que maximizam a resistência axial esperada e representados pelo ponto  $R_{CE, MAX}$  (0,38 ; 0,35 ; 0,27). Valores em pseudocomponentes.

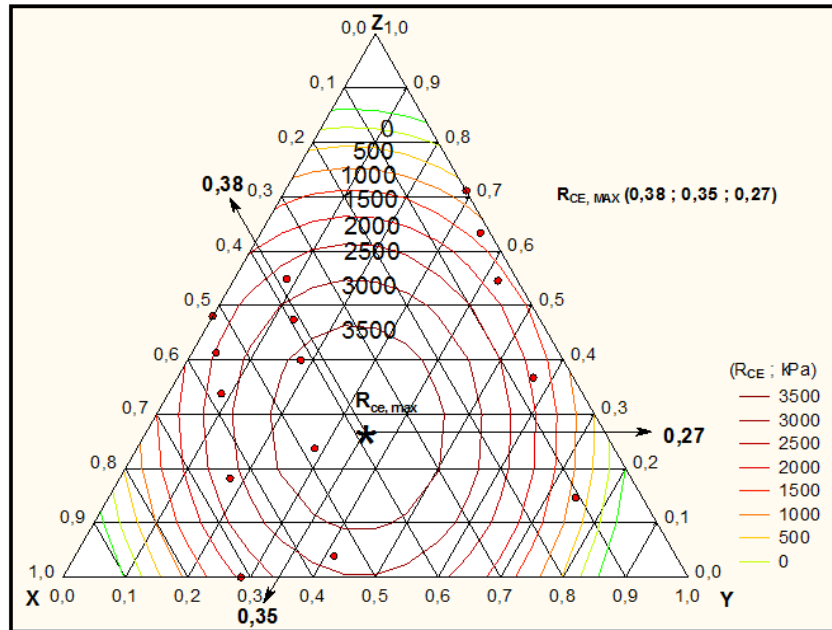


Figura 2. Determinação gráfica dos valores otimizados das componentes que maximizam a resistência à compressão axial esperada.

O procedimento consiste em localizar visualmente sobre a superfície triangular um ponto, correspondente a  $R_{CE, MAX}$ , sobre a curva de nível de maior valor, local onde sua superfície é reduzida a zero, assumindo a forma pontual. Importante observar que essa localização é aproximada. Então se lê os valores das coordenadas das componentes nos respectivos eixos e substitui-se na Eq. (B), determinando-se o valor máximo esperado para a resistência. Exemplificando: localizado o valor da resistência esperada máxima sobre as curvas de níveis da figura acima, lê-se para a Amostra 1 o valor de 0,38 no eixo X, para a Amostra 2 o valor de 0,35 no eixo Y e para a Amostra 3 o valor de 0,27 no eixo Z. Substituindo-se esses valores na Eq. (B) obtém-se 3.982 kPa para o valor máximo esperado da resistência ( $R_{CE, MAX}$ ). Para qualquer outro valor de resistência o procedimento será idêntico. Para a utilização da Eq. (C) transformam-se os valores das pseudocomponentes da  $R_{CE, MAX}$  (0,38 ; 0,35 ; 0,27) para os valores

correspondentes as coordenadas originais da  $R_{CE, MAX}$  (23,55 ; 51,58 ; 24,87). Substituindo-se esse valores na Eq. (C) obtém-se 3.974 kPa para o valor máximo esperado da resistência ( $R_{CE, MAX}$ ), confirmando desta forma a grande aproximação do procedimento. Logo: 23,55 % da Amostra 1, 51,58 % da Amostra 2 e 24,87 % da Amostra 3 maximizam o valor da resistência esperada.

A Tab. 4 resume os valores das componentes otimizadas, segundo as pseudocomponentes e coordenadas originais, e suas correspondentes resistências máximas esperadas. Também são apresentados os valores calculados pelo Software.

Tabela 4. Componentes otimizadas e suas resistências máximas esperadas.

EQUAÇÃO	PSEUDOCOMPONENTES	COORDENADAS ORIGINAIS	$R_{CE, MAX}$ (kPa)
Equação B	P(0,38 ; 0,35 ; 0,27)	–	3.982
Equação C	–	P(23,55 ; 51,58 ; 24,87)	3.974
Software	P(0,39 ; 0,33 ; 0,28)	P(23,88 ; 51,02 ; 25,10)	3.987

## DISCUSSÃO

Utilizando-se dos resultados obtidos em laboratório como dados de entrada no Software Statistica, é possível obter-se modelos matemáticos na forma quadrática, como mostrados nas Eq. (B) e Eq. (C). O programa também permite a representação da superfície de resposta na forma de coordenadas triangulares e a representação espacial, ambas apresentadas segundo os valores de suas pseudocomponentes.

A partir da definição e elaboração dessas superfícies, a determinação das percentagens das componentes na mistura, para qualquer valor desejado da resistência à compressão axial esperada, poderá ser determinada. Basta sobrepor na superfície triangular, sobre a área das curvas de níveis, o valor aproximado da resistência desejada e ler nos eixos triangulares os valores das componentes correspondentes. A Tab. 4 acima confirma tal procedimento. Dessa forma se elimina uma série de ensaios laboratoriais, isto porque é possível efetuar simulações preliminares independente de ensaios laboratoriais.

Nas superfícies de respostas podem-se perfeitamente visualizar a existência de um número sem fim de combinações, entre as componentes, que geram as propriedades

mecânicas no produto final, igualmente desenvolver simulações gráficas na área de validade dos intervalos pesquisados e efetuar estudos de maximização em projetos de misturas. Todos esses estudos podem ser realizados em escritório, permitindo a economia de tempo e serviços em ensaios laboratoriais, diminuindo desta forma os custos totais que envolvem as pesquisas. Simulada as percentagens da mistura novos ensaios se farão para confirmação dos valores anteriormente obtidos.

Logo: este procedimento permite dissecar de forma cristalina as propriedades físicas dos materiais, isto porque está baseado numa profunda interação entre os dados laboratoriais e o conhecimento de princípios matemáticos aplicáveis ao problema em questão.

## CONCLUSÃO

O estudo acima desenvolvido possibilita as seguintes afirmações:

- Ser possível através de pequeno número de ensaios laboratoriais obter-se modelos matemáticos e superfícies de respostas, tendo como finalidade a determinação de propriedades mecânicas de novos materiais;
- Visualizar nas superfícies de respostas triangular e espacial, as variações das combinações das proporções das componentes nas misturas, associadas aos resultados esperados na propriedade mecânica estudada;
- Otimizar as percentagens das componentes em uma mistura, na obtenção do valor máximo de uma propriedade mecânica de interesse, neste caso: a resistência à compressão axial esperada;
- A grande vantagem desse procedimento é o uso de software que permite a rápida obtenção das superfícies de respostas, a visualização gráfica do comportamento total do material em estudo e a determinação de propriedades mecânicas individuais, quando são variadas as proporções de seus componentes formadores, no desenvolvimento de novos materiais.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CORNELL, J. A. *Experiments with Mixtures: Designs, Models and the Analysis of Mixture Data*. 2. ed. New York, Wiley, 1990.

2. MONTGOMERY, A. D. ***Design and Analysis of Experiments***. 4 ed. New York, Wiley, 1996.
3. NARDI, J. V.; ACCHAR, W.; HOTZA, D. Enhancing the Properties of Ceramic Products Through Mixture Design and Response Surface Analysis. ***Journal of the European Ceramic Society***, v. 24, p. 375-379, 2004.
4. STATSOFT, INC. ***Statistica. Industrial Statistics***. Volume IV, Printed in the United States of America, 1995.

## **MECHANICAL PROPERTIES MAXIMIZATION OF CERAMIC PRODUCTS IN NEW MATERIALS DEVELOPMENT - MATHEMATICAL SIMULATION**

### **ABSTRACT**

*In laboratory it was studied the percentages of mixtures composed of two powdered ceramic component and a liquid for hydrating the mix that react chemically forming a ceramic cement. The mixtures were compacted into cylindrical molds and after 28 days of curing it's compressive strength was tested. Applying the regression (method of least squares) on the laboratory data it is obtained the mathematical representation of compressive strength in function on the contents of the components of each mixture. The mathematical model used was the quadratic. Through software this equation allows the simulation of surface graphic and spatial graphic, in which the variations in the values of the proportions of components and the mechanical characteristic studied are presented. The great advantage of this procedure is the use of small number of specimens and its main result is the determination of the percentages of the components that maximize the value of the mechanical properties studied.*

Key-words: mathematical simulation, new materials, mechanical properties maximization, equations adjustments, ceramic cement, compressive strength.