

RESUMO

CARVALHO, P. R. P. **Análise numérica de fenômenos termo-mecânicos com mudança de fase sólido-líquido em grandes deformações.** 2024. 187p. Tese - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2024.

Revisar ao final Motivado pelos recentes avanços nos processos de manufatura aditiva, bem como problemas de fabricação de elementos estruturais, este trabalho dedica-se ao desenvolvimento de uma ferramenta numérica para simular problemas termo-mecânicos, incluindo mudança de fase sólido-líquido e situações de contato. O escopo desta pesquisa inclui o desenvolvimento de modelos constitutivos termo-viscoelástico-viscoplásticos em grandes deformações, para simular a fase sólida dos materiais. Tanto os modelos constitutivos quanto a equação da condução de calor são baseados nas leis da termodinâmica, definidos a partir da energia livre de Helmholtz, de onde derivam a tensão e a entropia. A simulação numérica é realizada pelo método dos elementos finitos, com uma abordagem baseada em temperaturas para o problema térmico, e em posições para o problema mecânico. Para a simulação de sólidos e fluidos incompressíveis, emprega-se uma formulação mista do MEF baseada em posições e pressões. O contato é modelado utilizando o método nó-a-superfície com multiplicadores de Lagrange. Para o problema termo-mecânico de mudança de fase entre sólido e líquido, propõe-se um modelo totalmente Lagrangiano baseado na decomposição multiplicativa do gradiente de deformação mecânica em componentes sólidas e líquidas. A evolução de cada componente é controlada pelo modelo constitutivo do material, que varia conforme a fase. Essa abordagem garante uma descrição cinemática consistente em problemas envolvendo grandes deformações. Em todas as etapas deste trabalho, exemplos numéricos representativos são simulados com o objetivo de verificar o código proposto e demonstrar as características dos modelos desenvolvidos.

Palavras-chave: Mudança de fase. Termo-viscoelástico-viscoplástico. Materiais incompressíveis. Grandes deslocamentos. Grandes deformações. Contato.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Mudanças de configuração de um corpo deformável | 32 |
| Figura 2 – Mapeamento de um elemento finito em suas configurações inicial e final | 39 |
| Figura 3 – Dados do exemplo puramente térmico | 52 |
| Figura 4 – Coomparação entre os campos de temperatura obtidos neste trabalho (à esquerda) e no <i>software ANSYS</i> (à direita) para o tempo de análise 100s. | 52 |
| Figura 5 – Temperatura (em °C) ao longo do tempo nos pontos A e B do exemplo puramente térmico. | 53 |
| Figura 6 – Temperatura ao longo do eixo horizontal que percorre os pontos A e B em diversos tempos de análise para o exemplo puramente térmico | 53 |
| Figura 7 – Mapeamento da configuração intermediária no modelo termo-elástico | 60 |
| Figura 8 – Esquema de acoplamento bloco-iterativo para o problema termo-elástico | 65 |
| Figura 9 – Dados do exemplo de cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos | 66 |
| Figura 10 – Configuração deformada e campo de temperatura (em °C) para o pri- meiro e último passo do carregamento mecânico | 66 |
| Figura 11 – Deslocamento e temperatura vs. tempo no ponto A | 67 |
| Figura 12 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura | 67 |
| Figura 13 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decom- posta aditiva com lei exponencial, (c) decom. multiplicativa com lei linear e (d) decom. multiplicativa com lei exponencial | 68 |
| Figura 14 – Gráficos de (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da defor- mação, calculados na borda inferior do meio do vão para o exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura | 69 |
| Figura 15 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico | 69 |
| Figura 16 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecâ- nico, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decom. aditiva com lei exponencial, (c) decom. multiplica- tiva com lei linear e (d) decom. multiplicativa com lei exponencial | 70 |
| Figura 17 – Gráficos de (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da defor- mação, calculados na borda inferior do meio do vão para o exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico | 70 |
| Figura 18 – Cubo sob deformações térmicas excessivas - Descrição do problema e da discretização | 71 |

| | |
|---|----|
| Figura 19 – Resultados para o ponto A vs. tempo - (a) temperatura, (b) alongamento térmico, e componentes (c) componentes E_{11} e (d) E_{22} de deformação de Green-Lagrange | 72 |
| Figura 20 – Tensão σ_{11} sobre a configuração deformada para o modelo baseado na decomposição multiplicativa e lei exponencial | 72 |
| Figura 21 – Modelo reológico visco-elasto-plástico | 73 |
| Figura 22 – Configurações intermediárias para a decomposição multiplicativa aplicada ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico | 75 |
| Figura 23 – Fluxograma do algoritmo previsão-correção para marcha no tempo | 79 |
| Figura 24 – Estimativa inicial dos parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico a partir das tangentes das curvas experimentais | 84 |
| Figura 25 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico em material politetrafluoretileno | 85 |
| Figura 26 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico, desconsiderando o encruamento cinemático viscoso (isto é, $\tilde{c} = 0$), com (a) $c = 51,71$ MPa e (b) $c = 59,98$ MPa | 85 |
| Figura 27 – Análise do Jacobiano | 86 |
| Figura 28 – Gráficos de tensão compressiva de engenharia por (a) deformação linear compressiva de engenharia e (b) tempo, para o ensaio de relaxação com intervalos de 6h e $\dot{\varepsilon} = 0,01\text{ s}^{-1}$ | 87 |
| Figura 29 – Gráficos de tensão de engenharia por (a) deformação linear de engenharia e (b) tempo, para o ensaio de relaxação com intervalos de 6h e taxas de deformação variáveis. | 88 |
| Figura 30 – Gráficos de (a) tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6h e taxa de tensão de 0,1755 MPa/s. | 88 |
| Figura 31 – Gráficos de (a) tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6h e taxa de tensão variável. | 89 |
| Figura 32 – Dados para o exemplo do cilindro parcialmente comprimido | 89 |
| Figura 33 – Deslocamentos verticais no ponto A para o cilindro parcialmente comprimido submetido à fluência, considerando (a) erro do deslocamento com relação à malha HEX64/32x32, e diagramas de deslocamento ao longo do tempo para os casos com elementos (b) HEX8, (c) HEX27 e (d) HEX64 | 91 |
| Figura 34 – Configurações deformadas para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência em diferentes malhas, com componente $(E_p)_{22}$ de deformação plástica em mapas de cores | 92 |
| Figura 35 – Análise de convergência de malha para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência, incluindo (a) tempo de processamento para diferentes malhas e (b) número de iterações por passo de tempo | 93 |

| | |
|---|-----|
| Figura 36 – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência, incluindo (a) erro no deslocamento vertical do ponto A com relação à discretização temporal mais refinada, e (b) deslocamento vertical no ponto A ao longo do tempo | 94 |
| Figura 37 – Dados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico | 111 |
| Figura 38 – Resultados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico, com (a) gráfico de força de reação vertical e configuração deformada final com componentes σ_{22} de tensão de Cauchy em mapa de cores, para os casos (b) 2D e (c) 3D | 111 |
| Figura 39 – Dados do exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico | 112 |
| Figura 40 – (a) Força de reação vertical e (b) configuração deformada final para exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico | 112 |
| Figura 41 – Dados do exemplo de contato entre lajes | 113 |
| Figura 42 – Configurações deformadas do exemplo de contato entre lajes para 4 passos de tempo diferentes, com componente σ_{11} da tensão de Cauchy em mapa de cores | 114 |
| Figura 43 – Gráficos reações de apoio nas direções (a) x_2 , (b) x_1 e x_3 para o exemplo de contato entre lajes | 114 |
| Figura 44 – Dados do exemplo de dobramento simples de chapa metálica | 115 |
| Figura 45 – Configurações deformadas para o exemplo de dobramento simples de chapa metálica, com componentes horizontais de deformação plástica, $(E_p)_{11}$ ilustradas em mapas de cores | 115 |
| Figura 46 – Dados do exemplo de dobramento direcionado (<i>draw bending</i>) de barra metálica | 116 |
| Figura 47 – Configurações deformadas do exemplo de dobramento direcionado para o caso sem atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores | 116 |
| Figura 48 – Configurações deformadas finais do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores | 116 |
| Figura 49 – Gráficos de força de reação horizontal do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito | 117 |
| Figura 50 – Dados do exemplo de extrusão | 118 |
| Figura 51 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão sem atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores | 118 |
| Figura 52 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão com $\mu = 0,1$, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores | 119 |
| Figura 53 – Gráficos de (a) força de reação horizontal e (b) deslocamento no ponto A para o exemplo de extrusão | 119 |

| | |
|---|-----|
| Figura 54 – Dados para o exemplo do cubo hiperelástico com tensão uniaxial | 125 |
| Figura 55 – Configurações deformadas finais para os casos com (a) $\Lambda = 10^0$ MPa, (b) $\Lambda = 10^2$ MPa e (c) modelo incompressível | 125 |
| Figura 56 – Gráficos de (a) deslocamento vertical por força aplicada e (b) desloca- mento horizontal/vertical por força aplicada | 126 |
| Figura 57 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial por força aplicada e (b) pressão por força aplicada | 126 |
| Figura 58 – Gráficos de (a) Jacobiano por força aplicada e (b) $ J - 1 $ por Λ para os modelos compressíveis | 127 |
| Figura 59 – Representação visual do fenômeno da tensão superficial | 129 |
| Figura 60 – Representação visual de elementos de curva utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial | 131 |
| Figura 61 – Representação visual de elementos triangulares utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial | 132 |
| Figura 62 – Representação de força resultante de tensão superficial em nó de canto . | 133 |
| Figura 63 – Análise de convergência de pontos de integração para tensão superficial em (a) elementos de curva e (b) elementos triangulares | 133 |
| Figura 64 – Geometria e dados do exemplo: <i>Sloshing</i> de pequena amplitude | 134 |
| Figura 65 – Altura da superfície livre nas extremidades esquerda e direita do recipi- ente com relação ao tempo | 135 |
| Figura 66 – Configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores | 135 |
| Figura 67 – Configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores | 136 |
| Figura 68 – Geometria e dados do exemplo: colapso de barragem sob superfície lisa . | 136 |
| Figura 69 – Configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores | 137 |
| Figura 70 – Configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores | 137 |
| Figura 71 – Gráficos ao longo do tempo adimensional de (a) Variação do compri- mento do domínio e (b) Pressão medida no ponto inferior esquerdo | 138 |
| Figura 72 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 2D | 138 |
| Figura 73 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, considerando diferentes valores de viscosidade | 139 |
| Figura 74 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 10^{-3}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² | 139 |
| Figura 75 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 5 \cdot 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² | 139 |
| Figura 76 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² | 139 |

| | |
|---|-----|
| Figura 77 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² , e diferentes valores de massa específica | 140 |
| Figura 78 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² , e diferentes valores de massa específica | 141 |
| Figura 79 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 10^{-4}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m ³ , e diferentes valores de tensão superficial | 141 |
| Figura 80 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m ³ , e diferentes valores de tensão superficial | 142 |
| Figura 81 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D | 143 |
| Figura 82 – Gráficos de (a) distância ao ponto A e (b) pressão, para diversos pontos do contorno sob tensão superficial em 3D | 143 |
| Figura 83 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D | 144 |
| Figura 84 – Relações características entre entalpia e temperatura | 147 |
| Figura 85 – Dados do exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo | 152 |
| Figura 86 – Mapa de cores de temperatura e fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo | 153 |
| Figura 87 – Gráficos de (a) temperatura no ponto $x_1 = 1$ m e (b) posição da interface de mudança de fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo | 153 |
| Figura 88 – Modelo reológico para a fase de transição, considerando um sólido viscoelástico-viscoplástico | 155 |
| Figura 89 – Gráficos dos modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido | 164 |
| Figura 90 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,016$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = -2$ °C/s | 169 |
| Figura 91 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,08$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = -10$ °C/s | 170 |
| Figura 92 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,4$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = -50$ °C/s | 170 |
| Figura 93 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,016$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = 2$ °C/s | 171 |
| Figura 94 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,08$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = 10$ °C/s | 171 |
| Figura 95 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,4$ s ⁻¹ e $\dot{\theta} = 50$ °C/s | 172 |
| Figura 96 – Dados para o exemplo de prensagem de cilindro solidificado | 173 |

| | |
|--|-----|
| Figura 97 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de cilindro solidificado | 174 |
| Figura 98 – Configurações deformadas para o material hiperelástico, com σ_{11} em mapa de cores | 174 |
| Figura 99 – Configurações deformadas para o PTFE, com σ_{11} em mapa de cores | 174 |
| Figura 100 – Geometrias para o exemplo de prensagem de esfera solidificada | 175 |
| Figura 101 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de esfera solidificada com $\alpha = 0$ | 176 |
| Figura 102 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de esfera solidificada com $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ | 176 |
| Figura 103 – Configurações deformadas para material hiperelástico e $\alpha = 0$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores | 177 |
| Figura 104 – Configurações deformadas para material hiperelástico e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores | 177 |
| Figura 105 – Configurações deformadas para PTFE e $\alpha = 0$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores | 177 |
| Figura 106 – Configurações deformadas para PTFE e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores | 177 |
| Figura 107 – Dados do exemplo de derretimento de coluna 2D | 178 |
| Figura 108 – | 179 |
| Figura 109 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com $\alpha = 0$, e fases em mapa de cores | 180 |
| Figura 110 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com pressões (Pa) em mapa de cores, $\alpha = 0$, multiplicadores quínticos e malha 12x24 | 180 |
| Figura 111 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com pressões (Pa) em mapa de cores, $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, multiplicadores quínticos e malha 12x24 | 181 |
| Figura 112 – | 181 |
| Figura 113 – Dados do exemplo de derretimento de coluna 3D | 182 |
| Figura 114 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna 3D com multiplicadores quínticos, e fases em mapa de cores | 182 |
| Figura 115 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna 3D com multiplicadores quínticos, e pressão (Pa) em mapa de cores | 183 |
| Figura 116 – | 183 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|-----|
| Tabela 1 – parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico calibrados para o material politetrafluoretileno | 84 |
| Tabela 2 – Análise de convergência de malha para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência | 93 |
| Tabela 3 – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência | 93 |
| Tabela 4 – Parâmetros do material <i>Mild Steel Ck15</i> , retirados de ??) | 113 |
| Tabela 5 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos de curva sujeitos a tensão superficial, utilizando 20 pontos de integração da quadratura de Gauss | 131 |
| Tabela 6 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos triangulares sujeitos a tensão superficial, utilizando 79 pontos de integração da quadratura de Dunavant | 132 |
| Tabela 7 – Pontos de integração selecionados para tensão superficial em diversos tipos de elementos, utilizando o critério $e < 10^{-3}$ | 134 |
| Tabela 8 – Coeficiente de ponderação para a parcela latente do calor específico . . | 151 |
| Tabela 9 – Modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido | 164 |
| Tabela 10 – Parâmetros do material utilizado nas análises de problemas locais com mudança de fase | 169 |

LISTA DE QUADROS

| | |
|--|-----|
| Quadro 1 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase sólida ($\theta \leq \theta_s$) | 159 |
| Quadro 2 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase líquida ($\theta \geq \theta_\ell$) | 161 |
| Quadro 3 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase de transição ($\theta_s < \theta < \theta_\ell$) | 167 |

SUMÁRIO

| | | |
|--------------|---|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 19 |
| 1.1 | Objetivos | 20 |
| 1.2 | Justificativa | 20 |
| 1.3 | Estado da arte | 21 |
| 1.3.1 | Mecânica dos sólidos computacional | 21 |
| 1.3.2 | Dinâmica dos fluidos computacional | 22 |
| 1.3.3 | Modelos viscoelástico-viscoplásticos | 23 |
| 1.3.4 | Transferência de calor e modelos termo-mecânicos | 24 |
| 1.3.5 | Mudança de fase sólido-fluido | 25 |
| 1.3.6 | Modelos numéricos de contato | 26 |
| 1.4 | Metodologia | 27 |
| 2 | MECÂNICA DO CONTÍNUO | 31 |
| 2.1 | Cinemática dos corpos deformáveis | 31 |
| 2.1.1 | Medidas de deformação | 32 |
| 2.1.2 | Fórmulas da mudança de volume e área | 33 |
| 2.1.3 | Princípio da conservação da massa | 33 |
| 2.2 | Equilíbrio | 34 |
| 2.2.1 | Energia de deformação | 34 |
| 2.2.2 | Energia cinética | 35 |
| 2.2.3 | Energia potencial das forças externas | 35 |
| 2.3 | Modelos constitutivos hiperelásticos | 36 |
| 2.3.1 | Modelo de Saint Venant-Kirchhoff | 36 |
| 2.3.2 | Modelo Neo-Hookeano | 37 |
| 2.3.3 | Estado plano de deformação e de tensão | 37 |
| 2.4 | Método dos elementos finitos aplicado ao problema mecânico | 38 |
| 2.4.1 | Discretização espacial | 38 |
| 2.4.2 | Equações de equilíbrio | 40 |
| 2.4.3 | Integração temporal - Método de Newmark- β | 41 |
| 2.4.4 | Linearização das equações de equilíbrio | 41 |
| 3 | TERMODINÂMICA E TRANSFERÊNCIA DE CALOR | 43 |
| 3.1 | Primeira lei da termodinâmica | 43 |
| 3.2 | Segunda lei da termodinâmica | 45 |
| 3.3 | Energia livre de Helmholtz | 45 |
| 3.4 | Equação da condução de calor | 46 |
| 3.4.1 | Lei de Fourier | 48 |
| 3.4.2 | Condição de convecção | 49 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 3.5 | Método dos elementos finitos aplicado ao problema térmico | 50 |
| 3.5.1 | Exemplo numérico: problema puramente térmico | 51 |
| 4 | MODELO TERMO-ELÁSTICO | 55 |
| 4.1 | Base termodinâmica | 55 |
| 4.2 | Decomposição aditiva | 56 |
| 4.3 | Decomposição multiplicativa | 59 |
| 4.3.1 | Equivalência entre leis de expansão térmica | 62 |
| 4.4 | Equação termo-elástica da condução de calor | 63 |
| 4.5 | Solução numérica da termo-elasticidade | 63 |
| 4.5.1 | Acoplamento termo-mecânico | 63 |
| 4.6 | Exemplos numéricos | 64 |
| 4.6.1 | Cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos | 65 |
| 4.6.2 | Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura | 67 |
| 4.6.3 | Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico | 68 |
| 4.6.4 | Cubo sob deformações térmicas excessivas | 70 |
| 5 | MODELO VISCOELÁSTICO-VISCOPLÁSTICO | 73 |
| 5.1 | Cinemática | 74 |
| 5.2 | Energia, tensão e dissipação | 75 |
| 5.3 | Critério de escoamento e leis de evolução | 76 |
| 5.4 | Solução numérica | 78 |
| 5.5 | Operador tangente consistente | 79 |
| 5.6 | Definição da energia livre de Helmholtz | 81 |
| 5.7 | Aplicação ao material politetrafluoretileno (PTFE) | 82 |
| 5.7.1 | Calibração dos parâmetros | 82 |
| 5.7.2 | Ensaio de relaxação | 86 |
| 5.7.3 | Ensaio de fluênciia | 87 |
| 5.7.4 | Cilindro parcialmente comprimido | 89 |
| 5.7.4.1 | Ensaio de fluênciia com análise de convergência de malha | 89 |
| 5.7.4.2 | Ensaio de fluênciia com análise de convergência de tempo | 91 |
| 6 | MODELO TERMO-VISCOELÁSTICO-VISCOPLÁSTICO | 95 |
| 6.1 | Cinemática | 95 |
| 6.2 | Energia, tensão e dissipação | 96 |
| 6.3 | Operador tangente consistente | 99 |
| 6.4 | Equação da condução de calor | 100 |
| 6.5 | Modelos com viscosidade aprimorada | 102 |
| 7 | MODELO NUMÉRICO DE CONTATO | 103 |
| 7.1 | Discretização do contato pela estratégia nó-a-superfície | 104 |
| 7.2 | Detecção do contato | 104 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 7.3 | Imposição das condições de contato | 105 |
| 7.3.1 | Contato sem atrito | 106 |
| 7.3.2 | Contato com atrito de Coulomb | 107 |
| 7.3.2.1 | Condição de aderência | 108 |
| 7.3.2.2 | Condição de deslizamento | 109 |
| 7.4 | Exemplos numéricos | 110 |
| 7.4.1 | Contato entre cilindro e bloco hiperelástico | 110 |
| 7.4.2 | Contato entre esfera e bloco hiperelástico | 111 |
| 7.4.3 | Contato entre lajes em balanço | 112 |
| 7.4.4 | Dobramento simples de chapa metálica | 113 |
| 7.4.5 | Dobramento direcionado (<i>draw bending</i>) de barra metálica | 115 |
| 7.4.6 | Extrusão | 117 |
| 8 | SÓLIDOS E FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS | 121 |
| 8.1 | Formulação mista do MEF para materiais incompressíveis | 121 |
| 8.1.1 | Discretização do problema | 122 |
| 8.1.2 | Formulação estabilizada | 123 |
| 8.2 | Sólidos incompressíveis | 124 |
| 8.2.1 | Exemplo numérico: cubo hiperelástico com tensão uniaxial | 125 |
| 8.3 | Fluidos Newtonianos incompressíveis | 126 |
| 8.3.1 | Tensão superficial | 128 |
| 8.3.1.1 | Forças resultantes em elementos isolados e análise de pontos de integração | 130 |
| 8.3.2 | Exemplos numéricos de fluidos | 134 |
| 8.3.2.1 | <i>Sloshing</i> de pequena amplitude | 134 |
| 8.3.2.2 | Colapso de barragem sob superfície lisa | 135 |
| 8.3.2.3 | Fluido sob tensão superficial: caso 2D | 137 |
| 8.3.2.4 | Fluido sob tensão superficial: caso 3D | 142 |
| 9 | MUDANÇA DE FASE | 145 |
| 9.1 | Formulação puramente térmica | 145 |
| 9.1.1 | Modelo de mudança de fase não-isotérmica | 148 |
| 9.1.2 | Implementação numérica | 149 |
| 9.1.3 | Exemplo de verificação: solidificação de chapa ao longo de um eixo | 152 |
| 9.2 | Formulação termo-mecânica | 152 |
| 9.2.1 | Cinemática | 153 |
| 9.2.2 | Base termodinâmica | 155 |
| 9.2.3 | Modelo constitutivo da fase sólida | 157 |
| 9.2.4 | Modelo constitutivo da fase líquida | 159 |
| 9.2.5 | Modelo constitutivo da fase de transição | 162 |
| 9.2.5.1 | Definição dos multiplicadores sólido e líquido | 163 |
| 9.2.5.2 | Implementação numérica | 165 |
| 9.2.6 | Equação da condução de calor | 167 |

| | | |
|-------------|---|------------|
| 9.2.7 | Exemplos numéricos | 168 |
| 9.2.7.1 | Problema local de deformação monotônica com solidificação | 168 |
| 9.2.7.2 | Problema local de deformação monotônica com fusão | 171 |
| 9.2.7.3 | Prensagem de cilindro solidificado | 172 |
| 9.2.7.4 | Prensagem de esfera solidificada | 175 |
| 9.2.7.5 | Derretimento de coluna: caso 2D | 178 |
| 9.2.7.6 | Derretimento de coluna: caso 3D | 179 |
| 10 | CONCLUSÕES | 185 |
| 10.1 | Modelo viscoelástico-viscoplástico | 185 |
| 10.2 | Modelos constitutivos termo-mecânicos | 186 |
| 10.3 | Análise de problemas de contato | 187 |

Capítulo 1

Introdução

O recente avanço nos processos de manufatura aditiva (impressão 3D) motiva o estudo de modelos termo-mecânicos capazes de representar o fenômeno da mudança de fase. Para uma simulação detalhada desse tipo de problema, devem ser adequadamente consideradas, entre outros aspectos, as não-linearidades geométrica e física que surgem em casos de grandes deslocamentos e deformações, além da não-linearidade por contato. Entre outras situações nas quais esse tipo de análise é essencial, destacam-se os problemas de balística e diversos processos de fabricação de elementos estruturais, nos quais os efeitos térmicos podem ser relevantes, tais como conformação, extrusão, forja e fundição de metais.

Com essa motivação, propõe-se o desenvolvimento e a implementação de um modelo numérico para a análise de problemas termo-mecânicos, incluindo situações de contato e mudança de fase sólido-líquido. Ao considerar a mudança de fase, nota-se que a pesquisa não está restrita à mecânica dos sólidos, mas leva ainda em conta os campos da mecânica dos fluidos e das ciências térmicas. Para se permitir uma maior gama de aplicações, faz-se necessário o desenvolvimento de modelos constitutivos inelásticos em grandes deformações, incluindo modelos termo-viscoelástico-viscoplásticos. Trata-se, portanto, de uma proposta abrangente, com contribuições que focam tanto em análise multi-física, quanto na simulação de problemas não-lineares complexos da mecânica dos sólidos.

Para esse fim, foi desenvolvido um código computacional cuja principal ferramenta numérica é o método dos elementos finitos (MEF), utilizando como ponto de partida os desenvolvimentos de ??). Para o problema térmico, emprega-se uma abordagem do MEF baseada em temperaturas. Já para o problema mecânico, utiliza-se uma abordagem baseada em posições (??). Nos casos de materiais incompressíveis, adota-se uma formulação mista baseada em posições e pressões, conforme detalhado por ??). O código é continuamente aprimorado ao longo da pesquisa, incorporando os diversos modelos desenvolvidos.

Neste capítulo, são apresentadas as informações gerais do projeto, incluindo objetivos, justificativa, estado da arte, metodologia e cronograma. A formulação teórica desenvolvida ao longo da pesquisa é descrita nos Capítulos 2 a 9. As conclusões do trabalho, incluindo sugestões para pesquisas futuras, são apresentadas no Capítulo 10.

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho consiste no desenvolvimento e implementação computacional de modelos numéricos em descrição Lagrangiana para a simulação termo-mecânica de sólidos viscoelástico-viscoplásticos, materiais incompressíveis e mudança de fase sólido-líquido, incluindo situações de contato. Para isso, são traçados os seguintes objetivos específicos:

- 1) Extensão do programa de análise de sólidos com comportamento viscoelástico-viscoplástico, desenvolvido durante o mestrado do autor (??), do 2D para o 3D;
- 2) Desenvolvimento e implementação de acoplamento termo-mecânico no programa desenvolvido, com modelos constitutivos termo-elásticos e termo-viscoelástico-viscoplásticos;
- 3) Calibração e validação dos modelos constitutivos de sólido através de dados experimentais;
- 4) Implementação de modelos de contato com ou sem atrito, em 2D e 3D;
- 5) Implementação de formulações mistas do MEF para simulação de materiais incompressíveis, incluindo fluidos Newtonianos e sólidos gerais;
- 6) Desenvolvimento e implementação de modelo de mudança de fase;
- 7) Aplicação a exemplos numéricos representativos, que demonstrem a consistência da formulação e as potencialidades do programa desenvolvido.

1.2 Justificativa

Com relação à análise de problemas complexos em engenharia de estruturas, sabe-se que abordagens experimentais, embora necessárias, podem apresentar alto custo de materiais e mão-de-obra, além de possivelmente demandarem muito tempo. Já as soluções analíticas, quando disponíveis, estão restritas a casos muito específicos onde o modelo possa contar com hipóteses simplificadoras. Dessa forma, a alternativa numérica se destaca pela sua generalidade e praticidade. Com os recursos computacionais em crescente desenvolvimento, tais análises se tornam cada vez mais viáveis, sendo maior a rapidez e exatidão para simular problemas nas mais diversas esferas científicas.

No contexto da simulação de materiais viscoelástico-viscoplásticos submetidos a grandes deformações, mudança de fase por efeito da temperatura e contato entre sólidos deformáveis, uma grande variedade de aplicações pode ser encontrada, por exemplo, nos processos de manufatura de elementos estruturais. Destacam-se, dentre as aplicações, conformação mecânica, extrusão, laminação, forja e fundição. Análises numéricas desses processos podem ajudar a prever com maior precisão a forma final do elemento fabricado, e permitir ajustes em moldes, formas, e condições tais como temperatura ideal, de modo a se obter um melhor produto. Pode-se citar também as aplicações ao campo da balística, onde o objeto de estudo é o impacto de projéteis a altas temperaturas e velocidades com meios fluidos ou sólidos.

Outro desenvolvimento que vem sendo impulsionado nos últimos anos e aumenta a

demandas com relação ao tema é a tecnologia de manufatura aditiva, ou impressão 3D, a qual vem revolucionando o mercado pela sua grande versatilidade, sendo utilizada para fabricar desde objetos pequenos até estruturas altamente complexas.

Este trabalho justifica-se por contribuir não somente com uma ferramenta computacional com aplicação para a simulação realística dos vários processos de fabricação mencionados, bem como de diversos outros problemas termomecânicos, mas também com o desenvolvimento teórico do modelos numéricos empregados.

1.3 Estado da arte

Nesta seção, apresenta-se uma revisão bibliográfica acerca das áreas de estudo pesquisadas, desde as suas origens até os avanços mais recentes, sendo citadas as referências de maior relevância para este trabalho.

1.3.1 Mecânica dos sólidos computacional

Atualmente, a ferramenta numérica mais difundida não apenas em análises de sólidos e estruturas, e que também tem sido aplicada em diversos outros âmbitos científicos, é o Método dos Elementos Finitos. A evolução desse método está intimamente relacionada ao advento e aprimoramento da computação. Em meados da década de 1950, engenheiros já executavam análises numéricas a partir da discretização do sistema em elementos, como pode ser visto em ??) e ??). Entretanto, de acordo com ??), o termo “Método dos elementos finitos” foi cunhado apenas em ??). Entre trabalhos clássicos que contribuíram para o seu desenvolvimento na área da mecânica dos sólidos e das estruturas podem ser citados, por exemplo, ??), ??), ??) e ??), onde o método é aplicado tanto em casos lineares quanto não-lineares.

Falta descrever a história das análises não lineares geométrica e física no âmbito do MEF... É importante inclusive mencionar o Lagrangiano atualizado e a formulação corrotacional

??), apresenta uma formulação Lagrangiana total do MEF que utiliza como parâmetros nodais as posições atuais dos nós a partir de um eixo de coordenadas fixo, ao invés dos deslocamentos como é feito tradicionalmente. Uma formulação semelhante pode ser encontrada em ??). Essa abordagem possui as vantagens de naturalmente considerar a não linearidade geométrica, ser construída diretamente sobre o conceito isoparamétrico, e ainda, proporcionar uma implementação computacional didaticamente simples. Uma descrição detalhada da formulação pode ser encontrada em ??).

Vários trabalhos que atestam a confiabilidade do método dos elementos finitos baseado em posições podem ser citados. Em ??), esse é aplicado na análise estática de pórticos bidimensionais sob grandes deslocamentos. Já em ??), utilizam-se elementos de treliças espaciais com modelo constitutivo elasto-plástico. A análise dinâmica foi introduzida por ??) no contexto de pórticos planos, empregando o algoritmo de Newmark para integração no tempo. Outras aplicações em problemas dinâmicos podem ser encontradas, por exemplo,

em ??) e ??), sendo mostrada nesse último uma prova da conservação da quantidade de movimento.

1.3.2 Dinâmica dos fluidos computacional

No contexto da dinâmica dos fluidos computacional, inicialmente dominada pelos métodos das diferenças finitas e dos volumes finitos, o método dos elementos finitos foi ganhando seu espaço por volta da década de 1970, sofrendo certa resistência inicial em comparação com sua utilização no contexto de sólidos. De acordo com ??), o MEF apresenta diversas vantagens sobre os métodos dos volumes finitos e das diferenças finitas, por apresentar aproximações iguais ou superiores em problemas auto-adjuntos, além de permitir com facilidade a utilização de malhas não-estruturadas, possibilitando melhor representação de domínios arbitrários. Além disso, de acordo com ??), uma característica importante do método é que esse permite a incorporação de condições de contorno de forma natural.

Entretanto, a aplicação do método clássico de Galerkin (Bubnov-Galerkin), em uma descrição Euleriana, resulta em um problema com matrizes assimétricas devidas aos termos convectivos, e, nos casos onde a convecção é dominante, implica no aparecimento de variações espúrias nas variáveis transportadas (????). De forma a contornar essa desvantagem, alguns trabalhos propuseram modificações no processo de Galerkin, como os métodos *upwind*, que consistem em utilizar funções de peso diferentes das funções tentativa e especialmente escolhidas para introduzir termos estabilizantes, sendo o método *Streamline upwind/Petrov-Galerkin (SUPG)* ??) o método mais empregado atualmente.

As equações da mecânica dos fluidos são comumente descritas na forma Euleriana, devido ao fato dos fluidos apresentarem pouca ou nenhuma (fluidos Newtonianos) resistência às tensões de cisalhamento, podendo deformar-se indefinidamente. Isso resulta em métodos que utilizam malhas de elementos finitos fixas no espaço (??????). Assim, para que sejam simulados problemas com contornos móveis, são necessárias técnicas alternativas, tais como a descrição Lagrangiana-Euleriana Arbitrária (??) ou as formulações espaço-tempo (????), que permitem que o domínio seja deformado independentemente do movimento das partículas.

Para problemas de escoamentos de superfície livre com deformações controladas (distorções finitas), é possível aplicar formulações Lagrangianas do MEF similares às tradicionalmente utilizadas em sólidos, onde as malhas acompanham o movimento do domínio. No trabalho de ??), é apresentada uma abordagem Lagrangiana utilizando velocidades e pressões como parâmetros nodais. Uma formulação similar é apresentada em ??), sendo aplicada a problemas de colapso de barragem, oscilações não-lineares, e instabilidade de Rayleigh-Taylor. No trabalho de ??) é considerada ainda uma estratégia de remalhamento para contornar o problema de distorções excessivas na malha. Mais recentemente, em ??), foi introduzida uma formulação mista do MEF totalmente Lagrangiana utilizando posições e pressões como parâmetros nodais.

Para o tratamento geral de problemas de escoamentos de superfície livre, onde há

mudanças topológicas e separação/junção de subdomínios, tornam-se convenientes as abordagens que tratam o fluido como um conjunto de partículas interagindo entre si. O trabalho de ??) é considerado o pioneiro nesse tipo de técnica, com o método chamado *smoothed particle hydrodynamics*, dando origem a diversos outros métodos, como o *particle semi-implicit*, desenvolvido por ??). Ambos se destacaram por dispensar o uso das tradicionais malhas, substituindo as funções de forma pelas chamadas funções de núcleo, que dependem apenas das posições das partículas. Desde então, os denominados métodos numéricos sem malha vêm se difundindo em diversas aplicações, muitos sendo baseados em estratégias de mínimos quadrados móveis ??), como o *Hp Clouds* ??).

Recentemente, uma técnica que se destacou na dinâmica dos fluidos computacional é o método dos elementos finitos e partículas (*Particle Finite Element Method - PFEM*), introduzido em ??). Ao contrário dos métodos de partículas previamente mencionados, esse utiliza uma malha de elementos finitos, cujos nós são as partículas, para discretizar o domínio e integrar as equações diferenciais governantes, utilizando uma abordagem Lagrangiana atualizada. Os nós (partículas) movem-se carregando consigo as propriedades físicas e os valores nodais dos campos mecânicos, enquanto a malha é reconstruída a cada passo de tempo. Em ??), o PFEM foi aplicado a problemas de interação fluido-estrutura, contando com uma técnica simples denominada *alpha-shape* para reconhecimento do contato. Em ??), o método é utilizado para casos incluindo condução e difusão térmica, e em ??) para fluidos heterogêneos, mostrando excelentes resultados.

Em ??), é proposta uma formulação Lagrangiana unificada para tratar fluidos e sólidos de uma maneira geral, utilizando o método dos elementos finitos e partículas para ambos. Em ??), tal técnica é estendida, tratando o domínio sólido com o MEF tradicional. A formulação unificada é aplicada também em ??) para problemas de interação fluido-estrutura envolvendo efeitos termo-mecânicos e mudança de fase.

Falta introduzir a formulação do PFEM baseada nas posições das partículas, citando os trabalhos do Giovane, inclusive o artigo de 2024

1.3.3 Modelos viscoelástico-viscoplásticos

Muitos materiais de aplicação na indústria, como os polímeros, apresentam viscosidade (isto é, dependência temporal), tanto em suas parcelas de deformação elástica quanto plástica. No trabalho de ??) podem ser vistas as curvas experimentais demonstrando tal comportamento no material Poliamida 12, muito utilizado em processos de manufatura aditiva. Outros resultados experimentais podem ser vistos em ??) para o polietileno de alta densidade (PEAD), e em ???) e ??) para o politetrafluoretileno (PTFE). A fim de simular esse comportamento constitutivo, desenvolvem-se os chamados modelos viscoelásticos-viscoplásticos. No contexto de pequenas deformações, podem ser citados os modelos de ??), ??) e ??), desenvolvidos para materiais poliméricos.

Para problemas em grandes deformações, tornou-se amplamente aceito na literatura o uso da decomposição multiplicativa, também chamada de decomposição de Kröner-Lee,

por ter sido aplicada originalmente nos trabalhos de ??) e ??). Proposta inicialmente no contexto da elasto-plasticidade, a decomposição multiplicativa apresenta uma motivação física bem consistente, baseando-se na existência de uma configuração intermediária livre de tensões. Entre outros trabalhos que desenvolveram e/ou fizeram uso dela no contexto da elasto-plasticidade, podem ser citados ??), ??), ??), ??) e ??). Destaca-se ainda o trabalho de ??), que serviu como ponto de partida para modelos Lagrangianos baseados na segunda lei da termodinâmica, como os de ???????) e ??). Em relação ao problema viscoplástico, podem ser citados os trabalhos de ??), ??) e ??), onde são feitas generalizações dos modelos de ??) e/ou de ??) para o caso de grandes deformações.

A aplicação da decomposição multiplicativa, no entanto, não se restringe ao caso elasto-plástico ou viscoplástico, sendo amplamente utilizada em problemas viscoelásticos, termo-elásticos e inelásticos em geral. No caso viscoelástico, podem ser citados como referências os modelos aplicados em ??), ??), ??) e ??). Nesses, as deformações viscousas são tratadas como variáveis internas, em contraste aos modelos de convolução, onde o comportamento viscoso é descrito por meio de integrais hereditárias ?????????).

Nos modelos viscoelásticos-viscoplásticos, pode-se realizar a decomposição multiplicativa entre as parcelas viscoelásticas e viscoplásticas. Tal estratégia é aplicada, por exemplo, nos trabalhos de ??) e ??), sendo nesse último utilizada uma formulação termodinâmica. Já no trabalho de ??), é proposta uma abordagem genérica, onde considera-se a decomposição multiplicativa entre parcelas elásticas e inelásticas em geral. Modelos aplicados a materiais poliméricos semi-cristalinos em grandes deformações podem ser vistos em ??), ??) e ??). O comportamento viscoelástico-viscoplástico também é estudado em materiais do tipo asfáltico (????), materiais com *self-healing* (??), e até mesmo em materiais metálicos sob altas temperaturas (??).

Por fim, observações devem ser feitas com relação aos efeitos de Bauschinger e *Ratcheting* (??????), constatados, por exemplo, em problemas com carregamentos cíclicos. A representação desses fenômenos é, em geral, contemplada por modelos de encruamento cinemático adequados, como o de Armstrong-Frederick (??). Uma generalização desse modelo ao caso de grandes deformações é feita por ??), onde propõe-se a separação dos efeitos na micro-estrutura do material utilizando a decomposição multiplicativa. Essa estratégia é utilizada também nos trabalhos de ??), ??) e ??), aplicada a modelos elasto-plásticos.

1.3.4 Transferência de calor e modelos termo-mecânicos

As origens do estudo de condução térmica se devem a ????) e ??), em problemas de temperatura radial para geometrias esféricas e cilíndricas. Esses primeiros estudos foram feitos por superposição dos efeitos térmicos e mecânicos, considerando a elasticidade desacoplada. A primeira formulação acoplada de termo-elasticidade se deve a ??), onde as equações governantes são derivadas do princípio da conservação de energia e da segunda lei da termodinâmica.

No contexto não-linear, pode-se citar o trabalho de ??), onde a teoria foi formulada

considerando uma expressão de ordem cúbica para a energia livre de Helmholtz. Atualmente, a termo-elasticidade não-linear é um campo bem desenvolvido, sendo algumas das principais referências os trabalhos de ??????) e ??), onde nesse último o problema é apresentado em uma abordagem numérica, utilizando o método dos elementos finitos. O estudo da transferência de calor também é realizado em um contexto puramente térmico, podendo ser citados os trabalhos de ??) e ??).

O conceito de decomposição multiplicativa, utilizado até então para tratamento de problemas elasto-plásticos, foi adaptado para os modelos termo-elásticos originalmente em ?? (?? apud ??, ??), onde a configuração intermediária plástica é substituída, nesse caso, por uma configuração intermediária térmica. Essa ideia também foi apresentada de forma independente nos trabalhos de ??) e ??), sendo desenvolvida em ??) e ??), e desde então amplamente aplicada em modelos termo-elásticos de deformações finitas, como por exemplo nos trabalhos de ????) e ??).

Uma forma alternativa dessa estratégia assume que a configuração intermediária é elástica, ao invés de térmica, o que resulta na inversão da ordem das parcelas na decomposição multiplicativa. Essa inversão pode ser vista, por exemplo, nos modelos de ??) e ??), sendo que o último apresenta uma comparação entre as duas abordagens.

Por se tratar de um processo dissipativo, deve-se ainda considerar a possibilidade de geração de energia térmica nos trabalhos inelásticos, uma vez que apenas uma pequena parcela da energia é absorvida pelos rearranjos moleculares (??). Diversos estudos são direcionados a determinar a porcentagem da taxa de trabalho plástico efetivamente convertida em calor. De acordo com ??), tal porcentagem é tipicamente adotada constante entre 80% e 100%, porém, os experimentos de ??) comprovam que essa porcentagem apresenta uma grande dependência da deformação e da taxa de deformação.

Formulações com acoplamento entre a plasticidade e o campo térmico, denominadas termo-plásticas, foram apresentadas em ??), ??) e ??). Nesse último, são empregadas a primeira e a segunda leis da termodinâmica, e utiliza-se a inequação de Clausius-Duhem, conforme abordado por ??). Tal base termodinâmica deu origem ao trabalho de ??), no qual desenvolve-se uma teoria geral de elasto-plasticidade contínua (??), e ??), no qual a temperatura é tratada como uma variável interna. Uma revisão bibliográfica bem detalhada sobre modelos termo-mecânicos em geral, incluindo a termo-plasticidade, pode ser encontrada no trabalho de ??).

1.3.5 Mudança de fase sólido-fluido

O estudo da mudança de fase sólido-fluido possui aplicações nas mais diversas áreas, como a metalurgia, soldagem, e a recente tecnologia da manufatura aditiva, ou impressão 3D. A determinação do campo de temperaturas e do contorno entre as duas fases é um problema que faz parte de uma classe denominada problemas de contorno móveis ou livres, também conhecido como problema de Stefan, em homenagem ao físico Joseph Stefan, que realizou estudos acerca do derretimento de calotas polares por volta de 1890 (??).

Esse problema consiste de um conjunto de condições de contorno aplicadas na interface entre as fases para estabelecer a continuidade do domínio. Tais condições, no entanto, podem ser reescritas utilizando o método da entalpia, que unifica os domínios das diferentes fases em uma só equação para solucionar o campo de temperaturas, dispensando a aplicação de condições de contorno na interface móvel.

Do ponto de vista numérico, os métodos tradicionalmente aplicados são baseados em movimentação de malha (??) e no conceito de entalpia (??), no qual é dispensada a aplicação de condições de contorno na interface móvel. Entretanto, no trabalho de ??), o problema da solidificação é resolvido pelo método dos elementos finitos estendido, que representa a descontinuidade em termos de parâmetros nodais adicionais.

No entanto, os trabalhos previamente mencionados consideram que a condução térmica e a mudança de fase são os processos dominantes, desprezando o campo de deformações. No sentido de acoplar os diversos fenômenos, uma formulação geral foi desenvolvida em ??), considerando, além da condução térmica, os efeitos convectivos do fluido. Nesse, o fluido é considerado Newtoniano e o sólido elástico.

Entre trabalhos que incluem aplicações numéricas, podem ser citados os de ??), no caso de solidificação de metal, e ??), onde foi aplicada uma técnica de remalhamento. Em ??), é apresentada uma formulação Lagrangiana aplicada na simulação do derretimento do núcleo de reatores nucleares. Nesse, utiliza-se uma formulação denominada “unificada” para tratamento de problemas de interação fluido-estrutura, juntamente com o PFEM. A mudança de fase de sólido para líquido é considerada por meio de dois critérios, a saber, temperatura e deformação plástica excessiva, e a solidificação não é considerada. Tal formulação, apesar de prática, mostra-se altamente sensível ao refinamento da malha.

1.3.6 Modelos numéricos de contato

Os primeiros estudos sobre contato remontam a 1881, tendo sido conduzidos pelo físico alemão Heinrich Hertz, motivado por experimentos de interferência ótica em lentes de vidro (??). Entre trabalhos clássicos que moldaram o conhecimento nessa linha de pesquisa, valem ser citados os de ??), ??) e ??).

Em problemas onde pode-se garantir a coincidência das malhas na região do contato, uma das formulações mais simples é a Nó-a-Nó (??), na qual o modelo é definido por pares de nós devidamente alinhados. Para o caso mais geral, uma estratégia comum é a do tipo Nó-a-Segmento (para o caso 2D), ou Nó-a-Superfície (para o caso 3D), introduzida em ??) e ??), onde uma das interfaces de contato é discretizada por elementos nodais, denominados nós projéteis, enquanto a segunda interface é discretizada por elementos de linhas curvas ou de superfície, denominadas superfícies alvos. Explicações detalhadas sobre a formulação podem ser encontradas em ??). Outros exemplos de trabalhos que utilizam essa abordagem são ??), ??), ??) e ??). A desvantagem desse método é que ele somente garante que não haja interpenetração nas posições dos nós projéteis, mas os lados, ou faces do corpo projétil podem possuir pontos que penetram o corpo alvo.

Outro método atualmente muito difundido para modelagem de contato é o *Mortar*. Esse teve início com o trabalho de ??) e foi aperfeiçoado em ??), apenas como uma formulação matemática que proporciona uma técnica de compatibilização de domínios, sendo utilizado em problemas de contato primeiramente por ??). Essa técnica também fornece uma alternativa para simular contato entre malhas não-coincidentes, porém baseia-se em uma abordagem Segmento-a-Segmento (ou Superfície-a-Superfície), como pode ser visto, por exemplo, em ??). No método *Mortar*, todos os elementos de contorno passíveis de contato são discretizados como elementos de linha curva (segmentos) no caso 2D, ou de superfície no caso 3D, e o contato é determinado por integração numérica ao longo do domínio da interface. Dessa forma, tanto a detecção quanto a restrição são realizadas nos pontos de integração. Uma de suas vantagens é garantir a não-penetrabilidade nas regiões entre os nós, permitindo portanto uma discretização menos refinada na região de contato quando comparado com a abordagem Nô-a-Segmento. Entre outros trabalhos que utilizam o método, podem ser citados ??????).

Com relação à aplicação de modelos de contato em análise dinâmica, outros desafios surgem, uma vez que a forte não-linearidade do problema provoca mudanças repentinhas nos valores de aceleração e velocidade, que podem levar à instabilidade da solução quando utilizado o algoritmo de Newmark com os parâmetros tradicionais, como atestado no trabalho de ??). Técnicas para resolver essa inconformidade podem ser vistas, por exemplo, em ??), ??), ??) e ??). O último propõe novos parâmetros para o algoritmo de Newmark que levam a resultados estáveis e precisos mesmo para problemas de impacto com altas frequência, desde que utilizados passos de tempo suficientemente pequenos. Entre outros trabalhos que confirmam a eficiência desse estudo, podem ser citados os de ??), ??) e ??).

Quanto ao problema de contato termo-mecânico, a transferência de calor entre os corpos depende não apenas da área de contato, mas também da pressão de contato atuante. De acordo com ??), para que esse último seja corretamente considerado, deve-se aplicar uma formulação de “contato de alta precisão” de forma a evitar o mal condicionamento da matriz hessiana. Em ??), por exemplo, é aplicado o método dos multiplicadores de Lagrange aumentados. Com relação à área de contato, deve-se levar em conta que as interfaces possuem imperfeições geométricas do ponto de vista microscópico. Nesse sentido, modelos aproximados foram desenvolvidos para a obtenção da área de contato efetiva, como o de ??), e um modelo simplificado baseado na rigidez de Vickers, presente em ??), ambos dependentes da pressão aplicada. Além disso, para as áreas que não se encontram efetivamente em contato, ??) considera modelos de transferência de calor por radiação e condução através do ar.

Lembre-se de reorganizar a ordem das subseções!

1.4 Metodologia

Utiliza-se como ponto de partida o trabalho de mestrado de ??), no qual foi desenvolvido um código computacional para mecânica não linear dos sólidos, em linguagem Fortran e

baseado no Método dos Elementos Finitos, incorporando a análise de sólidos sob grandes deslocamentos, grandes deformações e contato, incluindo modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico. Esse código foi transcrito, neste trabalho, para a linguagem C++, e estendido ao caso tridimensional. No caso 2D são considerados elementos triangulares e quadrilaterais, e no caso 3D são considerados elementos tetraédricos e hexaédricos, sendo utilizadas em todos os casos as ordens de aproximação linear, quadrática e cúbica.

Assim como em ??), utiliza-se como base para as implementações deste trabalho a formulação do Método dos Elementos Finitos baseada em posições, conforme descrita em ??). Tendo sido desenvolvida originalmente no contexto de sólidos, esse método foi estendido para o caso de fluidos incompressíveis em ??), onde é empregada uma formulação de elementos finitos mista de posição e pressão. Essa formulação é aplicada neste trabalho tanto para fluidos quanto para sólidos incompressíveis, utilizando uma descrição totalmente Lagrangiana em ambos os casos. Isso garante uma descrição unificada, o que é conveniente para a modelagem da mudança de fase, onde o mesmo domínio pode conter meios sólidos e fluidos simultaneamente.

A incorporação de efeitos térmicos e modelos constitutivos termo-mecânicos é feita neste trabalho por uma abordagem termodinamicamente consistente. Isso significa que a equação da condução de calor, bem como os modelos constitutivos, derivam da primeira e da segunda lei da termodinâmica, onde a última é expressa pela inequação de Clausius-Duhem. É utilizado ainda o conceito de energia livre de Helmholtz, de onde derivam as tensões (para o problema mecânico) e a entropia (para o problema térmico).

Todos os modelos constitutivos apresentados neste trabalho são baseados na decomposição multiplicativa do gradiente da função mudança de configuração (????), permitindo aplicações em problemas com grandes deformações. No caso termo-elástico, implementa-se ainda um modelo baseado na decomposição aditiva da deformação de Green-Lagrange, a fim de comparar as duas abordagens e observar as suas respectivas limitações. Em ambos os casos, são adotadas leis de expansão térmica linear e exponencial.

Para o algoritmo de contato, utiliza-se o método nó-a-superfície (ou nó-a-segmento no caso 2D) com multiplicadores de Lagrange e modelo de atrito baseado na lei de Coulomb. Essa escolha deve-se à reconhecida simplicidade e robustez do método. Ademais, apesar de não se ter a garantia de não inter penetração em todos os pontos do domínio, a aproximação por meio desse método é suficiente para os problemas abordados neste trabalho.

Para a mudança de fase entre sólido e líquido, considera-se um modelo não-isotérmico, com equação da condução de calor baseada em temperaturas. A formulação termo-mecânica proposta baseia-se na decomposição multiplicativa entre deformações sólidas e líquidas, tratando a evolução dessas componentes de forma individual, de acordo com a fase e com a temperatura. Novamente, emprega-se uma abordagem termodinamicamente consistente e totalmente Lagrangiana.

Em cada uma das etapas da pesquisa, são simulados exemplos numéricos representativos, a fim de verificar o código desenvolvido ou demonstrar as características dos modelos adotados. Com relação às ferramentas computacionais, são utilizados, para geração de

malhas, visualização de pós-processamento e geração de gráficos, os *softwares Open-Source Gmsh* (??), *ParaView* (??) e *Gnuplot* (??), respectivamente.

Descrever a linguagem computacional e as principais bibliotecas utilizadas (PETSc...)

Capítulo 2

Mecânica do contínuo

sugiro alterar o título dessa seção para algo como elasticidade não linear, ou então separar o que é puramente mecânica do contínuo da parte que é aplicada a sólidos elásticos e abrir um outro capítulo para elasticidade

A mecânica do contínuo é o ramo da mecânica que ocupa-se em descrever o comportamento de materiais, tais como sólidos ou fluidos, sem considerar sua estrutura molecular ou granular, ou seja, tratando-os como meios contínuos. Ela se baseia na suposição de que, na escala de interesse, esses materiais podem ser considerados como uma entidade contínua e homogênea, em oposição aos modelos que descrevem o comportamento dos materiais em nível molecular.

Usualmente, a mecânica do contínuo possui duas formas principais de descrição: a Lagrangiana, ou material, onde toma-se como referência uma configuração de equilíbrio do corpo (a configuração inicial do corpo no caso da descrição Lagrangiana total), e a Euleriana, ou espacial, onde toma-se como referência a configuração deformada atual do corpo. Neste trabalho, opta-se por utilizar a descrição Lagrangiana. Maiores detalhes sobre os temas abordados aqui podem ser encontrados em [????](#) e [??](#)).

Faltou dizer porque (justificar) você está optando pela descrição Lagrangiana

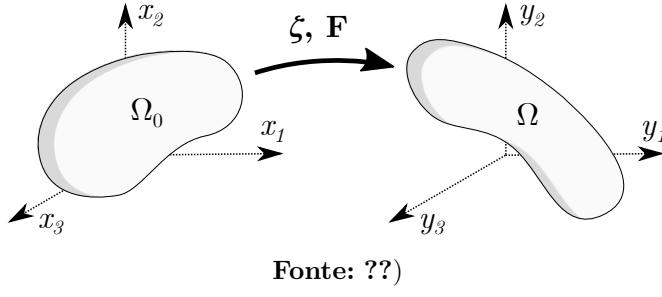
2.1 Cinemática dos corpos deformáveis

Seja um corpo com configuração inicial ou indeformada Ω_0 , e configuração atual Ω . Define-se a função mudança de configuração ζ como sendo uma aplicação vetorial que mapeia as posições atuais (denotadas por \mathbf{y}) a partir das iniciais (denotadas por \mathbf{x}), conforme ilustra a [Figura 1](#). Denota-se por \mathbf{F} o gradiente da função mudança de configuração, isto é:

$$\mathbf{F} = \nabla_0 \cdot \zeta. \quad (2.1)$$

onde ∇_0 denota o gradiente com relação à configuração inicial.

Figura 1 – Mudanças de configuração de um corpo deformável



2.1.1 Medidas de deformação

Uma medida de deformação é uma grandeza adimensional que permite mensurar pontualmente a mudança de forma ocorrida entre as configurações inicial e atual. Neste trabalho, as principais medidas de deformação utilizadas são o alongamento à direita de Cauchy-Green \mathbf{C} e o tensor de deformação de Green-Lagrange \mathbf{E} , definidos respectivamente por:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}). \quad (2.3)$$

Uma vez que \mathbf{F} é definido na configuração inicial, segue que as medidas de deformação apresentadas são Lagrangianas. Além disso, é possível demonstrar que elas são objetivas, isto é, independem de movimentos de corpo rígido. Na ausência de deformações, temos $\mathbf{C} = \mathbf{F} = \mathbf{I}$ e $\mathbf{E} = \mathbf{0}$. Outra característica conveniente do tensor de Green-Lagrange é que, para pequenas deformações, ela se aproxima à deformação linear de engenharia ($\boldsymbol{\varepsilon}$), recuperando os resultados da mecânica linear.

A taxa da deformação de Green-Lagrange pode ser calculada a partir da Eq. (2.3) como

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}}), \quad (2.4)$$

onde

$$\dot{\mathbf{F}} = \nabla_0 \cdot \dot{\zeta}. \quad (2.5)$$

Outra grandeza de particular utilidade neste trabalho é o gradiente da velocidade da mudança de configuração, definido por $\mathbf{L} = \nabla \cdot \dot{\zeta}$, onde ∇ denota o gradiente com relação à configuração atual e o ponto sobreescrito (\cdot) indica derivada no tempo. Apesar de ser uma grandeza Euleriana, ele pode ser escrito em termos de \mathbf{F} pela seguinte relação:

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \dot{\zeta}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial \dot{\zeta}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (2.6)$$

Pode-se ainda decompor \mathbf{L} em suas parcelas simétrica e antissimétrica, isto é:

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}, \quad \text{onde} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{D} = \text{sim}(\mathbf{L}) = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T), \quad \text{e} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{W} = \text{ant}(\mathbf{L}) = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T). \quad (2.9)$$

O tensor \mathbf{D} , também representado por $\dot{\epsilon}$, é denominado taxa de deformação, enquanto \mathbf{W} é denominado tensor taxa de rotação, ou vorticidade, ambos medidas Eulerianas. Aplicando (2.8) em (2.4), chega-se à seguinte relação entre \mathbf{D} e a taxa de deformação de Green-Lagrange:

$$\dot{\mathbf{E}} = \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F}. \quad (2.10)$$

2.1.2 Fórmulas da mudança de volume e área

Seja um elemento infinitesimal com volumes na configuração inicial e na configuração atual denotados por dV_0 e dV , respectivamente. Pode se estabelecer a seguinte relação entre a variação de volume e o gradiente da função mudança de configuração:

$$J = \det \mathbf{F} = \frac{dV}{dV_0}, \quad (2.11)$$

onde J é chamado de determinante Jacobiano, sendo uma medida de deformação volumétrica. A Eq. (2.11), denominada fórmula da mudança de volume, estabelece ainda uma importante condição: como os volumes são sempre grandezas positivas, segue também que $J = \det \mathbf{F}$ deve sempre ser positivo maior que zero, caso contrário há uma inconsistência física no modelo, caracterizada pela destruição ou inversão da matéria.

Agora seja uma área infinitesimal denotada por dS_0 na configuração inicial e dS na configuração atual, e sejam \mathbf{n}_0 e \mathbf{n} , respectivamente, os vetores unitários ortogonais à essas áreas. É possível estabelecer a seguinte relação:

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = J \mathbf{n}_0 dS_0, \quad (2.12)$$

denominada fórmula de Nanson, ou fórmula da mudança de área.

As Eqs. (2.11) e (2.12) são utilizadas em diversas passagens deste texto para relacionar equações Lagrangianas e Eulerianas. As demonstrações de ambas podem ser encontradas, por exemplo, em ??).

2.1.3 Princípio da conservação da massa

Outra propriedade que deve ser observada no equacionamento dos problemas mecânicos, e que auxilia a conversão de equações Lagrangianas em Eulerianas e vice-versa, é o princípio da conservação da massa. Esse princípio estabelece que os volumes de um corpo contínuo nas suas configurações inicial (V_0) e atual (V) deverá ter a mesma massa. Assim, denotando por dm a massa de um volume infinitesimal, e aplicando a fórmula da mudança de volume, temos:

$$\rho_0 = \frac{dm}{dV_0} = J \frac{dm}{dV} = J \rho, \quad (2.13)$$

onde ρ_0 e ρ são as densidades de massa nas configurações inicial e final, respectivamente. Pode-se ainda expressar a Eq. (2.13) na forma

$$\rho_0 dV_0 = \rho dV. \quad (2.14)$$

Logo, apesar de ρ e dV serem variáveis no tempo, o produto ρdV é constante. Como consequência, sendo f uma função qualquer dependente do tempo, a seguinte propriedade pode ser garantida:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho f dV = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \rho_0 f dV_0 = \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{f} dV_0 = \int_{\Omega} \rho \dot{f} dV, \quad (2.15)$$

onde \dot{f} é a derivada material de f no tempo.

2.2 Equilíbrio

Neste trabalho, as equações de equilíbrio são obtidas por meio da abordagem energética, partindo-se do princípio da energia total estacionária. Escreve-se o funcional da energia mecânica total do sistema como

$$\Pi_{\text{mec}} = \Pi_{\text{def}} + \Pi_{\text{cin}} - \Pi_{\text{ext}}, \quad (2.16)$$

onde Π_{def} é a energia de deformação, Π_{cin} é a energia cinética e Π_{ext} é a energia potencial das forças externas. O princípio da conservação da energia implica que a primeira variação do funcional deve ser nula, isto é,

$$\delta \Pi_{\text{mec}} = \delta \Pi_{\text{def}} + \delta \Pi_{\text{cin}} - \delta \Pi_{\text{ext}} = 0. \quad (2.17)$$

Até aqui é só conservação da energia. Estacionariedade da Energia é quando, partindo dessa equação, você estabelece que o ponto de equilíbrio é um ponto estacionário, ou seja, é aquele em que as primeiras derivadas do funcional em relação às incógnitas que definem o funcional não nulas... Acrescente essa equação.

Uma vez definidas as parcelas de energia, a Eq. (2.17) fornece as condições necessárias para o equilíbrio do sistema. Além disso, a segunda variação de Π_{mec} pode fornecer informações à respeito da natureza do equilíbrio: caso positivo, esse é estável; caso negativo, é instável; caso nulo, é indiferente.

2.2.1 Energia de deformação

A energia de deformação está relacionada ao trabalho devido que pode ser realizado pelas forças internas, podendo ser escrita pela integral

$$\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \psi dV_0, \quad (2.18)$$

onde ψ é a energia específica de deformação, ou energia livre de Helmholtz, definida pelo modelo constitutivo do material. Uma vez que a formulação descrita é totalmente Lagrangiana, a integral (2.18) é calculada no volume inicial, e, portanto, ψ deve ser definida

em termos da configuração inicial. A variação da energia de deformação pode ser escrita como

$$\delta\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \delta\psi \, dV_0 = \int_{\Omega_0} \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} : \delta\mathbf{E} \, dV_0 = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \delta\mathbf{E} \, dV_0 = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \delta\mathbf{C} \, dV_0, \quad (2.19)$$

onde

$$\mathbf{S} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} \quad (2.20)$$

é uma medida de tensão denominada tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie. Embora \mathbf{S} não apresente significado físico explícito, é possível, a partir de manipulações algébricas (??), relaciona-lo ao tensor das tensões de Cauchy, $\boldsymbol{\sigma}$, pela expressão:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T, \quad (2.21)$$

de onde pode-se concluir também que \mathbf{S} é simétrico. A relação entre \mathbf{S} e \mathbf{E} estabelecida pela Eq. (2.19) é denominada conjugação energética, isto é, diz-se que \mathbf{S} é conjugado energético de \mathbf{E} .

2.2.2 Energia cinética

A energia cinética está relacionada aos movimentos do corpo, sendo escrita como:

$$\Pi_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} \, dV = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} \, dV_0, \quad (2.22)$$

onde ρ e ρ_0 são a densidade de massa do material na configuração atual e inicial, respectivamente, e \mathbf{y} é o campo de posições atuais. A passagem da primeira para a segunda forma na Eq. (2.22) é feita por meio do princípio da conservação da massa.

A variação da energia cinética pode ser calculada com auxílio da derivada temporal, isto é:

$$\delta\Pi_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \frac{d}{dt} (\dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}}) \delta t \, dV = \int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} \delta t \, dV_0 = \int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \delta \mathbf{y} \, dV_0, \quad (2.23)$$

onde na última passagem considerou-se que $\dot{\mathbf{y}} \delta t = \delta \mathbf{y}$.

2.2.3 Energia potencial das forças externas

Assumindo que o corpo esteja sujeito a forças de superfície e de volume, denotadas por \mathbf{p} e \mathbf{b} , respectivamente, podemos escrever a energia potencial das forças externas como

$$\Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y} \, dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \mathbf{y} \, dV_0. \quad (2.24)$$

Embora tenha sido omitida a notação $(\cdot)_0$, assume-se que \mathbf{p} e \mathbf{b} são definidas na configuração inicial. Considerando ainda que essas sejam conservativas, isto é, independentes da mudança de posição, temos:

$$\delta\Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{y} \, dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{y} \, dV_0. \quad (2.25)$$

Daqui em diante você está resolvendo especificamente a mecânica dos sólidos

2.3 Modelos constitutivos hiperelásticos

Diz-se que um modelo constitutivo é elástico quando é definido apenas em função do estado de deformação atual, e independe de fatores como histórico e taxa de deformação. Quando, além disso, esse deriva de uma expressão explícita para ψ , diz-se que o modelo é hiperelástico. Para garantir que esse seja independente da escolha de eixos coordenados, escreve-se ψ em função dos invariantes de \mathbf{C} , definidos como

$$I_1 = \text{tr}(\mathbf{C}), \quad (2.26)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} [\text{tr}(\mathbf{C})^2 - \text{tr}(\mathbf{C}^2)], \quad \text{e} \quad (2.27)$$

$$I_3 = \det(\mathbf{C}), \quad (2.28)$$

ou dos invariantes de \mathbf{E} , definidos de forma análoga.

2.3.1 Modelo de Saint Venant-Kirchhoff

O modelo de Saint Venant-Kirchhoff é considerado o caso mais simples de lei hiperelastica, relacionando linearmente o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie com a deformação de Green-Lagrange. Neste caso, define-se a energia específica de deformação em termos dos invariantes de \mathbf{E} , pela expressão:

$$\psi = \frac{1}{2}(\Lambda - G)I_1^2 + GI_2 = G \text{tr}(\mathbf{E}^2) + \frac{1}{2}\Lambda \text{tr}(\mathbf{E})^2, \quad (2.29)$$

onde Λ e G são o parâmetro de Lamé e o módulo de elasticidade transversal do material, respectivamente, que podem ser relacionadas com o módulo de elasticidade (E) e coeficiente de Poisson (ν) pelas expressões:

$$\Lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad \text{e} \quad G = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (2.30)$$

Da Eq. (2.29), podemos calcular a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie como:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} = \Lambda \text{tr}(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2G\mathbf{E}. \quad (2.31)$$

Além disso, define-se o operador tangente consistente como:

$$\mathfrak{C} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}} = 2G\mathbf{II} + \Lambda\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}. \quad (2.32)$$

O que é \mathbf{II} ? Você tem certeza sobre essa equação? Dê uma conferida para garantir, é que eu já acabei tendo problemas com essa notação para o tensor constitutivo uma vez... Peguei de um lugar que estava errado. Observa-se que, neste modelo, \mathfrak{C} é constante, o que permite que a lei de Saint Venant-Kirchhoff seja escrita na seguinte forma simplificada:

$$\psi = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathfrak{C} : \mathbf{E}, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{S} = \mathfrak{C} : \mathbf{E}. \quad (2.34)$$

Apesar de simples, a lei de Saint Venant-Kirchhoff deve ser limitada ao caso de pequenas deformações, uma vez que essa permite a inversão do material, isto é, valores negativos de jacobiano, quando submetida à tensões compressivas excessivas.

2.3.2 Modelo Neo-Hookeano

Para problemas envolvendo grandes deformações, utiliza-se neste trabalho o modelo constitutivo Neo-Hookeano definido pela seguinte energia específica de deformação:

$$\psi = \frac{\Lambda}{2} \left(\ln \sqrt{I_3} \right)^2 + \frac{G}{2} \left(\text{tr } \mathbf{C} - 3 - \ln \sqrt{I_3} \right) = \frac{\Lambda}{2} (\ln J)^2 + G (\text{tr } \mathbf{E} - \ln J). \quad (2.35)$$

Desse modelo, derivam as seguintes expressões para o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e operador tangente consistente:

$$\mathbf{S} = \Lambda \ln(J) \mathbf{C}^{-1} + G(\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}), \quad (2.36)$$

$$\mathfrak{C} = \Lambda \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + 2\Lambda \ln(J) \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} - 2G \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}}. \quad (2.37)$$

É possível demonstrar que, para deformações suficientemente pequenas, o modelo Neo-Hookeano se assemelha ao modelo de Saint Venant-Kirchhoff, e ambos se assemelham à lei de Hooke generalizada.

Acho importante adicionar referências para as principais medidas e modelos apresentados aqui. Pode colocar referências gerais no início do capítulo de Mecânica do contínuo ou local. Quando estiver fazendo isso, tente usar livros voltados à mecânica do contínuo como Holzapfel, Ogden, Crisfield... ao invés do livro do Coda.

2.3.3 Estado plano de deformação e de tensão

As leis constitutivas apresentadas são definidas para o caso 3D, logo os tensores envolvidos devem ser aplicados em sua forma completa 3×3 . No entanto, em problemas bidimensionais só é possível escrever os tensores de deformação na forma 2×2 , sendo necessário adotar considerações sobre os demais termos. Nesse sentido, duas aproximações são comumente adotadas: estado plano de deformação (EPD) ou estado plano de tensão (EPT).

No EPD, considera-se que as componentes de deformação que atuam na terceira dimensão são nulas, isto é, $E_{13} = E_{23} = E_{31} = E_{32} = E_{33} = 0$, e portanto a lei constitutiva pode ser resolvida de forma direta. Já no EPT, esses termos devem ser calculados de forma que as componentes de tensão que atuam na terceira dimensão sejam nulas, isto é, $S_{13} = S_{23} = S_{31} = S_{32} = S_{33} = 0$, resultando em um sistema a ser resolvido para E_{13} , E_{23} e E_{33} .

Para modelos isotrópicos, as condições $S_{13} = S_{23} = 0$ resultam automaticamente em $E_{13} = E_{23} = 0$, restando apenas encontrar E_{33} tal que $S_{33} = 0$. No caso da lei de Saint Venant-Kirchhoff, isso é um problema linear que pode ser resolvido de forma explícita. Já no modelo Neo-Hookeano, o problema é não-linear, sendo resolvido neste trabalho pelo método de Newton-Raphson, de acordo com os seguintes passos:

1. Inicialmente, assume-se E_{33} nulo ou igual ao seu valor do passo anterior;
2. Calcula-se \mathbf{S} e \mathfrak{C} pela lei constitutiva;

3. Soma-se a E_{33} o valor $\Delta E_{33} = -S_{33}/\mathfrak{C}_{3333}$;
4. Se $|\Delta E_{33}|$ ou $|S_{33}|$ for menor que uma tolerância pré-estabelecida, finaliza-se o processo iterativo. Caso contrário, retorna-se ao Item 2.

Esse processo, embora computacionalmente custoso, se destaca pela sua generalidade, pois pode ser aplicado a qualquer modelo constitutivo, não se limitando aos casos hiperalásticos. Em particular, os mesmos procedimentos para o EPD e o EPT podem ser reaproveitados aos modelos termo-mecânicos e inelásticos apresentados posteriormente neste trabalho.

2.4 Método dos elementos finitos aplicado ao problema mecânico

O problema da mecânica do contínuo é resolvido numericamente neste trabalho pelo método dos elementos finitos, utilizando a abordagem baseada em posições descrita em ??), que se diferencia das tradicionais por utilizar como parâmetros nodais as posições ao invés dos deslocamentos ou velocidades. Para mais detalhes sobre a formulação, a referência citada deve ser consultada.

2.4.1 Discretização espacial

Neste trabalho, utilizam-se elementos finitos com funções de forma polinomiais de ordem 1, 2 e 3, dando preferência ao último pelos bons resultados alcançados em pesquisas relacionadas, permitindo uma melhor representação de geometria curvilíneas, e garantindo respostas satisfatórias sem que haja necessidade de refinamento excessivo da malha. No caso tridimensional, os domínios são discretizados em elementos do tipo hexaédrico, denotados por HEX8, HEX27 e HEX64, e tetraédrico, denotados por TE4, TE10 e TE20. No caso bidimensional, utilizam-se elementos quadrilaterais, denotados por Q4, Q9 e Q16, e triangulares, denotados por T3, T6 e T10. Já os contornos dos domínios bidimensionais são discretizados por elementos de linha de ordem equivalente, denotados por L2, L3 e L4. Todos os elementos citados são bem estabelecidos na literatura, tendo sido dispostos em ordem crescente de grau do polinômio, com número à direita representando a quantidade de nós em cada caso.

Sugestão: evite usar índices sobrepostos ($\varphi^\alpha(\xi)\mathbf{x}^\alpha$ mudar para $\phi_\alpha\dots$), reserve isso para as potências e para indicar variável interpolada no espaço finito ex: \mathbf{F}^h . Se precisar associar índices em variável que já possui subscrito, deixe o primeiro índice entre parênteses...

Os elementos são definidos em coordenadas adimensionais, denotadas por ξ , a partir das quais são mapeados os elementos nas configurações iniciais e finais. Denotando por \mathbf{x}^α e \mathbf{y}^α as posições iniciais e finais do nó α , respectivamente, as posições de um ponto qualquer no domínio do elemento podem ser interpoladas pelas expressões:

$$\zeta_0(\xi) = \varphi^\alpha(\xi)\mathbf{x}^\alpha, \text{ e} \quad (2.38)$$

$$\zeta_1(\xi) = \varphi^\alpha(\xi)\mathbf{y}^\alpha, \quad (2.39)$$

onde φ^α denota a função de forma associada ao nó α , e os índices α são somados por todos os nós do elemento. Dessa forma, podemos escrever a função mudança de configuração como $\zeta = \zeta_1 \circ \zeta_0^{-1}$, onde ζ_0 e ζ_1 mapeiam as configurações inicial e final, respectivamente, a partir das coordenadas adimensionais, conforme indica a Figura 2. Portanto, escreve-se:

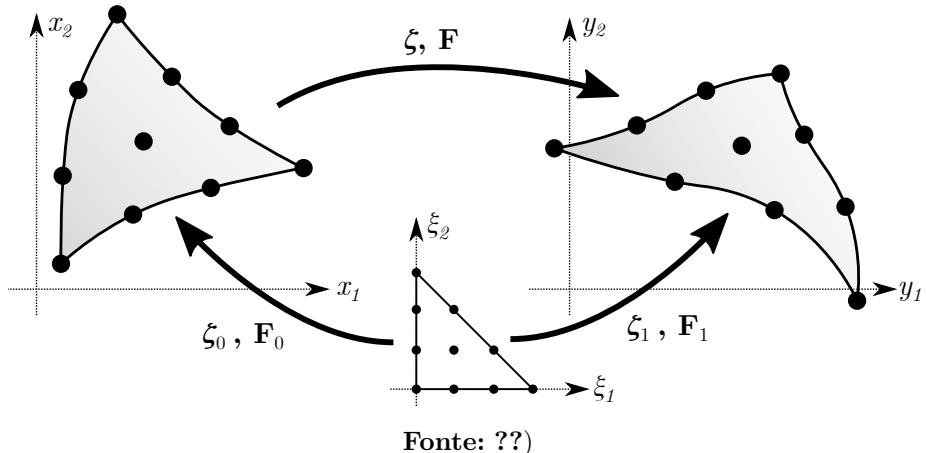
$$\mathbf{F} = \nabla_0 \cdot (\zeta_1 \circ \zeta_0^{-1}) = \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.40)$$

onde \mathbf{F}_0 e \mathbf{F}_1 são, respectivamente, os gradientes de ζ_0 e ζ_1 com relação às coordenadas adimensionais, isto é:

$$\mathbf{F}_0 = \frac{\partial \zeta_0}{\partial \xi} = \mathbf{x}^\alpha \otimes \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \xi}, \text{ e} \quad (2.41)$$

$$\mathbf{F}_1 = \frac{\partial \zeta_1}{\partial \xi} = \mathbf{y}^\alpha \otimes \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \xi}. \quad (2.42)$$

Figura 2 – Mapeamento de um elemento finito em suas configurações inicial e final



A partir da Eq. (2.40), também pode se escrever a taxa do gradiente da função mudança de configuração como

$$\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}_1 \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.43)$$

onde

$$\dot{\mathbf{F}}_1 = \frac{\partial \dot{\zeta}_1}{\partial \xi} = \dot{\mathbf{y}}^\alpha \otimes \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \xi}. \quad (2.44)$$

Aplicando as Eqs. (2.40) e (2.43) nas Eqs. (2.3) e (2.4), pode-se calcular o tensor de deformação de Green-Lagrange e sua taxa por meio das expressões

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} - \mathbf{I} \right), \text{ e} \quad (2.45)$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\dot{\mathbf{F}}_1^T \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^T \dot{\mathbf{F}}_1 \right) \mathbf{F}_0^{-1} = \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \dot{\mathbf{F}}_1^T \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} \right), \quad (2.46)$$

onde $\text{sim}(\mathbf{T}) = \frac{1}{2} (\mathbf{T} + \mathbf{T}^T)$ denota o tensor simétrico.

2.4.2 Equações de equilíbrio

Tendo escrito a equação de equilíbrio em termos do campo de posições (\mathbf{y}) e de suas derivadas temporais na [seção 2.2](#), podemos agora escrever-la em termos dos parâmetros nodais \mathbf{y}^α e de suas derivadas temporais, usando a interpolação $\mathbf{y} = \varphi^\alpha \mathbf{y}^\alpha$. Ainda, pelo método de Galerkin, podemos tomar $\delta\mathbf{y} = \varphi^\alpha \delta\mathbf{y}^\alpha$, onde $\delta\mathbf{y}^\alpha$ são os valores nodais das funções ponderadoras. Assim, a variação da energia cinética, Eq. (2.23), pode ser escrita como:

$$\delta\Pi_{\text{cin}} = \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi^\alpha \varphi^\beta \ddot{\mathbf{y}}^\beta \cdot \delta\mathbf{y}^\alpha dV_0. \quad (2.47)$$

Para as parcelas de forças externas, considerando que apenas carregamentos constantes por elemento são aplicados, temos

$$\delta\Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma} \varphi^\alpha \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{y}^\alpha dS_0 + \int_{\Omega_0} \varphi^\alpha \mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{y}^\alpha dV_0. \quad (2.48)$$

Já a variação da energia de deformação pode ser reescrita como

$$\delta\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^\alpha} \right) \cdot \delta\mathbf{y}^\alpha dV_0. \quad (2.49)$$

As integrais são calculadas neste trabalho por integração numérica, sendo realizadas no caso das Eqs. (2.48) e (2.49) sobre todos os elementos que contêm o nó α , e no caso da equação Eq. (2.47) sobre todos os elementos que contêm os nós α e β . Aplicando essas expressões na Eq. (2.17), temos

$$(\mathbf{f}_{\text{iner}}^\alpha + \mathbf{f}_{\text{int}}^\alpha - \mathbf{f}_{\text{ext}}^\alpha) \cdot \delta\mathbf{y}^\alpha = 0, \quad (2.50)$$

onde $\mathbf{f}_{\text{iner}}^\alpha$, $\mathbf{f}_{\text{int}}^\alpha$ e $\mathbf{f}_{\text{ext}}^\alpha$ denotam, respectivamente, as forças nodais equivalentes inerciais, internas e externas do nó α , cujas expressões são dadas por:

$$\mathbf{f}_{\text{iner}}^\alpha = \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi^\alpha \varphi^\beta \ddot{\mathbf{y}}^\beta dV_0, \quad (2.51)$$

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^\alpha = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^\alpha} dV_0, \quad \text{e} \quad (2.52)$$

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}^\alpha = \int_{\Gamma} \varphi^\alpha \mathbf{p} dS_0 + \int_{\Omega_0} \varphi^\alpha \mathbf{b} dV_0, \quad (2.53)$$

Pela arbitrariedade de $\delta\mathbf{y}^\alpha$, a Eq. (2.50) implica que, para cada nó α , devemos ter:

$$\mathbf{g}^\alpha = \mathbf{f}_{\text{iner}}^\alpha + \mathbf{f}_{\text{int}}^\alpha - \mathbf{f}_{\text{ext}}^\alpha = \mathbf{0}, \quad (2.54)$$

Isto é, o sistema global a ser resolvido consiste de N equações de equilíbrio e N parâmetros nodais, onde N é o número de nós da discretização. Esse sistema é não-linear, sendo resolvido de forma iterativa pelo método de Newton-Raphson, cujas equações linearizadas são discutidas posteriormente na [subseção 2.4.4](#).

2.4.3 Integração temporal - Método de Newmark- β

O método de Newmark- β (??) é um método de integração temporal amplamente utilizado em problemas de dinâmica das estruturas. A partir dele, pode-se escrever as velocidades e acelerações em termos das posições no passo atual e no passo anterior. Parte-se das seguintes aproximações:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_s + \dot{\mathbf{y}}_s \Delta t + [(1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{y}}_s + 2\beta \ddot{\mathbf{y}}] \frac{\Delta t^2}{2}, \text{ e} \quad (2.55)$$

$$\dot{\mathbf{y}} = \dot{\mathbf{y}}_s + (1 - \gamma) \Delta t \ddot{\mathbf{y}}_s + \gamma \Delta t \ddot{\mathbf{y}}, \quad (2.56)$$

onde o subscrito $(\cdot)_s$ denota que a variável é tomada no passo anterior, Δt é o intervalo de tempo entre os passos, e as constantes β e γ são denominadas parâmetros de Newmark. Rearranjando as Eqs. (2.55) e (2.56), é possível escrever as velocidades e acelerações no passo atual como

$$\dot{\mathbf{y}} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t} \mathbf{y} + \mathbf{r}_s - \gamma \Delta t \mathbf{q}_s \quad \text{e} \quad (2.57)$$

$$\ddot{\mathbf{y}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{y} - \mathbf{q}_s, \quad (2.58)$$

onde \mathbf{r}_s e \mathbf{q}_s são grandezas que dependem apenas das variáveis no passo anterior, definidas como:

$$\mathbf{r}_s = \dot{\mathbf{y}}_s + \Delta t (1 - \gamma) \ddot{\mathbf{y}}_s \quad \text{e} \quad (2.59)$$

$$\mathbf{q}_s = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{y}_s + \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{y}}_s + \left(\frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{y}}_s. \quad (2.60)$$

Substituindo-se a Eq. (2.58) na Eq. (2.51), as forças iniciais podem ser escritas como

$$\mathbf{f}_{\text{iner}}^\alpha = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi^\alpha \varphi^\beta \mathbf{y}^\beta dV_0 - \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi^\alpha \varphi^\beta \mathbf{q}_s^\beta dV_0. \quad (2.61)$$

A escolha dos parâmetros de Newmark irá determinar o tipo de integração e a ordem de convergência do método. Os valores mais comumente adotados são $\beta = 1/4$ e $\gamma = 1/2$, que resultam em um integrador incondicionalmente estável de segunda ordem, e produzem resultados satisfatórios para grande parte das aplicações. Esses parâmetros, no entanto, podem provocar instabilidade numérica caso ocorram mudanças bruscas de aceleração, mobilizando frequências mais elevadas, como em problemas de impacto. Nesses casos, uma alternativa é utilizar integradores que apresentem dissipação nas altas frequências, como o de ??), onde adotam-se os parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 3/2$.

2.4.4 Linearização das equações de equilíbrio

A linearização das equações de equilíbrio neste trabalho é feita pelo método de Newton-Raphson, isto é, calcula-se a matriz de rigidez tangente do problema derivando a Eq. (2.54) com relação aos parâmetros nodais.

Como as forças externas são consideradas não conservativas, suas derivadas com relação às posições são nulas. Já as derivadas das forças iniciais são calculadas a partir da Eq. (2.61) como:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\text{iner}}^{\alpha}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi^{\alpha} \varphi^{\beta} dV_0, \quad (2.62)$$

e as derivadas das forças internas são calculadas a partir da Eq. (2.52) como:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha} \otimes \mathbf{y}^{\beta}} + \mathfrak{C} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \right) dV_0 \quad (2.63)$$

onde

$$\mathfrak{C} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}} = \frac{d}{d\mathbf{E}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \right) \quad (2.64)$$

é o operador tangente consistente do modelo constitutivo, já definido para os modelos da seção 2.3. As derivadas da deformação de Green-Lagrange com relação às posições podem ser calculadas pelas seguintes equações:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^T \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \right) \mathbf{F}_0^{-1} = \text{sym} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} \right), \quad \text{e} \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha} \otimes \mathbf{y}^{\beta}} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} + \frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \right) \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.66)$$

onde, a partir da Eq. (2.42), segue que

$$\frac{\partial (F_1)_{ij}}{\partial y_k^{\alpha}} = I_{ik} \frac{\partial \varphi^{\alpha}}{\partial \xi_j}. \quad (2.67)$$

Capítulo 3

Termodinâmica e transferência de calor

Neste capítulo, serão apresentados os conceitos fundamentais da termodinâmica e da transferência de calor, que serão utilizados como base para os modelos termo-mecânicos desenvolvidos neste trabalho.

3.1 Primeira lei da termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica, também conhecida como lei da conservação da energia, estabelece que a taxa de energia total de um sistema deve ser nula, isto é:

$$\dot{\Pi} = \dot{\Pi}_{\text{int}} + \dot{\Pi}_{\text{cin}} - \dot{\Pi}_{\text{ext}} - \dot{\Pi}_{\text{ter}} = 0, \quad (3.1)$$

onde $\dot{\Pi}_{\text{int}}$ representa a energia interna do sistema, $\dot{\Pi}_{\text{ter}}$ representa o trabalho térmico, e $\dot{\Pi}_{\text{cin}}$ e $\dot{\Pi}_{\text{ext}}$ representam a energia cinética e a energia potencial das forças externas, introduzidas anteriormente pelas Eqs. (2.22) e (2.24), respectivamente.

A energia interna neste contexto não deve ser confundida com a energia de deformação, apresentada na Eq. (2.18), pois a última abrange apenas a energia que pode ser convertida em trabalho mecânico, não incluindo, por exemplo, parcelas de energia convertidas em rearranjos moleculares ou dissipativas em geral. Define-se a energia interna como:

$$\Pi_{\text{int}} = \int_{\Omega_0} u_e dV_0, \quad (3.2)$$

onde u_e é a densidade Lagrangiana de energia interna **mudar no restante do texto** (energia interna por unidade de volume na configuração inicial).

O trabalho térmico pode ser visto como a quantidade de calor absorvida ou liberada pelo sistema, tanto internamente quanto por meio da superfície de contorno. Assim, podemos defini-lo como:

$$\dot{\Pi}_{\text{ter}} = - \int_{\Gamma} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega_0} r dV_0, \quad (3.3)$$

onde \mathbf{q} é o fluxo de calor aplicado na superfície, \mathbf{n} é o vetor normal da superfície, e r é o calor interno gerado por unidade de volume na configuração inicial. Alternativamente, aplicando o teorema da divergência na primeira parcela da Eq. (3.3), pode-se escrever

$$\dot{\Pi}_{\text{ter}} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.4)$$

Nas Eqs. (3.3) e (3.4), \mathbf{q} e \mathbf{n} são definidos na configuração atual. Para obter uma versão totalmente Lagrangiana do trabalho térmico, podemos utilizar a fórmula de Nanson – Eq. (2.12) –, que resulta em

$$\mathbf{q} \cdot (\mathbf{n} dS) = \mathbf{q} \cdot (J\mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{n}_0 dS_0) = (J\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n}_0 dS_0, \quad (3.5)$$

onde \mathbf{n}_0 é o vetor normal da superfície na configuração inicial. Define-se, portanto, o fluxo de calor na configuração inicial como

$$\mathbf{q}_0 = J\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{q}. \quad (3.6)$$

Aplicando-se as Eqs. (3.5) e (3.6) na Eq. (3.3), escrevemos o trabalho térmico em sua forma Lagrangiana como:

$$\dot{\Pi}_{\text{ter}} = - \int_{\Gamma_0} \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0 dS_0 + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.7)$$

Utilizando novamente o teorema da divergência, isso resulta em:

$$\dot{\Pi}_{\text{ter}} = - \int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 dV_0 + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.8)$$

Os valores de $\dot{\Pi}_{\text{int}}$, $\dot{\Pi}_{\text{cin}}$ e $\dot{\Pi}_{\text{ext}}$ podem ser facilmente calculados pelas equações (3.2), (2.22) e (2.24). Ao aplicá-los juntamente com a Eq. (3.8) na Eq. (3.1), pode-se expressar a primeira lei da termodinâmica em sua forma Lagrangiana como:

$$\begin{aligned} \dot{\Pi} &= \underbrace{\int_{\Omega_0} \dot{u}_e dV_0}_{\text{Parcela interna}} + \underbrace{\int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0}_{\text{Parcela cinética}} - \underbrace{\int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{y}} dS_0}_{\text{Parcela das forças externas}} - \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0 \\ &\quad + \underbrace{\int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 dV_0 - \int_{\Omega_0} r dV_0}_{\text{Parcela térmica}} = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Uma forma mais conveniente da Eq. (3.9) pode ser obtida com a aplicação do princípio da taxa de trabalho (**colocar referência para esse princípio**). Tal princípio estabelece que a taxa da energia cinética é igual à taxa do trabalho das forças externas e internas. Utilizando as equações (2.19), (2.23) e (2.25), temos:

$$\int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0 = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{y}} dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0 - \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} dV_0. \quad (3.10)$$

Aplicando na Eq. (3.9), escreve-se a primeira lei da termodinâmica como:

$$\dot{\Pi} = \int_{\Omega_0} \dot{u}_e dV_0 - \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} dV_0 + \int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 dV_0 - \int_{\Omega_0} r dV_0 = 0. \quad (3.11)$$

Pela arbitrariedade do volume, podemos ainda expressa-la na seguinte forma local Lagrangiana:

$$\dot{u}_e - r = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0. \quad (3.12)$$

3.2 Segunda lei da termodinâmica

O conceito de entropia foi estabelecido originalmente em 1865 pelo físico alemão Rudolf Clausius, com origens na palavra grega que significa “transformação”. A entropia pode ser entendida como um número que mede a desordem do sistema termodinâmico, sendo associada à quantidade de energia que não pode ser convertida em trabalho.

A segunda lei da termodinâmica afirma que a quantidade de entropia de um sistema isolado sempre tende a aumentar até alcançar um valor máximo, no qual ocorre o equilíbrio termodinâmico. Uma das bases dessa lei se deve a Clausius, que afirmou, a partir de seus estudos, que o calor não pode passar de um corpo mais frio para um mais quente de forma espontânea. Essa lei, portanto, trata da irreversibilidade dos processos naturais, explicando fenômenos, como atrito e dissipação, que não são abrangidos pela primeira lei da termodinâmica.

Matematicamente, existem diversas maneiras de expressar a segunda lei da termodinâmica, sendo uma das mais utilizadas no contexto da mecânica do contínuo a inequação de Clausius-Duhem, dada em sua forma Lagrangiana por

$$\int_{\Omega_0} \dot{\eta} dV_0 \geq \int_{\Omega_0} \frac{r}{\theta} dV_0 - \int_{\Gamma_0} \frac{\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0}{\theta} dS_0, \quad (3.13)$$

onde η representa a entropia por unidade de volume na configuração inicial, e θ a temperatura absoluta. Levando em conta o teorema da divergência na última parcela da Ineq. (3.13), é possível expressar a integral no contorno por uma integral no volume, isto é:

$$\int_{\Omega_0} \dot{\eta} dV_0 \geq \int_{\Omega_0} \frac{r}{\theta} dV_0 - \int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot \left(\frac{\mathbf{q}_0}{\theta} \right) dV_0, \quad (3.14)$$

de onde, pela arbitrariedade do volume, segue que:

$$\dot{\eta} \geq \frac{r}{\theta} - \nabla_0 \cdot \left(\frac{\mathbf{q}_0}{\theta} \right). \quad (3.15)$$

Desenvolvendo algebraicamente, escreve-se:

$$\theta \dot{\eta} \geq r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 + \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta. \quad (3.16)$$

Finalmente, aplicando-se a forma local da primeira lei da termodinâmica, dada na Eq. (3.12), a inequação de Clausius-Duhem pode ser expressa na seguinte forma local Lagrangiana:

$$d_{\text{int}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} + \theta \dot{\eta} - \dot{u}_e - \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (3.17)$$

onde d_{int} representa a taxa de dissipação interna por unidade de volume na configuração inicial.

3.3 Energia livre de Helmholtz

A energia livre de Helmholtz, já apresentada na [subseção 2.2.1](#), pode ser entendida como a parcela da energia interna específica efetivamente convertida em trabalho mecânico,

sendo utilizada para definir o modelo constitutivo do material. Essa é definida, por unidade de volume na configuração inicial, como:

$$\psi = u_e - \theta\eta. \quad (3.18)$$

A partir dessa definição, temos que

$$\dot{\psi} = \dot{u}_e - \theta\dot{\eta} - \dot{\theta}\eta. \quad (3.19)$$

Aplicando essa expressão em Eq. (3.12) e Ineq. (3.17), pode-se escrever a primeira e segunda lei da termodinâmica em termos da energia livre de Helmholtz como:

$$\dot{\psi} + \theta\dot{\eta} + \dot{\theta}\eta - r = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0, \quad (3.20)$$

$$d_{\text{int}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \dot{\psi} - \dot{\theta}\eta - \frac{1}{T}\mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (3.21)$$

A Ineq. (3.21) é utilizada neste trabalho para garantir que os modelos constitutivos sejam termodinamicamente consistentes, sendo aplicada inclusive em problemas isotérmicos, nos quais ela é reduzida a

$$d_{\text{int}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \dot{\psi} \geq 0. \quad (3.22)$$

A partir disso, é possível mostrar que modelos hiperelásticos isotérmicos não provocam dissipação, uma vez que a energia livre de Helmholtz, nesse caso, depende apenas da deformação, e, portanto,

$$\dot{\psi} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}, \quad (3.23)$$

provando que $d_{\text{int}} = 0$.

3.4 Equação da condução de calor

Precisa ficar claro se precisa V_0 precisar ser igual a V_f ou se o que você está considerando é um problema de condução de calor em um domínio com deformação independente do problema térmico.

Considerando problemas puramente térmicos, onde desprezam-se os efeitos mecânicos, a energia livre de Helmholtz pode ser expressa como função apenas da temperatura, isto é, $\psi = \psi(\theta)$. Assim, temos:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\dot{\theta}. \quad (3.24)$$

Além disso, é possível desconsiderar os termos $\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}$ da Eq. (3.20) e da Ineq. (3.21). Dessa forma, essas podem ser escritas como:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \eta \right) \dot{\theta} + \theta\dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (3.25)$$

$$d_{\text{int}} = - \left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \eta \right) \dot{\theta} - \frac{1}{T}\mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (3.26)$$

Uma vez que $\dot{\theta}$ é arbitrário, é necessário que seu termo multiplicante seja nulo para que as leis da termodinâmica sejam atendidas. Assim, a seguinte expressão para a entropia é obtida:

$$\eta = -\frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad (3.27)$$

que reduz as leis da termodinâmica às seguintes expressões:

$$\theta \dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (3.28)$$

$$\mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \leq 0. \quad (3.29)$$

A Eq. (3.28) é denominada equação da condução de calor, expressa nesse contexto em sua forma simplificada para o caso puramente térmico. A taxa de entropia pode ser calculada a partir da Eq. (3.27) como

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \dot{\theta} = \frac{c_v}{\theta} \dot{\theta} = \rho_0 \frac{c_e}{\theta} \dot{\theta}, \quad (3.30)$$

onde c_v é o calor específico volumétrico do material, definido por unidade de volume na configuração inicial a partir da expressão

$$c_v = -\theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta}, \quad (3.31)$$

e c_e é o calor específico por unidade de massa, que pode ser associado ao calor específico volumétrico pela relação $c_v = \rho_0 c_e$. Ambos são formas alternativas de expressar a mesma grandeza. Embora o calor específico por unidade de massa seja mais comumente utilizado na literatura, adotaremos predominantemente c_v ao longo deste trabalho, para manter a abordagem totalmente Lagrangiana.

c_v é muito utilizado para calor específico a volume contante. Pode ser interessante mudar a variável... Em geral, o calor específico é um parâmetro do material que pode ser constante ou variar em função da temperatura. Considerando um caso no qual ele varia linearmente com relação à temperatura, podemos definir a energia livre de Helmholtz pela expressão dada em ??):

$$\psi(\theta) = (c_0 - c_\gamma \theta_0) \left(\theta - \theta_0 - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right) - \frac{1}{2} c_\gamma (\theta - \theta_0)^2, \quad (3.32)$$

onde θ_0 é a temperatura de referência do material, c_0 é uma constante de referência para o calor específico, e c_γ é um parâmetro que controla a variação do calor específico volumétrico com relação à temperatura. Assim, tem-se:

$$\eta = -\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = -(c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma (\theta - \theta_0), \quad (3.33)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (3.34)$$

Aplicando a Eq. (3.30) na Eq. (3.28), obtém-se:

$$\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 + c_v \dot{\theta} - r = 0, \quad (3.35)$$

que representa a equação da condução de calor em sua forma local. Essa pode ainda ser escrita em forma variacional ao ser multiplicada por uma função ponderadora $\delta\theta$, isto é:

$$(\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 + c_v \dot{\theta} - r) \delta\theta = 0. \quad (3.36)$$

Além disso, integrando-a no volume inicial, pode-se escrever-la na forma global:

$$\int_{\Omega_0} (\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0) \delta\theta dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0 = 0. \quad (3.37)$$

Pela regra do produto, tem-se que $\nabla_0 \cdot (\mathbf{q}_0 \delta\theta) = (\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0) \delta\theta + \mathbf{q}_0 \cdot (\nabla_0 \delta\theta)$. Logo, o primeiro termo da Eq. (3.37) pode ser reescrito como:

$$\int_{\Omega_0} (\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0) \delta\theta dV_0 = - \int_{\Omega_0} \mathbf{q}_0 \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot (\mathbf{q}_0 \delta\theta) dV_0. \quad (3.38)$$

Aplicando-se o teorema da divergência no último termo da Eq. (3.38) resulta:

$$\int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot (\mathbf{q}_0 \delta\theta) dV_0 = \int_{\Gamma_0} \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0 \delta\theta dS_0 = \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0, \quad (3.39)$$

onde $\bar{q}_0 = \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0$ denota o calor prescrito no contorno do corpo, definido por unidade de área na configuração inicial. Aplicando-se, enfim, as Eqs. (3.38) e (3.39) na Eq. (3.37), é possível expressar a equação da condução de calor em sua forma variacional global como:

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{q}_0 \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 = \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0. \quad (3.40)$$

É importante destacar que a Eq. (3.40) é deduzida para o caso puramente térmico. Em casos onde considera-se o acoplamento termo-mecânico, termos adicionais devem ser introduzidos, a depender do modelo constitutivo considerado. Mais detalhes sobre esses termos serão apresentados em capítulos posteriores.

3.4.1 Lei de Fourier

Para que a condição (3.29) seja atendida, o fluxo de calor deve ser tomado como uma função no mínimo linear do gradiente da temperatura. Essa relação é estabelecida pela lei de Fourier, escrita em forma Lagrangiana como:

$$\mathbf{q}_0 = -\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta, \quad (3.41)$$

onde \mathbf{K}_0 é a matriz de condutividade térmica do material definida na configuração inicial. Utilizando a relação entre \mathbf{q} e \mathbf{q}_0 estabelecida pela Eq. (3.6), e a identidade $\nabla\theta = \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla_0 \theta$, pode-se escrever a lei de Fourier também na forma Euleriana:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla\theta, \quad (3.42)$$

onde \mathbf{K} , denominada a matriz de condutividade térmica do material na configuração deformada, relaciona-se com \mathbf{K}_0 pela expressão:

$$\mathbf{K}_0 = J \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{F}^{-T}. \quad (3.43)$$

Da Eq. (3.43), segue que as matrizes \mathbf{K} e \mathbf{K}_0 não podem ser simultaneamente independentes das deformações, isto é, caso uma seja tomada constante, a outra irá variar em função de \mathbf{F} . Naturalmente, a questão sobre qual delas, ou sequer alguma delas, pode ser tomada constante, irá depender do material sendo tratado. No entanto, observa-se que, tomando \mathbf{K}_0 constante, o primeiro termo da Eq. (3.40) se torna totalmente independente da configuração atual, isto é, o material poderia deformar-se indefinidamente sem causar influência no problema térmico. Embora isso simplifique as equações, o seu sentido físico pode ser questionado. Dessa forma, opta-se por tomar a matriz Euleriana \mathbf{K} independente das deformações. Em geral, essa poderia variar com a temperatura, porém, isso não é considerado neste trabalho. Assumindo ainda o caso isotrópico, pode-se escrever

$$\mathbf{K} = k\mathbf{I}, \quad (3.44)$$

onde k é uma constante única de condutividade térmica, tomada sempre positiva para que a Ineq. (4.6) seja atendida. Aplicando essa lei isotrópica na Eq. (3.43), pode-se obter a matriz Lagrangiana pela expressão

$$\mathbf{K}_0 = kJ\mathbf{C}^{-1}. \quad (3.45)$$

A equação da condução de calor, (3.40), pode ser então reescrita substituindo a Eq. (3.41) no primeiro termo:

$$\int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0 = 0. \quad (3.46)$$

Pode-se verificar ainda que, a partir das relações apresentadas,

$$\int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 = \int_{\Omega} (\mathbf{K} \cdot \nabla \theta) \cdot (\nabla \delta\theta) dV, \quad (3.47)$$

isto é, o primeiro termo da Eq. (3.46) pode ser calculado tanto em forma Lagrangiana quanto Euleriana sem haja necessidade de reformular os demais termos da equação.

3.4.2 Condição de convecção

Tente entender bem essa condição. Note que só há convecção (transporte junto com a matéria) no fluido que está ao redor do sólido...

A condição de contorno de convecção é utilizada para representar a troca de calor com o ambiente efetuada por meio da movimentação dos fluidos externos, como, por exemplo, o ar. Utilizando a lei de resfriamento de Newton, temos:

$$\bar{q} = \bar{h}_c(\theta - \theta_{\text{ext}}), \quad (3.48)$$

onde \bar{h}_c é o coeficiente de transferência de calor por convecção, ou coeficiente de resfriamento, definido por unidade de área na configuração deformada, e θ_{ext} é a temperatura do ambiente externo. Assim, nos contornos do corpo onde ocorre a convecção, o seguinte termo é adicionado à equação da condução de calor:

$$\int_{\Gamma} \bar{q} \delta\theta dS = \int_{\Gamma} \bar{h}_c(\theta - \theta_{\text{ext}}) \delta\theta dS. \quad (3.49)$$

Assim, a equação da condução de calor pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 \\ & + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c (\theta - \theta_{ext}) \delta\theta dS - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0 = 0. \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde Γ_c representa o contorno onde aplicam-se as condições de convecção. Observa-se que o termo de convecção da Eq. (3.50) é integrado na configuração deformada, ao contrário dos demais.

3.5 Método dos elementos finitos aplicado ao problema térmico

Assim como no problema mecânico, utiliza-se neste trabalho o método dos elementos finitos para resolver numericamente o problema térmico. Os conceitos básicos do método, como as funções de forma e a discretização espacial, podem ser aproveitados do problema mecânico, conforme descrito na [seção 2.4](#).

No caso térmico, os parâmetros nodais a serem calculados são as temperaturas. Assim, no domínio de um elemento finito, pode-se realizar a seguinte interpolação:

$$\theta = \varphi^\alpha \theta^\alpha, \quad (3.51)$$

onde θ^α representa a temperatura no nó α , e os índices α são somados por todos os nós do elemento. Ainda, pelo método de Galerkin, pode-se escrever

$$\delta\theta = \varphi^\alpha \delta\theta^\alpha, \quad (3.52)$$

onde $\delta\theta^\alpha$ representa os valores nodais das funções ponderadoras.

Aplicando as Eqs. (3.51) e (3.52) na Eq. (3.50), e considerando a isotropia do material, escreve-se a equação da condução de calor como:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} k J \left(\mathbf{C}^{-1} \cdot \nabla_0 \varphi^\beta \right) \cdot (\nabla_0 \varphi^\alpha) \theta^\beta \delta\theta^\alpha dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \varphi^\alpha \varphi^\beta \dot{\theta}^\beta \delta\theta^\alpha dV_0 \\ & + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \varphi^\alpha \delta\theta^\alpha dS_0 + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c (\varphi^\beta \theta^\alpha - \theta_{ext}) \varphi^\alpha \delta\theta^\alpha dS - \int_{\Omega_0} r \varphi^\alpha \delta\theta^\alpha dV_0 = 0. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Pela arbitrariedade de $\delta\theta^\alpha$, a Eq. (3.53) implica que, para cada nó α , deve valer:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} k J \left(\mathbf{C}^{-1} \cdot \nabla_0 \varphi^\beta \right) \cdot (\nabla_0 \varphi^\alpha) \theta^\beta dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \varphi^\alpha \varphi^\beta \dot{\theta}^\beta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \varphi^\alpha dS_0 \\ & + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c (\varphi^\beta \theta^\beta - \theta_{ext}) \varphi^\alpha dS - \int_{\Omega_0} r \varphi^\alpha dV_0 = 0, \end{aligned} \quad (3.54)$$

o que nos fornece N equações, onde N é o número de nós da discretização. Esse sistema pode ser organizado globalmente como:

$$[\mathbf{C}] \cdot \{\dot{\theta}\} + [\mathbf{K}] \cdot \{\theta\} = \{\mathbf{F}\}, \quad (3.55)$$

onde $\{\theta\}$ representa o vetor de parâmetros nodais, e:

$$[\mathbf{C}]_{ij} = \int_{\Omega_0} c_v \varphi^i \varphi^j dV_0, \quad (3.56)$$

$$[\mathbf{K}]_{ij} = \int_{\Omega_0} k J (\mathbf{C}^{-1} \cdot \nabla_0 \varphi^j) \cdot (\nabla_0 \varphi^i) dV_0 + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c \varphi^i \varphi^j dS, \quad (3.57)$$

$$\{\mathbf{F}\}_i = - \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \varphi^i dS_0 + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c \theta_{\text{ext}} \varphi^i dS + \int_{\Omega_0} r \varphi^i dV_0. \quad (3.58)$$

Tendo em vista que as funções de forma são definidas em coordenadas adimensionais, os termos $\nabla_0 \varphi^i$ na Eq. (3.57) podem ser calculados da seguinte maneira:

$$\nabla_0 \varphi^i = \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \mathbf{F}_0^{-1} = \mathbf{F}_0^{-T} \cdot \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}}, \quad (3.59)$$

onde \mathbf{F}_0 é definido conforme a Eq. (2.41).

Alternativamente, o termo da condutividade térmica pode ser calculado pela abordagem Euleriana, utilizando a relação dada na Eq. (3.47). Dessa forma, podemos escrever:

$$[\mathbf{K}]_{ij} = \int_{\Omega} k (\nabla \varphi^j) \cdot (\nabla \varphi^i) dV + \int_{\Gamma_c} \bar{h}_c \varphi^i \varphi^j dS, \quad (3.60)$$

onde, de maneira análoga à Eq. (3.59), temos:

$$\nabla \varphi^i = \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \mathbf{F}_1^{-1} = \mathbf{F}_1^{-T} \cdot \frac{\partial \varphi^i}{\partial \boldsymbol{\xi}}, \quad (3.61)$$

sendo \mathbf{F}_1 definido conforme a Eq. (2.42).

Para que o sistema da Eq. (3.55) possa ser resolvido numericamente, resta definir como será tratada a taxa dos parâmetros nodais, $\{\dot{\theta}\}$. Neste trabalho, utiliza-se o método de Euler, também conhecido como método implícito, ou *backward Euler*, no qual escreve-se:

$$\{\dot{\theta}\} = \frac{1}{\Delta t} (\{\theta\} - \{\theta\}_{\text{ant}}), \quad (3.62)$$

onde $\{\theta\}_{\text{ant}}$ denota os parâmetros nodais no passo anterior da análise, e Δt é o intervalo de tempo entre os passos. Assim, pode-se reescrever a Eq. (3.55) como:

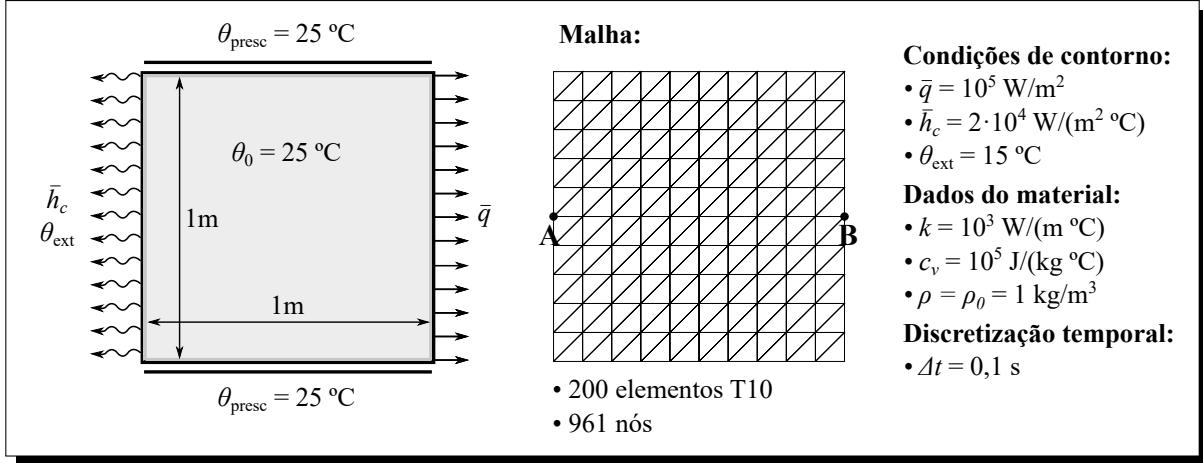
$$(\Delta t^{-1} [\mathbf{C}] + [\mathbf{K}]) \cdot \{\theta\} = \{\mathbf{F}\} + \Delta t^{-1} [\mathbf{C}] \cdot \{\theta\}_{\text{ant}}, \quad (3.63)$$

resultando em um sistema linear para $\{\theta\}$.

Um questionamento bem forte que pode surgir aqui é porque você usou um método de primeira ordem e altamente dissipativo no tempo (backward Euler), se você poderia ter utilizado Newmark, alpha generalizado, diferenças centrais, trapézios... que são métodos de segunda ordem e menos dissipativos. Apenas esteja preparado para isso.

3.5.1 Exemplo numérico: problema puramente térmico

Este exemplo é proposto para verificar o modelo térmico implementado. O problema consiste de um cubo com dimensões unitárias, sujeito a temperaturas prescritas nas bordas

Figura 3 – Dados do exemplo puramente térmico

superior e inferior, fluxo de calor prescrito na borda direita e condição de convecção da borda esquerda. Realiza-se uma análise transiente, com carregamentos térmicos constantes ao longo do tempo. Os dados relativos às características físicas, condições de contorno e discretização adotados estão dispostos na [Figura 3](#).

Os resultados são comparados com resultados obtidos pelo *software* ANSYS, mostrando excelente concordância conforme atestam as Figs. 4 a 6. Na [Figura 4](#), compara-se qualitativamente os campos de temperatura no instante final da análise ($t = 100 \text{ s}$). Na [Figura 5](#), são traçados os gráficos de temperatura ao longo do tempo para os pontos A e B indicados na [Figura 3](#). Por fim, na [Figura 6](#) são mostrados os gráficos de temperatura ao longo de um eixo x horizontal, com origem no ponto A, para diversos instantes ao longo da análise.

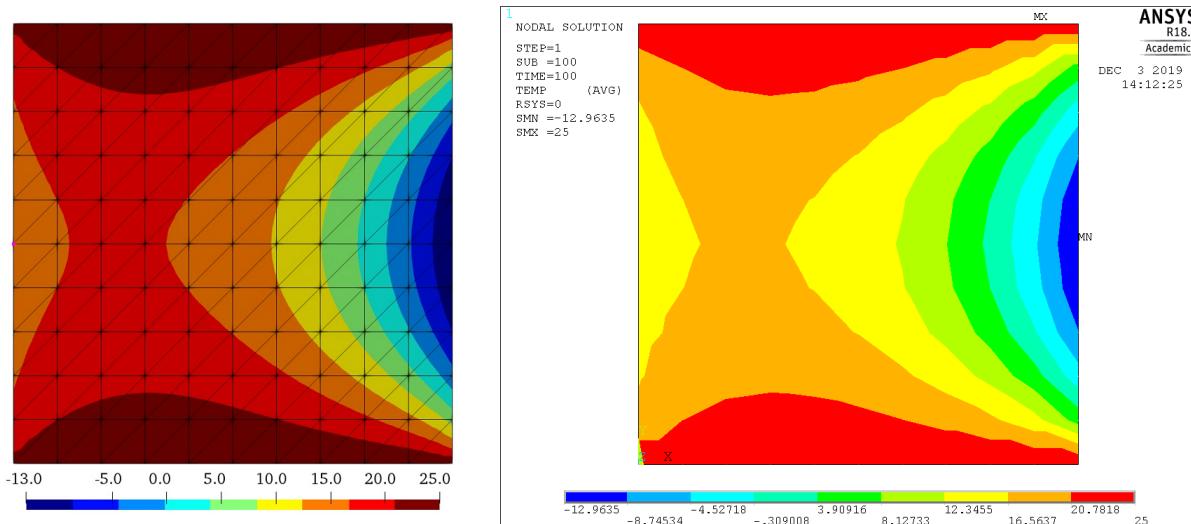
Figura 4 – Coomparação entre os campos de temperatura obtidos neste trabalho (à esquerda) e no *software* ANSYS (à direita) para o tempo de análise 100s.

Figura 5 – Temperatura (em °C) ao longo do tempo nos pontos A e B do exemplo puramente térmico.

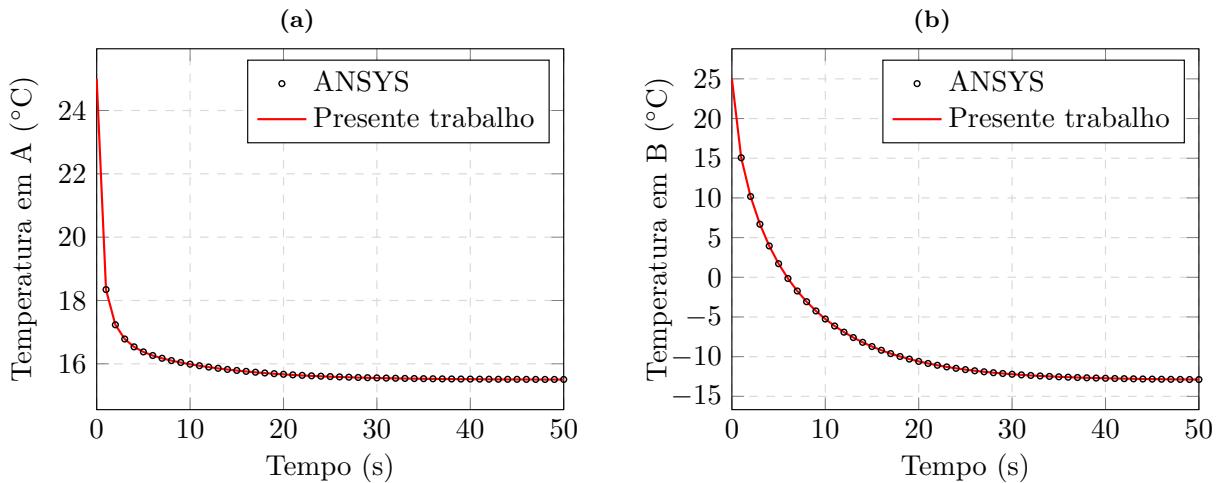
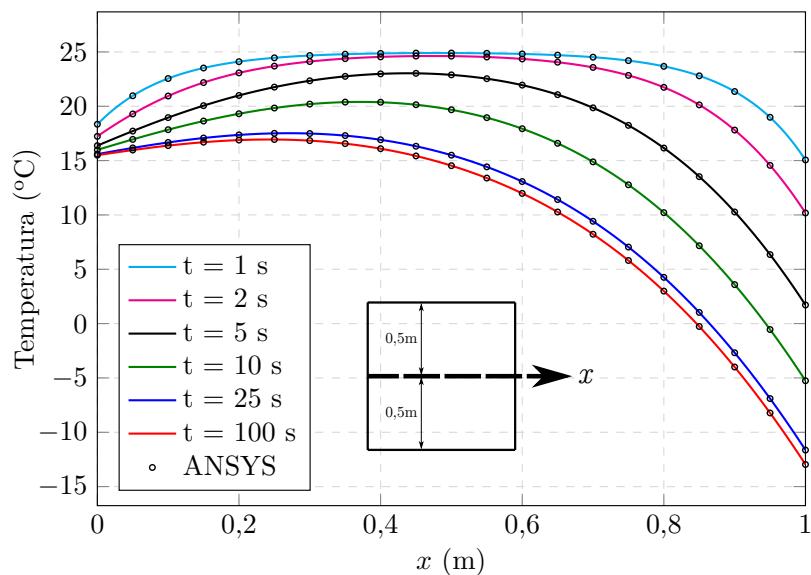


Figura 6 – Temperatura ao longo do eixo horizontal que percorre os pontos A e B em diversos tempos de análise para o exemplo puramente térmico



Capítulo 4

Modelo termo-elástico

A partir deste capítulo, são tratados modelos com acoplamento termo-mecânico, isto é, onde os problemas térmico e mecânico atuam conjuntamente e de forma interdependente. Particularmente, é apresentado o modelo termo-elástico, no qual a parcela mecânica é considerada um sólido hiperelástico.

4.1 Base termodinâmica

No caso termo-elástico, a energia livre de Helmholtz ψ pode ser escrita apenas em função da deformação (\mathbf{E}) e da temperatura. Assim, sua taxa pode ser expressa como:

$$\dot{\psi}(\mathbf{E}, \theta) = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \dot{\theta}. \quad (4.1)$$

Aplicando essa equação nas leis da termodinâmica, Eq. (3.20) e Ineq. (3.21), resulta:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} - \mathbf{S} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \eta \right) \dot{\theta} + \theta \dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (4.2)$$

$$d_{\text{int}} = \left(\mathbf{S} - \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \left(\eta + \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) \dot{\theta} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (4.3)$$

Uma vez que $\dot{\mathbf{E}}$ e $\dot{\theta}$ são arbitrários, os termos entre parênteses devem ser igualados a zero para que as leis da termodinâmica sejam atendidas. Isso resulta nas seguintes relações constitutivas:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} \quad \text{e} \quad \eta = -\frac{\partial\psi}{\partial\theta}. \quad (4.4)$$

Consequentemente, a Eq. (4.2) e a Ineq. (4.3) resultam nas seguintes expressões:

$$\theta \dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \leq 0. \quad (4.6)$$

As Eqs. (4.4) são denominadas relações constitutivas do material. A primeira, já apresentada na Eq. (2.20), é incorporada no problema mecânico, enquanto a segunda é incorporada no problema térmico. A partir da Eq. (4.4), obtém-se:

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta\partial\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} - \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \dot{\theta} = \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \frac{c_v}{\theta} \dot{\theta}, \quad (4.7)$$

onde c_v é o calor específico volumétrico, já definido na Eq. (3.31), e \mathbf{T}_E é denominado operador termo-elástico, dado por

$$\mathbf{T}_E = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}}. \quad (4.8)$$

Aplicando-se a Eq. (4.7) na Eq. (4.5), temos a equação local de condução de calor para o problema termo-elástico:

$$\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 + \theta \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}} + c_v \dot{\theta} = r. \quad (4.9)$$

O termo $\theta \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}}$ é denominado termo de acoplamento termo-elástico, responsável por transmitir o calor gerado pelas deformações elásticas ao problema térmico.

É conveniente expressar a energia livre de Helmholtz através da decomposição aditiva entre uma parcela mecânica (ψ_m), dependente da deformação e da temperatura, e uma parcela térmica (ψ_θ), dependente apenas da temperatura, isto é:

$$\psi(\mathbf{E}, \theta) = \psi_m(\mathbf{E}, \theta) + \psi_\theta(\theta). \quad (4.10)$$

Para a parcela térmica, pode-se utilizar a lei dada por ??), apresentada na Eq. (3.32). Isto é:

$$\psi_\theta(\theta) = (c_0 - c_\gamma \theta_0) \left(\theta - \theta_0 - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right) - \frac{1}{2} c_\gamma (\theta - \theta_0)^2. \quad (4.11)$$

Já a parcela mecânica pode ser expressa na forma $\psi_m(\mathbf{E}, \theta) = \psi_m(\mathbf{E}_e, \theta)$, onde \mathbf{E}_e é a parcela puramente elástica da deformação, dependente da deformação total e da temperatura. Uma vez escrita nessa forma, ψ_m pode ser dada por uma lei hiperelástica análoga às discutidas na seção 2.3. Resta, portanto, avaliar como será definido o tensor \mathbf{E}_e . Neste trabalho, duas formas serão discutidas: a decomposição aditiva e a multiplicativa.

4.2 Decomposição aditiva

Na termo-elasticidade linear, é comum assumir que a deformação linear de engenharia pode ser expressa pela soma entre parcelas elástica e térmica. Esse conceito pode ser generalizado considerando a decomposição aditiva do tensor de deformações de Green-Lagrange, isto é:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_\theta \quad (4.12)$$

onde \mathbf{E}_e é a parcela elástica, e \mathbf{E}_θ é a parcela térmica da deformação, definida pela lei de expansão térmica do material, que depende apenas da temperatura. Para o caso de pequenas deformações, muitos materiais podem ser representados pela seguinte lei linear¹:

$$\mathbf{E}_\theta = (\theta - \theta_0) \boldsymbol{\alpha}, \quad (4.13)$$

¹ Embora seja utilizada nos desenvolvimentos algébricos desta subseção, essa lei linear apresentada não será de interesse nas aplicações numéricas deste trabalho, sendo substituída por outra lei na subseção 4.3.1.

onde $\boldsymbol{\alpha}$ é o tensor de coeficientes de expansão térmica. Levando-se em conta que \mathbf{E}_θ representa puramente os efeitos de dilatação ou contração, apenas suas parcelas da diagonal principal devem ser não-nulas, isto é, $\alpha_{ij} = 0$ para $i \neq j$. Além disso, para o caso termicamente isotrópico, considerado neste trabalho, temos $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$, onde α é um coeficiente único de expansão térmica. Assim, a Eq. (4.13) pode ser escrita como:

$$\mathbf{E}_\theta = \alpha(\theta - \theta_0)\mathbf{I}, \quad (4.14)$$

de forma que

$$\mathbf{E}_e = \mathbf{E} - \alpha(\theta - \theta_0)\mathbf{I}. \quad (4.15)$$

Observa-se, no entanto, que a lei linear dada na Eq. (4.13) deve ser aplicada somente ao caso de pequenas deformações, uma vez que ela não é limitada para valores excessivos de contração, o que pode provocar a inversão do material.

O modelo constitutivo mecânico pode ser definido em função de \mathbf{E}_e conforme as leis hiperelásticas apresentadas na seção 2.3. Assim, calcula-se o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e o operador tangente consistente pelas expressões:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \cancel{\frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}}} \mathbf{II} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e}, \quad (4.16)$$

$$\mathfrak{C} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}_e} : \cancel{\frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}}} \mathbf{II} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}_e} = \frac{d}{d\mathbf{E}_e} \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} \right). \quad (4.17)$$

Para escrever explicitamente o potencial ψ_m quando utilizada a decomposição aditiva, deve-se levar em conta não apenas a expressão da lei hiperelástica dada em função de \mathbf{E}_e , mas ainda a parcela de trabalho efetuado pelas forças internas sobre as deformações térmicas. Para deixar mais claro, podemos partir da seguinte definição:

$$\psi_m = \int_0^{\mathbf{E}} \mathbf{S} d\mathbf{E}. \quad (4.18)$$

Após efetuar a mudança de variáveis de \mathbf{E} para \mathbf{E}_e , o limite inferior $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ se torna, pela Eq. (4.12), $\mathbf{E}_e = -\mathbf{E}_\theta$, e o limite superior se torna o próprio \mathbf{E}_e . Assim, a integral (4.18) pode ser reescrita como

$$\psi_m = \int_{-\mathbf{E}_\theta}^{\mathbf{E}_e} \mathbf{S} d\mathbf{E}_e = \tilde{\psi}_m|_{(\mathbf{E}_e)} - \tilde{\psi}_m|_{(-\mathbf{E}_\theta)}, \quad (4.19)$$

onde $\tilde{\psi}_m$ é a expressão da lei hiperelástica, aplicada em \mathbf{E}_e na primeira parcela da Eq. (4.19), e aplicada em $-\mathbf{E}_\theta$ na segunda parcela. Uma vez que a segunda parcela depende apenas da temperatura, essa não irá influenciar no cálculo da tensão. No entanto, irá influenciar no cálculo da entropia.

Adotando, por exemplo, o modelo de Saint Venant-Kirchhoff para $\tilde{\psi}_m$, escreve-se a parcela mecânica da energia livre de Helmholtz e a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie como:

$$\psi_m = \frac{1}{2} \mathbf{E}_e : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e - \frac{1}{2} \mathbf{E}_\theta : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_\theta, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} = \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e. \quad (4.21)$$

onde \mathfrak{C}_{SVK} é o operador tangente consistente da lei de Saint Venant-Kirchhoff, dependente apenas das constantes do material. Admitindo que essas constantes não variam com relação à temperatura, temos, ao derivar a Eq. (4.20):

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_\theta} : \frac{\partial \mathbf{E}_\theta}{\partial \theta} = (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e) : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} - (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_\theta) : \frac{\partial \mathbf{E}_\theta}{\partial \theta} \quad (4.22)$$

Substituindo-se na Eq. (4.22) a lei de expansão térmica linear dada pelas Eqs. (4.14) e (4.15) e desenvolvendo-se algebraicamente, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = -\alpha (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}) : \mathbf{I} = -\alpha \operatorname{tr} (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}), \quad (4.23)$$

de onde, com a aplicação da Eq. (4.4), pode-se obter a entropia:

$$\eta = - \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \right) = \alpha \operatorname{tr} (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}) - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (4.24)$$

A partir da entropia, é possível obter as seguintes expressões para o operador termo-elástico e para o calor específico volumétrico:

$$\mathbf{T}_\mathbf{E} = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} = \alpha \mathbf{I} : \mathfrak{C}_{SVK}, \quad (4.25)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (4.26)$$

Conforme visto na Eq. (4.26), o modelo adotado permite que o calor específico varie linearmente com a temperatura, podendo também ser um valor constante caso $c_\gamma = 0$. Já $\mathbf{T}_\mathbf{E}$ é uma matriz constante que depende apenas do coeficiente de expansão térmica e dos parâmetros de elasticidade.

Caso seja adotado o modelo neo-Hookeano para $\tilde{\psi}_m$, escreve-se a parcela mecânica da energia livre de Helmholtz, a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e o operador tangente consistente como:

$$\psi_m = \frac{\Lambda}{2} \ln(J_e)^2 + \frac{G}{2} (\operatorname{tr} \mathbf{C}_e - 3 - 2 \ln J_e) - \frac{\Lambda}{2} \ln(\bar{J}_\theta)^2 - \frac{G}{2} (\operatorname{tr} \bar{\mathbf{C}}_\theta - 3 - 2 \ln \bar{J}_\theta), \quad (4.27)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} = \Lambda \ln(J_e) \mathbf{C}_e^{-1} + G(\mathbf{I} - \mathbf{C}_e^{-1}), \quad (4.28)$$

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e \otimes \partial \mathbf{E}_e} = \Lambda \mathbf{C}_e^{-1} \otimes \mathbf{C}_e^{-1} + 2\Lambda \ln(J_e) \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e} - 2G \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e}, \quad (4.29)$$

onde $\mathbf{C}_e = 2\mathbf{E}_e + \mathbf{I}$, $J_e = \sqrt{\det \mathbf{C}_e}$, $\bar{\mathbf{C}}_\theta = \mathbf{I} - 2\mathbf{E}_\theta$, e $\bar{J}_\theta = \sqrt{\det \bar{\mathbf{C}}_\theta} = \sqrt{\det(\mathbf{I} - 2\mathbf{E}_\theta)}$. Derivando-se a Eq. (4.27) em relação à temperatura, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_m}{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta} : \frac{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta}{\partial \theta} = \mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} - \bar{\mathbf{S}}_\theta : \frac{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.30)$$

onde

$$\bar{\mathbf{S}}_\theta = 2 \frac{\partial \psi_m}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta} = \Lambda \ln(\bar{J}_\theta) \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} + G(\mathbf{I} - \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}). \quad (4.31)$$

Substituindo-se na Eq. (4.30) a lei de expansão térmica linear dada pelas Eqs. (4.13) e (4.15) e desenvolvendo algebricamente, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = -\alpha \mathbf{S} : \mathbf{I} + \alpha \bar{\mathbf{S}}_\theta : \mathbf{I} = -\alpha(\text{tr } \mathbf{S} - \text{tr } \bar{\mathbf{S}}_\theta) \quad (4.32)$$

de onde, com a aplicação da Eq. (4.4), pode-se obter a entropia:

$$\eta = - \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \right) = \alpha(\text{tr } \mathbf{S} - \text{tr } \bar{\mathbf{S}}_\theta) - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma(\theta - \theta_0). \quad (4.33)$$

A partir da entropia, é possível obter as seguintes expressões para o operador termo-elástico e para o calor específico volumétrico:

$$\mathbf{T}_E = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{S}} : \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \alpha \mathbf{I} : \mathfrak{C}, \quad (4.34)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma(\theta - \theta_0) - \alpha^2 \theta \mathbf{I} : (\mathfrak{C} - \bar{\mathfrak{C}}_\theta) : \mathbf{I}. \quad (4.35)$$

onde

$$\bar{\mathfrak{C}}_\theta = \Lambda \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} + 2\Lambda \ln(\bar{J}_\theta) \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta} - 2G \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta}. \quad (4.36)$$

Portanto, ao contrário do modelo de Saint Venant-Kirchhoff, neste caso, tanto o operador termo-elástico quanto o calor específico variam de acordo com a deformação do material, demonstrando que a aplicação de modelos constitutivos não-lineares na parcela mecânica influencia também nas variáveis térmicas. No entanto, conforme esperado, essa dependência só deve ser notável para grandes deformações, uma vez que, para deformações suficientemente pequenas, $\mathfrak{C} \approx \bar{\mathfrak{C}}_\theta \approx \mathfrak{C}_{SVK}$. Além disso, a ordem de grandeza de α é tipicamente muito menor que a do calor específico, fazendo com que o termo α^2 possa ser desprezado. Dessa forma, é seguro considerar, mesmo em casos de grandes deformações,

$$c_v \approx c_0 + c_\gamma(\theta - \theta_0), \quad (4.37)$$

que equivale à Eq. (4.26) obtida anteriormente.

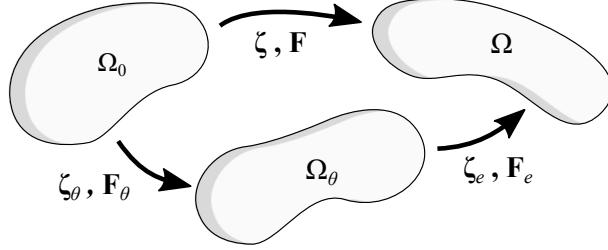
4.3 Decomposição multiplicativa

A decomposição multiplicativa baseia-se no conceito de configuração intermediária, isto é, uma configuração Ω_θ do corpo onde apenas deformações térmicas estão presentes. Denota-se por ζ_θ a função que mapeia o corpo em sua configuração inicial (Ω_0) para a configuração Ω_θ , e por ζ_e a função que mapeia o corpo de Ω_θ para a configuração final (Ω), conforme ilustra a Figura 7. Pode-se então representar a função mudança de configuração como $\zeta = \zeta_e \circ \zeta_\theta$. Assim, temos:

$$\mathbf{F} = \nabla_0 \cdot (\zeta_e \circ \zeta_\theta) = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_\theta, \quad (4.38)$$

onde $\mathbf{F}_e = \nabla_\theta \cdot \zeta_e$ representa as deformações puramente elásticas, e $\mathbf{F}_\theta = \nabla_0 \cdot \zeta_\theta$ representa as deformações puramente térmicas. O operador ∇_θ denota o gradiente com relação à

Figura 7 – Mapeamento da configuração intermediária no modelo termo-elástico



Ω_θ , ou seja, \mathbf{F}_e é definido na configuração intermediária. Já \mathbf{F}_θ é definido na configuração inicial.

A partir disso, pode-se escrever as parcelas elástica e térmica da deformação de Green-Lagrange, respectivamente, como:

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_e - \mathbf{I}), \quad (4.39)$$

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_\theta - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_\theta - \mathbf{I}), \quad (4.40)$$

onde, novamente, \mathbf{E}_e é definido na configuração intermediária, enquanto \mathbf{E}_θ é definido na configuração inicial. Após determinadas manipulações algébricas, pode-se ainda escrever:

$$\mathbf{E}_e = \mathbf{F}_\theta^{-T} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_\theta) \mathbf{F}_\theta^{-1}. \quad (4.41)$$

Observa-se que, para pequenas deformações térmicas, $\mathbf{F}_\theta \approx \mathbf{I}$, logo a Eq. (4.41) se aproxima da decomposição aditiva.

Uma vez que \mathbf{E}_e é definido na configuração intermediária, é natural definir o modelo constitutivo mecânico no mesmo domínio. Dessa forma, denota-se por $\tilde{\psi}_m$ a parcela mecânica da energia livre de Helmholtz por unidade de volume na configuração intermediária, escrita em função de \mathbf{E}_e conforme os modelos descritos na [seção 2.3](#). Como as demais passagens deste trabalho utilizam a versão Lagrangiana da energia livre, torna-se necessário recuperá-la a partir da seguinte expressão:

$$\psi_m = J_\theta \tilde{\psi}_m, \quad (4.42)$$

onde $J_\theta = \det \mathbf{F}_\theta$ é o Jacobiano da parcela térmica de deformação. O tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie é dado então por:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}} = J_\theta \frac{\partial \tilde{\psi}_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} = J_\theta \mathbf{F}_\theta^{-1} \mathbf{S}_e \mathbf{F}_\theta^{-T}, \quad (4.43)$$

onde

$$\mathbf{S}_e = \frac{\partial \tilde{\psi}_m}{\partial \mathbf{E}_e} \quad (4.44)$$

é o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie definido na configuração intermediária.

A lei de expansão térmica nesse caso pode ser expressa a partir do tensor \mathbf{F}_θ . Novamente, leva-se em conta que os efeitos térmicos devem ser apenas de dilatação ou contração, logo,

apenas as parcelas da diagonal principal de \mathbf{F}_θ devem ser não-nulas. Para o caso isotrópico, considerado neste trabalho, escreve-se:

$$\mathbf{F}_\theta = \lambda_\theta \mathbf{I}, \quad (4.45)$$

onde λ_θ é denominado alongamento térmico, dependente apenas da temperatura. Neste caso, duas leis são consideradas: linear e exponencial. A primeira, dada pela expressão

$$\lambda_\theta = 1 + \alpha(\theta - \theta_0), \quad (4.46)$$

deve ser utilizada apenas para deformações térmicas pequenas ou moderadas, uma vez que ela permite valores de alongamento inferiores a zero, o que é fisicamente inadmissível. Já a lei exponencial, dada pela expressão

$$\lambda_\theta = e^{\alpha(\theta - \theta_0)} \quad (4.47)$$

pode ser utilizada para problemas de grandes deformações sem que hajam inconsistências físicas. Nota-se que, para valores suficientemente pequenos de $\alpha(\theta - \theta_0)$, as duas leis descritas tornam-se coincidentes.

Aplicando a Eq. (4.45) nas Eqs. (4.40) a (4.43), as relações cinemáticas e constitutivas podem ser reescritas como:

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2}(\lambda_\theta^2 - 1)\mathbf{I}, \quad (4.48)$$

$$\mathbf{E}_e = \lambda_\theta^{-2}\mathbf{E} + \frac{1}{2}(\lambda_\theta^{-2} - 1)\mathbf{I}, \quad (4.49)$$

$$\psi_m = \lambda_\theta^3 \tilde{\psi}_m, \quad (4.50)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \mathbf{S}_e. \quad (4.51)$$

Além disso, pode-se calcular o operador tangente consistente pela expressão:

$$\mathfrak{C} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}} = \lambda_\theta \frac{d\mathbf{S}_e}{d\mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} = \frac{1}{\lambda_\theta} \frac{d\mathbf{S}_e}{d\mathbf{E}_e} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_e, \quad (4.52)$$

onde

$$\mathfrak{C}_e = \frac{d\mathbf{S}_e}{d\mathbf{E}_e} = \frac{d}{d\mathbf{E}_e} \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} \right) \quad (4.53)$$

é o operador tangente elástico.

Adotando, por exemplo, o modelo de Saint Venant-Kirchhoff para $\tilde{\psi}_m$, a energia livre de Helmholtz, o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e o operador termo-elástico são dados, respectivamente, por:

$$\psi_m = \frac{1}{2} \lambda_\theta^3 \mathbf{E}_e : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e, \quad (4.54)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e, \quad (4.55)$$

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_{SVK}. \quad (4.56)$$

Já para o modelo neo-Hookeano, têm-se:

$$\psi_m = \frac{\lambda_\theta^3 \Lambda}{2} \ln(J_e)^2 + \frac{\lambda_\theta^3 G}{2} (\text{tr } \mathbf{C}_e - 3 - 2 \ln J_e), \quad (4.57)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \Lambda \ln(J_e) \mathbf{C}_e^{-1} + \lambda_\theta G (\mathbf{I} - \mathbf{C}_e^{-1}), \quad (4.58)$$

$$\mathbf{C} = \lambda_\theta^{-1} \Lambda \mathbf{C}_e^{-1} \otimes \mathbf{C}_e^{-1} + 2\lambda_\theta^{-1} \Lambda \ln(J_e) \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e} - 2\lambda_\theta^{-1} G \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e}. \quad (4.59)$$

A derivada de ψ_m com relação à temperatura pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial(\lambda_\theta^3 \tilde{\psi}_m)}{\partial \lambda_\theta} \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} = (3\lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m - \mathbf{S}_e : \mathbf{C}) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.60)$$

de forma que, aplicando a Eq. (4.4), obtém-se a seguinte expressão para a entropia:

$$\eta = (\mathbf{S}_e : \mathbf{C} - 3\lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln\left(\frac{\theta_0}{\theta}\right) + c_\gamma(\theta - \theta_0). \quad (4.61)$$

A partir dessa equação, podem ser obtidas as seguintes expressões para o operador termo-elástico e para o calor específico volumétrico:

$$\mathbf{T}_E = \frac{\partial \eta}{\partial E} = (\lambda_\theta^{-2} \mathbf{C}_e : \mathbf{C} - \mathbf{S}_e) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.62)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma(\theta - \theta_0) + \theta (\mathbf{S}_e : \mathbf{C} - 3\lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m) \frac{\partial^2 \lambda_\theta}{\partial \theta^2} \quad (4.63)$$

$$+ \theta (-\lambda_\theta^{-3} \mathbf{C} : \mathbf{C}_e : \mathbf{C} - 6\lambda_\theta \tilde{\psi}_m + 3\lambda_\theta^{-1} \mathbf{S}_e : \mathbf{C}) \left(\frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}\right)^2. \quad (4.64)$$

O termo $\partial^2 \lambda_\theta / \partial \theta^2$ será anulado para a lei de expansão térmica linear, e será da ordem de α^2 para a lei exponencial. Já o termo $(\partial \lambda_\theta / \partial \theta)^2$ será da ordem de α^2 independente da lei adotada. Portanto, admitindo novamente a hipótese $\alpha \ll c_v$, esses termos podem ser desprezados, e o calor específico pode ainda ser escrito conforme a expressão (4.42).

4.3.1 Equivalência entre leis de expansão térmica

Neste trabalho, serão aplicadas as leis de expansão térmica linear e exponencial, definidas conforme as Eqs. (4.46) e (4.47) para o modelo baseado na decomposição multiplicativa. Para aplicar essas mesmas leis na decomposição aditiva, e possibilitar uma comparação justa entre as duas abordagens, deve-se levar em conta que elas são escritas em termos de E_θ ao invés de λ_θ , sendo necessário utilizar a Eq. (4.48) para relacioná-las. Portanto, aplicando nessa as Eqs. (4.46) e (4.47), pode-se escrever as leis linear e exponencial, respectivamente, como:

$$\mathbf{E}_\theta = \left[\alpha(\theta - \theta_0) + \frac{1}{2} \alpha^2 (\theta - \theta_0)^2 \right] \mathbf{I}, \text{ e} \quad (4.65)$$

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2} (e^{2\alpha(\theta - \theta_0)} - 1) \mathbf{I}. \quad (4.66)$$

Observa-se que a lei linear para o alongamento retorna quadrática para o tensor de deformações de Green-Lagrange, ao contrário da lei definida na Eq. (4.14). Naturalmente, considerando a hipótese $\alpha \ll 1$, o segundo termo da Eq. (4.65) é desprezível comparado ao primeiro, fazendo com que as duas leis sejam aproximadamente coincidentes. No entanto, a fim de abordar o caso geral, neste trabalho apenas a Eq. (4.65) será considerada para a lei linear.

4.4 Equação termo-elástica da condução de calor

Para se obter a forma variacional global da equação da condução de calor para o caso termo-elástico, pode-se aplicar procedimentos algébricos análogos aos realizados na seção 3.4, partindo da sua forma local apresentada na Eq. (4.9). Aplicando-se também a lei de Fourier, de forma análoga à subseção 3.4.1, temos:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 \\ & - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0 + \int_{\Omega_0} \theta \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}} \delta\theta dV_0 = 0. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Nota-se que a única diferença entre a Eq. (4.67) e a Eq. (3.46) é a adição do termo associado ao operador termo-elástico \mathbf{T}_E . No entanto, como será mencionado a seguir, esse termo geralmente possui ordem de grandeza muito inferior aos demais, sendo portanto desconsiderado nos exemplos deste capítulo.

4.5 Solução numérica da termo-elasticidade

A solução numérica do problema térmico é dada novamente pelo Método dos Elementos Finitos, conforme descrito na seção 3.5. Apesar de terem sido apresentadas equações gerais em muitas passagens deste capítulo, a aplicação numérica do problema termo-mecânico limita-se a algumas aproximações e considerações importantes:

1. Modelos adotados são isotrópicos, isto é, $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$, $\mathbf{K} = k \mathbf{I}$ e $\mathbf{K}_0 = k J \mathbf{C}^{-1}$.
2. Coeficiente de expansão térmica é pequeno, isto é, $\alpha \ll 1$. Como consequência:
 - Os termos do calor específico que dependem das deformações são desprezados, por apresentarem ordem de grandeza muito inferior à constante c_0 ;
 - O termo do operador termo-elástico, \mathbf{T}_E , na equação da condução de calor é desprezado, por apresentar ordem de grandeza muito inferior aos demais termos.
3. O calor específico é tomado como constante, isto é, $c_\gamma = 0$ e $c_v = c_0$.

4.5.1 Acoplamento termo-mecânico

Apesar de apresentarem equações governantes diferentes, os problemas térmico e mecânico são mutuamente dependentes. A variação de temperatura causa dilatação ou contração no material, interferindo no problema mecânico por meio do modelo constitutivo.

Já as deformações do corpo interferem no problema térmico de duas formas: a primeira é pelo termo de acoplamento termo-elástico ($\theta \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}}$), que, embora desprezado neste trabalho, pode influenciar de forma mais significativa em casos específicos. Já a segunda se deve ao fato de que, quando o corpo é deformado, o gradiente da temperatura é modificado, alterando o fluxo de calor pela lei de Fourier. Esse último fato normalmente é desconsiderado na termo-elasticidade linear, pois a variação é desprezível em problemas de pequenas deformações. No entanto, como este trabalho trata de problemas em grandes deformações, cuidados maiores são tomados nesse sentido.

O acoplamento termo-mecânico podem ser resolvido numericamente de duas formas: monolítica e particionada. No acoplamento monolítico, as incógnitas do problema térmico e do problema mecânico (temperaturas e posições) são resolvidas conjuntamente em um sistema único. Nesse caso, apenas um processo iterativo é necessário, porém, para garantir a convergência, a linearização de ambas as equações governantes deve ser feita com relação à ambos os parâmetros nodais (temperaturas e posições), o que pode resultar em equações relativamente mais complexas e sistemas não-simétricos.

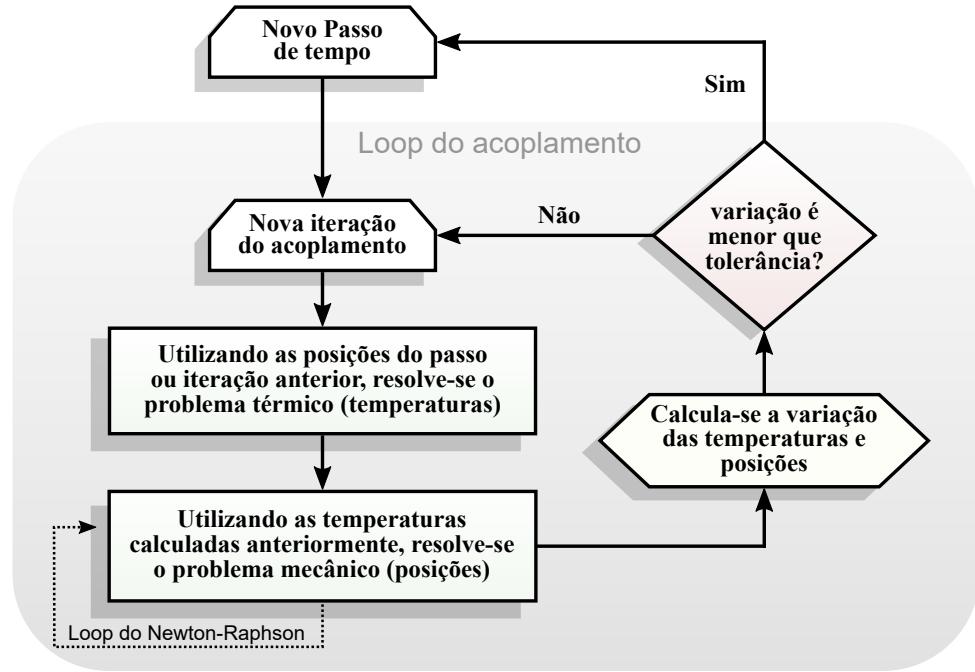
Já no acoplamento particionado, os problemas térmico e mecânico são resolvidos isoladamente, com trocas de informação feitas de forma explícita ou implícita durante o processo de solução dos sistemas. Na forma explícita, também chamada de acoplamento fraco, a troca de informações é feita apenas uma vez em cada passo de tempo, isto é, resolve-se o problema térmico com as posições do passo anterior, em seguida resolve-se o problema mecânico com as temperaturas previamente calculadas, e parte-se para o próximo passo de tempo. Já na forma implícita, também chamada de acoplamento forte, ou método bloco-iterativo, esse procedimento é realizado a cada iteração do procedimento de solução dos sistemas não lineares, dentro do mesmo passo de tempo, até que a variação das temperaturas e posições sejam menores que uma tolerância pré-estabelecida.

Neste trabalho, aplica-se o acoplamento particionado forte por ter uma implementação mais simples quando comparado ao monolítico e produzir resultados mais confiáveis quando comparado ao particionado fraco. Na [Figura 8](#) é apresentado um fluxograma resumido do processo bloco-iterativo adotado.

4.6 Exemplos numéricos

Nesta seção, são apresentados exemplos numéricos de termo-elasticidade com o intuito de verificar o código desenvolvido e comparar os diferentes modelos propostos. Embora a formulação de elementos finitos implementada conte com o caso tridimensional, por simplicidade e menor custo computacional, apenas problemas bidimensionais foram considerados nesta seção. Dessa forma, assume-se que as temperaturas são constantes ao longo do terceiro eixo, e toma-se espessura unitária em todos os exemplos.

Com relação ao modelo constitutivo mecânico, aplicam-se os estados planos de tensão e de deformação, conforme discutidos na [subseção 2.3.3](#). O EPD neste caso é considerado a partir das deformações totais ao invés das deformações elásticas, isto é, toma-se $E_{33} = 0$.

Figura 8 – Esquema de acoplamento bloco-iterativo para o problema termo-elástico

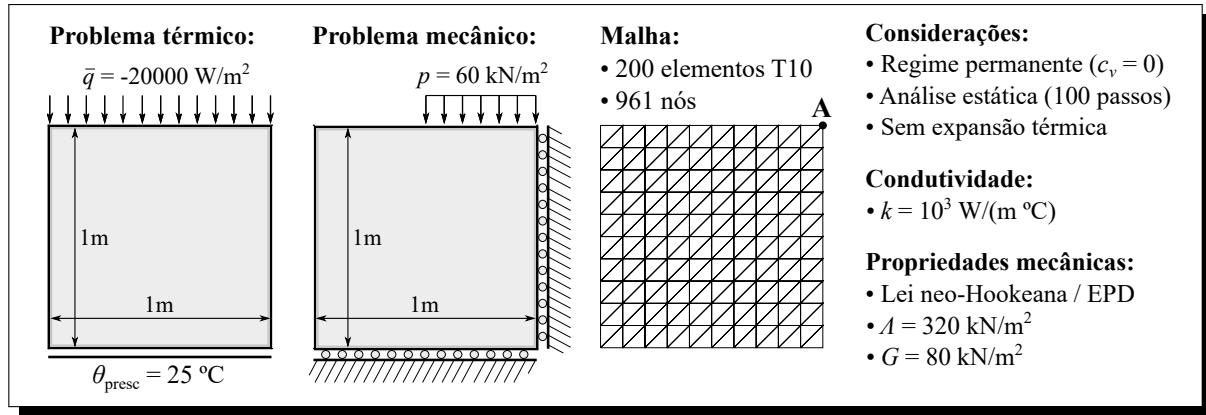
Isso implica, para o caso da decomposição aditiva, que $(E_e)_{33} = -(E_\theta)_{33}$ e, para o caso da decomposição multiplicativa, que $(E_e)_{33} = -\lambda_\theta^{-2}(E_\theta)_{33}$. Com relação ao EPT, nenhuma consideração precisa ser feita além do que foi discutido na [subseção 2.3.3](#).

4.6.1 Cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos

Este exemplo é proposto com o intuito de verificar a influência dos carregamentos mecânicos sobre os campos térmicos em problemas com grandes deformações. Considera-se um cubo de dimensões unitárias composto por material sólido, submetido a um fluxo de calor uniforme na face superior, fluxo de calor nulo nas faces da esquerda e da direita e temperatura prescrita na face inferior, além de ser parcialmente carregado por uma força distribuída vertical uniforme na face superior, estando com o deslocamento na direção normal restrito tanto na face inferior quanto na face da direita, como mostra a [Figura 9](#) **verifique se o que eu escrevi está correto. Tente descrever melhor o problema no texto..** As propriedades físicas assim e a discretização espacial também são apresentadas na [Figura 9](#), sendo que os carregamentos térmicos são tomados constantes ao longo do tempo, enquanto o carregamento mecânico é incrementado à medida que avança o número de passos. Para que não haja influência do problema térmico no mecânico, desconsideram-se os efeitos da expansão térmica. Além disso, assume-se que o processo seja suficientemente lento para que o problema mecânico possa ser tratado por uma análise estática, e o problema térmico por um regime permanente (considerado no código tomando $c_e = 0$).

Caso sejam desconsiderados os efeitos mecânicos, pode-se facilmente resolver o problema térmico de forma analítica, aplicando de forma direta a lei de Fourier para obter a

Figura 9 – Dados do exemplo de cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos

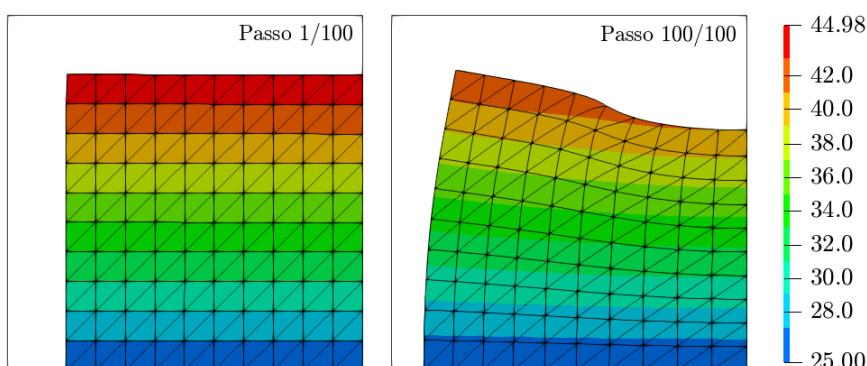


temperatura no topo do corpo (θ_{topo}):

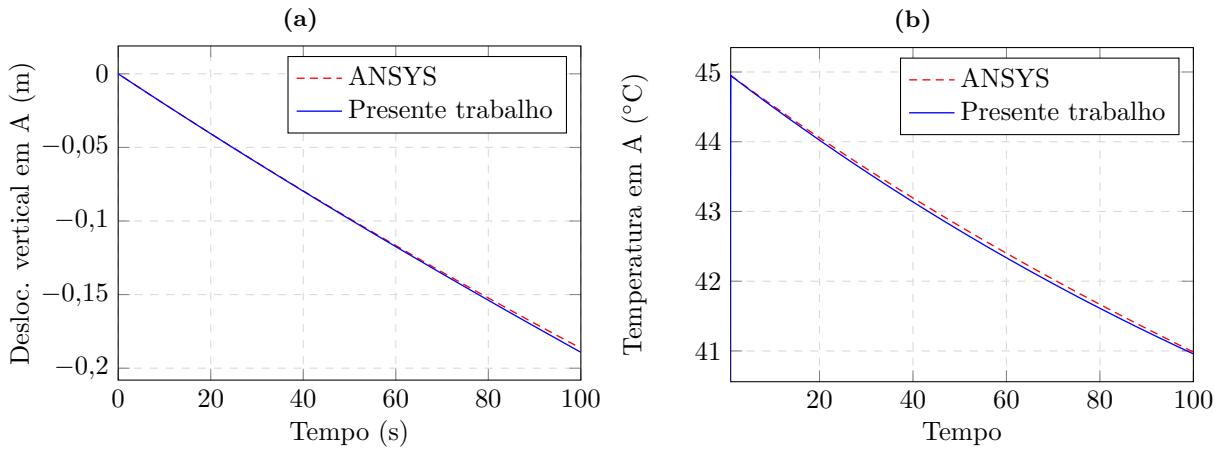
$$\bar{q} = -k \frac{(\theta_{\text{topo}} - \theta_{\text{presc}})}{h} \Rightarrow -20000 = -1000 \cdot (\theta_{\text{topo}} - 25) \Rightarrow \theta_{\text{topo}} = 45 \text{ }^{\circ}\text{C}. \quad (4.68)$$

Essa solução reflete de forma aproximada as temperaturas obtidas nos primeiros passos do problema, como pode ser visto nos resultados do primeiro passo, apresentados na [Figura 10](#). No entanto, ainda na [Figura 10](#), pode-se observar a variação no campo de temperatura do último passo, decorrente do surgimento de deformações modificando o gradiente de temperatura.

Figura 10 – Configuração deformada e campo de temperatura (em $^{\circ}\text{C}$) para o primeiro e último passo do carregamento mecânico

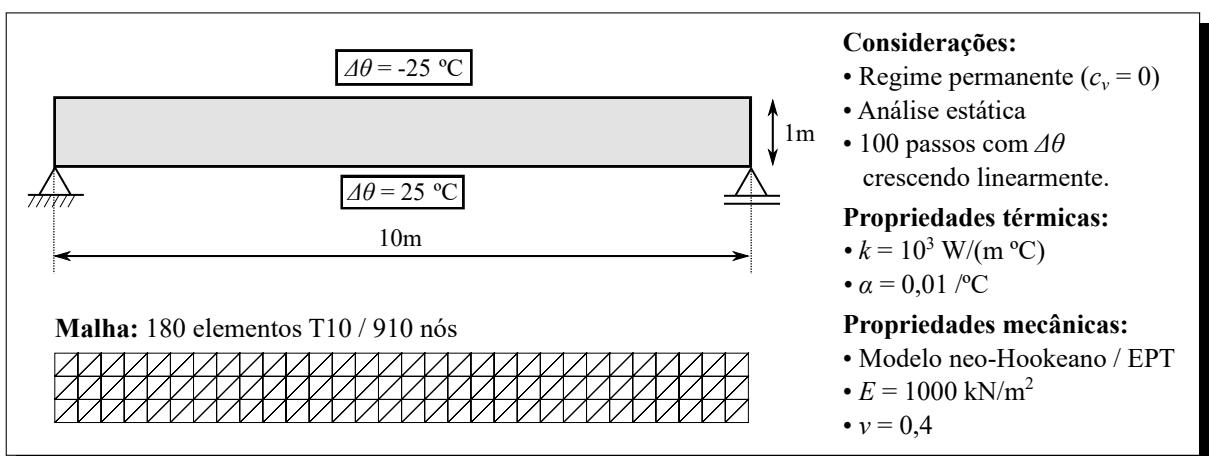


Na [Figura 11](#) são apresentados os gráficos de deslocamento vertical e temperatura no canto superior direito (ponto A) do corpo, onde são comparados com resultados obtidos por meio do *software* ANSYS, mostrando concordância satisfatória. Observa-se que a temperatura parte da solução puramente térmica esperada ($45 \text{ }^{\circ}\text{C}$) e varia conforme o nível de deformação aumenta, até um valor aproximadamente $41 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Essa variação é possível pois a constante de condutividade térmica foi tomada na sua forma Euleriana, ao invés da Lagrangiana, conforme comentado na [subseção 3.4.1](#).

Figura 11 – Deslocamento e temperatura vs. tempo no ponto A

4.6.2 Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura

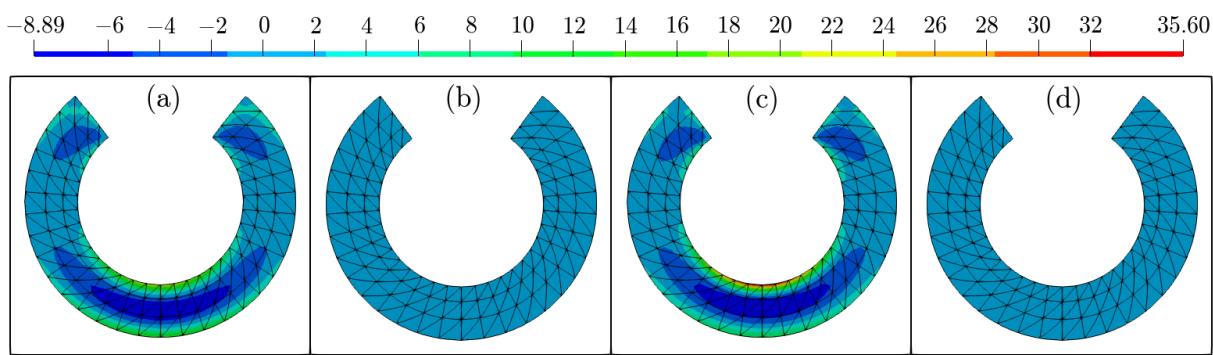
Neste exemplo, observa-se o efeito da expansão térmica e dos diferentes modelos constitutivos termo-elásticos no comportamento do corpo. Considera-se uma viga biapoiada sujeita à variação de temperatura negativa na borda superior e positiva na borda inferior, de forma que o efeito esperado seja de flexão, deslocando o centro do vão para baixo. Assume-se novamente análise estática e regime permanente, com as variações de temperatura sendo incrementadas a cada passo da análise. Ambas as decomposições, aditiva e multiplicativa, foram consideradas neste problema, e em cada uma foram adotadas as leis de expansão térmica linear e exponencial, totalizando quatro casos a serem analisados. Todos os dados do problema, incluindo geometria, condições de contorno, propriedades físicas e discretização, estão dispostos na [Figura 12](#).

Figura 12 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura

Por se tratar de uma viga isostática, sujeita apenas a carregamentos térmicos, sabe-se que as reações de apoio mecânicas devem ser nulas, assim como as componentes de tensão. No entanto, isso não impede que se manifestem tensões residuais no domínio da viga, decorrentes de incompatibilidades entre as deformações puramente térmicas e os

deslocamentos, que são compensadas com o surgimento de deformações elásticas. O que você quer dizer com residual nesse contexto? Deixe isso claro aqui. Na Figura 13, apresentase a componente σ_{11} das tensões de Cauchy para o último passo de tempo em cada um dos casos analisados. Observa-se que as tensões residuais são evidentes apenas nos casos onde foi adotada a lei de expansão térmica linear. Para a lei exponencial, as tensões obtidas (e, portanto, as deformações elásticas) são desprezíveis, demonstrando que essa permite uma mais adequada compatibilização das deformações puramente térmicas.

Figura 13 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decomp. aditiva com lei exponencial, (c) decomp. multiplicativa com lei linear e (d) decomp. multiplicativa com lei exponencial



precisa identificar o eixo 1 relativo a σ_{11} ! É tensão de Cauchy segundo o eixo horizontal (reto), ou segundo o eixo da viga deformado? Porque com a Lei linear surgem tensões? é só a componente 11 que fica diferente de zero? O mesmo vale para o próximo exemplo. Pelo fato de as deformações elásticas neste problema serem residuais, isto é, as deformações totais consistirem praticamente de suas parcelas térmicas, espera-se que não haja diferenças significativas entre as decomposições aditiva e multiplicativa. Essa expectativa é confirmada pelos resultados da Figura 14, onde são apresentados os gráficos de deslocamento e deformação na borda inferior do meio do vão. Embora diferenças entre as leis de expansão linear e exponencial sejam notáveis, especialmente na Figura 14(b), observa-se que em cada uma delas a escolha da decomposição de fato não manifesta um papel significativo. Mesmo no gráfico ampliado da Figura 14(a), só é possível observar diferenças mínimas para o caso da lei linear, onde as deformações residuais são maiores.

4.6.3 Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico

Com o intuito de aumentar a influência das deformações elásticas, o exemplo anterior é reformulado nesta subseção, sendo adicionado um carregamento mecânico distribuído ao longo do vão, e reduzidas as variações de temperatura. Os dados são apresentados na Figura 15.

Como consequência das deformações mecânicas decorrentes do carregamento aplicado, o campo das componentes horizontais de tensão deixa de ser residual e apresenta a disposição mostrada na Figura 16. Além disso, a própria configuração deformada diferencia-se do caso

Figura 14 – Gráficos de (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da deformação, calculados na borda inferior do meio do vão para o exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura

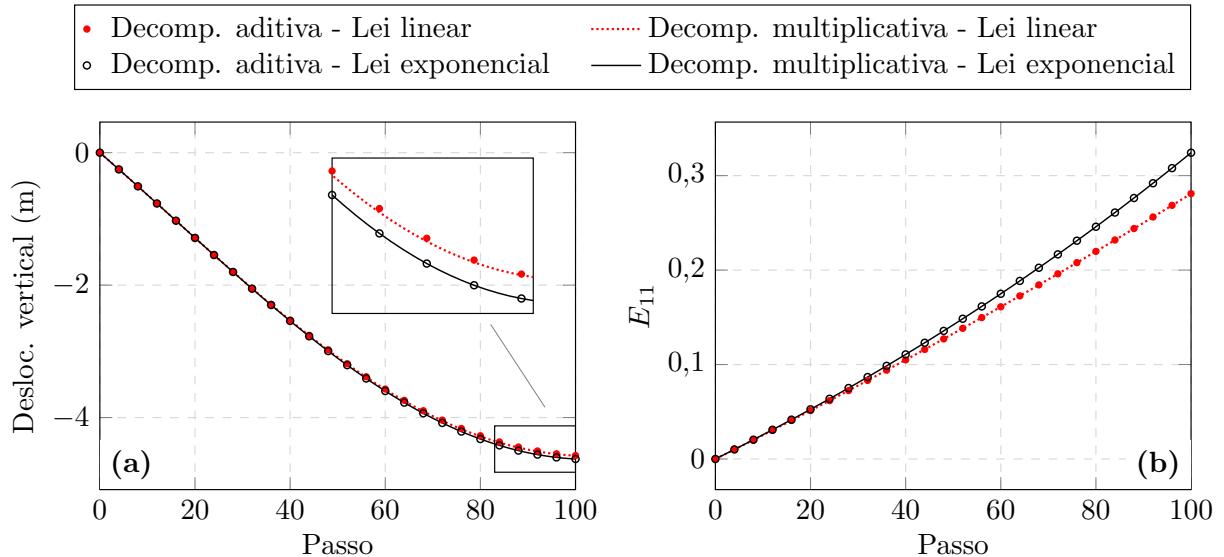
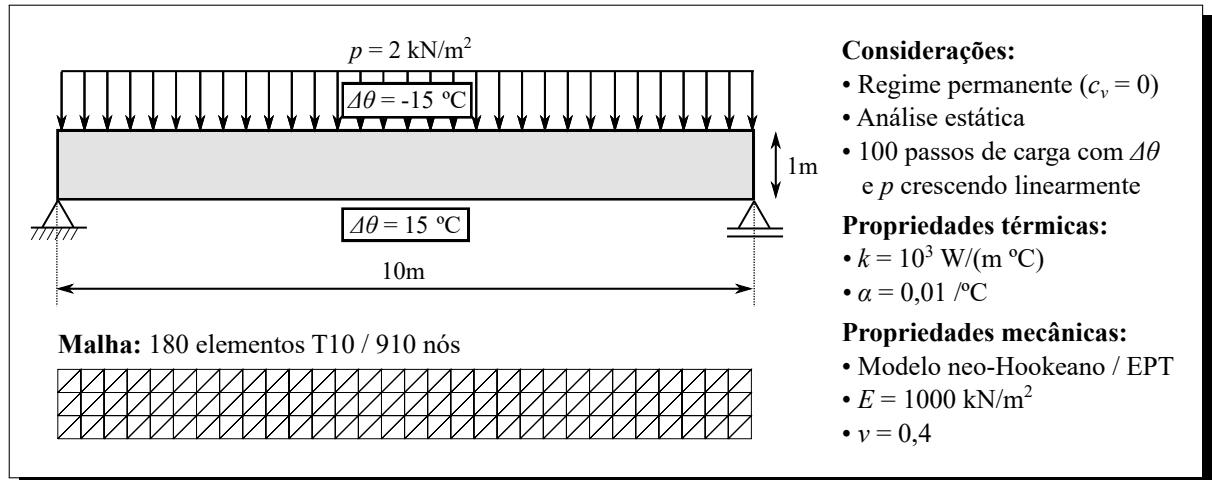


Figura 15 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico



anterior, apresentando um formato ligeiramente menos circular pelo fato de as deformações serem maiores no meio do vão.

Outra consequência do acréscimo nas deformações elásticas é a maior diferença entre as decomposições aditiva e multiplicativa, conforme atestado nos gráficos da Figura 17. De fato, ao contrário do caso sem carregamento mecânico, é notável a variação entre os valores obtidos para os dois tipos de decomposição, principalmente na Figura 17(b). No entanto, pelo fato de as deformações térmicas neste caso serem menores, as diferenças entre as leis de expansão térmica adotadas não são tão expressivas quanto as observadas no exemplo anterior.

Figura 16 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decompos. aditiva com lei exponencial, (c) decom. multiplicativa com lei linear e (d) decom. multiplicativa com lei exponencial

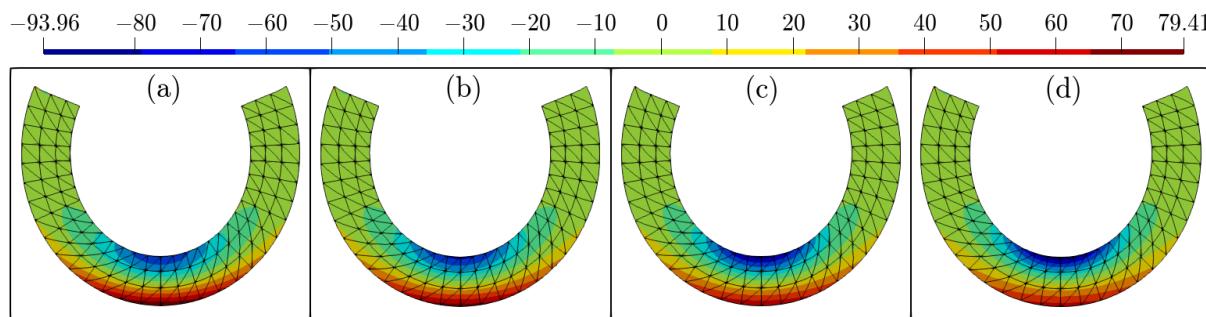
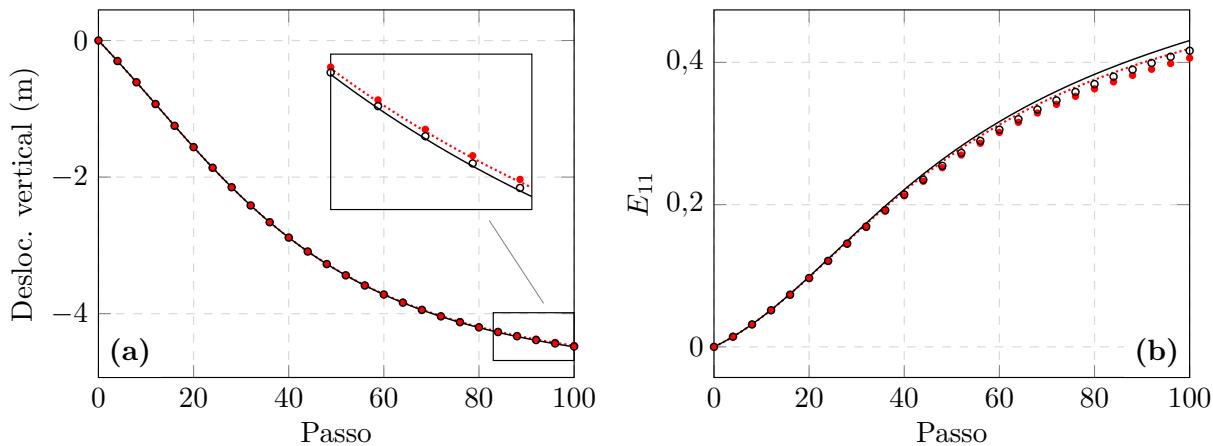


Figura 17 – Gráficos de (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da deformação, calculados na borda inferior do meio do vão para o exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento mecânico

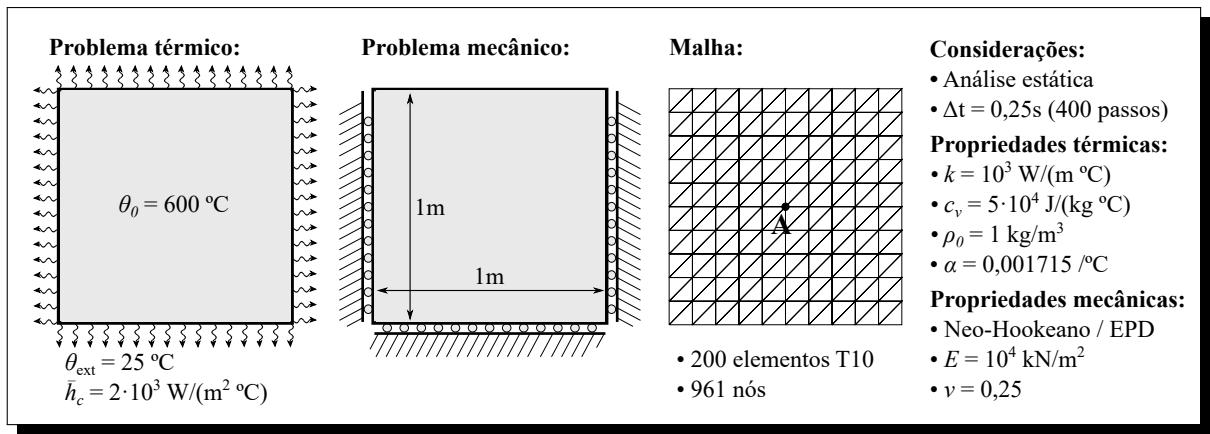
- | | |
|-------------------------------------|--|
| • Decomp. aditiva - Lei linear | Decomp. multiplicativa - Lei linear |
| ◦ Decomp. aditiva - Lei exponencial | — Decomp. multiplicativa - Lei exponencial |



4.6.4 Cubo sob deformações térmicas excessivas

Este exemplo é proposto para verificar a influência do modelo adotado em problemas de grandes deformações. Considera-se um cubo de dimensões unitárias previamente aquecido a uma temperatura de 600 °C, submetido a uma temperatura ambiente de 25 °C e condição de convecção em todas as faces. O coeficiente de expansão é escolhido de forma que essa variação de temperatura provoque um alto valor de contração térmica. No entanto, o corpo é restrito mecanicamente tanto em sua largura quanto em sua profundidade (EPD), de forma que a deformação seja livre apenas na direção vertical. O problema térmico é considerado transiente, com tempo máximo de análise 100 s, e $\Delta t = 0,25$ s. Já o problema mecânico é resolvido desprezando-se as parcelas dinâmicas (análise estática). Os demais dados do problema são dispostos na [Figura 18](#).

Novamente, são aplicados os modelos baseados nas decomposições aditiva e multiplicativa e as leis de expansão térmica linear e exponencial. Desses quatro combinações, o

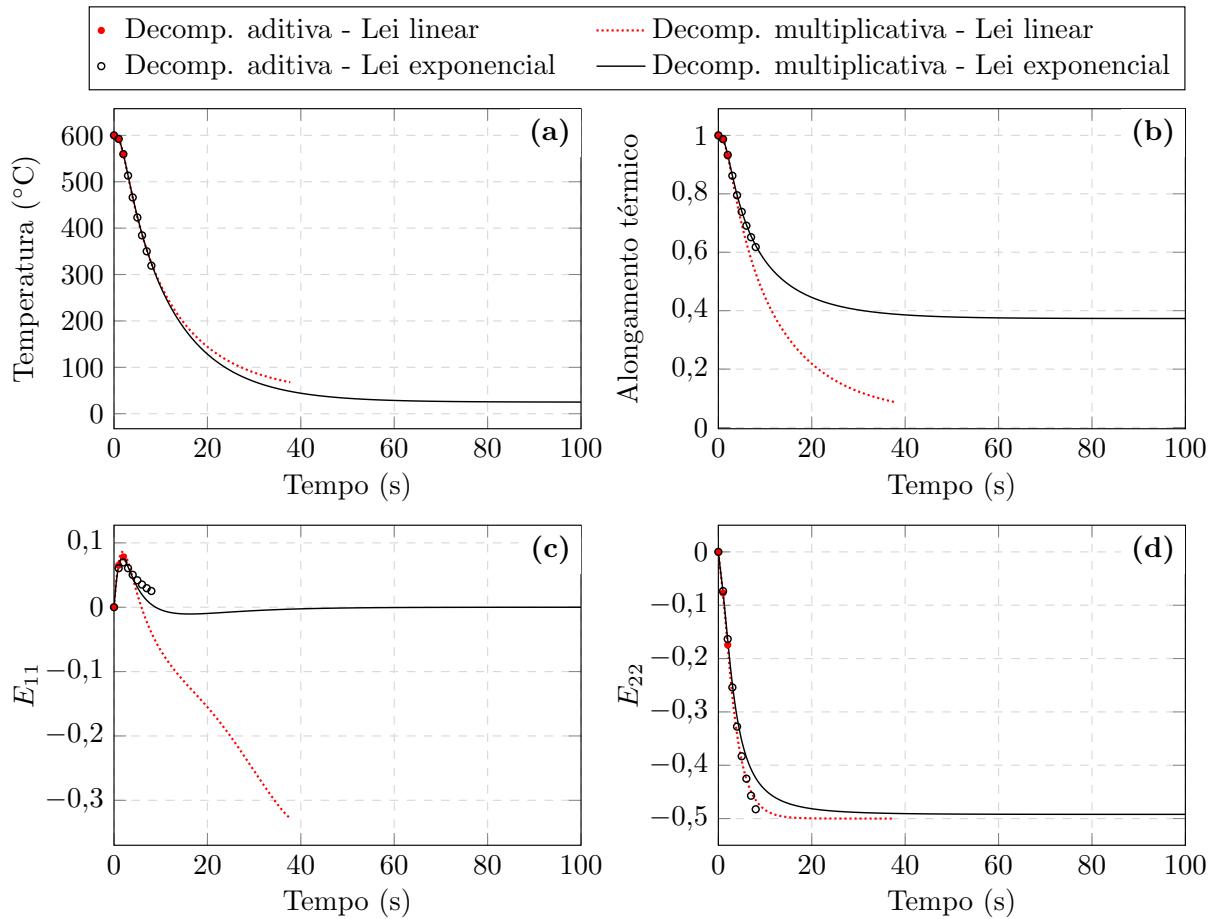
Figura 18 – Cubo sob deformações térmicas excessivas - Descrição do problema e da discretização

único modelo capaz de prosseguir até o final da análise foi o de decomposição multiplicativa com lei exponencial. Os demais apresentaram problema de inversão do material (Jacobiano negativo), devido às já mencionadas limitações quando submetidos a altos níveis de deformações compressivas. Para o caso de decomposição multiplicativa com lei de expansão térmica linear, houve erro de convergência **no processo iterativo de solução do sistema não linear?** no passo 151 ($t = 37,75\text{s}$); para o caso de decomposição aditiva com lei exponencial, no passo 34 ($t = 8,5\text{s}$); para o caso de decomposição aditiva com lei linear, no passo 11 ($t = 2,75\text{s}$).

Na [Figura 19](#) são apresentados os gráficos de temperatura, alongamento térmico, e componentes horizontal e vertical da deformação de Green-Lagrange (E_{11} e E_{22}), respectivamente, para o ponto central do corpo (ponto A da [Figura 18](#)). Embora as temperaturas tenham mantido aproximadamente o mesmo nível para os quatro casos, a influência da lei de expansão adotada é evidente na [Figura 19\(b\)](#): enquanto para a lei exponencial o alongamento mínimo fica estagnado em torno de 0,4, para lei linear observa-se uma tendência a valores próximos de 0, que seria o limite admissível para a inversão do material. Embora seja observado que esse valor limite não tenha sido atingido no ponto A, a interrupção do processamento indica que ele seja ultrapassado em outros pontos do domínio. Para o caso da decomposição aditiva com lei exponencial, a interrupção se dá muito antes que o valor limite de alongamento térmico seja alcançado no ponto A. No entanto, conforme pode ser observado na [Figura 19\(d\)](#), os valores de E_{22} tendem a ultrapassar $-0,5$, que é o valor mínimo admissível para a deformação de Green-Lagrange. Conclui-se portanto que, nesse caso, o problema de inversão do material se dá não apenas por conta da contração térmica, mas também pela resposta da parcela mecânica, que contribui para que os valores totais de deformação ultrapassem o limite. O mesmo pode ser inferido para o caso em que se utiliza decomposição aditiva e lei de expansão linear, porém, como deformações excessivas não são observadas nos gráficos da [Figura 19](#) para esse caso, conclui-se que a inversão do material não ocorre no ponto A, mas em outro ponto do domínio.

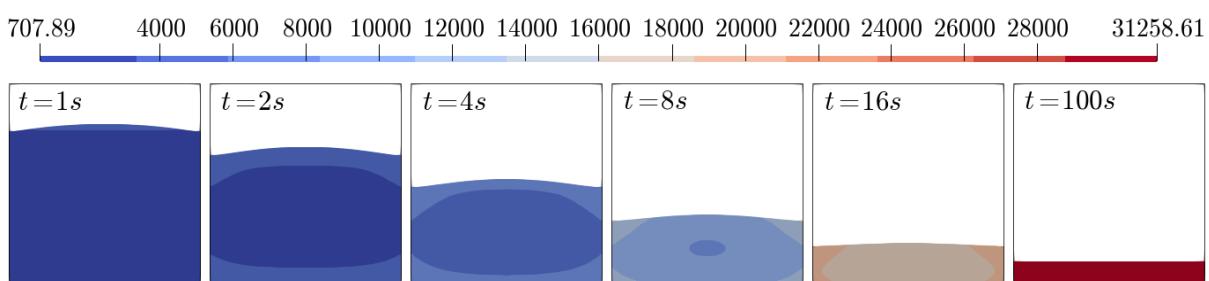
Na [Figura 20](#), são mostradas as configurações deformadas para diversos passos de

Figura 19 – Resultados para o ponto A vs. tempo - (a) temperatura, (b) alongamento térmico, e componentes (c) componentes E_{11} e (d) E_{22} de deformação de Green-Lagrange



tempo do problema, considerando o caso em que é utilizada a decomposição multiplicativa e lei de expansão térmica exponencial. Embora o alongamento térmico mínimo para esse caso seja em torno de 40%, conforme indicado na Figura 19(b), observa-se que a variação de altura é muito menor que 40% devido à contribuição da parcela mecânica de deformação que surge para compensar as restrições no sentido da largura e da profundidade. Ainda na Figura 20, são apresentadas no mapa de cores as componentes horizontais da tensão de Cauchy, manifestadas como consequência dessas deformações mecânicas.

Figura 20 – Tensão σ_{11} sobre a configuração deformada para o modelo baseado na decomposição multiplicativa e lei exponencial



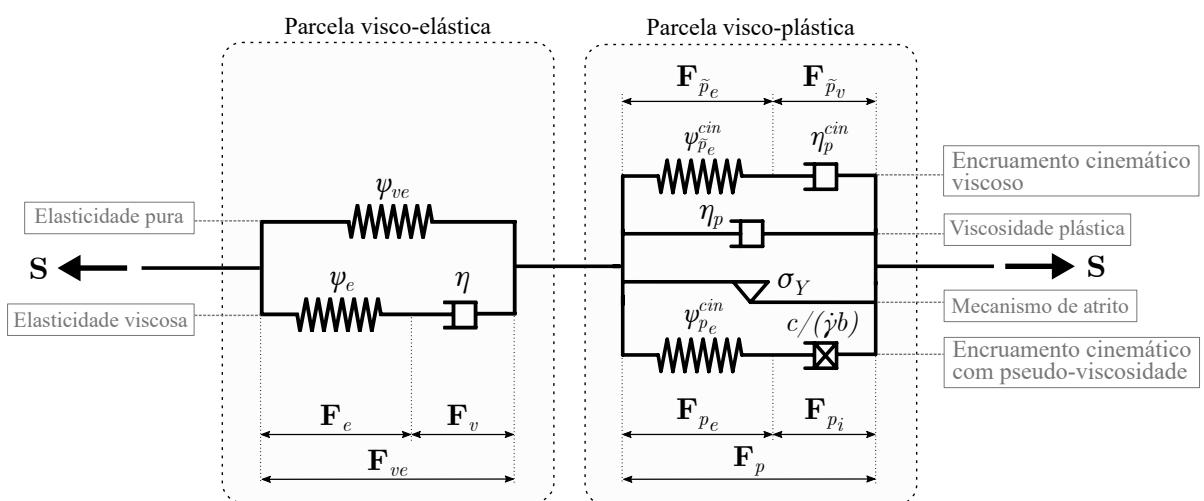
Capítulo 5

Modelo viscoelástico-viscoplástico

O modelo viscoelástico-viscoplástico apresentado neste trabalho é baseado no de ??), sendo adicionada uma parcela de encruamento cinemático viscoso a fim de contemplar a dependência temporal da rigidez plástica.

Assim, constrói-se o modelo reológico que serve como base para os desenvolvimentos desta seção, apresentado na Figura 21. Esse modelo consiste na associação em série de uma parcela viscoelástica, representada pelo modelo de Zener colocar referência e identificar na figura (Zener) abaixo de Parcila visco-elástica, e uma viscoplástica. A plasticidade é simbolizada por um mecanismo de atrito, e a viscoplasticidade é considerada pela associação em paralelo desse mecanismo de atrito com um pistão de viscosidade η_p . Além disso, baseado na proposta de ??), é possível decompor as deformações plásticas em parcelas “plásticas-elásticas” e “plásticas-inelásticas”, que representam, na micro-escala, as deformações induzidas por discordâncias e as deformações irreversíveis devidas a escorregamentos nos cristais, respectivamente. Com essa ideia, é possível incorporar no modelo a lei de encruamento cinemático de Armstrong-Frederick incluir citação, considerando que as parcelas plásticas-elásticas são representadas por uma mola com rigidez “ c ” e as parcelas

Figura 21 – Modelo reológico visco-elasto-plástico



Fonte: Adaptado de ??)

plásticas-inelásticas por um pistão com viscosidade “ $c/(\dot{\gamma}b)$ ”. Observa-se, no entanto, que esse pistão não evolui com o tempo, mas sim com o nível das deformação plástica, tratando-se portanto de uma pseudo-viscosidade. Dessa forma, considera-se associado em paralelo um modelo adicional de encruamento cinemático viscoso, onde a parcela de deformação plástica-inelástica é representada por um pistão de viscosidade η_p^{cin} variável no tempo.

A adição do encruamento cinemático viscoso permite que o modelo apresentado seja aplicado com precisão ao material politetrafluoretileno (PTFE), cujos resultados experimentais mostram uma notável dependência das taxas de deformação sobre a rigidez plástica. Isso é demonstrado na [seção 5.7](#), após a descrição completa do modelo constitutivo.

5.1 Cinemática

Por ser aplicado a problemas com grandes deformações, utiliza-se neste modelo a decomposição multiplicativa como apresentada na [seção 4.3](#) aplicada ao caso termo-elástico. Nesse contexto, o gradiente da função mudança de configuração é expresso como:

Sugiro colocar deformação no singular sempre que estiver se referindo a um único caso ou ao modelo reológico. As componentes do tensor são componentes da medida de deformação e não das deformações... O mesmo se aplica a tensão. Assim, fica no plural só quando for genérico (ex.: grandes deformações, tensões elevadas... Não vou modificar mais isso daqui pra frente, fica por sua conta se você preferir assim.)

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{ve}\mathbf{F}_p. \quad (5.1)$$

onde \mathbf{F}_{ve} corresponde à parcela viscoelástica de deformação, e \mathbf{F}_p denota a parcela plástica, ou viscoplástica. Além disso, baseado no modelo reológico adotado, as deformações viscoelásticas podem ser decompostas em parcelas elásticas (\mathbf{F}_e) e viscósas (\mathbf{F}_v), isto é,

$$\mathbf{F}_{ve} = \mathbf{F}_e\mathbf{F}_v, \quad (5.2)$$

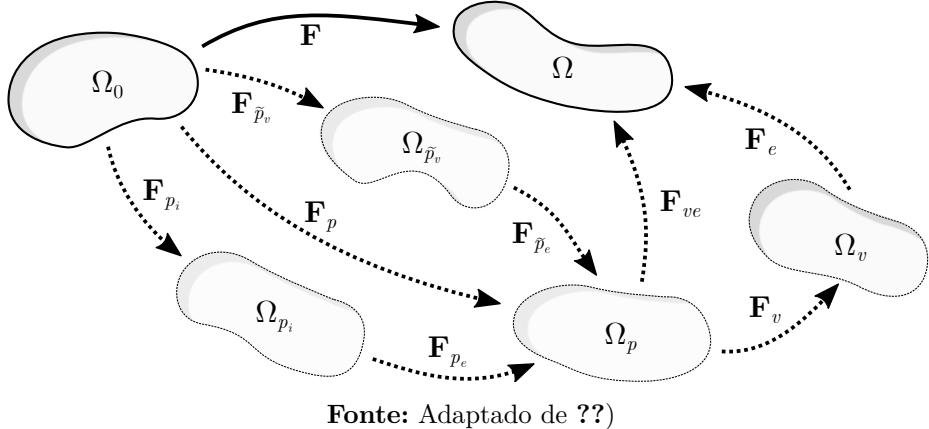
e as deformações plásticas podem ser decompostas em parcelas plásticas-elásticas e plásticas-inelásticas, conforme comentado anteriormente, de duas formas:

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{pe}\mathbf{F}_{pi} = \mathbf{F}_{\tilde{p}e}\mathbf{F}_{\tilde{p}i}, \quad (5.3)$$

onde a primeira decomposição é utilizada para representar o encruamento cinemático pseudo-viscoso, e a segunda o encruamento cinemático viscoso. Conforme discutido na [seção 4.3](#), cada decomposição multiplicativa está associada a uma configuração intermediária do sólido. Na [Figura 22](#) essas configurações intermediárias são apresentadas de forma esquemática com os seus respectivos mapeamentos.

Para cada parcela apresentada do gradiente da função mudança de configuração, denotada de forma genérica por $\mathbf{F}_{(.)}$, pode-se definir tensores associados ao alongamento à direita de Cauchy-Green, $\mathbf{C}_{(.)}$, à deformação de Green-Lagrange, $\mathbf{E}_{(.)}$, à velocidade da mudança de configuração, $\mathbf{L}_{(.)}$, e à taxa de deformação de engenharia, $\mathbf{D}_{(.)}$, por expressões análogas às Eqs. [\(2.2\)](#), [\(2.3\)](#), [\(2.6\)](#) e [\(2.8\)](#), respectivamente.

Figura 22 – Configurações intermediárias para a decomposição multiplicativa aplicada ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico



5.2 Energia, tensão e dissipação

Com base na [Figura 21](#), é possível expressar a energia livre de Helmholtz do modelo constitutivo por meio das parcelas de energia armazenadas nas quatro molas apresentadas. Na parcela viscoelástica, essas parcelas são denotadas por ψ_{ve} e ψ_e , sendo a primeira associada às deformações viscoelásticas totais, e a segunda apenas às deformações elásticas. Para a parcela viscoplástica, temos as molas $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$, responsáveis pelo encruamento cinemático viscoso e pseudo-viscoso, respectivamente. Adicionalmente, a fim de representar o encruamento isotrópico, pode-se considerar uma energia armazenada ψ_p^{iso} , dependente apenas de um parâmetro de encruamento κ . Assim, a energia livre de Helmholtz pode ser escrita como:

$$\psi = \psi_{ve}(\mathbf{E}_{ve}) + \psi_e(\mathbf{E}_e) + \psi_{p_e}^{\text{cin}}(\mathbf{E}_{p_e}) + \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}(\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}) + \psi_p^{\text{iso}}(\kappa). \quad (5.4)$$

É importante ser dito que as parcelas de energia apresentadas são originalmente definidas nas suas respectivas configurações intermediárias. No entanto, como será visto posteriormente, as deformações inelásticas são isocóricas, isto é, preservam o volume da configuração inicial. Portanto, a quantidade de energia por unidade de volume nas configurações intermediárias é igual à quantidade de energia por unidade de volume na configuração inicial, permitindo que as parcelas ψ_{ve} , ψ_e , $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$ possam ser definidas sem que haja qualquer preocupação relacionada à conversão de volumes, ao contrário do caso termo-elástico ([seção 4.3](#)).

Propõe-se neste trabalho um modelo termodinamicamente consistente, isto é, cujas equações respeitem as leis da termodinâmica. Em particular, deve ser atendida a inequação de Clausius-Duhem, escrita para o caso isotérmico na Ineq. [\(3.22\)](#). Para isso, é necessário calcular taxa da energia livre de Helmholtz. Com base na Eq. [\(5.4\)](#), escreve-se:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \dot{\mathbf{E}}_{ve} + \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} : \dot{\mathbf{E}}_e + \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{p_e} + \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{\tilde{p}_e} + \frac{\partial \psi_p^{\text{iso}}}{\partial \kappa} \dot{\kappa}. \quad (5.5)$$

Utilizando-se as relações cinemáticas obtidas pela decomposição multiplicativa, acrescidas de manipulações algébricas na Eq. [\(5.5\)](#), discutidas com mais detalhes em ??), a

inequação de Clausius-Duhem pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & \left(\mathbf{S} - \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} - \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \left(\mathbf{C}_e \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \right) : \mathbf{L}_v \\ & + \left(\mathbf{C}_{ve} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} + \mathbf{F}_v^T \mathbf{C}_e \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} - \mathbf{F}_{p_e} \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} \mathbf{F}_{p_e}^T - \mathbf{F}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \mathbf{F}_{\tilde{p}_e}^T \right) : \mathbf{L}_p \quad (5.6) \\ & + \left(\mathbf{C}_{p_e} \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} \right) : \mathbf{L}_{p_i} + \left(\mathbf{C}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \right) : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v} - \frac{\partial \psi_p^{\text{iso}}}{\partial \kappa} \dot{\kappa} \geq 0. \end{aligned}$$

Conforme postulado por ??), a inequação acima deve ser válida para qualquer processo termodinâmico, isto é, qualquer valor de $\dot{\mathbf{E}}$. Dessa forma, para garantir a não-negatividade do primeiro termo da Ineq. (5.6), esse é igualado a zero. Isso implica que a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie deve ser dada por:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} + \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T}, \quad (5.7)$$

e a Ineq. (5.6) pode ser reescrita como:

$$d_{\text{int}} = \mathbf{M}_e : \mathbf{L}_v + \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}_p + \mathbf{M}_p : \mathbf{L}_{p_i} + \mathbf{M}_{\tilde{p}} : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v} + \sigma_\kappa \dot{\kappa} \geq 0, \quad (5.8)$$

onde

$$\sigma_\kappa = - \frac{\partial \psi_p^{\text{iso}}}{\partial \kappa}, \quad (5.9)$$

$\boldsymbol{\Sigma}$ é denominado tensão relativa, definido como:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{M}_{ve} + \mathbf{F}_v^T \mathbf{M}_e \mathbf{F}_v^{-T} - \mathbf{F}_{p_e} \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} \mathbf{F}_{p_e}^T - \mathbf{F}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \mathbf{F}_{\tilde{p}_e}^T, \quad (5.10)$$

e os demais tensores são definidos por

$$\mathbf{M}_e = \mathbf{C}_e \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e}, \quad \mathbf{M}_{ve} = \mathbf{C}_{ve} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}}, \quad \mathbf{M}_p = \mathbf{C}_{p_e} \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} \quad \text{e} \quad \mathbf{M}_{\tilde{p}} = \mathbf{C}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \quad (5.11)$$

sendo denominados tensores de Mandel, definidos nas suas respectivas configurações intermediárias. Para modelos isotrópicos, é possível verificar que os tensores de Mandel são simétricos ??). A partir da Ineq. (5.8), diz-se que $\boldsymbol{\Sigma}$ é a medida de tensão termodinamicamente conjugada à \mathbf{L}_p , sendo, portanto, utilizada para definir o critério de escoamento do modelo constitutivo.

5.3 Critério de escoamento e leis de evolução

Utiliza-se neste trabalho o critério de escoamento de von Mises, definido no presente contexto pela seguinte função:

$$\Phi = \|\boldsymbol{\Sigma}^D\| - \sqrt{\frac{2}{3}} (\sigma_Y - \sigma_\kappa), \quad (5.12)$$

onde σ_Y é a tensão de escoamento, e o sobrescrito $(\cdot)^D$ denota a parcela desviadora de um tensor. No caso de plasticidade independente de taxa (Explicar melhor: você quer dizer

no caso das parcelas viscosas associadas com o mecanismo de atrito serem nulas? A taxa a que você se refere é a taxa de deformação plástica? A parcela viscoelástica continua presente (dependente da taxa de deformação?), tem-se a condição $\Phi \leq 0$. Já no caso da viscoplasticidade, em particular no modelo de Perzyna

Para que a Ineq. (5.8) seja atendida, expressões adequadas devem ser escolhidas para \mathbf{L}_v , \mathbf{L}_p , \mathbf{L}_{p_i} , $\mathbf{L}_{\tilde{p}_v}$ e $\dot{\kappa}$, chamadas leis de evolução. Ainda, utilizando a relação $\mathbf{L}_{(\cdot)} = \dot{\mathbf{F}}_{(\cdot)} \mathbf{F}_{(\cdot)}^{-1}$, é possível escrever essas expressões utilizando as taxas de cada componente do gradiente da função mudança de configuração. Uma forma intuitiva de obter as leis de evolução é pelo princípio da máxima dissipação da energia, discutido com detalhes em ??). Para a lei de evolução viscosa, pode-se tomar

$$\mathbf{L}_v = \frac{1}{\eta} \mathbf{M}_e^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_v = \frac{1}{\eta} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v. \quad (5.13)$$

onde η é o parâmetro de viscosidade. Para a lei de evolução plástica, pode-se tomar

$$\mathbf{L}_p = \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_p = \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p \quad (5.14)$$

onde $\mathbf{N}_p = \boldsymbol{\Sigma}^D / \|\boldsymbol{\Sigma}^D\|$ é o tensor que controla a direção da evolução plástica e $\dot{\gamma}$ é o multiplicador plástico. Seguindo o modelo viscoplástico de ??), o multiplicador plástico é dado por $\dot{\gamma} = \langle \Theta \rangle / \eta_p$, onde η_p é o parâmetro de viscosidade plástica, $\langle \cdot \rangle$ denota o colchete de Macaulay, isto é, $\langle \Theta \rangle = (\Theta + |\Theta|)/2$, e Θ é denominada função das tensões excedentes (*overstress*), definida em função de Φ e escolhida de forma que seja contínua e convexa para $\Phi \geq 0$, e nula quando $\Phi = 0$. Neste trabalho, adota-se

$$\Theta = e^{\beta\Phi} - 1, \quad (5.15)$$

onde β é um parâmetro de calibração do material.

Para as parcelas de encruamento cinemático pseudo-viscoso e visoso, as leis de evolução são tomadas, respectivamente, como

$$\mathbf{L}_{p_i} = \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{p_i} = \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} \quad (5.16)$$

$$\mathbf{L}_{\tilde{p}_v} = \frac{1}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{\tilde{p}_v} = \frac{1}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}. \quad (5.17)$$

A Eq. (5.16) é uma generalização da lei de encruamento cinemático de Armstrong-Frederick para o caso de grandes deformações, sendo c a constante de rigidez plástica, e b um parâmetro adimensional. Observa-se que a Eq. (5.17) não depende do multiplicador plástico $\dot{\gamma}$, logo, mesmo tratando-se de uma variável plástica, o tensor $\mathbf{L}_{\tilde{p}_v}$ pode ser não-nulo ainda que o material não esteja em regime plástico.

Por fim, a lei de evolução do encruamento isotrópico é dada por:

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma}. \quad (5.18)$$

Para que o modelo apresentado seja termodinamicamente consistente, deve-se ainda garantir que este respeite a segunda lei da termodinâmica. Para isso, aplicam-se as Eqs. (5.13), (5.14) e (5.16) a (5.18) na Ineq. (5.8), de onde, utilizando a propriedade tensorial $\mathbf{A} : \mathbf{A}^D = \|\mathbf{A}^D\|^2$, resulta

$$d_{\text{int}} = \dot{\gamma}\|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \frac{1}{\eta}\|\mathbf{M}_e^D\|^2 + \dot{\gamma}\frac{b}{c}\|\mathbf{M}_p^D\|^2 + \frac{1}{\eta_p^{\text{cin}}}\|\mathbf{M}_{\tilde{p}}^D\|^2 + \sqrt{\frac{2}{3}}\dot{\gamma}\sigma_\kappa. \quad (5.19)$$

A partir do critério de escoamento, Eq. (5.12), tem-se que $\dot{\gamma}\|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \sqrt{\frac{2}{3}}\dot{\gamma}\sigma_\kappa = \dot{\gamma}\Phi + \sqrt{\frac{2}{3}}\dot{\gamma}\sigma_Y$, que é maior ou igual a zero dada a definição de $\dot{\gamma}$. Como todos os demais termos da Eq. (5.19) também são maiores ou iguais a zero, a condição $d_{\text{int}} \geq 0$ é satisfeita.

Utilizando um procedimento análogo ao apresentado em ??), é possível demonstrar que as leis de evolução adotadas garantem a propriedade da conservação do volume inelástico, ou seja, J_p , J_v , J_{p_i} e $J_{\tilde{p}_v}$ são unitários, onde $J_{(\cdot)} = \det \mathbf{F}_{(\cdot)}$ denota o determinante Jacobiano de cada parcela da deformação.

5.4 Solução numérica

A integração temporal das leis de evolução é realizada neste trabalho pelo método implícito de Euler, também chamado neste contexto de algoritmo de retorno radial. Aplicando esse método às Eqs. (5.13), (5.14) e (5.16) a (5.18) escreve-se as formas discretas no tempo:

$$\mathbf{R}_v = \mathbf{F}_v - \mathbf{F}_v^{\text{ant}} - \frac{\Delta t}{\eta} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v = \mathbf{0}, \quad (5.20)$$

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{F}_p - \mathbf{F}_p^{\text{ant}} - \Delta\gamma \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = \mathbf{0}, \quad (5.21)$$

$$\mathbf{R}_{p_i} = \mathbf{F}_{p_i} - \mathbf{F}_{p_i}^{\text{ant}} - \Delta\gamma \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} = \mathbf{0}, \quad (5.22)$$

$$\mathbf{R}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} - \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{\text{ant}} - \frac{\Delta t}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{0}, \quad (5.23)$$

$$R_\kappa = \kappa - \kappa^{\text{ant}} - \Delta\gamma \sqrt{\frac{2}{3}} = 0, \quad (5.24)$$

onde \mathbf{R}_v , \mathbf{R}_p , \mathbf{R}_{p_i} , $\mathbf{R}_{\tilde{p}_v}$ e R_κ são os resíduos do sistema não-linear, os termos com índice sobrescrito $(\cdot)^{\text{ant}}$ são tomados no instante anterior do passo de tempo, enquanto os demais termos são tomados no instante atual, sendo Δt o intervalo do passo de tempo, e $\Delta\gamma = \dot{\gamma}\Delta t$.

Nos passos de tempo onde ocorre plastificação, adiciona-se ainda a condição de consistência. Para materiais com plasticidade independente de taxa, tem-se:

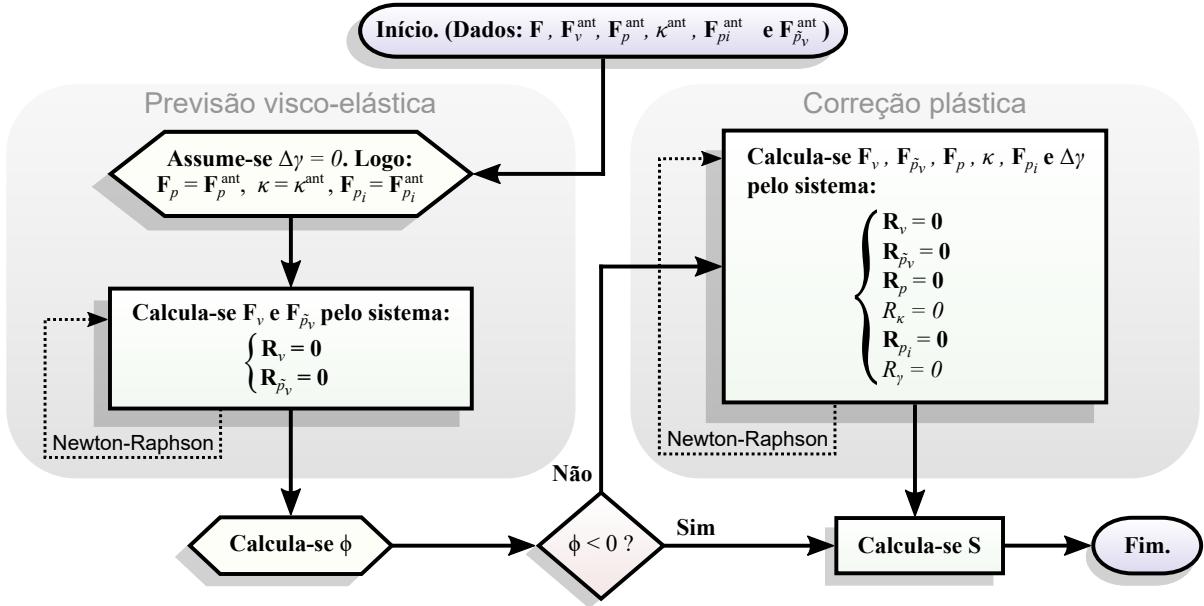
$$R_\gamma = \Phi = 0. \quad (5.25)$$

Já para materiais viscoplásticos com modelo de Perzyna, essa condição é substituída por:

$$R_\gamma = \Delta\gamma - \Delta t \frac{\langle \Theta \rangle}{\eta_p} = 0. \quad (5.26)$$

O algoritmo desenvolvido baseia-se em etapas de previsão e correção, apresentado em forma de fluxograma na [Figura 23](#). Deve ser mencionado que o método implícito de Euler provoca erros numéricos na propriedade da conservação do volume inelástico (????), e, portanto, requer um passo de tempo suficientemente pequeno grande para evitar discrepâncias, como pode ser visto nas análises realizadas em ??) e ??).

Figura 23 – Fluxograma do algoritmo previsão-correção para marcha no tempo



5.5 Operador tangente consistente

Para garantir convergência ótima da solução numérica com o modelo constitutivo não linear, o operador tangente consistente, representado pelo tensor de quarta ordem \mathfrak{C} , é definido de tal forma que:

$$\Delta \mathbf{S} = \mathfrak{C} : \Delta \mathbf{E} \quad (5.27)$$

onde $\Delta \mathbf{S}$ e $\Delta \mathbf{E}$ são, respectivamente, as variações no passo de tempo da tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e da deformação de Green-Lagrange.

Utilizando as relações cinemáticas descritas na Seção 5.1, é possível escrever \mathbf{S} apenas em função de \mathbf{E} , \mathbf{F}_v e \mathbf{F}_p . Assim, vale a seguinte aproximação de primeira ordem:

$$\Delta \mathbf{S} \approx \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p. \quad (5.28)$$

Para que a Eq. (5.28) possa ser associada à forma da Eq. (5.27), deve-se expressar $\Delta \mathbf{F}_v$ e $\Delta \mathbf{F}_p$ em termos de $\Delta \mathbf{E}$. Esse processo não é trivial, exigindo determinadas manipulações algébricas sobre as leis de evolução e de consistência.

No contexto numérico, a condição de consistência pode ser expressa como

$$\Delta \gamma \Delta R_\gamma = 0. \quad (5.29)$$

Essa condição implica que, caso o material esteja em regime plástico, e portanto $\Delta\gamma > 0$, ΔR_γ deve ser nulo. No caso viscoplastico, R_γ é dado pela Eq. (5.26). Dessa forma, o valor de ΔR_γ pode ser aproximado por:

$$\frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \kappa} \Delta \kappa + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{p_i}} : \Delta \mathbf{F}_{p_i} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \gamma} \Delta \gamma \approx 0. \quad (5.30)$$

Além disso, como \mathbf{R}_v e $\mathbf{R}_{\tilde{p}_v}$ devem ser nulos para todo passo de tempo, também deve ser válido que $\Delta \mathbf{R}_v = \mathbf{0}$ e $\Delta \mathbf{R}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{0}$. Tendo em vista que \mathbf{R}_v pode ser escrito apenas em termos de \mathbf{E} , \mathbf{F}_v e \mathbf{F}_p , e que $\mathbf{R}_{\tilde{p}_v}$ pode ser escrito apenas em termos de \mathbf{F}_p e $\mathbf{F}_{\tilde{p}_v}$, as seguintes aproximações podem ser aplicadas:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \approx \mathbf{0}, \quad \text{e} \quad (5.31)$$

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p + \frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} \approx \mathbf{0}, \quad (5.32)$$

de onde resulta:

$$\Delta \mathbf{F}_v \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \right), \quad \text{e} \quad (5.33)$$

$$\Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} \right)^{-1} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \right). \quad (5.34)$$

Aplicando-se as Eqs. (5.33) e (5.34) na Eq. (5.30), e substituindo as variações $\Delta \mathbf{F}_p$, $\Delta \kappa$ e $\Delta \mathbf{F}_{p_i}$ pelas leis de evolução discretizadas (5.21), (5.24) e (5.22), respectivamente, é possível reorganizar-la na forma

$$\mathbf{D}_\mathbf{E} : \Delta \mathbf{E} + D_\gamma \Delta \gamma \approx 0 \quad (5.35)$$

onde

$$\mathbf{D}_\mathbf{E} = \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}}, \quad \text{e} \quad (5.36)$$

$$D_\gamma = \left[\frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_p} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} \right] : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \\ + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \kappa} \sqrt{\frac{2}{3}} + \frac{b}{c} \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{p_i}} : (\mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i}) + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \gamma}. \quad (5.37)$$

Da Eq. (5.35), segue que

$$\Delta \gamma \approx \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}, \quad (5.38)$$

onde $\mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} = -\mathbf{D}_\mathbf{E}/D_\gamma$ é um tensor que pode ser interpretado, para passos de tempo suficientemente pequenos, como a derivada de γ com relação a \mathbf{E} . Assim, pela lei de evolução discretizada de \mathbf{F}_p , temos:

$$\Delta \mathbf{F}_p = \Delta \gamma \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p \approx (\mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}) \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = [(\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}}] : \Delta \mathbf{E}. \quad (5.39)$$

Aplicando a Eq. (5.39) na Eq. (5.33), temos:

$$\Delta \mathbf{F}_v \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} \right] : \Delta \mathbf{E}. \quad (5.40)$$

Finalmente, aplicando as Eqs. (5.39) e (5.40) na Eq. (5.28), e associando-a com a Eq. (5.27), podemos definir o operador tangente consistente do modelo viscoelástico-viscoplástico pela seguinte expressão:

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} \right] + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}}. \quad (5.41)$$

Vale ser destacado que a expressão acima é baseada em aproximações numéricas, sendo dependente da discretização temporal adotada. Logo, para garantir a convergência quadrática do método de Newton-Raphson, devem ser adotados valores suficientemente pequenos de variação temporal.

Por fim, deve-se considerar os passos de tempo nos quais não houve correção plástica, isto é, $\Delta\gamma = 0$. Nesses casos, temos $\mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} = \mathbf{0}$, logo a Eq. (5.41) pode ser simplificada para

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}}. \quad (5.42)$$

5.6 Definição da energia livre de Helmholtz

Para finalizar a descrição do modelo constitutivo, resta definir as expressões para cada parcela da energia livre de Helmholtz. Em geral, as parcelas ψ_{ve} , ψ_e , ψ_{pe}^{cin} e $\psi_{\tilde{p}e}^{\text{cin}}$ são dadas por leis hiperelásticas definidas em termos das medidas de deformação associadas, e a parcela ψ_p^{iso} é dada de acordo com a lei de encruamento isotrópico. Por ser aplicado a problemas de grandes deformações, as leis hiperelásticas neste trabalho utilizam o modelo neo-Hookeano, conforme descrito na subseção 2.3.2. Dessa forma, as parcelas ψ_{ve} e ψ_e são escritas como

$$\psi_{ve} = \frac{\Lambda}{2} (\ln J_{ve})^2 + G_{ve} (\text{tr } \mathbf{E}_{ve} - \ln J_{ve}), \quad \text{e} \quad (5.43)$$

$$\psi_e = G_e (\text{tr } \mathbf{E}_e - \ln J_e), \quad (5.44)$$

onde G_{ve} e G_e são os módulos de elasticidade transversais de cada componente, e Λ é a constante de Lamé. Observa-se que a parcela volumétrica, associada à Λ , é aplicada apenas na componente viscoelástica. Isso ocorre pois, pela propriedade da conservação do volume viscoso, devemos ter $J_{ve} = J_e$, logo seu efeito é independente da componente aplicada.

Para as parcelas ψ_{pe}^{cin} e $\psi_{\tilde{p}e}^{\text{cin}}$, a mesma lei neo-Hookeana é adotada. No entanto, levando em conta que $J_{pe} = J_{\tilde{p}e} = 1$, as suas parcelas volumétricas podem ser desconsideradas, logo as expressões são reduzidas para

$$\psi_{pe}^{\text{cin}} = \frac{c}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_{pe} - \ln J_{pe}), \quad \text{e} \quad (5.45)$$

$$\psi_{\tilde{p}e}^{\text{cin}} = \frac{\tilde{c}}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_{\tilde{p}e} - \ln J_{\tilde{p}e}), \quad (5.46)$$

onde c e \tilde{c} são os parâmetros de rigidez plástica para os encruamentos cinemáticos pseudo-viscoso e viscoso, respectivamente, sendo a primeira equivalente à constante c aplicada na Eq. (5.16) para a lei de evolução de Armstrong-Frederick. Por fim, toma-se $\psi_p^{\text{iso}} = 0$, isto é, desconsideram-se os efeitos do encruamento isotrópico nos exemplos apresentados.

5.7 Aplicação ao material politetrafluoretileno (PTFE)

O politetrafluoretileno (PTFE) é um material polimérico com aplicações nas mais diversas áreas, caracterizando-se por sua estabilidade térmica, alta resistência a impactos, baixo coeficiente de atrito e baixa reatividade química. Neste trabalho, foram utilizados os resultados experimentais de ??), onde foram realizados ensaios de tensão uniaxial com carregamento monotônico, relaxação e fluência. No primeiro, foram apresentadas as respostas para 5 diferentes taxas de deformação: $5 \cdot 10^{-6}$, 10^{-4} , 10^{-2} , 1 e 10^3 s^{-1} . Esses resultados são utilizados no presente trabalho para calibrar os parâmetros do modelo, desprezando-se apenas o caso com taxa 10^3 s^{-1} , por manifestar efeitos dinâmicos que podem comprometer a calibração. Já os ensaios de relaxação e fluência são utilizados neste trabalho para validação, sendo comparados com a resposta numérica do modelo calibrado. Foram utilizados em todos os casos corpos de prova cilíndricos de diâmetro 25,4 mm e comprimento 30,5 mm. É importante destacar que os todos os ensaios são feitos à compressão, em temperatura ambiente. Dessa forma, a caracterização mecânica do PTFE neste trabalho é limitada a essas condições.

5.7.1 Calibração dos parâmetros

Conforme mencionado anteriormente, a calibração dos parâmetros neste trabalho é feita com as respostas dos ensaios de carregamento monotônico para as taxas de deformação¹ $5 \cdot 10^{-6}$, 10^{-4} , 10^{-2} e 1 s^{-1} . Esses 4 casos são simulados numericamente com análises quase-estáticas, em 250 passos de tempo. O valor máximo de deformação considerado foi de 0,3321, resultando nos valores de Δt , da menor taxa para a maior, 265,68s, 13,284s, 0,13284s e 0,0013284s.

Na primeira etapa, são calibrados os parâmetros viscoelásticos Λ , G_e , G_{ve} e η , onde leva-se em consideração apenas os trechos iniciais das curvas. Uma vez definidos esses valores, parte-se para a calibração dos demais parâmetros, levando em conta os trechos em regime viscoplástico.

Para os trechos viscoelásticos, pode-se estimar valores de módulos de elasticidade a partir das tangentes das curvas experimentais. Já os coeficientes de Poisson não podem ser determinados com certeza a partir dos ensaios de ??), uma vez que não foram apresentados os resultados de deformações transversais. No entanto, baseado nos estudos de ??), esses foram arbitrados neste trabalho por valores entre 0,46 e 0,48.

Os parâmetros Λ e G_e podem então ser obtidos pela Eq. (2.30) a partir de um módulo

¹ A não ser que seja mencionado o contrário, os dados de deformação (e taxa de deformação) apresentados nesta seção referem-se à deformação linear de engenharia

de elasticidade E_e , e o parâmetro G_{ve} a partir de um módulo de elasticidade E_{ve} , onde os valores iniciais de E_e e E_{ve} são obtidos levando em conta as seguintes propriedades do modelo viscoelástico:

- Para períodos de tempo suficientemente grandes, o pistão de viscosidade η tende a dissipar a energia elástica ψ_e . Portanto, taxas de deformação menores estão associadas puramente à rigidez E_{ve} .
- Para períodos de tempo suficientemente pequenos, a dissipação do pistão de viscosidade η é desprezível, o que significa que ambas as parcelas ψ_e e ψ_{ve} agem em conjunto. Portanto, taxas de deformação maiores estão associadas à rigidez $E_{ve} + E_e$.

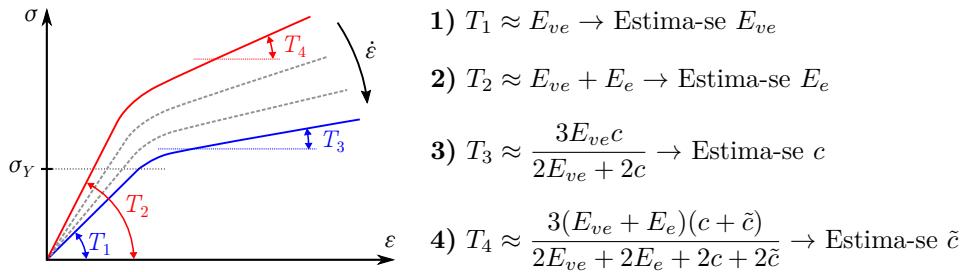
Nesta análise, a menor taxa de deformação considerada é $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, logo a rigidez E_{ve} estimada é tomada como sendo a tangente dessa curva. Já a rigidez $E_{ve} + E_e$ é tomada como sendo a tangente da curva com a maior taxa considerada, 1 s^{-1} , de onde pode-se extrair um valor estimado para E_e . Em seguida, os valores finais desses parâmetros, bem como de η , são modificados manualmente para um melhor ajuste das curvas.

Parte-se então para a calibração dos parâmetros viscoplásticos. O parâmetro σ_Y é aproximadamente a tensão de transição entre os trechos viscoelásticos e viscoplásticos, logo pode ser extraído diretamente do gráfico de tensão-deformação. Nesse sentido, utilizam-se como referência os gráficos de menores taxas de deformação, onde a resposta é mais próxima do caso elasto-plástico, e, portanto, o ponto de transição entre os regimes é mais claro. Já os parâmetros de rigidez plástica, c e \tilde{c} , podem ser estimados de forma análoga ao caso viscoelástico, levando em conta as seguintes propriedades do modelo:

- Para períodos de tempo suficientemente grandes, o pistão de viscosidade η_p^{cin} tende a dissipar a energia $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$. Portanto, em taxas de deformação menores, a rigidez plástica está associada puramente a c .
- Para períodos de tempo suficientemente pequenos, a dissipação do pistão de viscosidade η_p^{cin} é desprezível, o que significa que ambas as parcelas $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$ agem em conjunto contribuindo para a rigidez plástica. Portanto, em taxas de deformação maiores, a rigidez plástica está associada a $c + \tilde{c}$.

Sabe-se que a tangente da curva em regime elasto-plástico é dada aproximadamente por $EK/(E + K)$, onde E é o módulo de elasticidade e K é o módulo de plasticidade. O último pode ser calculado por uma equação análoga à (2.30), utilizando $G = c/2$ ou $G = (c + \tilde{c})/2$ e $\nu = 0,5$ (pela incompressibilidade do modelo plástico). Dessa forma, para as taxas menores temos $K = 3c/2$, e para as taxas maiores, $K = 3(c + \tilde{c})/2$. Novamente, considerou-se $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ como menor taxa, portanto o valor estimado de c é obtido igualando sua tangente a $3E_{ve}c/(2E_{ve} + 2c)$. Já a tangente da maior taxa, 1 s^{-1} , é igualada a $3(E_{ve} + E_e)(c + \tilde{c})/(2E_{ve} + 2E_e + 2c + 2\tilde{c})$, de onde obtem-se o valor estimado de \tilde{c} . O processo descrito de estimativa dos parâmetros é resumido na [Figura 24](#).

Figura 24 – Estimativa inicial dos parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico a partir das tangentes das curvas experimentais



Novamente, os valores finais de rigidez plástica, bem como os parâmetros b , η_p^{cin} , η_p e β , são calibrados manualmente. O parâmetro b está associado à evolução da rigidez plástica com o nível de deformação, e pode ser calibrado utilizando apenas o gráfico com menor taxa. Já a constante η_p^{cin} está associada à variação da rigidez plástica com relação às taxas de deformação, e as constantes η_p e β estão associadas à abertura da curva de transição entre os regimes viscoelásticos e viscoplásticos.

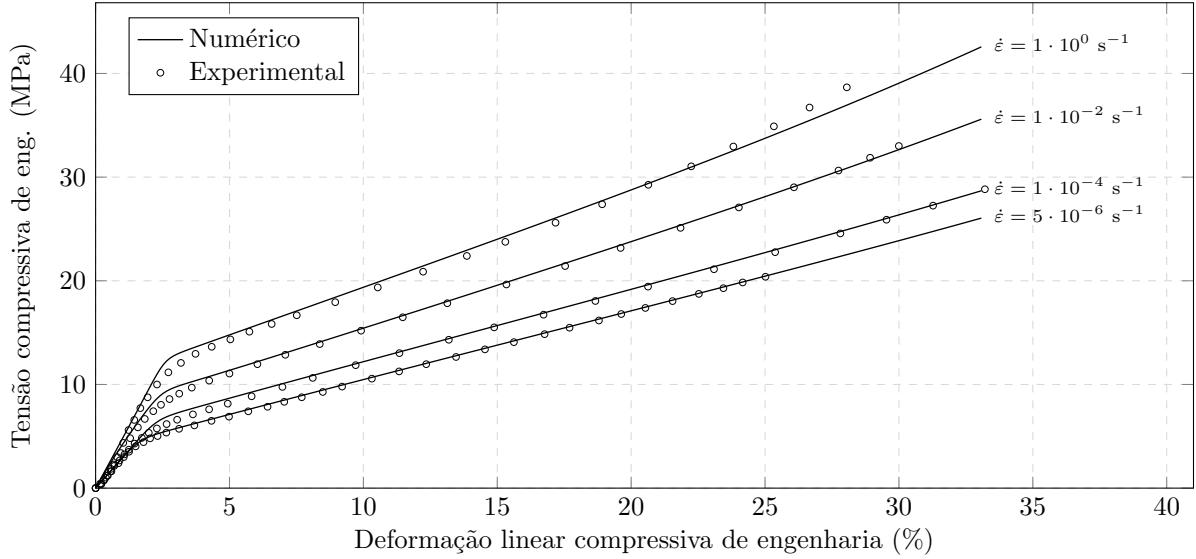
Os parâmetros calibrados são apresentados na [Tabela 1](#), sendo mostrados na [Figura 25](#) os gráficos comparativos do modelo experimental com o numérico calibrado. Nesse, apresentam-se os valores de deformação linear de engenharia por tensão nominal (ou tensão de engenharia), sendo essa última calculada neste caso pela expressão $\bar{\sigma}_{11} = J\sigma_{11}/F_{11} = F_{11}S_{11}$. Como é possível observar, o modelo apresentado foi capaz de representar satisfatoriamente o comportamento dos gráficos em diferentes taxas de deformação, com exceção das transições entre os trechos viscoelásticos e viscoplásticos nos casos de maiores taxas, onde não foi possível acomodar a abertura das curvas numéricas com as experimentais, indicando uma possibilidade de melhoria no modelo viscoplástico.

Tabela 1 – parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico calibrados para o material politetrafluoretileno

| Parâmetros viscoelásticos | | | |
|-------------------------------|----------------|---------------|-------------------|
| Λ (MPa) | G_{ve} (MPa) | G_e (MPa) | η (MPa·s) |
| 1866.89 | 97.98 | 64.2614 | 172.37 |
| Parâmetros viscoplásticos | | | |
| σ_Y (MPa) | c (MPa) | b | \tilde{c} (MPa) |
| 2.41 | 51.71 | 4 | 8.27 |
| η_p^{cin} (MPa·s) | η_p (s) | β (MPa) | |
| 172.37 | $9 \cdot 10^6$ | 2 | |

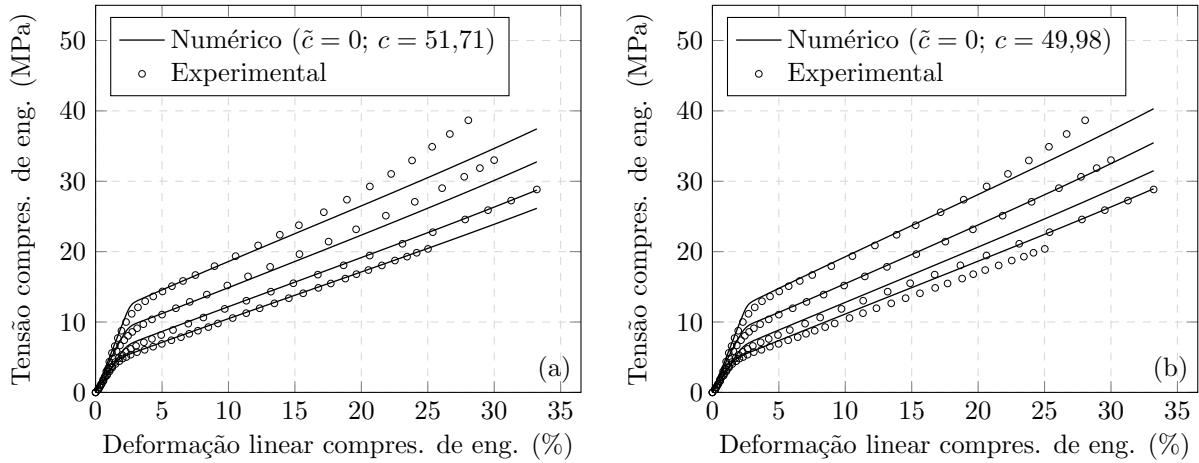
Adicionalmente, para demonstrar a influência da parcela de encruamento cinemático viscoso na representação do comportamento constitutivo, apresenta-se na [Figura 26](#) os resultados do ensaio de carregamento monotônico para $\tilde{c} = 0$. Dois casos são considerados: no primeiro, o valor de c é mantido igual ao original (51,71 MPa), e no segundo ele é tomado como a soma dos valores originais de c e \tilde{c} (59,98 MPa). Em ambos os casos, nota-se que a resposta numérica não condiz com o comportamento esperado, indicando que o modelo de Armstrong-Frederick não é capaz de representar isoladamente a dependência

Figura 25 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico em material politetrafluoretileno



temporal da rigidez plástica. De fato, pode ser observado que, em cada caso, a rigidez plástica é aproximadamente a mesma para todas as taxas de deformação, adaptando-se apenas às menores taxas no primeiro caso, e às maiores taxas no segundo. Esses resultados sugerem que um componente viscoso de encruamento cinemático, ou qualquer formulação com efeito equivalente, é necessária para simular a resposta constitutiva do PTFE.

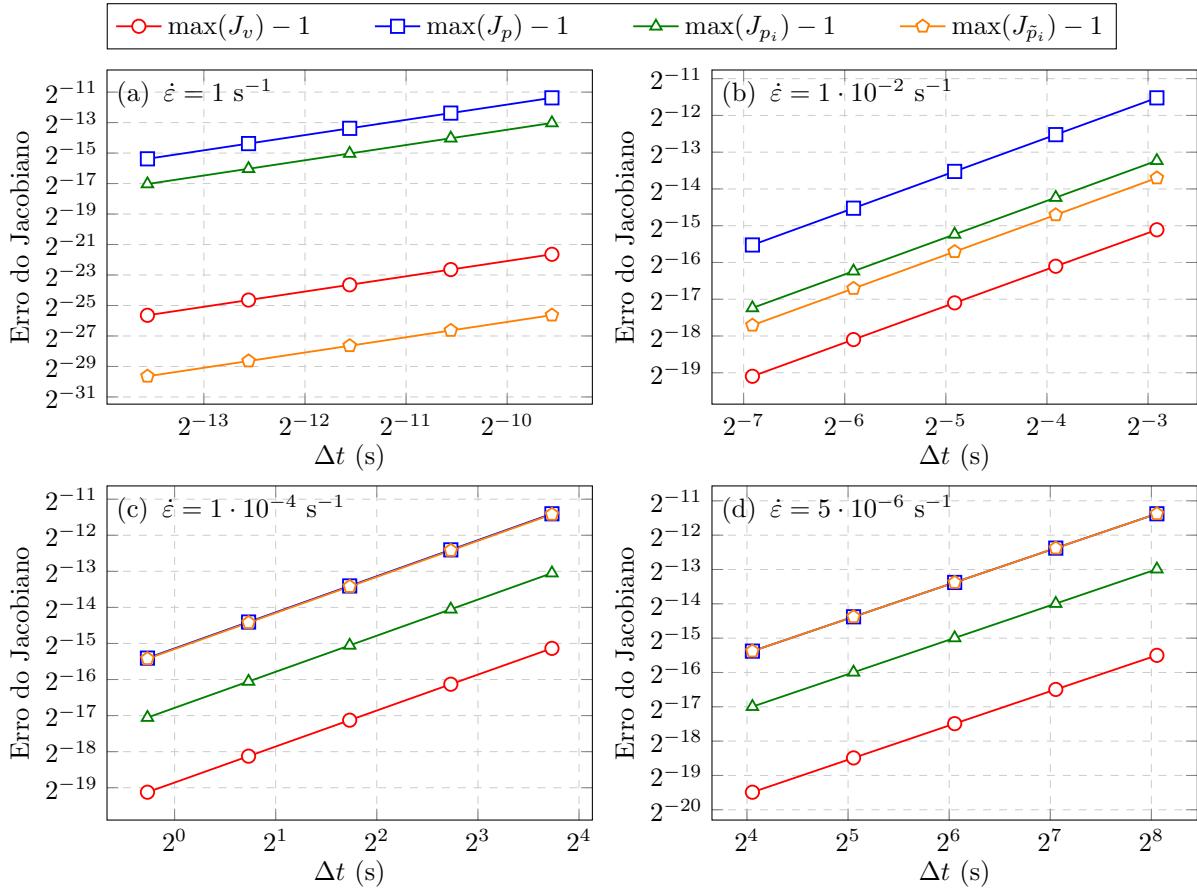
Figura 26 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico, desconsiderando o encruamento cinemático viscoso (isto é, $\tilde{c} = 0$), com (a) $c = 51,71$ MPa e (b) $c = 59,98$ MPa



Neste mesmo exemplo, considerando os parâmetros originais, realiza-se uma análise da propriedade da conservação do volume inelástico. Na [Figura 27](#) são mostrados os erros dos jacobianos J_v , J_p , J_{p_i} e $J_{\tilde{p}_v}$ para as 4 diferentes taxas de deformação, com 5 diferentes valores de Δt . As inclinações das retas são, em todos os casos, próximas de 1, indicando convergência de primeira ordem. Dessa forma, o erro dos Jacobianos, causado pelo algoritmo de retorno de Euler conforme discutido na [seção 5.4](#), pode ser reduzido

pela metade ao dobrar o número de passos de tempo. É interessante observar que, para os casos com menores taxas de deformação, os erros de $J_{\tilde{p}_v}$ se tornam praticamente iguais aos de J_p , uma vez que a parcela viscosa de deformação plástica tende a se comportar de forma equivalente à parcela plástica em intervalos de tempo muito longos.

Figura 27 – Análise do Jacobiano



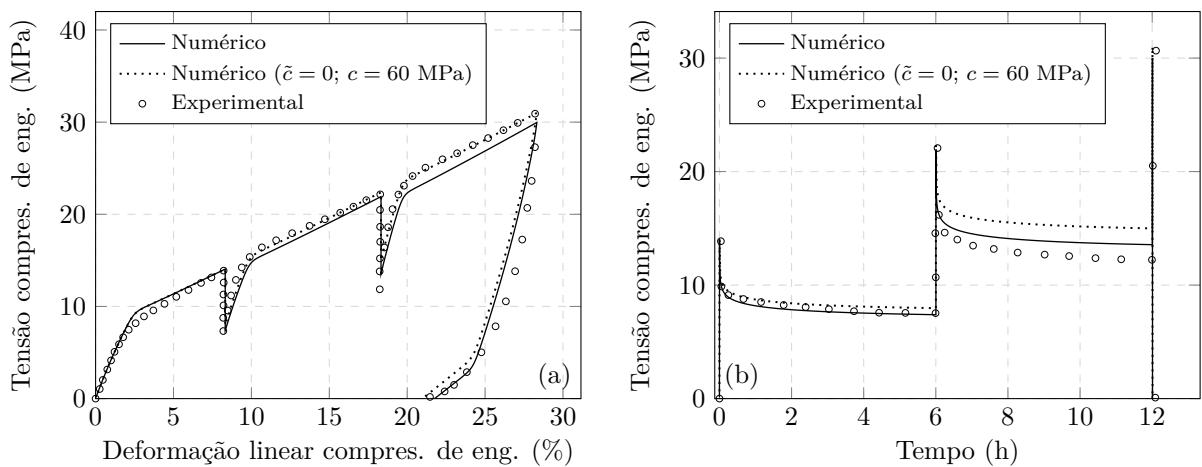
5.7.2 Ensaio de relaxação

O ensaio de relaxação apresentado em ??) é realizado em três etapas de carregamento, intercaladas por duas etapas de intervalo, e seguida de uma etapa de descarregamento. A taxa de deformação aplicada é $0,01\text{s}^{-1}$, tanto nas etapas de carregamento quanto na de descarregamento. Nas etapas de intervalo, as deformações são mantidas fixas por 6h, nos valores de 0,0832 e 0,1832 para o primeiro e segundo intervalo, respectivamente. Para a solução numérica, consideram-se 4200 passos de tempo, sendo 300 para cada etapa de carregamento/descarregamento, e 1500 para cada etapa de intervalo. Dessa forma, o valor de Δt é variável ao longo da análise.

Na Figura 28 são mostrados os resultados dessa análise, e a comparação com a resposta experimental. Nota-se, em geral, uma boa concordância, especialmente para a primeira curva de relaxação da Figura 28(b), onde as respostas são praticamente indistinguíveis. No entanto, a partir da segunda fase de carregamento, observa-se uma queda nos valores

numéricos de tensão com relação aos experimentais. Esse problema pode ser atribuído à componente viscosa de encruamento cinemático, que continua evoluindo durante os intervalos, consequentemente reduzindo a rigidez plástica e a tensão de escoamento. Para investigar esse efeito de forma mais aprofundada, também são incluídos na Figura 28 os resultados numéricos sem encruamento cinemático viscoso, considerando $\tilde{c} = 0$ e $c = 60$ MPa. Verifica-se que, nesse caso, não há redução nos valores de tensão após os intervalos, e os resultados para o diagrama de tensão-deformação são excelentes. Apesar disso, é importante lembrar que o modelo sem encruamento cinemático viscoso é inconsistente com as demais taxas de deformação, sendo também inferior ao modelo original no diagrama de tensão ao longo do tempo.

Figura 28 – Gráficos de tensão compressiva de engenharia por (a) deformação linear compressiva de engenharia e (b) tempo, para o ensaio de relaxação com intervalos de 6h e $\dot{\varepsilon} = 0,01\text{s}^{-1}$.

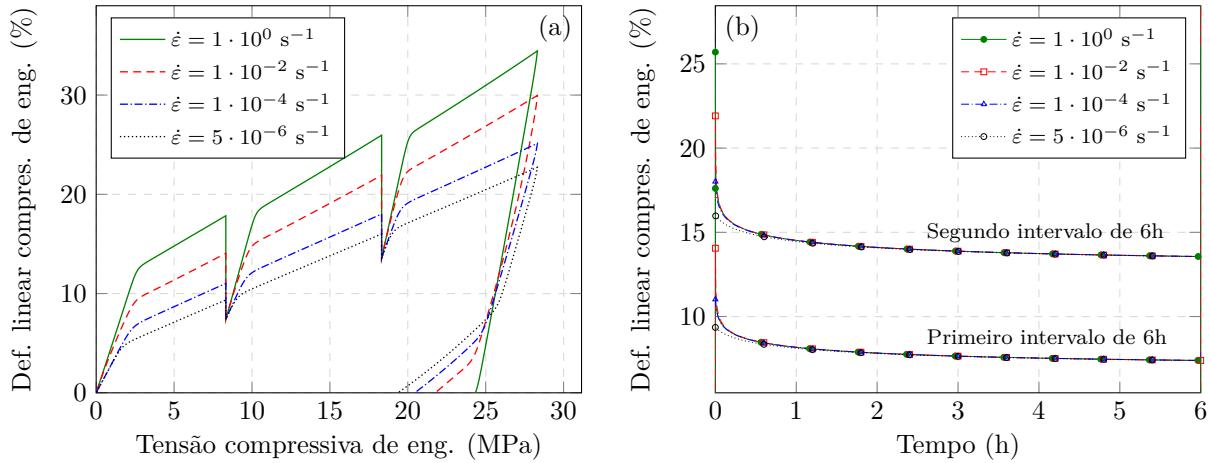


Em seguida, o mesmo exemplo é considerado utilizando diferentes taxas de deformação para cada etapa de carregamento e descarregamento. Os resultados numéricos dessa análise são mostrados na Figura 29. Na Figura 29(a) é possível ver que a redução no nível de tensão após cada intervalo de relaxação é notável apenas nos casos com maiores taxas, já que nesses há maior influência do encruamento cinemático viscoso. Com relação às curvas de relaxação, observa-se na Figura 29(b) que os valores dos quatro casos tendem a convergir para o mesmo valor (tensão de escoamento), assumindo comportamentos bem similares entre si já na primeira hora de intervalo.

5.7.3 Ensaio de fluênciа

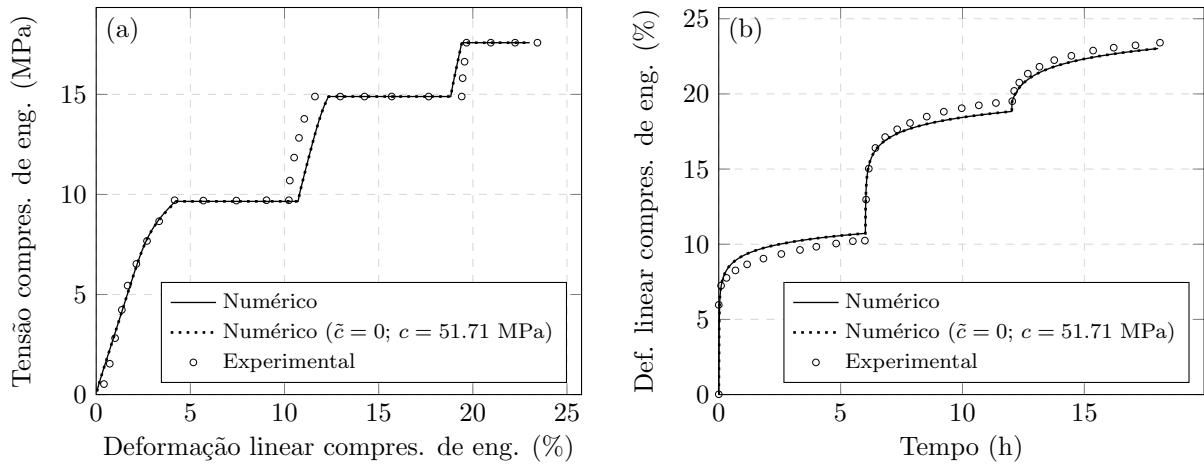
Neste caso, ao invés de deformação prescrita, aplica-se tensão de engenharia prescrita (ou força distribuída). Novamente, consideram-se três etapas de carregamento, cada uma seguida por uma etapa de intervalo, sendo utilizadas as mesmas discretizações temporais do exemplo anterior. Nas etapas de carregamento, aplica-se taxa de tensão de engenharia constante de $0,17557\text{ MPa/s}$. Nas etapas de intervalo, as tensões são mantidas fixas por 6h, nos valores de $9,653\text{ MPa}$, $14,892\text{ MPa}$ e $17,582\text{ MPa}$ para o primeiro, segundo e terceiro intervalo, respectivamente. Os resultados numéricos são comparados com os

Figura 29 – Gráficos de tensão de engenharia por (a) deformação linear de engenharia e (b) tempo, para o ensaio de relaxação com intervalos de 6h e taxas de deformação variáveis.



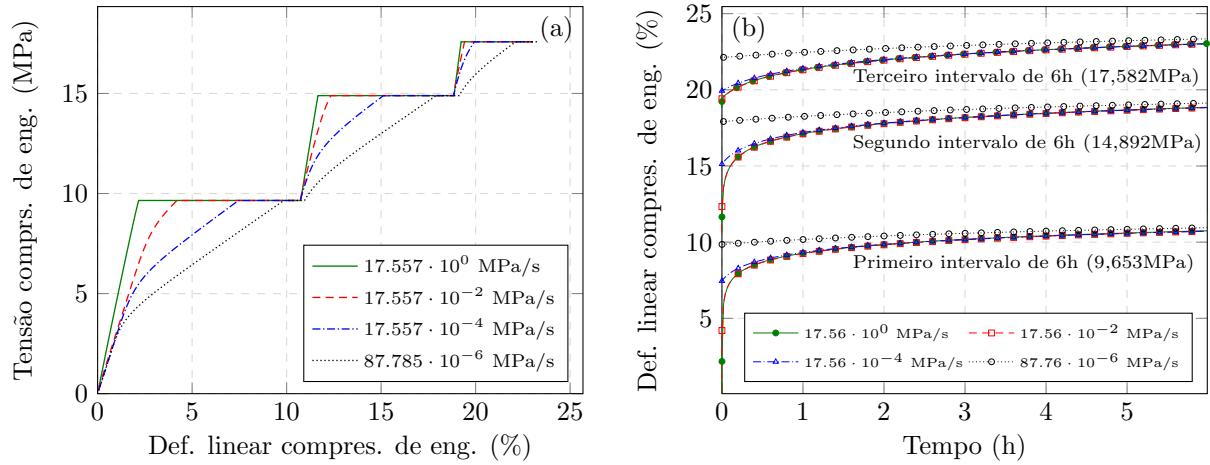
experimentais na [Figura 30](#), onde novamente pode ser vista uma conformação satisfatória das curvas, levando em conta as incertezas associadas. Além disso, observa-se que os resultados numéricos para o caso com $\tilde{c} = 0$ são equivalentes ao modelo original, indicando que o componente de encruamento cinemático viscoso não possui papel importante neste caso em particular.

Figura 30 – Gráficos de (a) tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6h e taxa de tensão de 0,1755 MPa/s.



Adicionalmente, na [Figura 31](#) são mostrados os resultados do ensaio de fluência considerando diferentes taxas de tensão durante as etapas de carregamento e descarregamento. Como esperado, o valor médio de deformação aumenta com a taxa de tensão. Para as curvas de fluência, embora as deformações tendam aproximadamente ao mesmo valor, observa-se que os trechos intermediários são mais distintos entre si quando comparados com as curvas de relaxação do exemplo anterior.

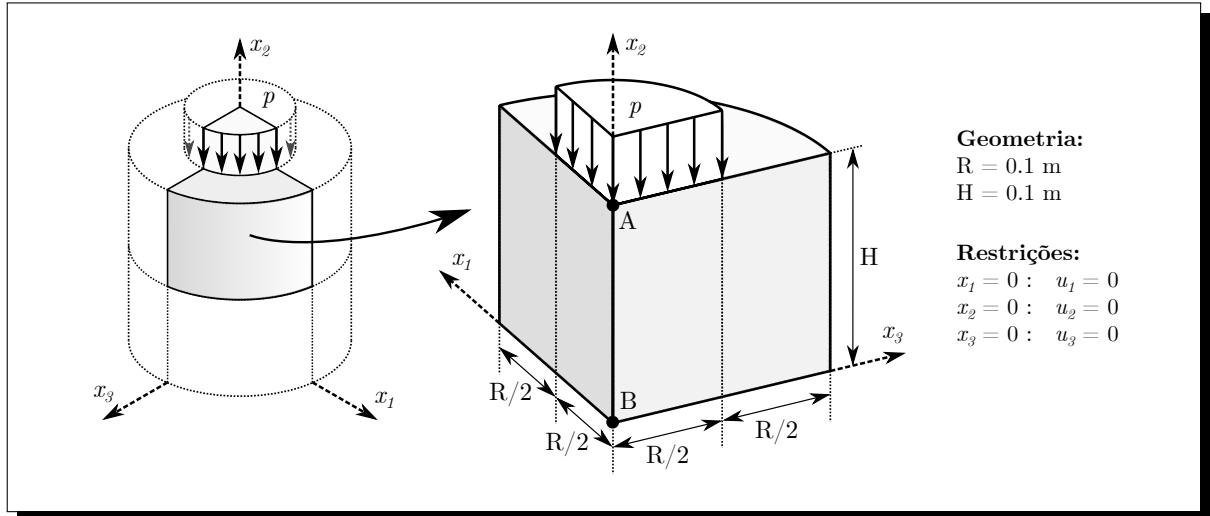
Figura 31 – Gráficos de (a) tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6h e taxa de tensão variável.



5.7.4 Cilindro parcialmente comprimido

Neste exemplo, considera-se um corpo de prova cilíndrico com material PTFE, sujeito a compressão parcial em ambas as faces. Devido à simetria, apenas um oitavo da geometria é discretizada, com as devidas restrições aplicadas em cada eixo de simetria gerado, resultando no problema mostrado na [Figura 32](#). A seguir, este exemplo é simulado em diversas condições de malha, refinamento temporal e evolução de carregamento.

Figura 32 – Dados para o exemplo do cilindro parcialmente comprimido



5.7.4.1 Ensaio de fluência com análise de convergência de malha

Nesta análise, considera-se que a força p aplicada no cilindro possui valor 21 MPa, fixo ao longo de um tempo total de 10^6 s. Aqui, utiliza-se uma abordagem diferente para a discretização temporal: ao invés de intervalos de tempo fixos, os valores de Δt evoluem conforme uma progressão geométrica. Essa abordagem é particularmente apropriada para

exemplos com evolução do tipo logarítmica, uma vez que permite o uso de intervalos de tempo menores no início da análise, onde a taxa de deslocamento é maior, e intervalos de tempo maiores no final da análise, onde os resultados são relativamente estáveis, otimizando portanto o número total de passos necessário. Neste caso, aplicam-se 400 passos de tempo, com Δt inicial de 1,28356 s, e razão da progressão geométrica de 1,025, resultando em um valor final de $2,43915 \cdot 10^4$ s para o Δt .

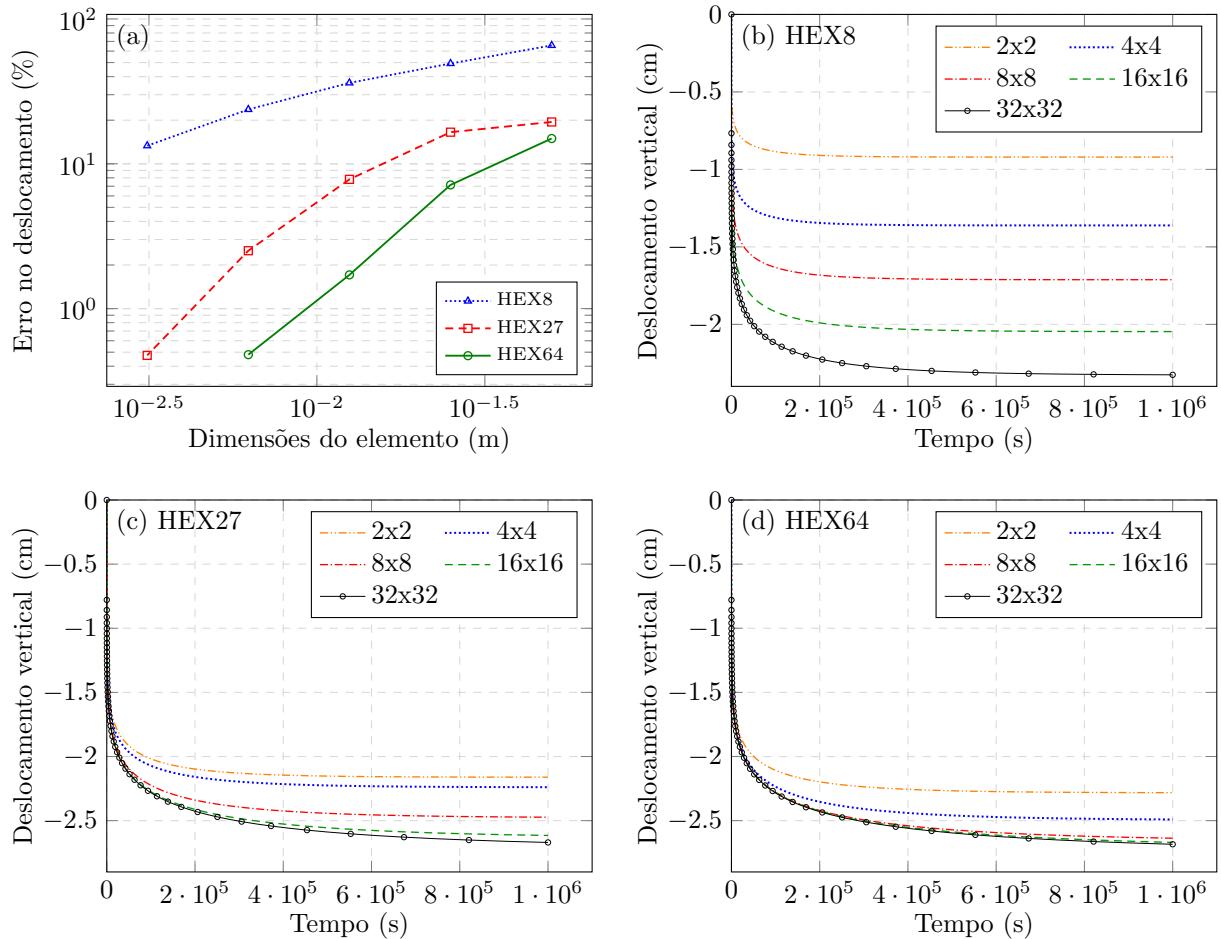
Adotam-se, neste problema, elementos finitos hexaédricos (HEX8, HEX27 e HEX64) para discretizar o domínio do sólido. Ao total, utilizam-se 15 malhas diferentes, sendo 5 para cada tipo de elemento. Uma vez que o problema é radialmente simétrico, o refinamento é aplicado apenas nas interfaces transversais do cilindro, sendo utilizadas malhas com 2x2, 4x4, 8x8, 16x16 e 32x32 elementos transversais. O número de camadas radiais é mantida fixa para cada tipo de elemento, com valor apenas suficiente para representar adequadamente a geometria. Considerando a performance computacional, esse valor é tomado menor para os elementos de ordem maior, uma vez que esses contam com mais nós e, em geral, uma melhor interpolação.

Os deslocamentos verticais no ponto A para cada caso são apresentados na [Figura 33](#). A evolução ao longo do tempo é mostrada separadamente para os casos com elemento HEX8, HEX27 e HEX64, nas Figuras 33(b), 33(c) e 33(d), respectivamente. Como pode ser visto, devido à alta não-linearidade do problema, os resultados são expressivamente dependentes da malha, sendo exigido um relativamente alto grau de refinamento para uma boa convergência dos gráficos, especialmente utilizando o elemento de ordem linear (HEX8), que sofre do efeito de *locking*. Na [Figura 33\(a\)](#), mostra-se ainda o erro do deslocamento máximo em cada caso, tomado com relação à malha mais refinada (HEX64/32x32). Nota-se que os casos com HEX27/32x32 e HEX64/16x16 apresentam resultados similares, com erro suficientemente pequeno em relação à malha de referência. A configuração deformada final para cada caso pode ser vista na [Figura 34](#).

Os dados do problema relacionados à performance computacional são compilados na [Tabela 2](#) para cada malha considerada, sendo todos os casos executados no mesmo *cluster* e sob condições equivalentes. O tempo de processamento em horas também pode ser visto em forma de gráfico na [Fig. 35\(a\)](#). Observa-se que a malha mais refinada (HEX64/32x32) possui um tempo de execução aproximadamente 5.1 vezes maior do que a malha HEX27/32x32, e em torno de 6.9 vezes maior do que a malha HEX64/16x16. Portanto, caso seja necessária uma boa precisão com custo computacional moderado, a malha HEX64/16x16 se torna mais vantajosa. No entanto, para situações práticas onde uma alta precisão não é necessária, a malha HEX64/8x8 também é uma opção adequada, com um tempo de processamento de aproximadamente 2.8% em relação à mais refinada. Por outro lado, a malha HEX27/16x16 não é indicada, uma vez que ela possui um maior tempo de processamento e ainda maior erro quando comparada à HEX64/8x8.

Na [Fig. 35\(b\)](#), mostra-se ainda um gráfico indicando o número de iterações globais do método de Newton-Raphson por passo de tempo para alguns casos selecionados. Observa-se que, embora os intervalos de tempo sejam menores nos passos iniciais, o número de

Figura 33 – Deslocamentos verticais no ponto A para o cilindro parcialmente comprimido submetido à fluência, considerando (a) erro do deslocamento com relação à malha HEX64/32x32, e diagramas de deslocamento ao longo do tempo para os casos com elementos (b) HEX8, (c) HEX27 e (d) HEX64

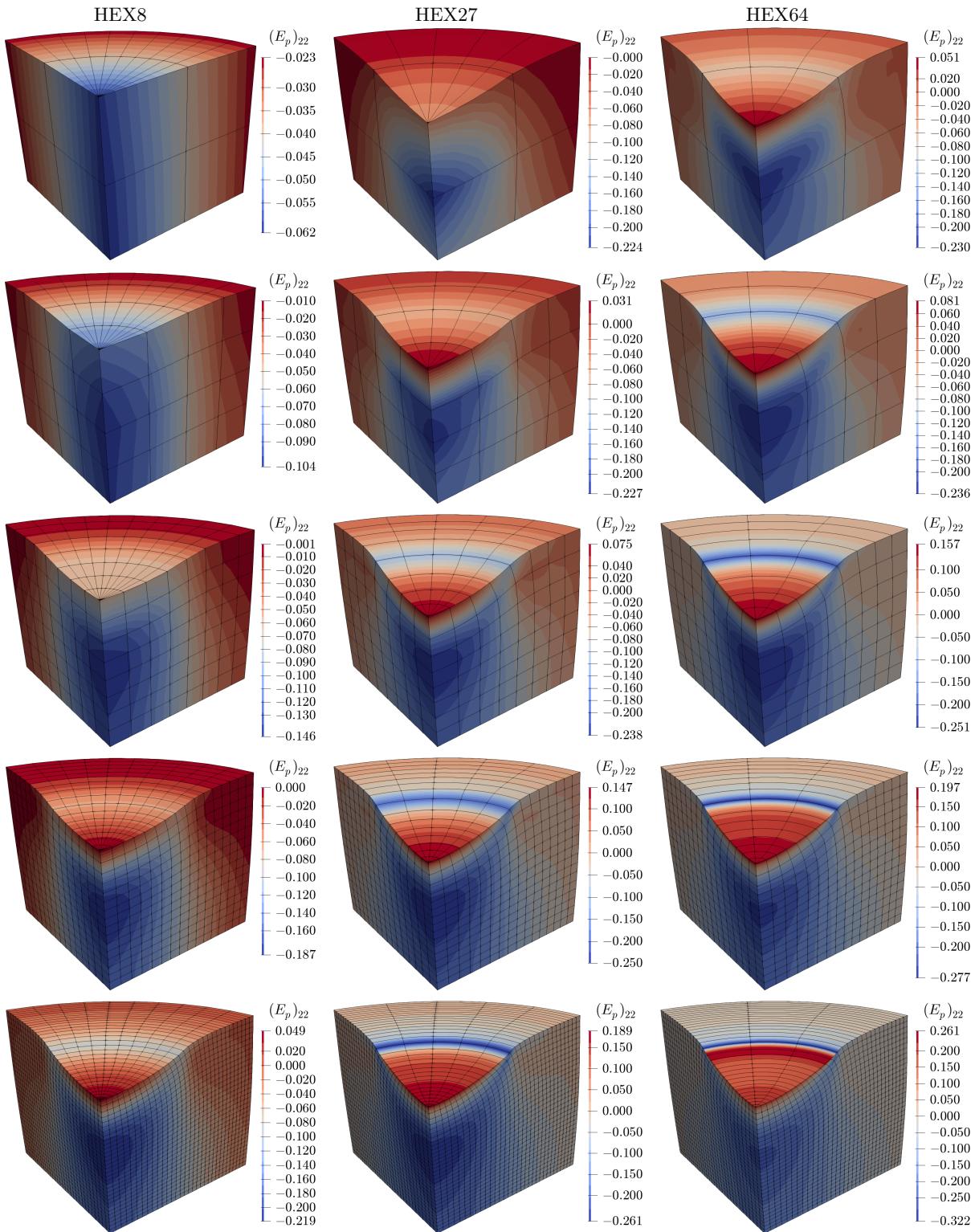


iterações é consideravelmente maior. Isso é esperado, uma vez que a taxa de deslocamento é expressivamente maior no início da análise, devido à carga abrupta e à evolução logarítmica característica de fluência em materiais viscoplásticos.

5.7.4.2 Ensaio de fluência com análise de convergência de tempo

Novamente, considera-se um valor fixo de 21 MPa para p , e um tempo de análise máximo de 10^6 s. Entretanto, neste caso é feita uma análise de convergência para a discretização temporal. Toma-se uma malha fixa (HEX64/8x8), e 6 diferentes discretizações temporais, com 100, 200, 400, 800, 1600 e 3200 passos de tempo. Novamente, os valores de Δt em cada caso evoluem conforme uma progressão geométrica, com Δt inicial inversamente proporcional ao número de passos. A razão da progressão geométrica, no entanto, não pode ser associada linearmente ao número de passos, e precisa ser calculada individualmente para cada discretização, utilizando o fato de que a soma dos termos da progressão deve ser igual ao tempo total de análise. Os dados completos das discretizações são mostrados na Tabela 3 para cada caso, bem como o deslocamento vertical mínimo (ocorrido no ponto A),

Figura 34 – Configurações deformadas para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência em diferentes malhas, com componente $(E_p)_{22}$ de deformação plástica em mapas de cores



o número total de iterações e o tempo de processamento. Nota-se que os resultados para 100 passos de tempo não são incluídos, pois a discretização nesse caso não foi suficiente para prosseguir a análise, apresentando problemas de convergência já no primeiro passo.

Como esperado, os tempos de processamento total e efetivos são maiores para os casos

Tabela 2 – Análise de convergência de malha para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência

| ORD | NSUB | NELEM | NGDL | DESLY (cm) | NITER | ITER-MED | TP (s) | TP-EF (s) |
|-----|------|-------|--------|------------|-------|----------|----------|-----------|
| 1 | 2 | 40 | 297 | -0.920576 | 802 | 2.005 | 33.3 | 32.5 |
| | 4 | 160 | 825 | -1.361507 | 857 | 2.143 | 126.4 | 123.5 |
| | 8 | 640 | 2673 | -1.711853 | 1247 | 3.118 | 681.1 | 670.3 |
| | 16 | 2560 | 9537 | -2.046559 | 1290 | 3.225 | 2845.3 | 2802.5 |
| | 32 | 10240 | 35937 | -2.325473 | 1273 | 3.183 | 12083.1 | 11910.1 |
| 2 | 2 | 20 | 825 | -2.161145 | 1279 | 3.197 | 176.0 | 173.0 |
| | 4 | 80 | 2673 | -2.239302 | 1274 | 3.185 | 557.4 | 546.3 |
| | 8 | 320 | 9537 | -2.473387 | 1261 | 3.152 | 2325.9 | 2282.7 |
| | 16 | 1280 | 35937 | -2.615494 | 1272 | 3.180 | 10833.0 | 10656.0 |
| | 32 | 5120 | 139425 | -2.670087 | 1311 | 3.277 | 68240.9 | 67533.3 |
| 3 | 2 | 12 | 1470 | -2.281924 | 1276 | 3.190 | 725.6 | 712.0 |
| | 4 | 48 | 5070 | -2.491031 | 1260 | 3.150 | 2342.0 | 2288.7 |
| | 8 | 192 | 18750 | -2.636977 | 1283 | 3.208 | 9932.6 | 9719.4 |
| | 16 | 768 | 72030 | -2.669944 | 1312 | 3.280 | 50978.9 | 50120.9 |
| | 32 | 3072 | 282270 | -2.684284 | 1317 | 3.292 | 350303.8 | 346866.9 |

ORD = Ordem do elemento

NSUB = Número de subdivisões de elementos

NELEM = Número de elementos

NGDL = Número de graus de liberdade

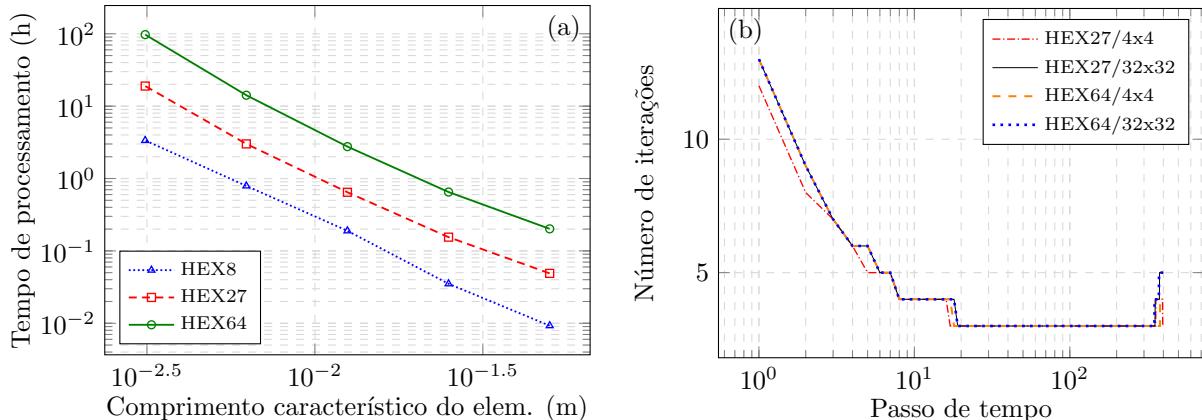
DESLY = Mínimo deslocamento vertical

NITER = Número total de iterações

ITER-MED = Número médio de iterações por passo

TP = Tempo de processamento total

TP-EF = Tempo de processamento descontando o pós e pré-processamento

Figura 35 – Análise de convergência de malha para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência, incluindo (a) tempo de processamento para diferentes malhas e (b) número de iterações por passo de tempo**Tabela 3** – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência

| NPT | Δt inicial (s) | razão da PG | Δt final (s) | DESLY (cm) | IT-M | TP (s) | TP-EF (s) |
|------|----------------------------|-------------|-------------------------|------------|--------|---------|-----------|
| 100 | $5.13423970 \cdot 10^0$ | 1.10427504 | $9.44331542 \cdot 10^4$ | — | — | — | — |
| 200 | $2.56711985 \cdot 10^0$ | 1.05069781 | $4.82540019 \cdot 10^4$ | -2.64364 | 4.6300 | 7274.8 | 7062.8 |
| 400 | $1.28355992 \cdot 10^0$ | 1.02500000 | $2.43914962 \cdot 10^4$ | -2.63698 | 3.2075 | 9932.6 | 9719.4 |
| 800 | $6.41779962 \cdot 10^{-1}$ | 1.01241411 | $1.22625256 \cdot 10^4$ | -2.63267 | 2.6938 | 16412.2 | 16197.8 |
| 1600 | $3.20889981 \cdot 10^{-1}$ | 1.00618575 | $6.14803972 \cdot 10^3$ | -2.62985 | 2.5181 | 30134.4 | 29917.5 |
| 3200 | $1.60444991 \cdot 10^{-1}$ | 1.00308757 | $3.07822430 \cdot 10^3$ | -2.62786 | 2.0241 | 48005.6 | 47784.8 |

NPT = Número de passos de tempo

DESLY = Deslocamento vertical mínimo

IT-M = Número médio de iterações por passo de tempo

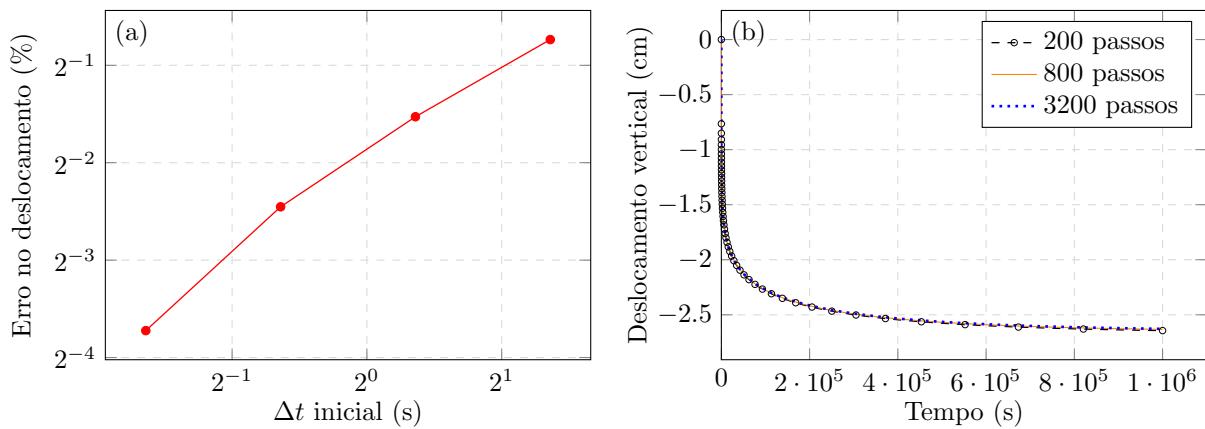
TP = Tempo de processamento total

TP-EF = Tempo de processamento descontando o pós e pré-processamento

mais refinados, mas o número médio de iterações por passo de tempo é menor. Observa-se,

no entanto, que os deslocamentos verticais mínimos não apresentam grandes divergências, apresentando um erro de apenas 0,6% entre os casos com 200 e 3200 passos de tempo, o que é desprezível do ponto de vista prático. Esses resultados indicam que a discretização temporal aplicada possui pouca influência neste exemplo, desde que seja suficiente para garantir a convergência. Os erros com relação ao caso mais refinado (3200 passos) podem ser vistos na Fig. 36(a), e a evolução dos deslocamentos ao longo do tempo no ponto A é mostrada na Fig. 36(b) para alguns passos de tempo selecionados, sendo notável a similaridade entre os casos analisados.

Figura 36 – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência, incluindo (a) erro no deslocamento vertical do ponto A com relação à discretização temporal mais refinada, e (b) deslocamento vertical no ponto A ao longo do tempo



Capítulo 6

Modelo termo-viscoelástico-viscoplástico

O modelo termo-viscoelástico-viscoplástico apresentado neste capítulo é uma generalização do modelo viscoelástico-viscoplástico apresentado no [Capítulo 5](#), sendo adicionados os efeitos da expansão térmica, da geração de calor por dissipação, e da dependência dos parâmetros mecânicos sobre a temperatura. Os conceitos termodinâmicos utilizados como base para este modelo são discutidos com mais detalhes nos Capítulos [3](#) e [4](#).

6.1 Cinemática

Novamente, utiliza-se a estratégia da decomposição multiplicativa, aplicada na [seção 4.3](#) para o caso termo-elástico, e na [seção 5.1](#) para o caso viscoelástico-viscoplástico. No presente contexto, aplica-se uma combinação dos dois modelos. Dessa forma, o gradiente da função mudança de configuração pode ser expresso como

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_m \mathbf{F}_\theta, \quad (6.1)$$

onde \mathbf{F}_θ , definido na configuração inicial, representa as deformações térmicas, e \mathbf{F}_m , definido na configuração intermediária térmica (Ω_θ), representa as deformações mecânicas. Utilizando como base o modelo viscoelástico-viscoplástico, em particular as decomposições introduzidas na [seção 5.1](#), podemos escrever $\mathbf{F}_m = \mathbf{F}_{ve} \mathbf{F}_p$, onde $\mathbf{F}_{ve} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_v$ representa as deformações viscoelásticas, e $\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{pe} \mathbf{F}_{pi} = \mathbf{F}_{\tilde{p}e} \mathbf{F}_{\tilde{p}v}$ as deformações plásticas.

Assim como na [seção 4.3](#), consideram-se neste caso apenas leis de expansão térmica isotrópicas, isto é, $\mathbf{F}_\theta = \lambda_\theta \mathbf{I}$, onde λ_θ é o alongamento térmico. Dessa forma, a Eq. (6.1) pode ser reescrita simplesmente como

$$\mathbf{F} = \lambda_\theta \mathbf{F}_m = \lambda_\theta \mathbf{F}_{ve} \mathbf{F}_p, \quad (6.2)$$

e as seguintes relações podem ser obtidas:

$$\mathbf{C} = (\lambda_\theta \mathbf{F}_{ve} \mathbf{F}_p)^T (\lambda_\theta \mathbf{F}_{ve} \mathbf{F}_p) = \lambda_\theta^2 \mathbf{F}_p^T \mathbf{C}_{ve} \mathbf{F}_p, \quad (6.3)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{ve} + \mathbf{F}_{ve} \mathbf{L}_p \mathbf{F}_{ve}^{-1} + \dot{\lambda}_\theta \lambda_\theta^{-1} \mathbf{I}, \quad \text{e} \quad (6.4)$$

$$\mathbf{D} = \text{sim}(\mathbf{L}) = \mathbf{D}_{ve} + \text{sim}(\mathbf{F}_{ve} \mathbf{L}_p \mathbf{F}_{ve}^{-1}) + \dot{\lambda}_\theta \lambda_\theta^{-1} \mathbf{I}. \quad (6.5)$$

Aplicando as Eqs. (2.10) e (6.2) na Eq. (6.5), e desenvolvendo algebricamente, é possível escrever a taxa da deformação de Green-Lagrange viscoelástica como

$$\dot{\mathbf{E}}_{ve} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_p^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}_p^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_{ve} \mathbf{L}_p) - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_{ve}. \quad (6.6)$$

Realizando procedimentos análogos para as demais decomposições, podemos escrever

$$\dot{\mathbf{E}}_e = \mathbf{F}_v^{-T} \dot{\mathbf{E}}_{ve} \mathbf{F}_v^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_e \mathbf{L}_v), \quad (6.7)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_{pe} = \mathbf{F}_{p_i}^{-T} \dot{\mathbf{E}}_p \mathbf{F}_{p_i}^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_{pe} \mathbf{L}_{p_i}), \quad \text{e} \quad (6.8)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_{\tilde{p}e} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{-T} \dot{\mathbf{E}}_p \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_{\tilde{p}e} \mathbf{L}_{\tilde{p}_v}). \quad (6.9)$$

6.2 Energia, tensão e dissipação

A energia livre de Helmholtz do presente modelo pode ser expressa em duas parcelas: mecânica e térmica. Para a parcela mecânica, utiliza-se como base a energia do modelo viscoelástico-viscoplástico, apresentada na Eq. (5.4). Entretanto, nota-se que as componentes desta equação são definidas nas suas respectivas configurações intermediárias. Para que elas sejam escritas em forma Lagrangiana, deve-se multiplicar cada componente pelo Jacobiano entre a configuração inicial e a intermediária, J_{int} . Mas, como já foi visto na seção 5.3, as deformações inelásticas são isocóricas, isto é, preservam o volume do sólido. Dessa forma, para cada uma das configurações intermediárias consideradas, J_{int} consistirá apenas da sua parcela térmica, que, no caso isotrópico, é dada simplesmente por $J_\theta = \lambda_\theta^3$. Assim, a energia livre de Helmholtz pode ser escrita como:

$$\psi = \psi_\theta + \lambda_\theta^3 \psi_m, \quad (6.10)$$

onde ψ_θ é a parcela térmica de ψ , que pode ser dada novamente pela Eq. (4.11), e ψ_m representa a parcela mecânica de ψ , definida de forma análoga à Eq. (5.4), porém, agora dependente também da temperatura. Isto é,

$$\psi_m = \psi_{ve}(\theta, \mathbf{E}_{ve}) + \psi_e(\theta, \mathbf{E}_e) + \psi_{pe}^{\text{cin}}(\theta, \mathbf{E}_{pe}) + \psi_{\tilde{p}e}^{\text{cin}}(\theta, \mathbf{E}_{\tilde{p}e}) + \psi_p^{\text{iso}}(\theta, \kappa), \quad (6.11)$$

Propõe-se neste trabalho um modelo termodinamicamente consistente, isto é, cujas equações respeitem a primeira e segunda lei da termodinâmica, apresentadas, respectivamente, na Eq. (3.20) e na Ineq. (3.21). Em ambos os casos, é necessário calcular a taxa da energia livre de Helmholtz. Baseado nas Eqs. (6.10) e (6.11), e sabendo que λ_θ e ψ_θ dependem apenas da temperatura, temos:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & \lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \dot{\mathbf{E}}_{ve} + \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} : \dot{\mathbf{E}}_e + \frac{\partial \psi_{pe}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{pe}} : \dot{\mathbf{E}}_{pe} + \frac{\partial \psi_{\tilde{p}e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}e}} : \dot{\mathbf{E}}_{\tilde{p}e} + \frac{\partial \psi_p^{\text{iso}}}{\partial \kappa} : \dot{\kappa} \right) \\ & + \left(\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Utilizando a Eq. (6.6), podemos escrever

$$\frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \dot{\mathbf{E}}_{ve} = \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \left(\lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_p^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}_p^{-1} \right) - \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \text{sim}(\mathbf{C}_{ve} \mathbf{L}_p) - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} : \mathbf{C}_{ve}. \quad (6.13)$$

Considerando que ψ_{ve} seja isotrópico, temos que $\partial\psi_{ve}/\partial\mathbf{E}_{ve}$ é simétrico, logo pode-se aplicar no segundo termo a propriedade $\mathbf{A} : \text{sim}(\mathbf{B}) = \mathbf{A} : \mathbf{B}$, válida quando \mathbf{A} é um tensor simétrico. Em seguida, pode-se utilizar a identidade tensorial $\mathbf{A} : (\mathbf{BCD}) = (\mathbf{B}^T \mathbf{AD}^T) : \mathbf{C}$ em todos os termos, de forma que a Eq. (6.13) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial\psi_{ve}}{\partial\mathbf{E}_{ve}} : \dot{\mathbf{E}}_{ve} = \left(\lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial\psi_{ve}}{\partial\mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \left(\mathbf{C}_{ve} \frac{\partial\psi_{ve}}{\partial\mathbf{E}_{ve}} \right) : \mathbf{L}_p - \text{tr} \left(\mathbf{C}_{ve} \frac{\partial\psi_{ve}}{\partial\mathbf{E}_{ve}} \right) \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta, \quad (6.14)$$

onde $\text{tr}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} : \mathbf{I}$ representa o traço de um tensor. Considerando também que ψ_e , $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$ são isotrópicos, e utilizando as Eqs. (6.7) a (6.9), pode-se realizar um procedimento análogo para as demais parcelas da Eq. (6.12), resultando nas seguintes expressões:

$$\frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} : \dot{\mathbf{E}}_e = \left(\mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}}_{ve} - \left(\mathbf{C}_e \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \right) : \mathbf{L}_v, \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{p_e} = \left(\mathbf{F}_{p_i}^{-1} \frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} \mathbf{F}_{p_i}^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}}_p - \left(\mathbf{C}_{p_e} \frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} \right) : \mathbf{L}_{p_i}, \quad \text{e} \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{\tilde{p}_e} = \left(\mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{-1} \frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}}_p - \left(\mathbf{C}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \right) : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v}. \quad (6.17)$$

Aplicando a Eq. (6.6) na Eq. (6.15) e realizando manipulações algébricas similares às anteriores, temos, ainda

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} : \dot{\mathbf{E}}_e &= \left(\lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \left(\mathbf{C}_{ve} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \right) : \mathbf{L}_p \\ &\quad - \left(\mathbf{C}_e \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \right) : \mathbf{L}_v - \text{tr} \left(\mathbf{C}_{ve} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \right) \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Utilizando relações cinemáticas, verifica-se que o termo $\mathbf{C}_{ve} \mathbf{F}_v^{-1}$ pode ser reescrito como $\mathbf{F}_v^T \mathbf{C}_e$. Além disso, é possível demonstrar algebricamente a propriedade tensorial $\text{tr}(\mathbf{ABA}^{-1}) = \text{tr}(\mathbf{B})$. Logo, a Eq. (6.18) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} : \dot{\mathbf{E}}_e &= \left(\lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \left(\mathbf{F}_v^T \mathbf{C}_e \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \right) : \mathbf{L}_p \\ &\quad - \left(\mathbf{C}_e \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \right) : \mathbf{L}_v - \text{tr} \left(\mathbf{C}_e \frac{\partial\psi_e}{\partial\mathbf{E}_e} \right) \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Já nas Eqs. (6.16) e (6.17), pode-se utilizar a relação $\dot{\mathbf{E}}_p = \mathbf{F}_p^T \mathbf{D}_p \mathbf{F}_p$, análoga à Eq. (2.10). Assim, podemos escrever:

$$\frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{p_e} = \left(\mathbf{F}_{p_e} \frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} \mathbf{F}_{p_e}^T \right) : \mathbf{D}_p - \left(\mathbf{C}_{p_e} \frac{\partial\psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{p_e}} \right) : \mathbf{L}_{p_i}, \quad \text{e} \quad (6.20)$$

$$\frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} : \dot{\mathbf{E}}_{\tilde{p}_e} = \left(\mathbf{F}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \mathbf{F}_{\tilde{p}_e}^T \right) : \mathbf{D}_p - \left(\mathbf{C}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial\mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \right) : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v}, \quad (6.21)$$

onde os termos $\mathbf{D}_p = \text{sim}(\mathbf{L}_p)$ também podem ser substituídos por \mathbf{L}_p nesse contexto, já que realizam contração dupla com tensores simétricos. Dessa forma, a taxa da energia

livre de Helmholtz pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\dot{\psi} = & \lambda_\theta \left(\mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} + \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} \\ & + \left(\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_{ve} \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_e \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} \\ & - \lambda_\theta^3 (\Sigma : \mathbf{L}_p + \mathbf{M}_e : \mathbf{L}_v + \mathbf{M}_p : \mathbf{L}_{p_i} + \mathbf{M}_{\tilde{p}} : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v} + \sigma_\kappa \dot{\kappa}),\end{aligned}\quad (6.22)$$

onde $\sigma_\kappa = -\partial \psi_p^{\text{iso}} / \partial \kappa$ é a tensão de escoamento, Σ é a tensão relativa, já definida na Eq. (5.10), e \mathbf{M}_e , \mathbf{M}_p e $\mathbf{M}_{\tilde{p}}$ são os tensores de Mandel, definidos na Eq. (5.11).

Aplicando a Eq. (6.22) na Eq. (3.20) e na Ineq. (3.21), podemos reescrever a primeira e a segunda leis da termodinâmica, respectivamente. Após alguns desenvolvimentos algébricos, a primeira pode ser lida como

$$\begin{aligned}- & \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_{ve} \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_e \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} - \lambda_\theta \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} \\ & + \lambda_\theta^3 (\Sigma : \mathbf{L}_p + \mathbf{M}_e : \mathbf{L}_v + \mathbf{M}_p : \mathbf{L}_{p_i} + \mathbf{M}_{\tilde{p}} : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v} + \sigma_\kappa \dot{\kappa}) \\ & - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0,\end{aligned}\quad (6.23)$$

e a segunda como

$$\begin{aligned}d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_{ve} \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_e \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} - \lambda_\theta \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} \\ & + \lambda_\theta^3 (\Sigma : \mathbf{L}_p + \mathbf{M}_e : \mathbf{L}_v + \mathbf{M}_p : \mathbf{L}_{p_i} + \mathbf{M}_{\tilde{p}} : \mathbf{L}_{\tilde{p}_v} + \sigma_\kappa \dot{\kappa}) - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0.\end{aligned}\quad (6.24)$$

Seguindo novamente o postulado de ??), as expressões acima devem ser válidas para quaisquer valores de $\dot{\mathbf{E}}$ e $\dot{\theta}$. Tomando os conjugados termodinâmicos desses termos como zero, temos que a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e a entropia são dadas, respectivamente, pelas expressões:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \left(\mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_{ve}}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} + \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} \right) = \lambda_\theta \mathbf{S}_m, \quad \text{e} \quad (6.25)$$

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \lambda_\theta^2 (\text{tr } \mathbf{M}_{ve} + \text{tr } \mathbf{M}_e - 3\psi_m) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (6.26)$$

onde \mathbf{S}_m equivale à tensão do modelo puramente mecânico, definida na Eq. (5.7). Partindo da Eq. (6.25), e aplicando certas manipulações algébricas, é possível verificar que $\mathbf{C} : \mathbf{S} = \lambda_\theta^3 \mathbf{C}_m : \mathbf{S}_m = \lambda_\theta^3 (\text{tr } \mathbf{M}_{ve} + \text{tr } \mathbf{M}_e)$. Logo, podemos reescrever a equação da entropia como

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + (\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}. \quad (6.27)$$

Suponha que χ denote, de forma geral, as variáveis internas inelásticas do modelo (neste caso, \mathbf{F}_v , \mathbf{F}_p , \mathbf{F}_{p_i} , $\mathbf{F}_{\tilde{p}_v}$ e κ). Então, podemos escrever ψ alternativamente apenas

em função de θ , \mathbf{E} e χ , isto é, $\psi = \psi(\theta, \mathbf{E}, \chi)$. Nesse caso, é possível demonstrar que as Eqs. (6.25) e (6.27) são equivalentes a

$$\mathbf{S} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\theta, \chi} \quad \text{e} \quad \eta = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \chi}. \quad (6.28)$$

O critério de escoamento e leis de evolução aplicados neste caso são análogos aos do modelo viscoelástico-viscoplástico descrito no [Capítulo 5](#). Utiliza-se novamente o critério de Von Mises, dado pela Eq. (5.12), e as leis de evolução dadas nas Eqs. (5.13), (5.14), (5.16), (5.17), e (5.18). Aplicando-as, juntamente com as demais relações constitutivas, na Eq. (6.23) e Ineq. (6.24), temos que a primeira e segunda leis da termodinâmica podem ser reescritas simplesmente como

$$\theta \dot{\eta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad (6.29)$$

$$d_{\text{int}} = d_m - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (6.30)$$

onde d_m representa a parcela mecânica da taxa de dissipação, dada por

$$d_m = \lambda_\theta^3 \left(\dot{\gamma} \|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \frac{1}{\eta} \|\mathbf{M}_e^D\|^2 + \dot{\gamma} \frac{b}{c} \|\mathbf{M}_p^D\|^2 + \frac{1}{\eta_p^{\text{cin}}} \|\mathbf{M}_{\tilde{p}}^D\|^2 + \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma} \sigma_\kappa \right), \quad (6.31)$$

similar à dissipação calculada na Eq. (5.19) para o modelo viscoelástico-viscoplástico em condições isotérmicas, diferenciando-se apenas pelo termo λ_θ^3 . De forma análoga à esse caso, é possível demonstrar que $d_m \geq 0$. Além disso, a parcela térmica da Ineq. (6.30) ($-\frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta$) é automaticamente maior ou igual à zero quando utilizada a lei de Fourier, conforme já discutido na [subseção 3.4.1](#). Dessa forma, pode-se garantir que o modelo adotado satisfaz a segunda lei da termodinâmica.

Manipulando as Eqs. (3.20) e (6.29), é possível obter a seguinte relação:

$$\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} = \dot{\psi} + d_m + \dot{\theta} \eta, \quad (6.32)$$

mostrando que a taxa de trabalho interno é igual à soma da taxa de energia livre de Helmholtz (representando a energia armazenada), a taxa de dissipação mecânica, e um termo associado à entropia. Além de servir como um método para verificar a consistência da formulação e das expressões utilizadas, essa relação permite analisar quantitativamente a porcentagem de energia dissipada em comparação com a energia efetivamente convertida no processo mecânico.

O algoritmo para solução numérica do presente modelo é análogo ao caso viscoelástico-viscoplástico, já descrito com detalhes na [seção 5.4](#), sendo utilizado novamente o método implícito de Euler para integração temporal das leis de evolução.

6.3 Operador tangente consistente

Uma vez que os problemas térmico e mecânico são resolvidos individualmente, e que as temperaturas são mantidas fixas durante a solução do problema mecânico, o cálculo do

operador tangente consistente não deve levar em conta variações de temperatura ou de λ_θ para efeito de convergência. Dessa forma, a variação da tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie pode ser calculada como

$$\Delta \mathbf{S} = \lambda_\theta \Delta \mathbf{S}_m = \lambda_\theta \mathfrak{C}_m : \Delta \mathbf{E}_m \quad (6.33)$$

onde \mathbf{E}_m é a parcela mecânica da deformação de Green-Lagrange, e \mathfrak{C}_m é o operador tangente consistente do modelo puramente mecânico, calculado de forma análoga à descrita na Seção 5.5.

A partir das relações cinemáticas apresentadas, é possível demonstrar que $\Delta \mathbf{E}_m = \lambda_\theta^{-2} \Delta \mathbf{E}$. Portanto, a Eq. (6.33) pode ser reescrita como

$$\Delta \mathbf{S} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m : \Delta \mathbf{E}. \quad (6.34)$$

Logo, por associação com a Eq. (5.27), o operador tangente consistente do modelo termo-viscoelástico-viscoplástico pode ser expresso como

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m. \quad (6.35)$$

6.4 Equação da condução de calor

A Eq. (6.29) é denominada equação da condução de calor. Para obtermos uma forma aplicável dessa equação, resta apenas desenvolver o termo $\dot{\eta}$. Para isso, podemos escrever a entropia apenas em função de θ , \mathbf{E} , e das variáveis internas $\boldsymbol{\chi}$, isto é, $\eta = \eta(\theta, \mathbf{E}, \boldsymbol{\chi})$. Assim, temos

$$\dot{\eta} = \frac{1}{\theta} c_v^* \dot{\theta} + \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}}, \quad (6.36)$$

onde

$$c_v^* = \theta \left(\frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}}, \quad \mathbf{T}_{\mathbf{E}} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}}. \quad (6.37)$$

Os tensores $\mathbf{T}_{\mathbf{E}}$ e $\mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}}$ são denominados operadores termo-mecânicos. Partindo da Eq. (6.27), podemos calcula-los como

$$\mathbf{T}_{\mathbf{E}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} + \lambda_\theta^{-1} \left[\mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} - \mathbf{S} \right] \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad \text{e} \quad (6.38)$$

$$\mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} = -\lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \theta \partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} + \left[\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} - 3\lambda_\theta^2 \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} \right] \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}. \quad (6.39)$$

Já o parâmetro c_v^* denota o calor específico volumétrico efetivo do material, dado neste caso por

$$c_v^* = c_v + c_v^m, \quad (6.40)$$

onde c_v é a sua parcela puramente térmica, calculada como

$$c_v = -\theta \frac{\partial^2 \psi_\theta}{\partial \theta^2}, \quad (6.41)$$

e c_v^m é a sua parcela mecânica, calculada como

$$\begin{aligned} c_v^m = & -\lambda_\theta^3 \theta \left(\frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \theta^2} \right)_{\mathbf{E}, \chi} + \theta \left[\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \chi} - 6\lambda_\theta^2 \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \chi} \right] \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \\ & + \theta \left(-\lambda_\theta^{-2} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 6\lambda_\theta \psi_m \right) \left(\frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \theta \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m \right) \frac{\partial^2 \lambda_\theta}{\partial \theta^2} \end{aligned} \quad (6.42)$$

Aplicando a Eq. (6.36) na Eq. (6.29), temos, enfim, a equação da condução de calor local:

$$c_v^* \dot{\theta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = r + d_m - \theta q_m, \quad (6.43)$$

onde, por conveniência, a variável q_m é adotada para representar os termos de acoplamento termo-mecânico, isto é:

$$q_m = \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{T}_{\chi} : \dot{\chi}. \quad (6.44)$$

Como visto na Eq. (6.43), o termo de dissipação mecânica (d_m) e o termo de acoplamento termo-mecânico ($-\theta q_m$) desempenham o mesmo papel que o calor interno fornecido (r): adicionar ou remover calor do sistema. Valores positivos no lado direito da Eq. (6.43) indicam uma tendência do sistema a aumentar as temperaturas, enquanto valores negativos indicam uma tendência a diminuir as temperaturas. A partir da Eq. (6.31), pode-se observar que a dissipação mecânica é não-negativa por definição, sempre adicionando calor ao sistema.

Entretanto, na prática, a dissipação mecânica nem sempre se converte totalmente em calor. Quando um material sofre deformação inelástica, uma parte da energia é armazenada no rearranjo e entrelaçamento das discordâncias dentro da estrutura cristalina do material, um processo conhecido como trabalho frio (????). Para contabilizar esse efeito, vários estudos propõem o uso de um multiplicador no termo de dissipação mecânica (????). Dessa forma, a Eq. (6.45) se torna:

$$c_v^* \dot{\theta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = r + \beta d_m - \theta q_m, \quad (6.45)$$

onde o multiplicador β , frequentemente denominado coeficiente de Taylor-Quinney (????), representa a fração de energia convertida em calor durante a deformação inelástica, geralmente estimada empiricamente em torno de 0.9 (????).

Ao contrário da dissipação mecânica, o termo de acoplamento termo-mecânico ($-\theta q_m$) pode ser negativo ou positivo. Quando negativo, esse termo pode contrabalançar o efeito da dissipação mecânica, diminuindo a temperatura. Embora isso possa parecer contraintuitivo para processos inelásticos, é comum durante a fase elástica/viscoelástica, onde a dissipação mecânica é baixa em comparação com a fase plástica/viscoplastica. Esse fenômeno é discutido em (??), onde os resultados de uma barra sob carregamento mecânico apresentam uma queda de temperatura durante a fase elástica, seguida por um aumento de temperatura durante a fase plástica. Resultados semelhantes também são discutidos em (??).

De forma análoga ao caso termo-elástico, pode-se multiplicar a Eq. (6.43) por uma função ponderadora $\delta\theta$, integrar no volume inicial, e realizar manipulações algébricas

similares à [seção 4.4](#). Disso resulta a equação da condução de calor em sua forma variacional global:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} c_v^* \dot{\theta} \delta \theta dV_0 + \int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta \theta) dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta \theta dS_0 \\ & - \int_{\Omega_0} (r + \beta d_m - \theta q_m) \delta \theta dV_0 = 0, \end{aligned} \quad (6.46)$$

onde \bar{q}_0 é o fluxo de calor prescrito, e \mathbf{K}_0 é a matriz de condutividade térmica do material na configuração inicial, já definida na Eq. [\(3.45\)](#), utilizando a lei de Fourier.

Novamente, utiliza-se o método dos elementos finitos, em conjunto com o método de Galerkin, para solução numérica da Eq. [\(6.46\)](#). Entretanto, dado que c_v^* depende da temperatura, o sistema torna-se não-linear, demandando técnicas iterativas de solução, como o método de Newton-Raphson. O mesmo também ocorre nos casos onde o parâmetro de condutividade k depende da temperatura, embora esses casos não sejam tratados neste trabalho. Para o acoplamento termo-mecânico, adotamos o método bloco-iterativo descrito na Seção [4.5.1](#).

6.5 Modelos com viscosidade aprimorada

Capítulo 7

Modelo numérico de contato

O modelo de contato descrito neste capítulo é uma extensão do modelo aplicado em ??), onde foi utilizado o método nó-a-segmento em conjunto com multiplicadores de Lagrange para problemas bidimensionais. Neste trabalho, considera-se também o caso tridimensional, demandando o emprego de uma estratégia nó-a-superfície. Além disso, algumas modificações gerais são feitas ao modelo original de forma a melhorar sua precisão, entre elas:

- A detecção do contato é feita por meio da intersecção das trajetórias dos elementos, ao invés do ponto de mínima distância. Essa modificação é pouco importante no caso sem atrito, onde o ponto original de contato não possui grande influência no ponto final após o deslizamento. No entanto, para o caso com atrito, é importante garantir que a condição de aderência seja aplicada no ponto correto, onde ocorreu originalmente o contato.
- As coordenadas adimensionais dos pontos de contato são adicionadas como parâmetros do sistema global, sendo recalculadas a cada iteração pelo método de Newton-Raphson, juntamente com as posições e os multiplicadores de Lagrange. No método original, os pontos de contato eram permitidos deslizar apenas transversalmente ao ponto original, o que poderia causar inconsistências em elementos de alta ordem (especialmente elementos com certo grau de curvatura), pois o nó projétil poderia acabar fora do domínio dos elementos alvo. Para contornar esse problema, os pontos de contato eram atualizados ao final de cada convergência do Newton-Raphson, e o sistema era calculado novamente com os novos pontos, gerando mais iterações e comprometendo a ordem de convergência. Já no presente modelo, pelo fato de as coordenadas adimensionais serem atualizadas a cada iteração, o ponto de contato é permitido deslizar apenas dentro do próprio domínio do elemento, evitando as inconsistências mencionadas previamente e reduzindo a necessidade de refazer o processo de Newton-Raphson em cada passo de tempo. Apesar disso, o novo modelo possui a desvantagem de apresentar um tempo de processamento maior em cada iteração, devido à introdução de parâmetros adicionais, aumentando a ordem do sistema.

7.1 Discretização do contato pela estratégia nó-a-superfície

No método nó-a-superfície, os pares de interface de contato distinguem-se entre “projéteis”, onde os elementos de contato são os nós, e “alvos”, onde os elementos de contato são as superfícies (ou segmentos, no caso 2D). Esses últimos utilizam como base a malha do sólido, sendo discretizados por elementos finitos de superfície (neste trabalho, triangulares ou quadrilaterais), ou de linha no caso 2D. Dessa forma, pode-se escrever as posições ao longo de uma superfície pela interpolação:

$$\mathbf{y}_S(\xi) = \varphi^\alpha(\xi)\mathbf{y}^\alpha, \quad (7.1)$$

onde o índice α é somado por todos os nós do elemento alvo, e φ^α denota a função de forma desse elemento aplicada ao nó α , que depende, neste caso, das coordenadas adimensionais ξ . Derivando \mathbf{y}_S com relação à cada componente de ξ , temos os vetores tangentes e tangentes unitários, definidos, respectivamente, pelas expressões:

$$\mathbf{t}^i(\xi) = \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \xi_i} \mathbf{y}^\alpha, \quad \text{e} \quad (7.2)$$

$$\bar{\mathbf{t}}^i(\xi) = \mathbf{t}^i / \|\mathbf{t}^i\|. \quad (7.3)$$

Observa-se que no caso 3D há dois vetores tangentes ($i = 1, i = 2$), enquanto no caso 2D apenas um ($i = 1$). O vetor normal, denotado por \mathbf{n} , é calculado de forma que $\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{t}}^i = 0$ para cada i . No caso 3D, ele é o produto vetorial entre os dois vetores tangente, isto é,

$$\mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}}^1 \times \bar{\mathbf{t}}^2. \quad (7.4)$$

No caso bidimensional, a mesma regra se aplica, porém considerando $\bar{\mathbf{t}}^2 = (0,0,1)$, o que resulta simplesmente em

$$n_1 = \bar{t}_2^1 \quad \text{e} \quad n_2 = -\bar{t}_1^1. \quad (7.5)$$

O vetor normal 2D calculado pela [Equação 7.5](#) será automaticamente unitário. Já o vetor normal 3D calculado pela [Equação 7.4](#) pode ter norma diferente de 1. Nesse caso, calcula-se o vetor normal unitário por

$$\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{n} / \|\mathbf{n}\|. \quad (7.6)$$

Nota-se que o sentido de \mathbf{n} e $\bar{\mathbf{n}}$ irá depender da orientação do elemento finito. Para padronizar as equações posteriores, convenciona-se neste trabalho que os vetores normais apontam para fora do sólido. No caso 2D, isso pode ser obtido orientando os elementos de linha no sentido anti-horário em contornos externos do sólido, e sentido horário em contornos internos (como furos). No caso 3D a orientação dos elementos finitos irá depender do algoritmo de geração de malha utilizado, sendo recomendável avaliar o sentido durante a criação da geometria.

7.2 Detecção do contato

Neste trabalho, ativa-se o contato em um determinado nó projétil quando a sua trajetória intersecta a trajetória de algum elemento alvo. Adotam-se, para fins de simplificação,

trajetórias lineares entre os passos de tempo, isto é, estima-se a posição de um nó projétil entre os passos anterior e atual por meio da função linear

$$\mathbf{y}_N^{int}(\omega) = \omega \mathbf{y}_N + (1 - \omega) \mathbf{y}_N^{s-1}, \quad (7.7)$$

onde \mathbf{y}_N e \mathbf{y}_N^{s-1} são as posições do nó projétil no passo atual e anterior, respectivamente, e ω é um parâmetro que representa o tempo adimensional decorrido entre os dois passos, valendo 0 para o passo anterior e 1 para o atual. Analogamente, para cada nó α de um elemento alvo, podemos estimar sua posição no tempo ω pela função

$$\mathbf{y}_\alpha^{int}(\omega) = \omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1}, \quad (7.8)$$

onde \mathbf{y}_α e \mathbf{y}_α^{s-1} são as posições do nó no passo atual e anterior, respectivamente. Assim, para um ponto qualquer do domínio do elemento alvo definido pela coordenada adimensional ξ , temos

$$\mathbf{y}_S^{int}(\omega, \xi) = \varphi^\alpha(\xi) [\omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1}], \quad (7.9)$$

onde, novamente, o índice α é somado sobre todos os nós do elemento. Neste contexto, a condição de intersecção entre as trajetórias do nó projétil e do elemento alvo pode ser vista como $\mathbf{r}(\omega, \xi) = \mathbf{y}_N^{int}(\omega) - \mathbf{y}_S^{int}(\omega, \xi) = \mathbf{0}$. Aplicando nessa as Eqs. (7.7) e (7.9) temos, enfim:

$$\mathbf{r}(\omega, \xi) = \omega \mathbf{y}_N + (1 - \omega) \mathbf{y}_N^{s-1} - \varphi^\alpha(\xi) [\omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1}] = \mathbf{0}. \quad (7.10)$$

A Eq. (7.10) é um sistema não-linear de equações para ω e ξ , cuja ordem é o número de dimensões do problema, calculado neste trabalho pelo método de Newton-Raphson. De forma a obter a convergência adequada do método, utilizam-se as derivadas:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \omega} = \mathbf{y}_N - \mathbf{y}_N^{s-1} - \varphi^\alpha(\xi) (\mathbf{y}_\alpha - \mathbf{y}_\alpha^{s-1}), \quad (7.11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi_j} = -\frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \xi_j} [\omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1}], \quad (7.12)$$

Esse sistema é calculado para cada combinação de nó projétil e elemento alvo. Caso ocorra a convergência, verificam-se os valores de ω e ξ obtidos. Naturalmente, a intersecção precisa ter ocorrido entre os passos anterior e atual, isto é, o valor de ω deve estar entre 0 e 1. Além disso, as coordenadas adimensionais ξ precisam pertencer ao domínio do elemento finito. Caso essas condições sejam atendidas, ativa-se finalmente o contato entre o nó projétil e o elemento alvo, e o valor de ξ calculado é adotado como ponto de aderência, caso haja atrito.

7.3 Imposição das condições de contato

Neste trabalho, a imposição das condições de contato é feita pelo método dos multiplicadores de Lagrange, adicionados como parâmetros nodais ao sistema, associados às forças normais de contato. Além disso, conforme discutido previamente, as coordenadas adimensionais ξ do ponto de contato também são introduzidas como parâmetros do sistema, gerando novas equações denominadas condições de deslizamento. Descreve-se a seguir como essa imposição é feita para os casos sem e com atrito.

7.3.1 Contato sem atrito

A condição primária de contato a ser imposta é a de impenetrabilidade, que é traduzida como $g_n^\alpha = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0$, onde g_n^α é a distância normal entre o nó projétil α e seu respectivo ponto de contato no elemento alvo. Essa condição é imposta neste trabalho pelo método dos multiplicadores de Lagrange, onde, para cada nó de contato α , adiciona-se à Eq. (2.16) (energia mecânica total) a parcela

$$\Pi_{\text{cont}}^\alpha = \lambda_n^\alpha g_n^\alpha = \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \bar{\mathbf{n}}. \quad (7.13)$$

O termo λ_n^α , denominado multiplicador de Lagrange, é adicionado como parâmetro do sistema global, assumindo também neste contexto o significado físico de força normal de contato.

Observa-se que ambos \mathbf{y}_S e $\bar{\mathbf{n}}$ dependem das coordenadas adimensionais de contato (ξ) e das posições nodais do elemento alvo (denotadas por \mathbf{y}_S^β para cada nó β). Logo, Π_{cont}^α depende de λ_n^α , \mathbf{y}_N^α , \mathbf{y}_S^β e ξ . Sendo assim, com o intuito de aplicar o princípio da energia mecânica total estacionária, calcula-se a variação da Eq. (7.13) pela expressão

$$\delta \Pi_{\text{cont}}^\alpha = \delta \lambda_n^\alpha g_n^\alpha + \lambda_n^\alpha \bar{\mathbf{n}} \cdot \delta \mathbf{y}_N^\alpha + \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta \mathbf{y}_S^\beta + \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \xi} \cdot \delta \xi, \quad (7.14)$$

onde o índice β é somado em todos os nós do elemento alvo. Os termos da Eq. (7.14) multiplicando as variações $\delta \mathbf{y}_N^\alpha$ e $\delta \mathbf{y}_S^\beta$ podem ser adicionados à Eq. (2.54) como forças de contato, denotadas por $\mathbf{f}_{\text{cont}}^\alpha$ e $\mathbf{f}_{\text{cont}}^\beta$, respectivamente. Já os termos multiplicando $\delta \lambda_n^\alpha$ e $\delta \xi$ são igualados a zero e introduzidos como equações adicionais do sistema.

Levando em conta que $\mathbf{y}_S = \varphi^\beta \mathbf{y}_S^\beta$, a derivada parcial de g_n^α com relação a \mathbf{y}_S^β pode ser calculada pela expressão

$$\frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -\varphi^\beta \bar{\mathbf{n}} + (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}, \quad (7.15)$$

logo, as forças de contato aplicadas no nó projétil e nos nós do elemento alvo podem ser expressas, respectivamente, como

$$\mathbf{f}_{\text{cont}}^\alpha = \lambda_n^\alpha \bar{\mathbf{n}}, \quad \text{e} \quad (7.16)$$

$$\mathbf{f}_{\text{cont}}^\beta = \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -\lambda_n^\alpha \varphi^\beta \bar{\mathbf{n}} + \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}. \quad (7.17)$$

O termo da Eq. (7.14) multiplicando $\delta \lambda_n^\alpha$ introduz a condição de não-penetracão ao sistema, lida como

$$g_n^\alpha = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0. \quad (7.18)$$

Por fim, para o cálculo do termo multiplicando $\delta \xi$, leva-se em conta que a derivada parcial de g_n^α com relação a ξ é dada pela expressão

$$\frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \xi_i} = -\mathbf{t}^i \cdot \bar{\mathbf{n}} + (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \xi_i} = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \xi_i}. \quad (7.19)$$

Vale ser dito que, para os casos em que são utilizados elementos finitos de primeira ordem, $\bar{\mathbf{n}}$ é constante ao longo do elemento, logo $\partial\bar{\mathbf{n}}/\partial\xi_i = 0$ e a parcela da Eq. (7.14) associada à $\delta\xi$ se anula. Por esse motivo, modelos clássicos de contato com elementos lineares desconsideram a variação de ξ em sua formulação, e mesmo modelos aplicados a elementos de alta ordem comumente utilizam diferentes abordagens para tratar desse problema. Em ??), por exemplo, as coordenadas adimensionais são mantidas fixas, e atualizadas somente após cada processo de Newton-Raphson global, durante a verificação das mudanças de condições de contato. Já no presente trabalho, opta-se por introduzir ξ como um dos parâmetros do sistema, atualizando-o a cada iteração do processo de Newton-Raphson. Dessa forma, o termo da Eq. (7.14) multiplicando a variação $\delta\xi$ é introduzido como uma equação adicional do sistema, denominada condição de deslizamento, e lida como

$$\lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \xi} = \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \xi} = \mathbf{0}. \quad (7.20)$$

As Eqs. (7.16) a (7.18) e (7.20) constituem as parcelas do resíduo associadas ao contato sem atrito, e devem ser linearizadas com relação às posições nodais, aos multiplicadores de Lagrange (λ_n^α) e às coordenadas adimensionais de contato (ξ) de forma a garantir a convergência adequada do processo de Newton-Raphson global. Uma vez que o modelo de contato implementado não conta com a possibilidade de adesão, as forças normais de contato devem ser sempre compressivas, isto é, $\lambda_n^\alpha < 0$. Sendo assim, a condição aplicada no algoritmo para a desativação do contato é $\lambda_n^\alpha \geq 0$.

7.3.2 Contato com atrito de Coulomb

Para o caso com atrito, além da força normal (λ_n^α), considera-se, para cada nó projetivo α , uma força transversal de contato, denotada por $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$. Neste trabalho, determina-se $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ pela lei de Coulomb, que pode ser expressa pelas seguintes condições:

$$\theta = \|\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha\| - \mu |\lambda_n^\alpha| \leq 0, \quad \text{e} \quad (7.21)$$

$$\theta \mathbf{g}_t^\alpha = \mathbf{0}, \quad (7.22)$$

onde μ é o coeficiente de atrito, e \mathbf{g}_t^α é a distância tangencial do nó α ao ponto original de contato. O vetor \mathbf{g}_t^α pode ser definido como a projeção do deslizamento total (\mathbf{g}^α) sobre o plano tangente do elemento alvo, isto é,

$$\mathbf{g}_t^\alpha = \mathbf{g}^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \bar{\mathbf{n}} \quad (7.23)$$

onde $\mathbf{g}^\alpha = \mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_{stick}$, sendo \mathbf{y}_{stick} a posição original de contato, também chamada de posição de aderência (*stick*). A Eq. (7.22) é chamada condição de Kuhn-Tucker. A partir dela, o seguinte pode ser inferido:

1. Se θ é menor que 0, isto é, se a magnitude da força transversal é menor que $\mu|\lambda_n^\alpha|$, então não deve haver deslizamento tangencial;

2. Se houver deslizamento tangencial, então θ precisa ser nulo, isto é, a força transversal deve ter mesma magnitude de $\mu|\lambda_n^\alpha|$.

Essas condições são chamadas, respectivamente, aderência e deslizamento, sendo tratados separadamente no modelo desenvolvido. O algoritmo implementado é baseado em etapas de previsão e correção, isto é: assume-se inicialmente condição de aderência, e calcula-se o valor de θ . Se $\theta \leq 0$, a previsão está correta e a solução é mantida. Caso contrário, assume-se a condição de deslizamento.

7.3.2.1 Condição de aderência

No caso de aderência, temos, além da condição de impenetrabilidade, uma condição de não-deslizamento, que é imposta também pelo método dos multiplicadores de Lagrange. Assim, para cada nó α em aderência, adiciona-se à energia mecânica total, além da parcela Π_{cont}^α dada na Eq. (7.13), a parcela

$$\Pi_{\text{ader}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \mathbf{g}_t^\alpha \quad (7.24)$$

É importante notar que, pelo fato de $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ ser uma força transversal, ela pode ser escrita de forma única como combinação linear dos vetores tangentes, isto é, $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha = (\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i$. Aplicando ainda a Eq. (7.23), e levando em conta que $\bar{\mathbf{t}}^i \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0$ para todo vetor tangente i , temos que a Eq. (7.24) pode ser reescrita simplesmente como

$$\Pi_{\text{ader}}^\alpha = [(\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i] \cdot [\mathbf{g}^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \bar{\mathbf{n}}] = (\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i \cdot \mathbf{g}^\alpha = (\lambda_t^\alpha)^i (g_t^\alpha)^i, \quad (7.25)$$

onde o índice i é somado sobre todos os vetores tangente do elemento, $(g_t^\alpha)^i = \mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{t}}^i$ é a projeção do deslizamento sobre o vetor tangente i , e os termos $(\lambda_t^\alpha)^i$ são multiplicadores de Lagrange que representam a força transversal na direção i . Nota-se também que, pela condição de aderência, a coordenada adimensional de contato ξ deve ser mantida fixa, e portanto sua variação não é considerada neste caso. Dessa forma, a variação da Eq. (7.25) pode ser escrita como

$$\delta \Pi_{\text{ader}}^\alpha = \delta(\lambda_t^\alpha)^i (g_t^\alpha)^i + (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial(g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} \cdot \delta \mathbf{y}_N^\alpha + (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial(g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta \mathbf{y}_S^\beta. \quad (7.26)$$

Os termos da Eq. (7.26) multiplicando $\delta \mathbf{y}^\alpha$ e $\delta \mathbf{y}^\beta$ são adicionados à equação de equilíbrio global como forças tangenciais de aderência, expressas, respectivamente, como

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\alpha = (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial(g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} = (\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i, \quad \text{e} \quad (7.27)$$

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\beta = (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial(g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -(\lambda_t^\alpha)^i \varphi^\beta \bar{\mathbf{t}}^i + (\lambda_t^\alpha)^i \mathbf{g}^\alpha \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}, \quad (7.28)$$

e o termo multiplicando $(\lambda_t^\alpha)^i$ introduz novas equações a serem adicionada ao sistema global, denominadas condições de não-deslizamento, dadas, para cada índice i de vetor tangente, pela expressão

$$(g_t^\alpha)^i = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_{\text{stick}}) \cdot \bar{\mathbf{t}}^i = 0, \quad (7.29)$$

Reitera-se que a parcela de energia referente à condição de impenetrabilidade, apresentada na subseção 7.3.1, também deve ser incluída neste caso. Dessa forma, as Eqs. (7.16) e (7.17) (forças de contato normal) continuam sendo adicionadas à equação de equilíbrio global, e a Eq. (7.18) (condição de não-penetrabilidade) também é considerada no sistema. No entanto, pelo fato de não haver variação de $\boldsymbol{\xi}$ neste caso, a Eq. (7.20) (condição de deslizamento) é desconsiderada.

7.3.2.2 Condição de deslizamento

Na condição de atrito com deslizamento, $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ deixa de ser representada por meio de parâmetros nodais e torna-se uma força prescrita não-conservativa aplicada no nó α . Conforme discutido anteriormente, pela lei de Coulomb, a magnitude de $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ deve ser igual à magnitude de $\mu\lambda_n^\alpha$. Além disso, a direção da força é tomada contrária à direção do deslizamento. Assim, podemos escrever

$$\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha = -\mu|\lambda_n^\alpha| \frac{\mathbf{g}_t^\alpha}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|} \quad \text{ou} \quad (\lambda_t^\alpha)^i = -\mu|\lambda_n^\alpha| \frac{(g_t^\alpha)^i}{\|g_t^\alpha\|}, \quad (7.30)$$

para cada índice i de vetor tangente. Podemos ainda aplicar o fato de λ_n^α ser negativo, conforme discutido previamente. Assim, $|\lambda_n^\alpha| = -\lambda_n^\alpha$, e a Eq. (7.30) pode ser reescrita simplesmente como

$$\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha = \mu\lambda_n^\alpha \frac{\mathbf{g}_t^\alpha}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|} \quad \text{ou} \quad (\lambda_t^\alpha)^i = \mu\lambda_n^\alpha \frac{(g_t^\alpha)^i}{\|g_t^\alpha\|}. \quad (7.31)$$

Neste caso, a força prescrita $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ é adicionada diretamente à variação de energia mecânica total do sistema, pela parcela $\delta\Pi_{\text{desliz}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \delta\mathbf{g}_t^\alpha$. Como \mathbf{g}_t^α depende de \mathbf{y}_N^α , \mathbf{y}_S^β e $\boldsymbol{\xi}$, podemos escrever

$$\delta\Pi_{\text{desliz}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \delta\mathbf{g}_t^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\mathbf{g}_t^\alpha}{\partial\mathbf{y}_N^\alpha} \cdot \delta\mathbf{y}_N^\alpha + \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\mathbf{g}_t^\alpha}{\partial\mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta\mathbf{y}_S^\beta + \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\mathbf{g}_t^\alpha}{\partial\boldsymbol{\xi}} \cdot \delta\boldsymbol{\xi} \quad (7.32)$$

onde o índice β é somado sobre todos os nós do elemento alvo. De forma análoga aos casos anteriores, os termos da Eq. (7.32) multiplicando as variações $\delta\mathbf{y}_N^\alpha$ e $\delta\mathbf{y}_S^\beta$ podem ser adicionados à equação de equilíbrio global como forças tangenciais de atrito, expressas, respectivamente, como

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\mathbf{g}_t^\alpha}{\partial\mathbf{y}_N^\alpha} = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha - (\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}})\bar{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha, \quad \text{e} \quad (7.33)$$

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\beta = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\mathbf{g}_t^\alpha}{\partial\mathbf{y}_S^\beta} = -\varphi^\alpha \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}})\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial\bar{\mathbf{n}}}{\partial\mathbf{y}_S^\beta}, \quad (7.34)$$

onde utilizou-se o fato de que $\boldsymbol{\lambda}_t$ é uma força tangente, isto é, $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0$. Já a parcela de Eq. (7.32) multiplicando $\delta\boldsymbol{\xi}$ é adicionada à Eq. (7.20) e igualada a zero, resultando na seguinte condição de deslizamento:

$$[\lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}})\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha] \cdot \frac{\partial\bar{\mathbf{n}}}{\partial\boldsymbol{\xi}} = 0. \quad (7.35)$$

Novamente, observa-se que as forças normais de contato, dispostas nas Eqs. (7.16) e (7.17), continuam sendo adicionadas à equação de equilíbrio global, e a condição de não-penetrão, Eq. (7.18), também é considerada sem modificações. É possível verificar que, neste caso, a linearização das equações resulta em uma matriz tangente não-simétrica, ao contrário dos problemas estruturais apresentados até então neste trabalho, exigindo um tratamento numérico diferenciado.

7.4 Exemplos numéricos

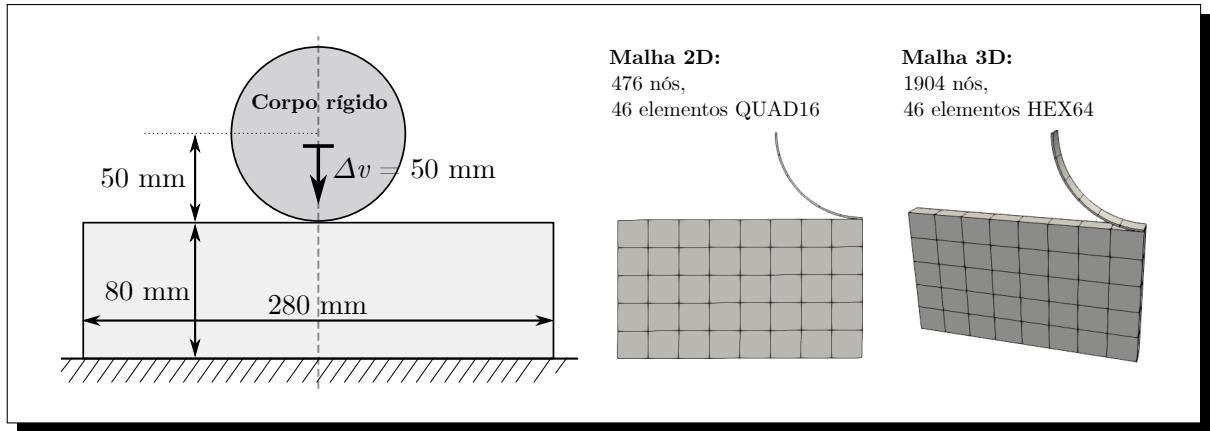
A formulação de contato descrita neste capítulo é implementada no programa desenvolvido, e aplicada a exemplos numéricos em duas ou três dimensões. A seguir, são apresentados alguns desses exemplos, com o intuito de verificar ou demonstrar as possibilidades de aplicação do algoritmo desenvolvido. São apresentados ainda exemplos adicionais de conformação de metais, baseados nos exemplos originalmente propostos por ??), porém com a consideração de atrito.

7.4.1 Contato entre cilindro e bloco hiperelástico

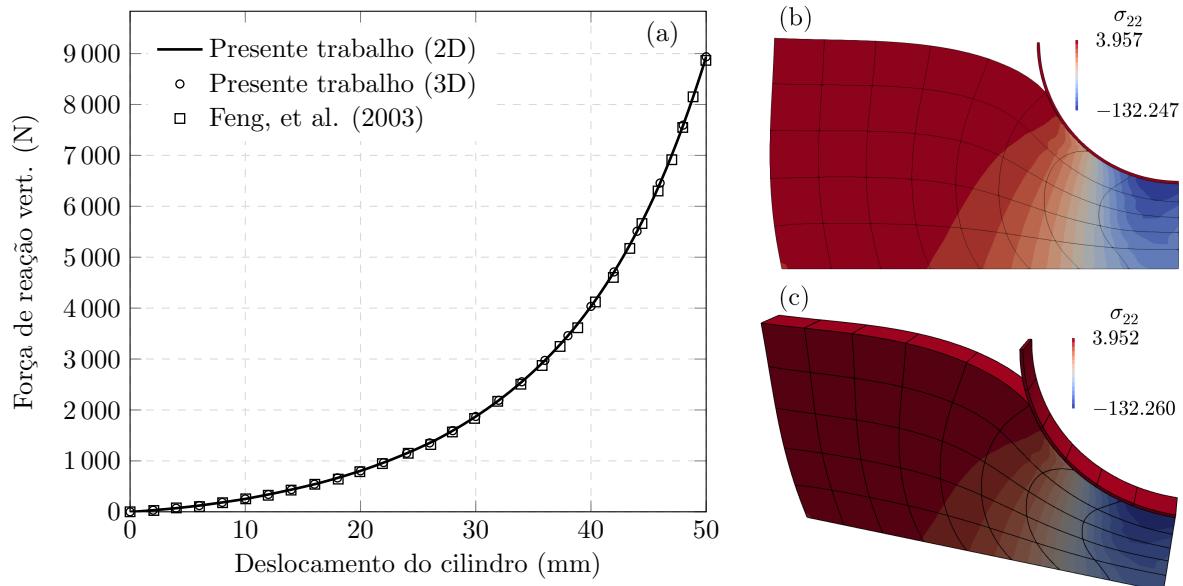
Este exemplo, proposto originalmente por ??), é utilizado para verificar o algoritmo de contato (com atrito) implementado. Considera-se um cilindro rígido sujeito a deslocamento prescrito sobre um bloco hiperelástico, conforme os dados dispostos na Figura 37. De forma a verificar as duas versões do algoritmo, o problema é analisado tanto em 2 quanto em 3 dimensões, utilizando elementos finitos quadrilaterais e hexaédricos de ordem 3 (Q16 e HEX64, respectivamente). Por conta da simetria do problema, apenas metade do domínio é discretizado, com as devidas condições de contorno aplicadas no eixo de simetria. No caso 3D, as interfaces do sólido são ainda restritas no eixo z, de forma a simular o estado plano de deformações aplicado no exemplo original. Além disso, a espessura é tomada como 10 mm de forma a facilitar a visualização, porém, os resultados obtidos são divididos por 10 quando aplicável, para possibilitar a comparação com o problema original, onde aplica-se espessura unitária. Com relação ao contato, as interfaces do cilindro são discretizadas como segmentos alvos, enquanto as interfaces do bloco como nós projéteis, e o coeficiente de atrito é $\mu = 0,4$. Por fim, o número de passos de tempo adotado é 100.

De forma a permitir a concordância com o trabalho de ??), utiliza-se neste exemplo em particular a lei hiperelástica de Blatz-Ko, onde temos $\mathbf{S} = G(J\mathbf{C}^{-1} - \mathbf{C}^{-2})$, sendo considerado $G = 10 \text{ N/mm}^2$.

Na Figura 38, são mostrados os resultados obtidos para os dois casos analisados. Na Figura 38(a), apresenta-se o gráfico de reação vertical total, onde observa-se uma excelente concordância com a referência em ambos os casos. Esses valores são tomados como a soma das forças de reação vertical em todos os nós do contorno inferior do bloco, multiplicado por dois para considerar a parte simétrica não discretizada do domínio. Por fim, nas Figuras 38(b) e 38(c) mostram-se as configurações deformadas do problema no último passo, para os casos 2D e 3D, respectivamente, com componentes σ_{22} da tensão de Cauchy

Figura 37 – Dados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico

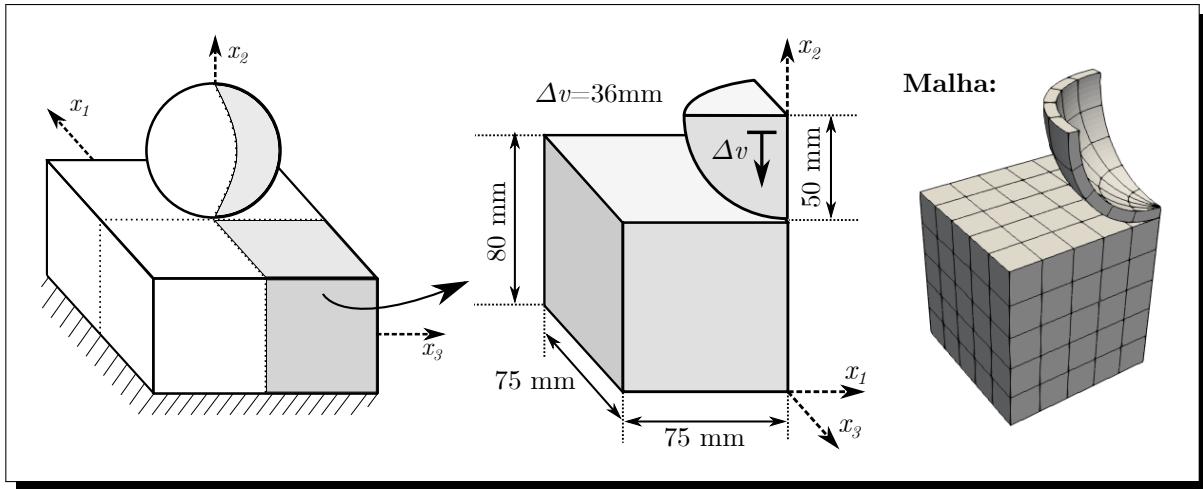
ilustradas em mapa de cores. Como esperado, os valores máximo e mínimo de tensão são consistentes entre os dois casos, apesar de se tratarem de análises em dimensões diferentes.

Figura 38 – Resultados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico, com (a) gráfico de força de reação vertical e configuração deformada final com componentes σ_{22} de tensão de Cauchy em mapa de cores, para os casos (b) 2D e (c) 3D

7.4.2 Contato entre esfera e bloco hiperelástico

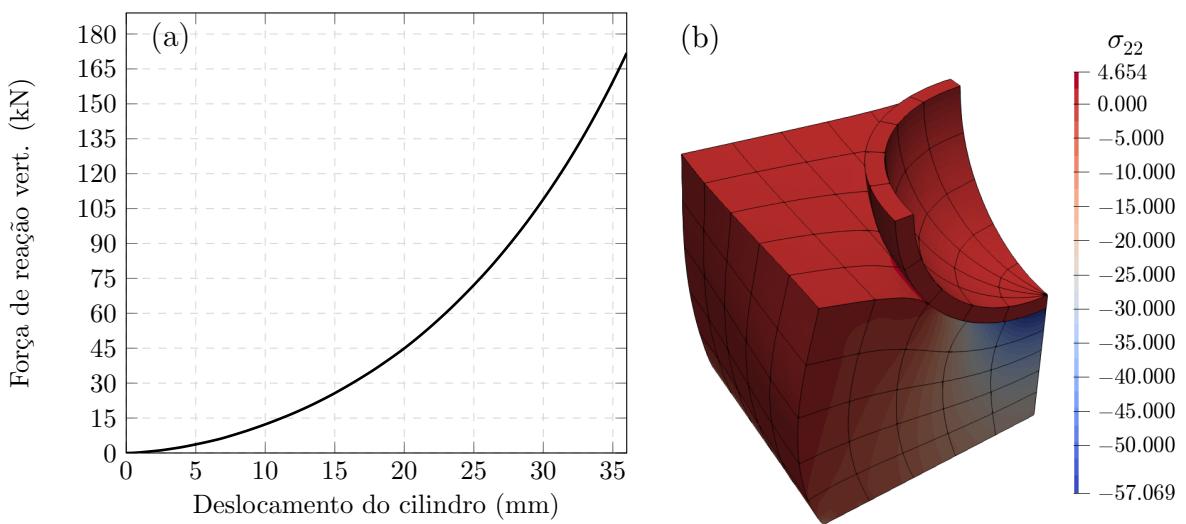
Nesta seção, propõe-se uma versão intrinsecamente 3D do exemplo anterior, considerando o contato entre uma superfície rígida esférica e um bloco tridimensional, com geometria disposta na [Figura 39](#). Devido à simetria, apenas 1/4 do exemplo é discretizado, sendo aplicadas as respectivas restrições nos eixos de simetria gerados. A malha utiliza 5120 nós, e 150 elementos hexaédricos de ordem 3 (HEX64). Novamente, considera-se a lei hiperelástica de Blatz-Ko para o bloco, com $G = 10 \text{ N/mm}^2$, 100 passos de tempo, e coeficiente de atrito $\mu = 0,4$.

Figura 39 – Dados do exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico



O gráfico de força de reação vertical para este caso é apresentado na [Figura 40\(a\)](#), onde os valores são obtidos pela soma das forças de reação de cada nó na interface inferior do bloco, multiplicado por 4 para considerar as parcelas simétricas não discretizadas. Além disso, apresenta-se na [Figura 40\(b\)](#) a configuração deformada final do problema, isto é, a configuração no passo 100, sendo indicadas as componentes σ_{22} da tensão de Cauchy em mapa de cores.

Figura 40 – (a) Força de reação vertical e (b) configuração deformada final para exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico

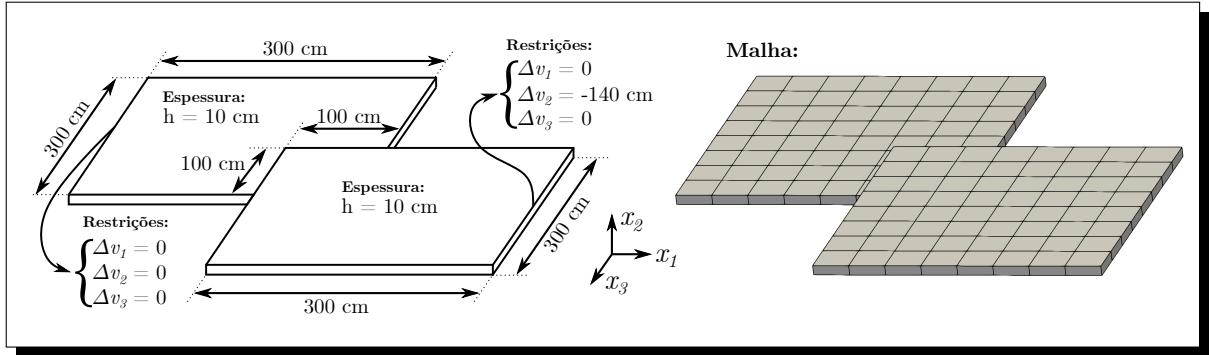


7.4.3 Contato entre lajes em balanço

Neste exemplo, propõe-se o contato sem atrito entre duas lajes em balanço, com geometria disposta na [Figura 41](#). Aplica-se deslocamento prescrito vertical em um dos apoios, evoluindo monotonicamente de 0 a -140 cm em um total de 200 passos de tempo. Com relação à malha, cada laje é discretizada em 64 elementos hexaédricos de ordem 3

(HEX64). Por fim, o material adotado neste caso é neo-Hookeano, com $E = 1000 \text{ kN/cm}^2$ e $\nu = 0,3$.

Figura 41 – Dados do exemplo de contato entre lajes



Na [Figura 42](#) são apresentadas as configurações deformadas para os tempos $t = 1/4$, $t = 1/2$, $t = 3/4$ (configurações intermediárias) e $t = 1$ (configuração final), com mapas de cores indicando a componente horizontal da tensão de Cauchy, σ_{11} . Além disso, na [Figura 43](#) são mostradas as forças de reação no apoio onde é aplicado o deslocamento prescrito, tomadas, para cada caso, como a soma das forças em todos os nós do apoio. Observa-se que as reações no eixo x_1 e x_3 apresentam trechos de descontinuidade. Esses erros são esperados no presente algoritmo, uma vez que a ativação e desativação de nós de contato entre passos de tempo é um processo naturalmente descontínuo, mas podem ser reduzidos com o refinamento da malha.

7.4.4 Dobramento simples de chapa metálica

Este exemplo é proposto originalmente em ??), sendo reapresentado neste trabalho para mostrar as aplicações do algoritmo de contato implementado. Trata-se da simulação do processo de dobramento de uma chapa metálica retangular, que assume formato de L após ser impelida contra dois anteparos rígidos. Assume-se que as peças sejam suficientemente lubrificadas de forma a garantir que o atrito possa ser desprezado. Os dados do exemplo estão dispostos na [Figura 44](#), sendo novamente aproveitada a simetria para discretização do sólido.

Os blocos superior e inferior são simulados como corpos rígidos. Já para a chapa metálica considera-se o material *Mild Steel Ck15*, simulado pelo modelo elasto-plástico em grandes deformações com encruamento cinemático de Armstrong-Frederick. Os parâmetros do modelo constitutivo são retirados do trabalho de ??), e apresentados na [Tabela 4](#).

Tabela 4 – Parâmetros do material *Mild Steel Ck15*, retirados de ??)

| Λ_e (MPa) | G_e (MPa) | σ_Y (MPa) | c (MPa) | b |
|-------------------|-------------|------------------|-----------|-----|
| 173 333 | 80 000 | 300 | 1 900 | 8,5 |

Figura 42 – Configurações deformadas do exemplo de contato entre lajes para 4 passos de tempo diferentes, com componente σ_{11} da tensão de Cauchy em mapa de cores

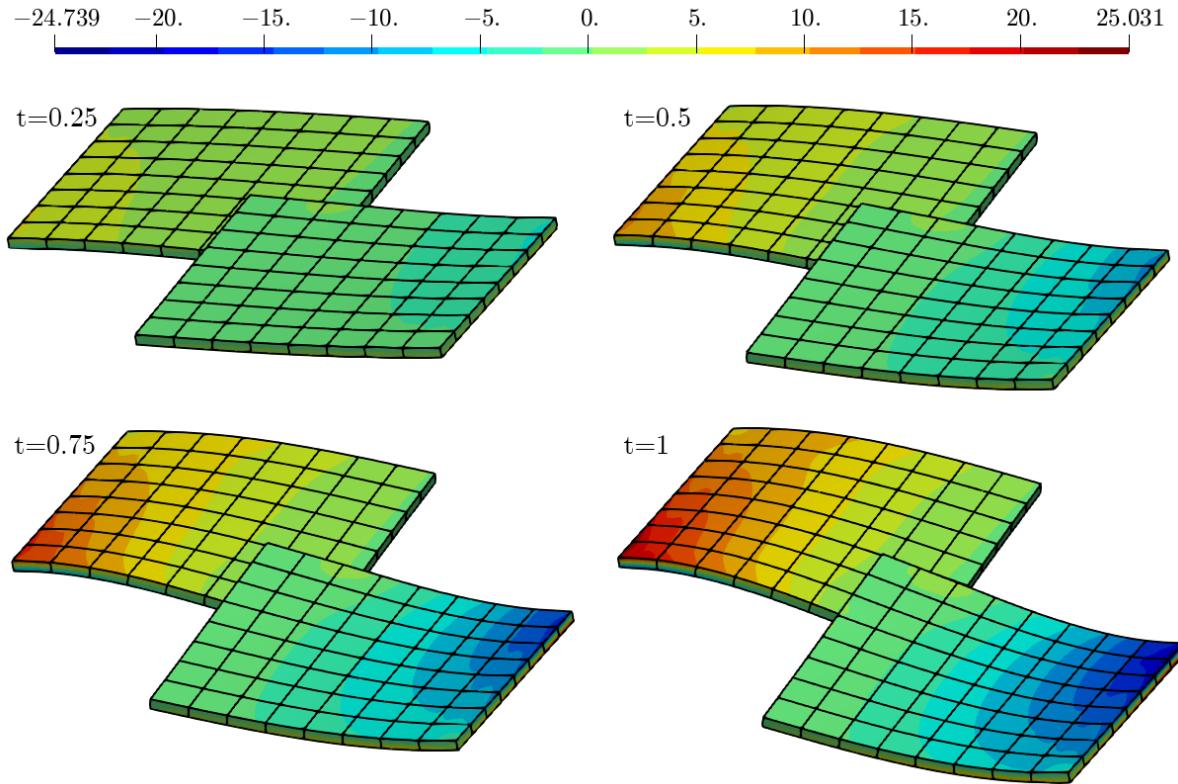
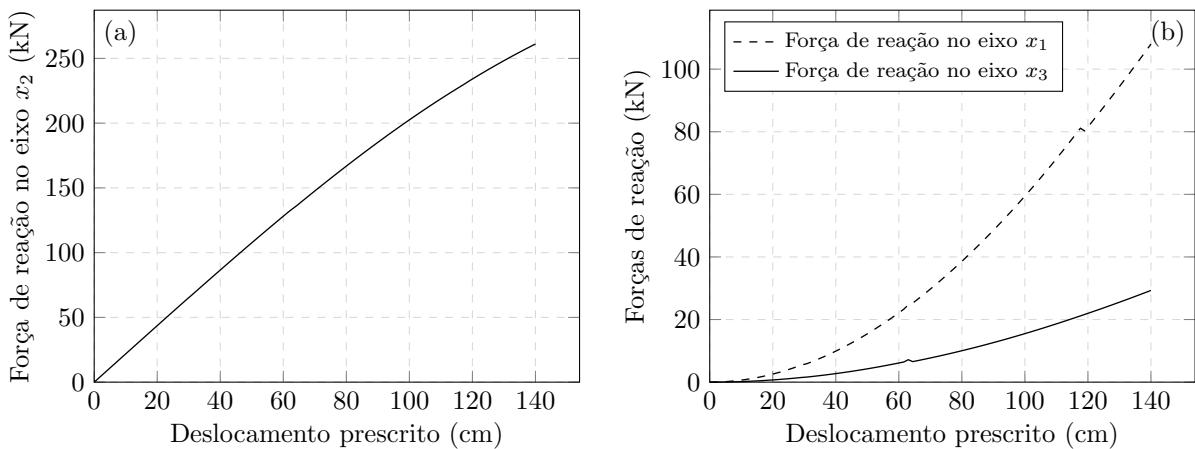
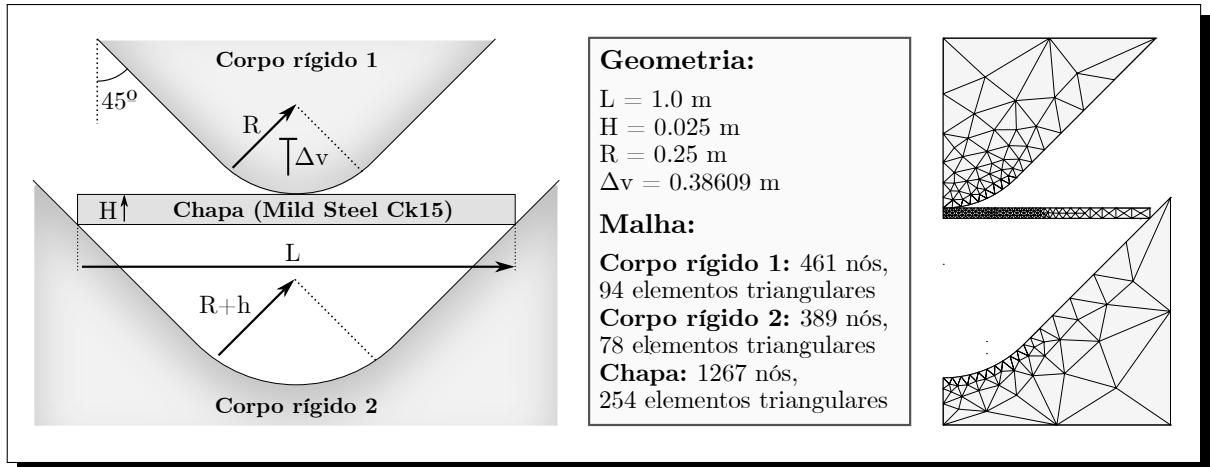
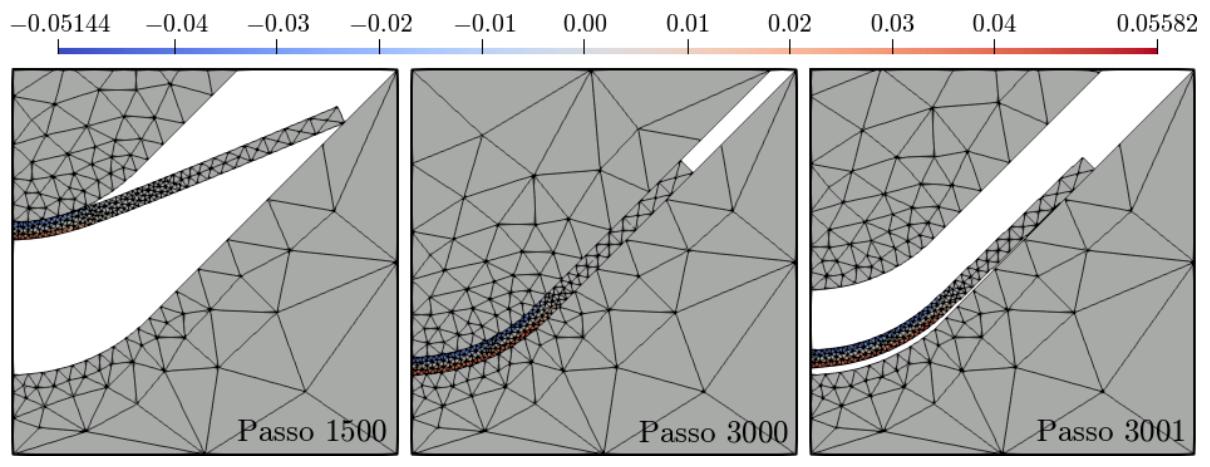


Figura 43 – Gráficos reações de apoio nas direções (a) x_2 , (b) x_1 e x_3 para o exemplo de contato entre lajes



O processo de dobramento é simulado em 3000 passos de deslocamento prescrito. Em seguida, aplica-se mais um passo de retirada do anteparo rígido, para que possa ser observado o recuo (*Springback*) manifestado na chapa metálica. As configurações deformadas de alguns passos chaves da análise são mostradas na [Figura 45](#), incluindo a configuração final após a retirada da peça. Foi obtido um ângulo final da chapa metálica de aproximadamente $92,12^\circ$, isto é, houve, após o *Springback*, uma variação de $0,88^\circ$ com relação ao ângulo imposto de 90° .

Figura 44 – Dados do exemplo de dobramento simples de chapa metálica**Figura 45** – Configurações deformadas para o exemplo de dobramento simples de chapa metálica, com componentes horizontais de deformação plástica, $(E_p)_{11}$ ilustradas em mapas de cores

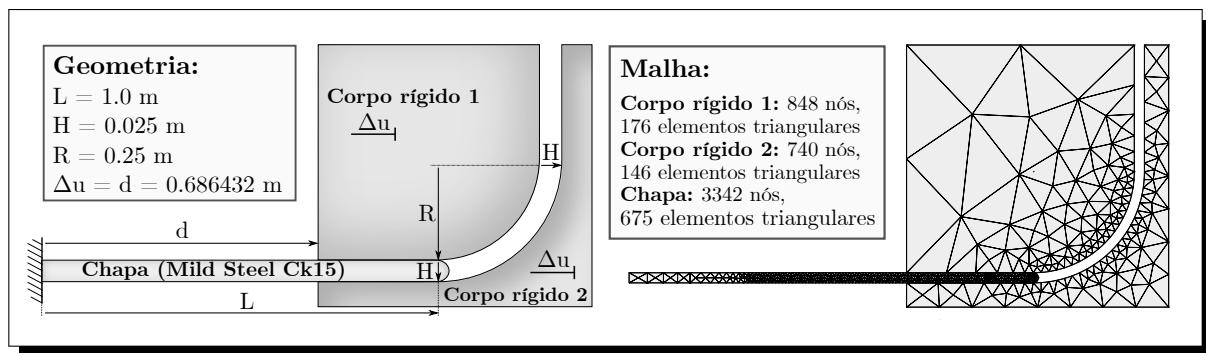
Fonte: ??)

7.4.5 Dobramento direcionado (*draw bending*) de barra metálica

Neste exemplo é feita uma simulação numérica do processo de dobramento direcionado, apresentado como alternativa ao dobramento simples (exemplo anterior) para a obtenção de um mesmo formato de peça. Este exemplo é proposto originalmente em ?? para o caso sem atrito, e foi estendido neste texto para o caso com atrito, considerando os coeficientes $\mu = 0,05$ e $\mu = 0,1$. Os dados de geometria e condição de contorno são apresentados na Figura 46. Novamente, considera-se o material *Mild Steel Ck15* para a chapa, cujos parâmetros são dados na Tabela 4. O processo de dobramento é feito em 3000 passos de deslocamento prescrito, seguidos de 1 passo onde os anteparos rígidos são removidos, para demonstrar o efeito do *Springback*.

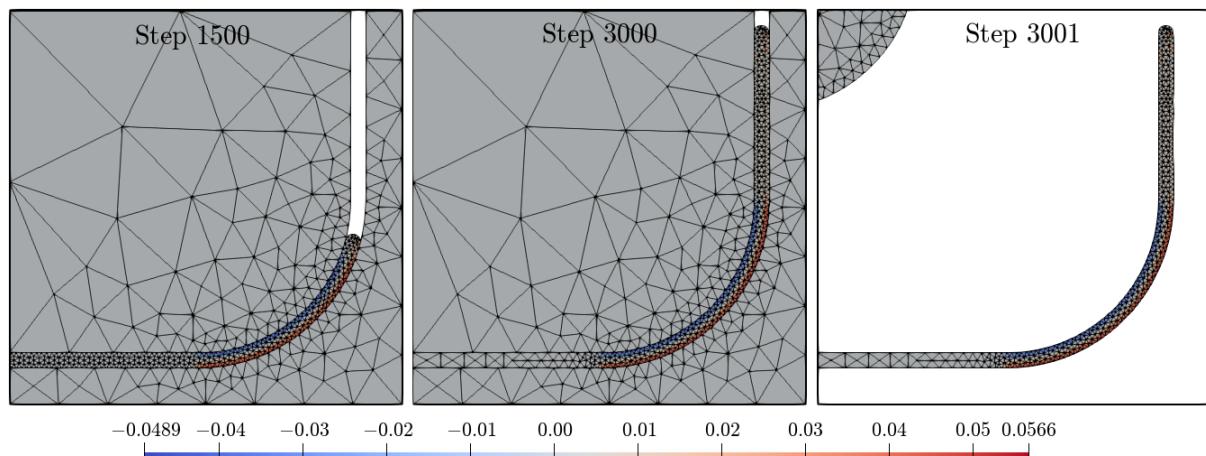
A principal diferença do dobramento direcionado com relação ao dobramento simples é o fato de que algumas regiões da peça são sujeitas ao dobramento seguido de retificação, ativando o efeito de *Bauschinger*. As consequências desse efeito podem ser vistas na Figura 47, onde apresentam-se as configurações deformadas e a componente $(E_p)_{11}$ das

Figura 46 – Dados do exemplo de dobramento direcionado (*draw bending*) de barra metálica



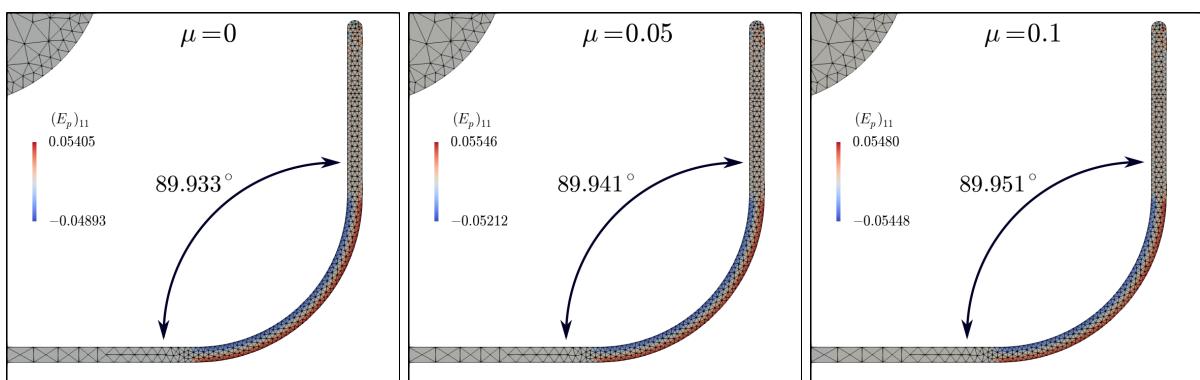
deformações plásticas para o caso sem atrito. Como pode ser visto, ao contrário do exemplo anterior, neste caso as deformações plásticas não se concentram apenas na região central da peça, mas também residualmente na região superior, onde houve anteriormente o processo de dobramento.

Figura 47 – Configurações deformadas do exemplo de dobramento direcionado para o caso sem atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores



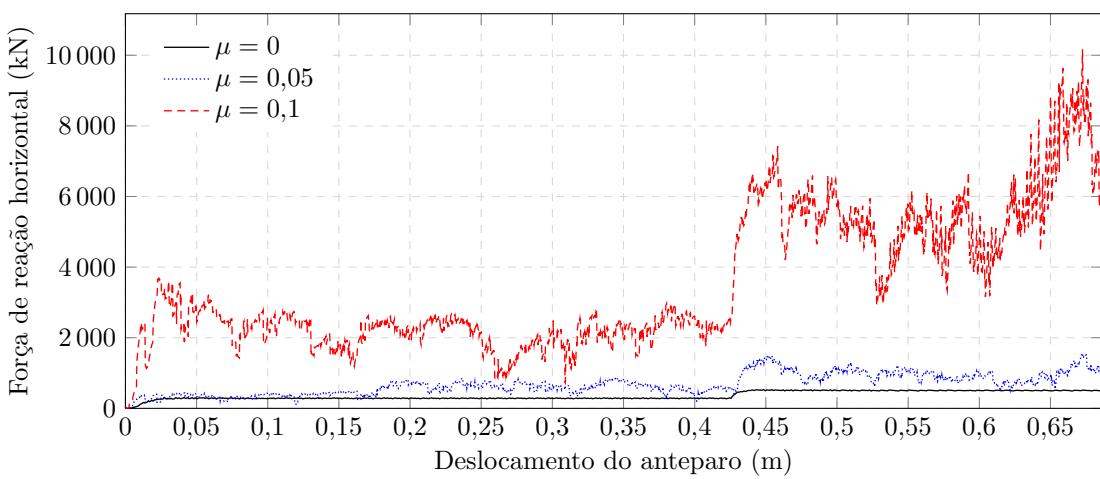
Como consequência, o exemplo de dobramento direcionado apresenta diferenças na sua configuração deformada final com relação ao dobramento simples: o ângulo obtido

Figura 48 – Configurações deformadas finais do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores



para a chapa neste caso é menor que 90° , como pode ser visto na Figura 48. Este ângulo varia de acordo com o coeficiente de atrito utilizado, porém, em todos os casos ele é bem mais próximo de 90° do que o ângulo obtido no exemplo de dobramento simples, o que indica uma conformação mais adequada ao formato desejado. Observa-se ainda que a diferença provocada pelo coeficiente de atrito possui influência mínima na configuração deformada. No entanto, conforme apresentado na Figura 49, este influencia altamente na reação de apoio horizontal, isto é, a força necessária para realizar o processo de dobramento direcionado (medida na extremidade esquerda da chapa).

Figura 49 – Gráficos de força de reação horizontal do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito

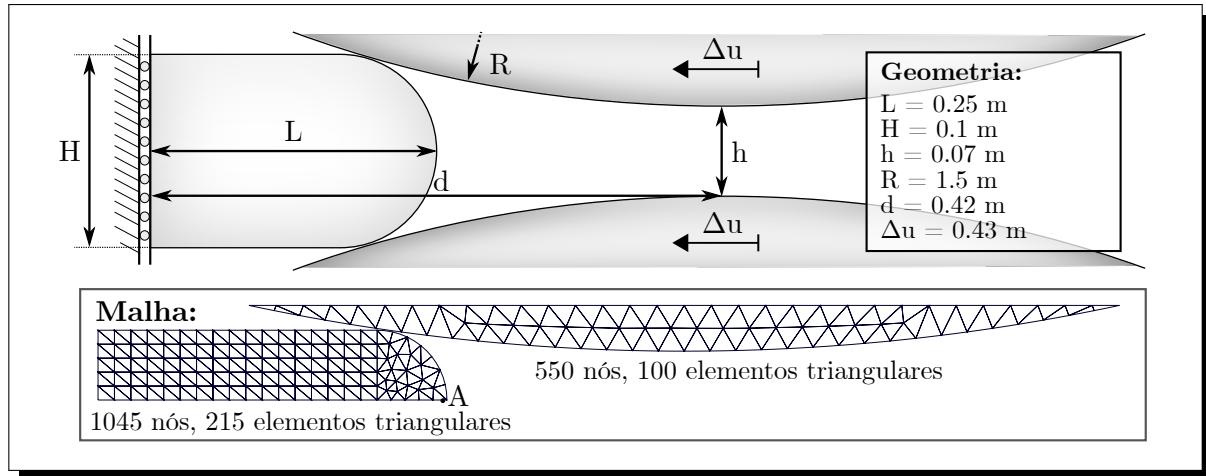
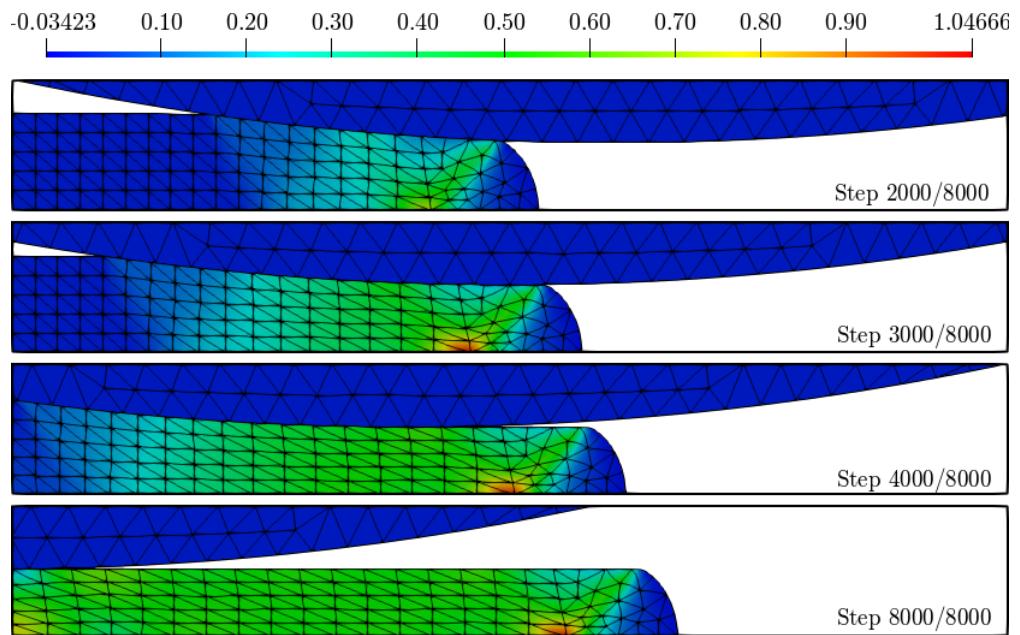


7.4.6 Extrusão

Assim como os exemplos anteriores, este é originalmente proposto em ??) para o caso sem atrito, sendo estendido neste texto para o caso com atrito, considerando os coeficientes $\mu = 0,05$ e $\mu = 0,1$. Trata-se de uma chapa metálica com material *Mild Steel Ck15* (Tabela 4), compelida entre anteparos rígidos de formato circular, a fim de reduzir a altura da sua seção transversal em aproximadamente 30%. Dada a simetria do problema, apenas a parte superior foi discretizada, sendo aplicada as devidas condições de contorno no eixo de simetria. Os dados de geometria e malha são apresentados na Figura 50.

O processo foi simulado em uma análise estática com 8000 passos de deslocamento prescrito, e utilizou-se estado plano de deformação para a chapa metálica. As configurações deformadas em diversos passos de tempo são mostradas para o caso sem atrito na Figura 51 e para o caso com coeficiente de atrito $\mu = 0,1$ na Figura 52. Embora a configuração deformada final seja aproximadamente igual para os dois casos no que diz respeito ao formato da peça, observa-se que a disposição das variáveis internas muda consideravelmente de um caso para o outro.

Na Figura 53 apresentam-se, por fim, os gráficos de reação horizontal total da chapa e deslocamento no ponto A ao longo do processo. O primeiro, mostrado na Figura 53(a), é calculado a partir da soma das forças internas horizontais de todos os nós do apoio na ex-

Figura 50 – Dados do exemplo de extrusão**Figura 51** – Configurações deformadas do exemplo de extrusão sem atrito, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores

tremidade esquerda, multiplicada por 2 de forma a considerar a parcela não discretizada do problema. Neste, observa-se uma alta influência do coeficiente de atrito, conforme esperado. Já o deslocamento no ponto A, mostrado na [Figura 53\(b\)](#), apresenta diferenças notáveis apenas no meio do processo, resultando no fim em valores praticamente equivalentes para os três casos.

Figura 52 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão com $\mu = 0,1$, apresentando a componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores

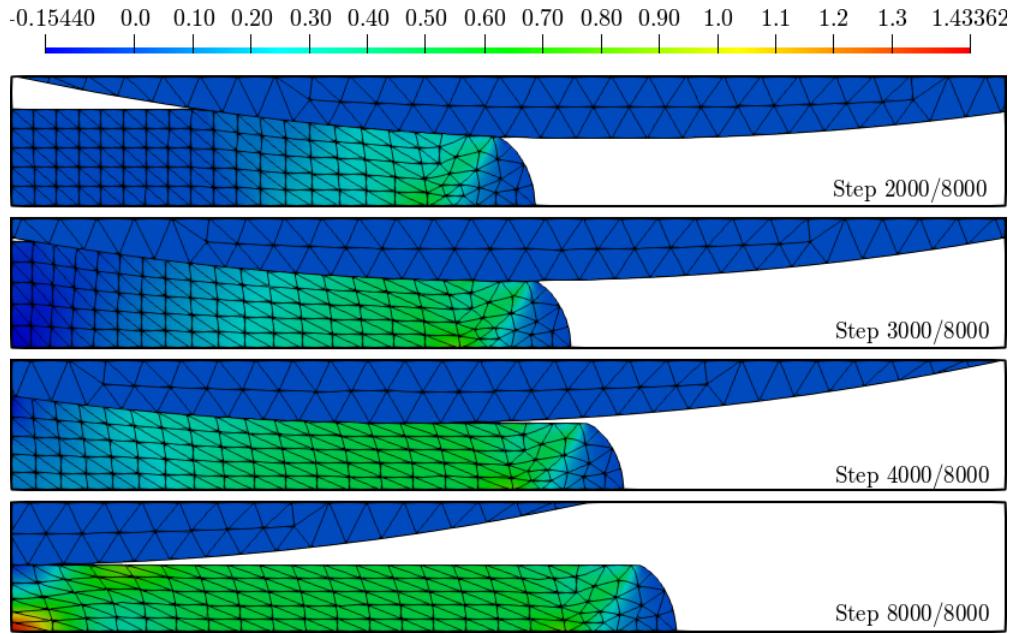
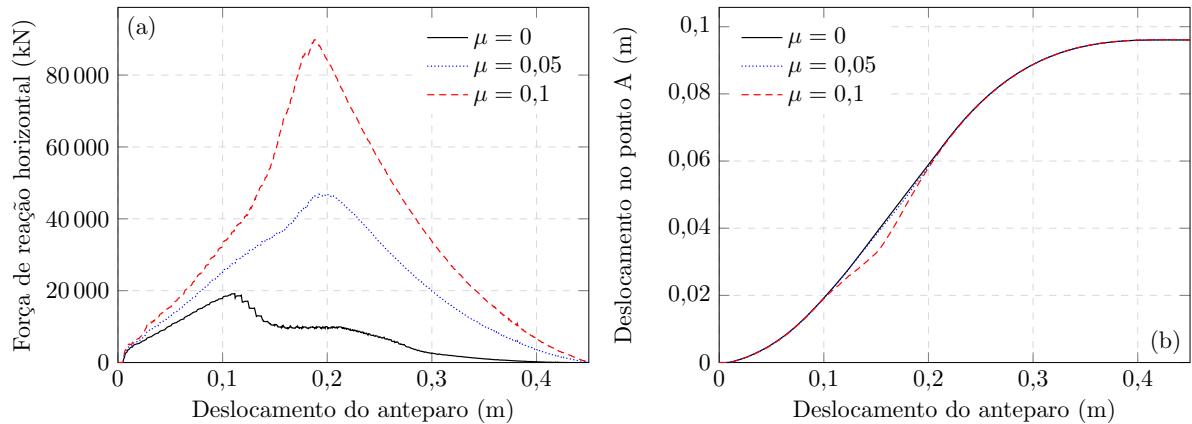


Figura 53 – Gráficos de (a) força de reação horizontal e (b) deslocamento no ponto A para o exemplo de extrusão



Capítulo 8

Sólidos e fluidos incompressíveis

Até então, o presente trabalho tem focado exclusivamente em modelos constitutivos compressíveis, isto é, que permitem deformações volumétricas. Isso se deve especificamente às leis hiperelásticas aplicadas, que apresentam componentes volumétricas, associadas ao parâmetro de Lamé Λ . Analisando-se os modelos apresentados na [seção 2.3](#), é possível observar que Λ funciona como um parâmetro de penalidade para a condição de incompressibilidade. Sendo assim, as deformações volumétricas são mais próximas de zero quanto maior o valor de Λ . No entanto, é impossível chegar ao caso totalmente incompressível, isto é, com deformações volumétricas nulas, apenas usando esses modelos.

A seguir, apresentaremos uma formulação para tratar modelos totalmente incompressíveis, baseada no trabalho de ??), que adota uma abordagem mista baseada em posições e pressões. Além de aplicarmos essa formulação a sólidos – tomando como base os modelos constitutivos discutidos anteriormente –, também a utilizamos para simular fluidos, especificamente fluidos Newtonianos incompressíveis. A teoria é abordada de forma geral na [seção 8.1](#), sendo particularizada para o caso sólido na [seção 8.2](#), e para fluidos Newtonianos incompressíveis na [seção 8.3](#).

Neste capítulo, trataremos exclusivamente de problemas isotérmicos, ou seja, sem levar em conta os efeitos da expansão térmica ou demais termos relacionados ao acoplamento termo-mecânico. Esses aspectos serão discutidos com maiores detalhes no Capítulo 9, em um contexto mais abrangente.

8.1 Formulação mista do MEF para materiais incompressíveis

No contexto da dinâmica dos fluidos computacional, a condição de incompressibilidade é comumente satisfeita ao anular-se o divergente das velocidades (??). Porém, em abordagens Lagrangianas, especialmente as que não utilizam velocidades como parâmetros nodais, torna-se mais conveniente aplicar a condição de incompressibilidade por meio do Jacobiano, inserindo-a diretamente no modelo constitutivo do material.

Levando em conta que o Jacobiano representa a deformação volumétrica do corpo, conforme discutido na [subseção 2.1.2](#), a condição de incompressibilidade pode ser traduzida,

para cada ponto do domínio, como $J = 1$. Tal condição pode ser ainda representada como

$$J - 1 = 0 \quad \text{ou} \quad \ln(J) = 0. \quad (8.1)$$

A última forma da Eq. (8.1) é utilizada no modelo Neo-Hookeano da [subseção 2.3.2](#), sendo imposta de maneira aproximada pelo método das penalidades, em função do parâmetro Λ , conforme discutido anteriormente.

Para que a condição de incompressibilidade seja imposta de maneira precisa, substituir-se o método das penalidades pelo método dos multiplicadores de Lagrange. Sendo assim, a energia livre de Helmholtz do material é escrita na forma

$$\psi = \psi_{\text{iso}} - p \ln(J), \quad (8.2)$$

onde ψ_{iso} representa a parcela isocórica do modelo constitutivo, e p é um multiplicador de Lagrange que possui significado físico de pressão. Alternativamente, a condição de incompressibilidade poderia ser imposta utilizando a primeira forma da Eq. (8.1), conforme feito em [??](#)). No entanto, a segunda forma da Eq. (8.1) pode ser vantajosa do ponto de vista algébrico, por levemente simplificar determinadas equações apresentadas posteriormente.

Com a adição do novo parâmetro p , a variação da energia de deformação, originalmente apresentada na Eq. (2.19), passa a ser escrita como

$$\delta\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \delta\psi \, dV_0 = \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} : \delta\mathbf{E} + \frac{\partial\psi}{\partial p} \delta p \right) \, dV_0 = \int_{\Omega_0} [\mathbf{S} : \delta\mathbf{E} - \ln(J)\delta p] \, dV_0, \quad (8.3)$$

sendo a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, neste caso, dada por

$$\mathbf{S} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} = \frac{\partial\psi_{\text{iso}}}{\partial\mathbf{E}} - p \frac{\partial\ln(J)}{\partial\mathbf{E}} = \mathbf{S}' - p\mathbf{C}^{-1}, \quad (8.4)$$

onde $\mathbf{S}' = \partial\psi_{\text{iso}}/\partial\mathbf{E}$ é a componente de \mathbf{S} associada à parcela isocórica do modelo constitutivo.

Observa-se que o modelo incompressível apresentado é geral, podendo ser aplicado em conjunto com qualquer modelo constitutivo, desde que as componentes ψ_{iso} e \mathbf{S}' sejam corretamente definidas, e ajustadas de forma a não considerar as parcelas de deformação volumétrica. Naturalmente, isso vale para os modelos constitutivos de sólidos já apresentados neste trabalho, e também para modelos de fluidos que serão apresentados posteriormente.

8.1.1 Discretização do problema

Os conceitos do Método dos Elementos Finitos discutidos na [seção 2.4](#) são igualmente válidos para a presente formulação. Porém, considerações adicionais devem ser feitas em decorrência da inclusão do parâmetro p . Analogamente às posições, a pressão é interpolada por valores nodais, isto é,

$$p = \varphi^\alpha p^\alpha, \quad (8.5)$$

onde φ^α é a função de forma do nó α , p^α é a pressão no nó α , e os índices α são somados por todos os nós do elemento finito.

Utilizando o método de Galerkin, podemos assumir também que $\delta p = \varphi^\alpha \delta p^\alpha$. Aplicando isso na Eq. (8.3), subsequentemente na Eq. (2.18) (princípio da energia mecânica total estacionária), e considerando a arbitrariedade de δp^α , introduz-se um novo conjunto de equações no sistema, denominadas equações de incompressibilidade. Essas são definidas, para cada nó α , como:

$$g_p^\alpha = - \int_{\Omega_0} \varphi^\alpha \ln(J) dV_0 = 0. \quad (8.6)$$

As equações de incompressibilidade (8.6) devem ser solucionadas em conjunto com as equações de equilíbrio (2.54) em um sistema não-linear cujas variáveis são as posições nodais (\mathbf{y}^α) e as pressões nodais (p^α). Assim como na [subseção 2.4.4](#), a linearização do problema é feita pelo método de Newton-Raphson. Assim, para que a matriz tangente seja obtida, deriva-se a Eq. (8.6) com relação às variáveis nodais, resultando nas seguintes expressões:

$$\frac{\partial g_p^\alpha}{\partial \mathbf{y}^\beta} = - \int_{\Omega_0} \varphi^\alpha \mathbf{C}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^\beta} dV_0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial g_p^\alpha}{\partial p^\beta} = 0, \quad (8.7)$$

onde $\partial \mathbf{E} / \partial \mathbf{y}^\beta$ é dado na Eq. (2.65). A linearização das equações de equilíbrio com relação às posições já foi desenvolvida na [subseção 2.4.4](#). No entanto, é necessário ainda linearizá-las com relação às pressões. Uma vez que essas não influenciam nas forças externas e iniciais, basta calcular a derivada das forças internas, dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^\alpha}{\partial p^\beta} = \int_{\Omega_0} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial p^\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^\alpha} dV_0 = - \int_{\Omega_0} \varphi^\beta \mathbf{C}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^\alpha} dV_0. \quad (8.8)$$

Observa-se que a Eq. (8.8) é análoga à primeira parte da Eq. (8.7), indicando que a formulação apresentada resulta em um sistema simétrico. No entanto, conforme demonstrado no próximo capítulo, isso deixa de ser válido para os casos onde a estabilização se torna necessária.

8.1.2 Formulação estabilizada

A inclusão de multiplicadores de Lagrange pode gerar instabilidades numéricas quando um determinado conjunto de condições, denominadas condições de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi (LBB), são identificadas. Para uma descrição detalhada das mesmas, os trabalhos originais de ??) e ??) podem ser consultados. Tais instabilidades numéricas podem comprometer a qualidade da solução obtida, demandando estratégias adicionais de estabilização. Diversos trabalhos se dedicam ao estudo dessas estratégias, como ??), ??) e ??), que exploram métodos onde diferentes funções de interpolação são adotadas para os campos de pressão.

Neste trabalho, será utilizada a técnica PSPG (*Pressure Stabilizing Petrov-Galerkin*), mais especificamente a versão Lagrangiana apresentada em ??), adaptada a partir da formulação Euleriana desenvolvida por ??) e ??). A estratégia consiste em adicionar à

equação de incompressibilidade (8.6) um termo estabilizante $\mathcal{S}_{\text{pspg}}^\alpha$, resultando na seguinte equação:

$$-\int_{\Omega_0} \varphi^\alpha \ln(J) dV_0 + \mathcal{S}_{\text{pspg}}^\alpha = 0. \quad (8.9)$$

Esse termo estabilizante é definido, para cada nó α , como a integral do produto interno entre o gradiente da função de forma nesse nó e a equação da conservação do momento Lagrangiana, ponderado por um escalar τ_{pspg} dividido pela massa específica:

$$\mathcal{S}_{\text{pspg}}^\alpha = \int_{\Omega_0} \frac{\tau_{\text{pspg}}}{\rho_0} (\nabla \varphi^\alpha) \cdot [\rho_0 \ddot{\mathbf{y}} - \nabla_0 \cdot (\mathbf{F} \mathbf{S}) - \mathbf{b}] dV_0. \quad (8.10)$$

Após determinadas manipulações algébricas, é possível ainda desenvolver-lo na forma:

$$\mathcal{S}_{\text{pspg}}^\alpha = \int_{\Omega_0} \frac{\tau_{\text{pspg}}}{\rho_0} (\nabla_0 \varphi^\alpha \cdot \mathbf{F}^{-1}) \cdot (\rho_0 \ddot{\mathbf{y}} - \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla_0 p - \mathbf{b}) dV_0. \quad (8.11)$$

O termo τ_{pspg} é calculado conforme ??), isto é:

$$\tau_{\text{pspg}} = \left(\frac{1}{\tau_1^2} + \frac{1}{\tau_2^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (8.12)$$

onde τ_1 e τ_2 estão associados às parcelas dinâmicas e viscosas, respectivamente, sendo o último apenas relevante no contexto da análise de fluidos. Esses são dados por

$$\tau_1 = \alpha_{\text{pspg}} \beta \Delta t^2 \quad \text{e} \quad \tau_2 = \frac{\beta \rho h_{\text{rgn}}^2 \Delta t}{4\gamma\mu}, \quad (8.13)$$

em que α_{pspg} é um parâmetro utilizado para calibrar a parcela dinâmica, β e γ são os parâmetros de Newmark, μ é a viscosidade do fluido, e h_{rgn} é um fator de escala dos elementos finitos, calculado por:

$$h_{\text{rgn}} = 2 \left| \frac{\nabla \|\dot{\mathbf{y}}\|}{\|\nabla \|\dot{\mathbf{y}}\|\|} \cdot \nabla \varphi^\alpha \right|^{-1}. \quad (8.14)$$

Nota-se que, com a adição do termo estabilizante $\mathcal{S}_{\text{pspg}}$, a nova equação de incompressibilidade (8.9) é escrita explicitamente em função das pressões. Dessa forma, a linearização da mesma com relação às pressões resulta diferente de zero, removendo a instabilidade do sistema. Caso o leitor tenha interesse em verificar as equações linearizadas escritas de maneira explícita, o trabalho de ??) pode ser consultado.

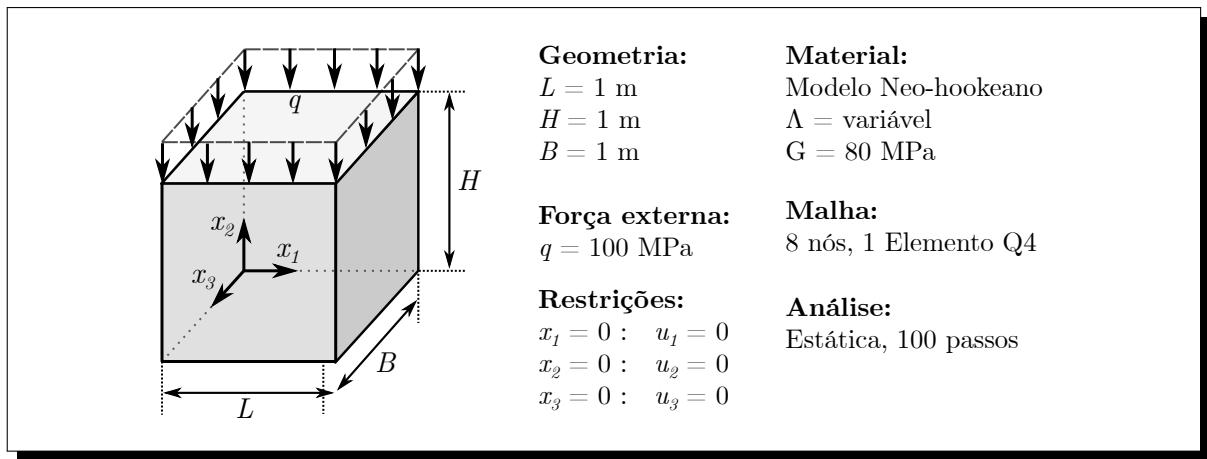
8.2 Sólidos incompressíveis

A formulação apresentada é inicialmente aplicada neste trabalho a problemas de sólidos, considerando os modelos constitutivos já estudados anteriormente. Para isso, toma-se como ψ_{iso} a energia livre de Helmholtz de cada um desses modelos, desconsiderando suas partes volumétricas.

8.2.1 Exemplo numérico: cubo hiperelástico com tensão uniaxial

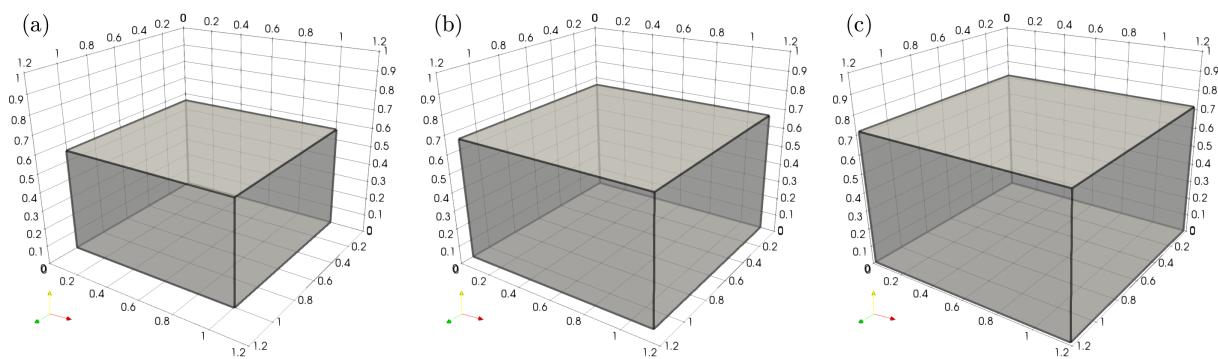
A fim de testar a formulação implementada, foi simulado um problema tridimensional simples de tensão uniaxial. Considera-se um cubo sujeito a tensões compressivas, conforme os dados dispostos na [Figura 54](#). Para efeito de comparação, o exemplo foi analisado com os modelos incompressível e compressível, sendo utilizado em ambos o modelo constitutivo Neo-Hookeano apresentado na [subseção 2.3.2](#). Para o caso compressível, 5 valores de Λ são considerados: 10^0 , 10^1 , 10^2 , 10^3 e 10^4 MPa. Para o caso incompressível, naturalmente, a parcela do modelo associada ao parâmetro Λ é desconsiderada, uma vez que essa representa a variação volumétrica do material. Não foi necessário neste exemplo o emprego da técnica de estabilização.

Figura 54 – Dados para o exemplo do cubo hiperelástico com tensão uniaxial



Na [Figura 55](#) são mostradas as configurações deformadas finais para alguns casos analisados, possibilitando uma identificação visual da diferença entre os modelos, especialmente em relação ao volume obtido.

Figura 55 – Configurações deformadas finais para os casos com (a) $\Lambda = 10^0$ MPa, (b) $\Lambda = 10^2$ MPa e (c) modelo incompressível



Na [Figura 56](#) são mostrados o gráficos de deslocamento horizontal e vertical por força aplicada, na [Figura 57\(a\)](#) são mostrados os gráficos de tensão de Cauchy uniaxial, e na [Figura 57\(b\)](#) são mostrados o gráficos de pressão por força aplicada. Para o modelo compressível, considera-se como pressão a parcela volumétrica da tensão, isto é, $p = \Lambda \ln(J)$.

É possível observar nesses gráficos que o modelo compressível apresenta uma tendência ao modelo incompressível à medida que o valor de Λ aumenta, conforme comentado no início deste capítulo. Particularmente para o presente problema, verifica-se que o modelo compressível com $\Lambda = 10^4$ MPa já se mostra suficiente para simular o caso incompressível com um certo grau de precisão.

Figura 56 – Gráficos de (a) deslocamento vertical por força aplicada e (b) deslocamento horizontal/vertical por força aplicada

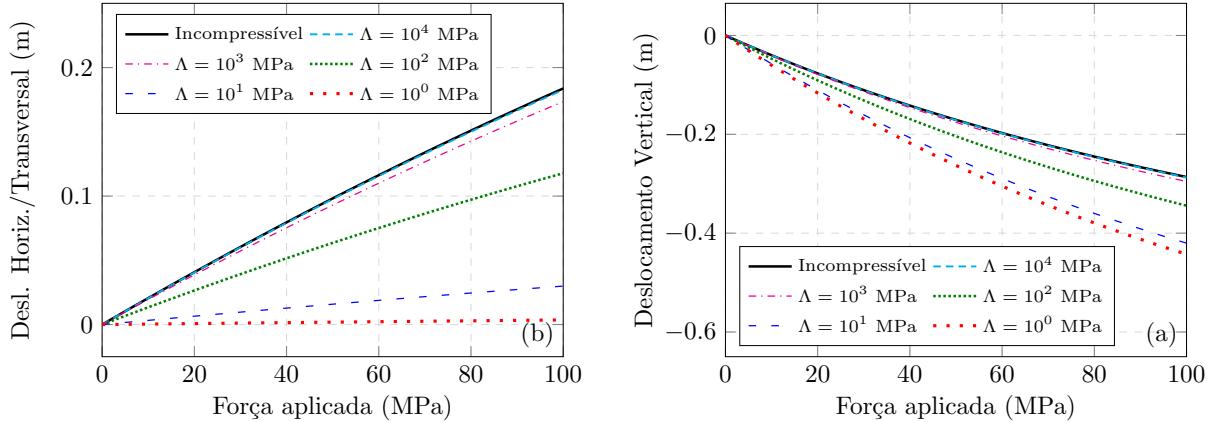
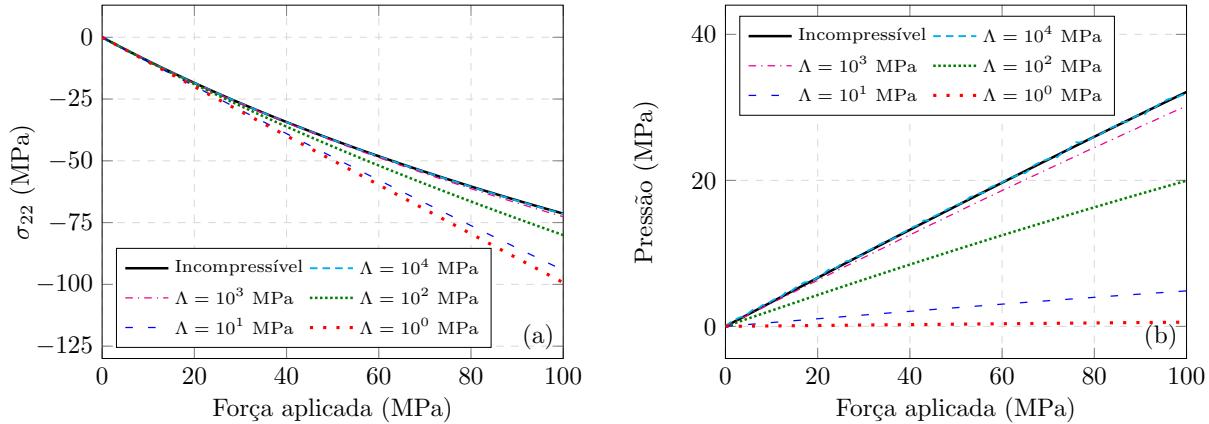


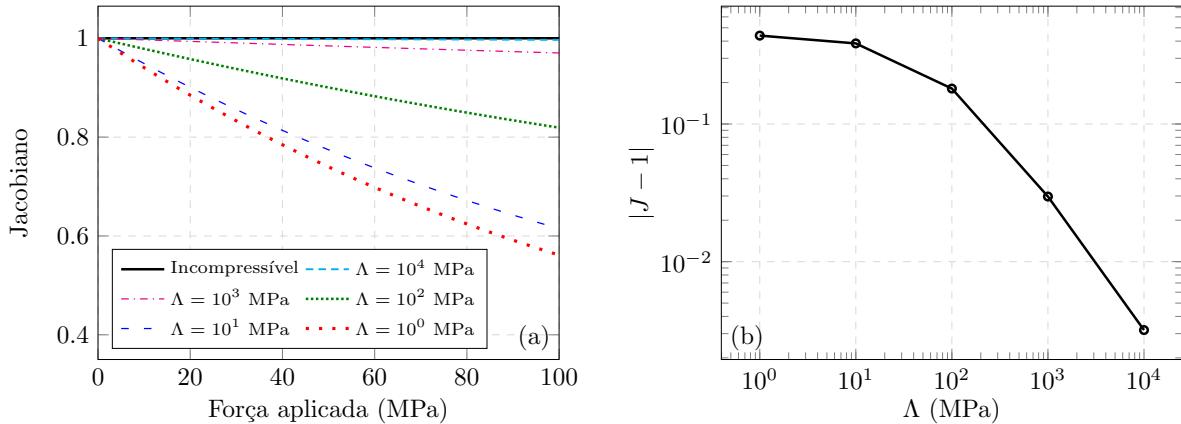
Figura 57 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial por força aplicada e (b) pressão por força aplicada



Na [Figura 58](#) é feita uma análise do Jacobiano para todos os casos analisados. A partir da [Figura 58\(a\)](#) pode-se observar, como esperado, que o modelo incompressível resulta em Jacobiano unitário, e modelos compressíveis se distanciam mais desse valor à medida que Λ diminui. Na [Figura 58\(b\)](#) é apresentado um gráfico de convergência para o Jacobiano dos modelos compressíveis, considerando sua diferença com relação ao caso incompressível.

8.3 Fluidos Newtonianos incompressíveis

Ao contrário de sólidos, fluidos não apresentam resistência a cisalhamento e podem deformar-se indefinidamente, facilmente levando a grandes mudanças topológicas, incluindo, por exemplo, separação e junção de subdomínios. Por esse motivo, formulações Lagrangianas

Figura 58 – Gráficos de (a) Jacobiano por força aplicada e (b) $|J - 1|$ por Λ para os modelos compressíveis

como a apresentada neste capítulo podem não ser capazes de simular determinados problemas, sendo limitadas a certos casos onde não hajam mudanças topológicas excessivas.

Neste trabalho, aplica-se o modelo de fluido Newtoniano. Comumente utilizado no contexto Euleriano, o modelo original relaciona tensões de Cauchy com as taxas de deformação linear, sendo necessárias determinadas manipulações algébricas para escrevê-lo em termos de grandezas Lagrangianas. A princípio, parte-se da relação

$$\boldsymbol{\sigma}' = 2\mu \mathbf{D}, \quad (8.15)$$

onde μ é o parâmetro de viscosidade do fluido, $\boldsymbol{\sigma}'$ é a parcela isocórica da tensão de Cauchy, e \mathbf{D} é a taxa de deformação linear, também representada por $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$.

Levando em conta a relação entre taxa de deformação linear e taxa de deformação de Green-Lagrange apresentada na Eq. (2.10), e também a relação entre a tensão de Cauchy e a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie apresentada na Eq. (2.21), podemos representar a Eq. (8.15) na forma

$$\frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S}' \mathbf{F}^T = 2\mu (\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}' = 2\mu J \mathbf{C}^{-1} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{C}^{-1}, \quad (8.16)$$

isto é,

$$\mathbf{S}' = \mathcal{D} : \dot{\mathbf{E}}, \quad (8.17)$$

onde \mathcal{D} , denominado operador de viscosidade, é um tensor de quarta ordem definido em forma indicial como

$$\mathcal{D}_{ijkl} = 2\mu J (C_{ik}^{-1} C_{jl}^{-1}). \quad (8.18)$$

A taxa da deformação de Green-Lagrange pode ser calculada pela Eq. (2.4), onde, no contexto do Método dos Elementos Finitos, calcula-se a taxa do gradiente da função mudança de configuração pela Eq. (2.43).

Uma vez que este modelo constitutivo não é escrito apenas em termos da deformação de Green-Lagrange, mas também de sua taxa, algumas considerações adicionais devem ser feitas na formulação previamente apresentada. Em particular, a linearização das forças

internas para solução do sistema não-linear pelo MEF, apresentada originalmente na Eq. (2.63), deve ser reescrita como

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha} \otimes \mathbf{y}^{\beta}} + \mathfrak{C} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} + \mathcal{D} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\alpha}} \right) dV_0, \quad (8.19)$$

onde o operador tangente consistente, \mathfrak{C} , é dado neste contexto por

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = 2 \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \mathbf{C}} : \dot{\mathbf{E}} \quad \text{ou} \quad \mathfrak{C}_{ijkl} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial E_{kl}} = 2 \frac{\partial \mathcal{D}_{ijmn}}{\partial C_{kl}} \dot{E}_{mn}, \quad (8.20)$$

e a derivada da taxa da deformação de Green-Lagrange com relação às posições nodais pode ser calculada, a partir da Eq. (2.46), como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} &= \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \frac{\partial \dot{\mathbf{F}}_1^T}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} + \mathbf{F}_0^{-T} \dot{\mathbf{F}}_1^T \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \mathbf{F}_0^{-1} \right) \\ &= \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \frac{\partial \dot{\mathbf{F}}_1^T}{\partial \dot{\mathbf{y}}^{\beta}} \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} \right) \frac{\partial \dot{\mathbf{y}}^{\beta}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} + \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \dot{\mathbf{F}}_1^T \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \mathbf{F}_0^{-1} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \frac{\partial \dot{\mathbf{y}}^{\beta}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} + \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \dot{\mathbf{F}}_1^T \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} \mathbf{F}_0^{-1} \right), \end{aligned} \quad (8.21)$$

onde as derivadas $\partial \mathbf{E} / \partial \mathbf{y}^{\beta}$ e $\partial \mathbf{F}_1 / \partial \mathbf{y}^{\beta}$ são dadas nas Eqs. (2.65) e (2.67), respectivamente, e a derivada $\partial \dot{\mathbf{y}}^{\beta} / \partial \mathbf{y}^{\beta}$ depende do integrador temporal utilizado. Para o integrador Newmark- β , utilizado neste trabalho, calcula-se a partir da Eq. (2.57):

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{y}}^{\beta}}{\partial \mathbf{y}^{\beta}} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t}. \quad (8.22)$$

8.3.1 Tensão superficial

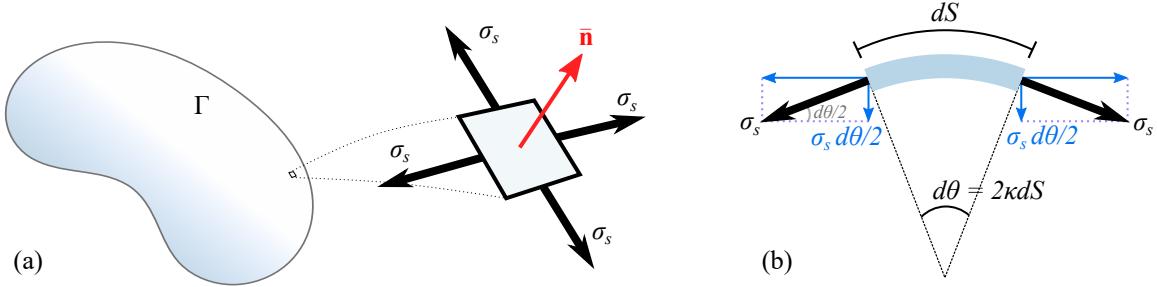
A tensão superficial é um fenômeno físico que ocorre na interface entre um fluido (particularmente um líquido) e o meio externo. Esse fenômeno ocorre pois as moléculas da superfície não estão rodeadas por outras moléculas em todas as direções, como ocorre no interior do líquido. Consequentemente, elas são atraídas mais fortemente pelas moléculas adjacentes na interface e pelas moléculas internas. Essa atração desigual cria uma “película” na superfície do líquido, fazendo com que ele se comporte como se estivesse coberto por uma fina membrana elástica. A tensão superficial é responsável por diversos efeitos observáveis, como a formação de gotas esféricas, a capilaridade e a capacidade de alguns insetos caminharem sobre a água.

Nesta seção, será utilizada como base a formulação descrita em ??) e ??). Como ilustrado na Fig. 59, a tensão superficial atua como uma tensão de tração nas direções tangenciais à superfície do fluido. Embora parte dessa tensão se auto-equilibre, a presença de curvatura gera componentes que agem na direção normal à superfície, conforme representado na Fig. 59(b) para o caso bidimensional. Assumindo uma tensão superficial σ_s , é possível demonstrar que a componente normal da tensão atuante possui magnitude $2\sigma_s\kappa$, onde κ é a curvatura média da superfície, definida por:

$$\kappa = -\frac{1}{2} \nabla_s \cdot \bar{\mathbf{n}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial y_i} - \bar{n}_i \bar{n}_j \frac{\partial \bar{n}_i}{\partial y_j} \right), \quad (8.23)$$

sendo $\bar{\mathbf{n}}$ o vetor normal unitário, definido conforme a Seção 7.1, e $\nabla_s = (\mathbf{I} - \bar{\mathbf{n}} \otimes \bar{\mathbf{n}}) \nabla$ o gradiente superficial ao longo da interface.

Figura 59 – Representação visual do fenômeno da tensão superficial



Utilizando a abordagem energética descrita na Seção 2.2, podemos incorporar essa tensão normal no problema mecânico como uma componente da energia potencial das forças externas. Sua variação pode ser expressa como

$$\delta\Pi_{ext}^s = \int_{\Gamma} 2\sigma_s \kappa \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{y} dS. \quad (8.24)$$

Ao contrário das forças externas definidas na Seção 2.2.3, essa é não-conservativa, pois sua intensidade e direção variam ao longo do processo, de acordo com a geometria do domínio. Portanto, a Eq. (8.24) é integrada sobre o contorno deformado (Γ) do fluido.

A Eq. (8.24) pode ser transformada utilizando o teorema da divergência, conforme detalhado em ??). Isso resulta em

$$\delta\Pi_{ext}^s = - \int_{\Gamma} \sigma_s \nabla_s \cdot \delta \mathbf{y} dS + \int_{\partial\Gamma} \sigma_s \mathbf{m} \cdot \delta \mathbf{y} ds, \quad (8.25)$$

onde $\partial\Gamma$ representa o contorno de Γ , e \mathbf{m} denota o vetor binormal de $\partial\Gamma$, definido como o vetor tangente a Γ e ortogonal a $\partial\Gamma$. Para problemas tridimensionais, Γ é uma superfície bidimensional, enquanto $\partial\Gamma$ é uma curva. Já para problemas bidimensionais, Γ é uma curva, enquanto $\partial\Gamma$ é representada por pontos.

A forma apresentada na Eq. (8.25) é vantajosa para aplicação no Método dos Elementos Finitos em comparação com a Eq. (8.24), pois elimina a necessidade de calcular a curvatura. Isso viabiliza a utilização de elementos finitos lineares, nos quais a curvatura é localmente nula. Neste caso, o efeito da tensão superficial surge exclusivamente pela diferença de inclinação entre os elementos, que gera uma curvatura artificial e discreta ao longo do contorno.

Aplicando o MEF em conjunto com o método de Galerkin, a Eq. (8.25) resulta em forças nodais, introduzidas no sistema como forças externas. Para cada nó α do contorno, essa força resultante é dada por

$$(\mathbf{f}_{ext}^s)^\alpha = - \int_{\Gamma} \sigma_s \nabla_s \varphi^\alpha dS + \int_{\partial\Gamma} \sigma_s \mathbf{m} \varphi^\alpha ds, \quad (8.26)$$

ou, em notação indicial,

$$(f_{ext}^s)_i^\alpha = - \int_{\Gamma} \sigma_s \left(\frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial y_i} - \bar{n}_i \bar{n}_j \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial y_j} \right) dS + \int_{\partial\Gamma} \sigma_s m_i \varphi^\alpha ds. \quad (8.27)$$

As derivadas das funções de forma com relação às posições podem ser calculadas utilizando a regra da cadeia, isto é:

$$\frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial \varphi^\alpha}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{y}}, \quad (8.28)$$

onde $\partial \boldsymbol{\xi} / \partial \mathbf{y}$ é dado pela inversa de $\mathbf{F}_1 = \partial \mathbf{y} / \partial \boldsymbol{\xi}$. Para esse cálculo, uma particularidade deve ser levada em conta: dado que Γ é uma superfície bidimensional imersa em um espaço tridimensional (no caso 3D), ou uma curva unidimensional imersa em um espaço bidimensional (no caso 2D), \mathbf{F}_1 não é uma matriz quadrada, mas sim uma matriz com dimensões 3×2 ou 2×1 . Assim, o conceito convencional de matriz inversa é substituído pela pseudoinversa de Moore-Penrose, e $\partial \boldsymbol{\xi} / \partial \mathbf{y}$ é calculado como:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{y}} = (\mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1)^{-1} \mathbf{F}_1^T. \quad (8.29)$$

No caso 2D, onde a coordenada adimensional é um escalar, e \mathbf{F}_1 possui dimensões 2×1 , a Eq. (8.29) pode ser simplificada para

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \left\| \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right\|^{-\frac{1}{2}}. \quad (8.30)$$

8.3.1.1 Forças resultantes em elementos isolados e análise de pontos de integração

As integrais apresentadas nas Eqs. (8.26) e (8.27) são calculadas numericamente utilizando quadraturas adequadas ao tipo de elemento finito empregado. Devido à alta não-linearidade das expressões integradas, especialmente em elementos de alta ordem, sabe-se que esse processo produz resultados aproximados, sendo mais precisos quanto maior o número de pontos de integração. No entanto, o aumento desse número também resulta em um maior tempo de processamento. Para garantir uma relação ótima entre precisão e custo computacional, é realizada nesta seção uma análise para definir o número ideal de pontos de integração em cada tipo de elemento utilizado.

Para problemas bidimensionais, onde Γ é unidimensional, consideram-se elementos de curva (ou de linha) com 2, 3 e 4 nós, denotados por L2, L3, e L4, respectivamente. Esses elementos possuem aproximações linear, quadrática, e cúbica, nessa ordem, sendo utilizada a quadratura de Gauss para integrar ao longo de seus domínios.

A quantidade necessária de pontos de integração é dependente da disposição geométrica do elemento, incluindo fatores como curvatura e variação do vetor normal. Uma vez que esses fatores são variáveis ao longo do problema, considera-se nesta análise um caso extremo onde o elemento forma um quadrante de circunferência. Entretanto, na prática, recomenda-se discretizar o problema suficientemente para que a disposição geométrica individual de cada elemento finito não ultrapasse esse caso extremo. Naturalmente, esse quadrante será aproximado por polinômios, com fidelidade geométrica limitada pela ordem do elemento finito.

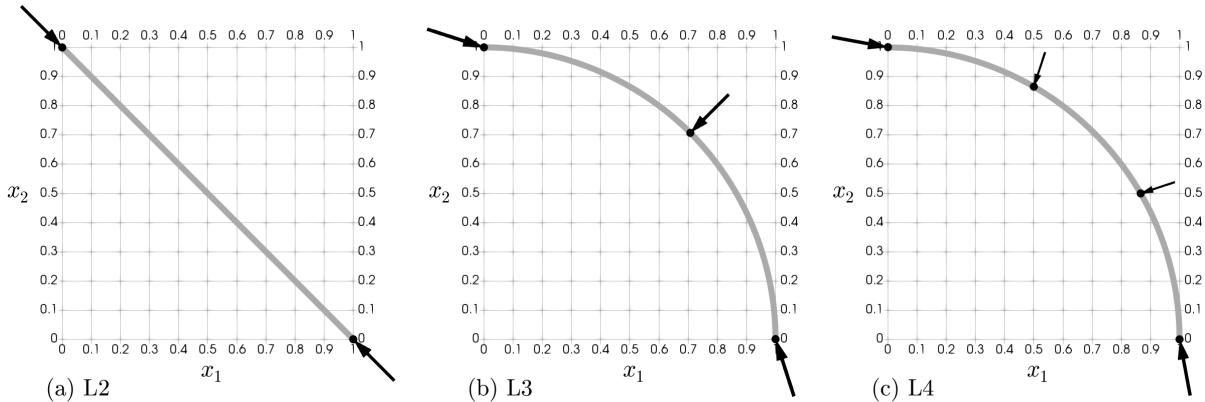
Tomando-se um elemento com tensão superficial unitária, calcula-se, para cada um de seus nós, a força resultante através da primeira integral da Eq. (8.26). A segunda integral

é desprezada neste contexto pois assume-se que o elemento não intersecta o contorno de Γ . As coordenadas dos nós e as forças nodais resultantes, utilizando 20 pontos de integração, são apresentadas na Tabela 5 para cada tipo de elemento de curva considerado, sendo representadas visualmente na Fig. 60.

Tabela 5 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos de curva sujeitos a tensão superficial, utilizando 20 pontos de integração da quadratura de Gauss

| (a) L2 | | (b) L3 | | (c) L4 | |
|---------|-----------------------|---|-----------------------|--|----------------------|
| Coords. | Força nodal result. | Coords. | Força nodal result. | Coords. | Força nodal result. |
| (0; 1) | (0.707107; -0.707107) | $(0; 1)$ | (0.974986; -0.313389) | $(0; 1)$ | (0.9621; -0.179398) |
| (1; 0) | (-0.707107; 0.707107) | $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}; \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ | (-0.66160; -0.66160) | $\left(\frac{1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ | (-0.19446; -0.58824) |
| | | $(1; 0)$ | (-0.313389; 0.974986) | $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}; \frac{1}{2}\right)$ | (-0.58824; -0.19446) |
| | | | | $(1; 0)$ | (-0.179398; 0.9621) |

Figura 60 – Representação visual de elementos de curva utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial



Para problemas tridimensionais, onde Γ é bidimensional, consideram-se os elementos triangulares T3, T6 e T10, com aproximações linear, quadrática, e cúbica, respectivamente. A integração numérica neste caso é feita utilizando a quadratura de ??), que possui um número máximo de 79 pontos de integração.

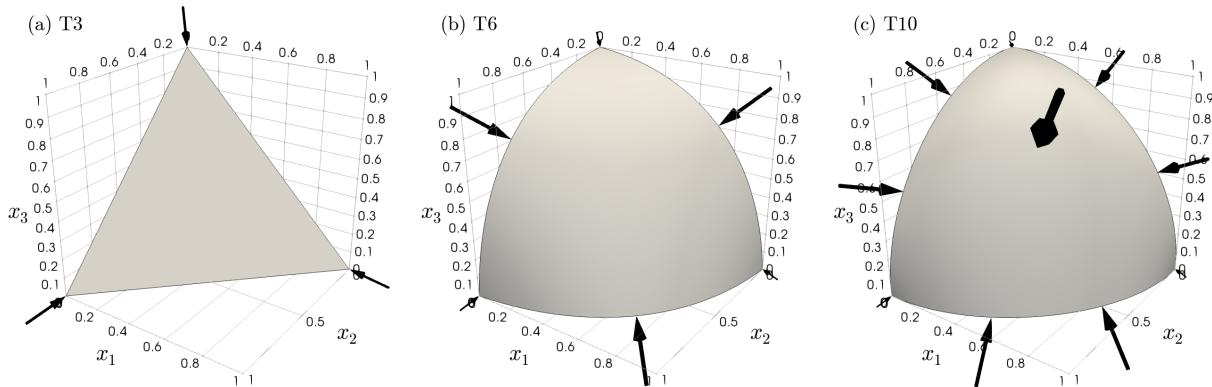
Neste caso, assumem-se elementos que simulam a disposição geométrica de um octante de uma esfera. As coordenadas dos nós e as forças resultantes, utilizando 79 pontos de integração, são dispostas na Tabela 6, com representação visual de cada caso apresentada na Fig. 61.

Observa-se que os nós centrais dos elementos possuem forças resultantes mais próximas da direção normal, enquanto os nós de bordo exibem forças mais próximas da direção tangente. Entretanto, os nós de bordo recebem ainda contribuições similares de elementos vizinhos, fazendo com que a força resultante se alinhe com a bissetriz entre os elementos. Esse efeito permite que a diferença de inclinação entre elementos adjacentes seja tratada

Tabela 6 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos triangulares sujeitos a tensão superficial, utilizando 79 pontos de integração da quadratura de Dunavant

| (a) T3 | | (c) T10 | |
|--|----------------------------------|---|-----------------------------------|
| Coordenadas | Força nodal resultante | Coordenadas | Força nodal resultante |
| (0; 0; 1) | (0.288675; 0.288675; -0.57735) | (0; 0; 1) | (0.175642; 0.175642; -0.0113901) |
| (0; 1; 0) | (0.288675; -0.57735; 0.288675) | $\left(0; \frac{1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ | (0.589651; 0.00375044; -0.253053) |
| (1; 0; 0) | (-0.57735; 0.288675; 0.288675) | $\left(0; \frac{\sqrt{3}}{2}; \frac{1}{2}\right)$ | (0.572785; -0.299737; -0.0255342) |
| (b) T6 | | $\left(0; 1; 0\right)$ | (0.157543; -0.0733659; 0.153388) |
| Coordenadas | Força nodal resultante | $\left(\frac{1}{2}; 0; \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ | (0.00375044; 0.589651; -0.253053) |
| $\left(0; 0; 1\right)$ | (0.299576; 0.299576; -0.169459) | $\left(\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ | (-0.691797; -0.691797; -0.83786) |
| $\left(0; \frac{\sqrt{2}}{2}; \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ | (0.687796; -0.558743; -0.558743) | $\left(\frac{1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2}; 0\right)$ | (-0.0757699; -0.358703; 0.549825) |
| $\left(0; 1; 0\right)$ | (0.299574; -0.169459; 0.299576) | $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}; 0; \frac{1}{2}\right)$ | (-0.299737; 0.572785; -0.0255342) |
| $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}; 0; \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ | (-0.558743; 0.687796; -0.558743) | $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}; \frac{1}{2}; 0\right)$ | (-0.358703; -0.0757699; 0.549825) |
| $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}; \frac{\sqrt{2}}{2}; 0\right)$ | (-0.558744; -0.558744; 0.687795) | $\left(1; 0; 0\right)$ | (-0.0733659; 0.157543; 0.153388) |
| $\left(1; 0; 0\right)$ | (-0.169459; 0.299574; 0.299576) | | |

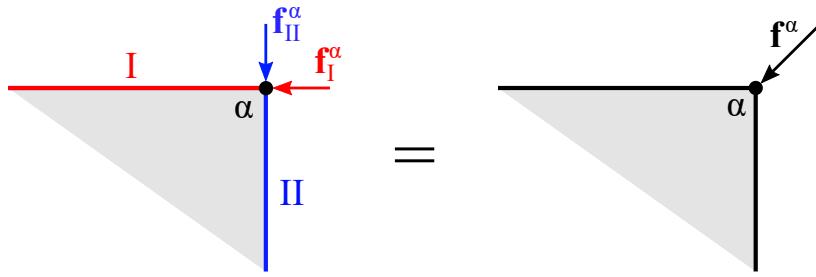
Figura 61 – Representação visual de elementos triangulares utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial



como uma curvatura artificial, apesar da falta de suavidade geométrica. Considere, por exemplo, um nó de canto que conecta elementos de linha retos e perpendiculares entre si, conforme ilustrado na Fig. 62. Nesse caso, a soma das forças resultantes no nó em cada elemento produzirá uma força inclinada a 45° (bissetriz).

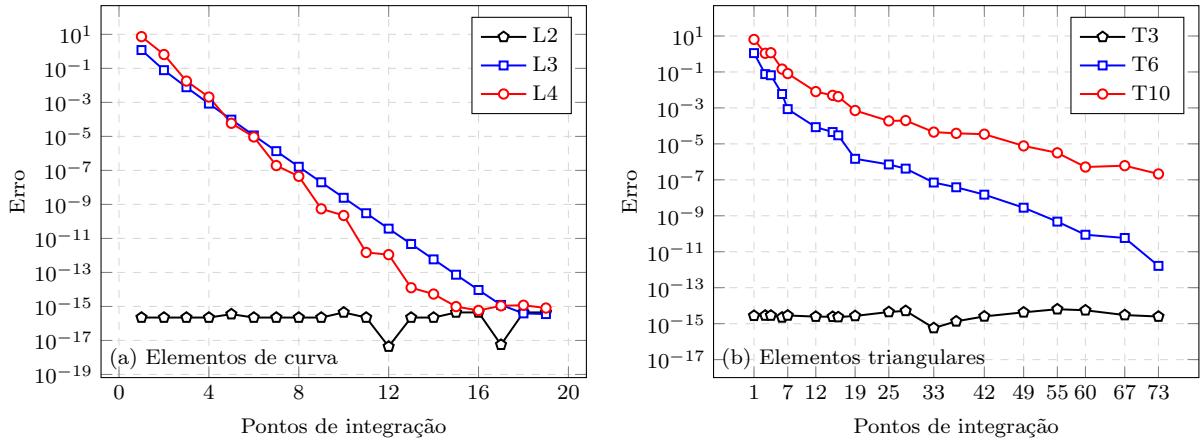
Esse comportamento causa uma tendência a suavizar os cantos do domínio. Por esse motivo, líquidos que não estão sujeitos a outras forças além da tensão superficial tendem a assumir um formato esférico. Em geral, a tensão superficial atua de forma a minimizar a área da superfície para um determinado volume.

Seguindo para a análise de pontos de integração, calculamos as forças resultantes em cada um dos elementos finitos previamente apresentados, utilizando números menores de pontos de integração. Para os elementos de curva, empregamos de 1 a 19 pontos da

Figura 62 – Representação de força resultante de tensão superficial em nó de canto

quadratura de Gauss, comparando-os com a referência de 20 pontos (Tabela 5). Nos elementos triangulares, utilizamos de 1 a 73 pontos da quadratura de ??), comparando-os com a referência de 79 pontos (Tabela 6).

O erro em cada nó α é calculado por $e^\alpha = \|\mathbf{f}^\alpha - \mathbf{f}_{\text{ref}}^\alpha\| / \|\mathbf{f}_{\text{ref}}^\alpha\|$, onde \mathbf{f}^α representa a força resultante calculada e $\mathbf{f}_{\text{ref}}^\alpha$ a força de referência. O erro total no elemento é determinado pela fórmula $e = \sqrt{\sum \alpha(e^\alpha)^2}$. A Fig. 63 mostra os gráficos dos erros em função do número de pontos de integração para cada tipo de elemento.

Figura 63 – Análise de convergência de pontos de integração para tensão superficial em (a) elementos de curva e (b) elementos triangulares

Destaca-se que os elementos de ordem linear, como o L2 e o T3, não são afetados pelo número de pontos de integração. Uma vez que o vetor normal e a inclinação são constantes ao longo desses elementos, a resposta numérica exata da Eq. (8.27) é obtida com apenas 1 ponto de integração. Por esse motivo, os erros associados a esses elementos na Fig. 63 são mínimos, equivalentes a resíduos computacionais. Por outro lado, os elementos de ordem quadrática e cúbica apresentam um comportamento convergente, com os erros diminuindo progressivamente à medida que o número de pontos de integração aumenta.

Utilizando os gráficos da Fig. 63 como referência, pode-se estabelecer um critério de tolerância para o erro, de acordo com o nível de precisão almejado para as forças resultantes. Neste trabalho, utiliza-se o critério $e < 10^{-3}$, culminando nos pontos de integração dispostos na Tabela 7.

Vale ressaltar que esta análise considera elementos sujeitos a um alto grau de variação

Tabela 7 – Pontos de integração selecionados para tensão superficial em diversos tipos de elementos, utilizando o critério $e < 10^{-3}$

| Elementos de curva | | | Elementos triangulares | | |
|--------------------|----|----|------------------------|----|-----|
| L2 | L3 | L4 | T3 | T6 | T10 |
| 1 | 4 | 5 | 1 | 7 | 19 |

geométrica ao longo de seu domínio (Figs. 60 e 61), o que não é comum em problemas com malhas suficientemente refinadas. Em situações usuais, os erros obtidos com os pontos de integração da Tabela 7 podem ser muito inferiores ao critério de 10^{-3} estabelecido.

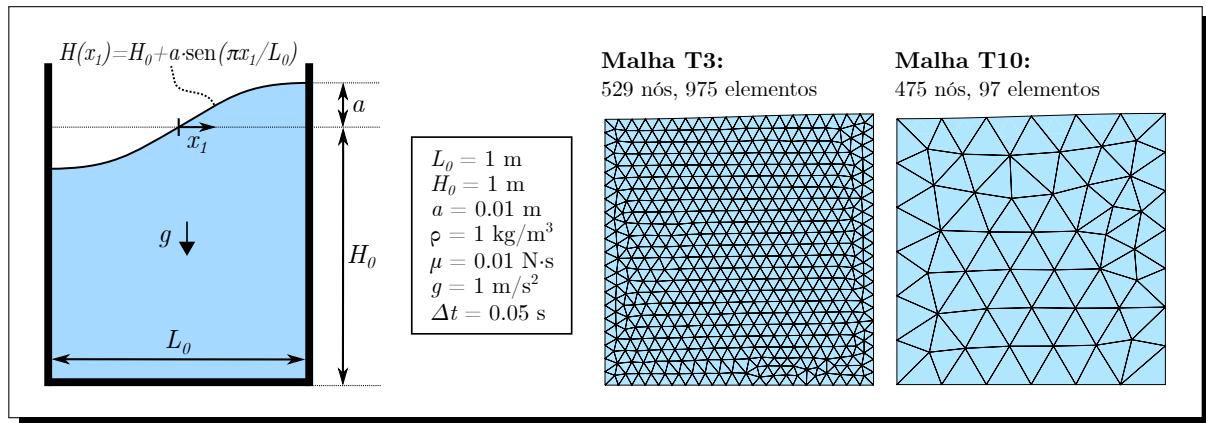
8.3.2 Exemplos numéricicos de fluidos

A seguir, são apresentados exemplos numéricicos com o objetivo de verificar o modelo implementado de fluido Newtoniano incompressível.

8.3.2.1 Sloshing de pequena amplitude

Este exemplo consiste de um tanque de água cujas condições iniciais são representadas na Figura 64, sendo adotada condição de deslizamento nas paredes. Duas malhas são consideradas: a primeira formada por elementos T3, e a segunda por elementos T10. Não foi necessário aplicar a estabilização neste caso.

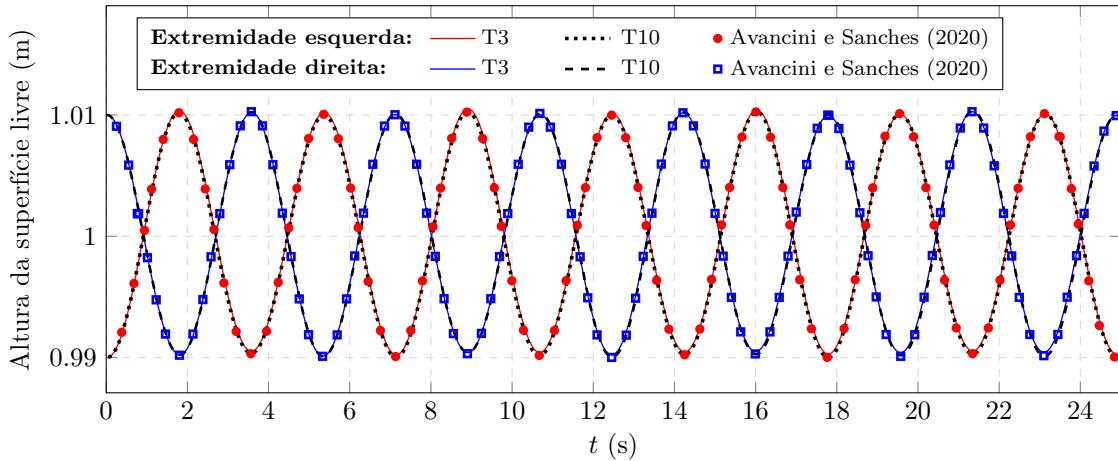
Figura 64 – Geometria e dados do exemplo: *Sloshing* de pequena amplitude



Por ser um exemplo com baixos níveis de deformação, sua simulação foi possível com a formulação apresentada do Método dos Elementos Finitos, mostrando resultados consistentes com a literatura. Na Figura 65 são apresentados os valores das alturas da superfície livre ao longo do tempo nas extremidades esquerda e direita do tanque, sendo observado um comportamento oscilatório. Esses resultados são similares para as duas malhas analisadas, mostrando ótima concordância com os de ??).

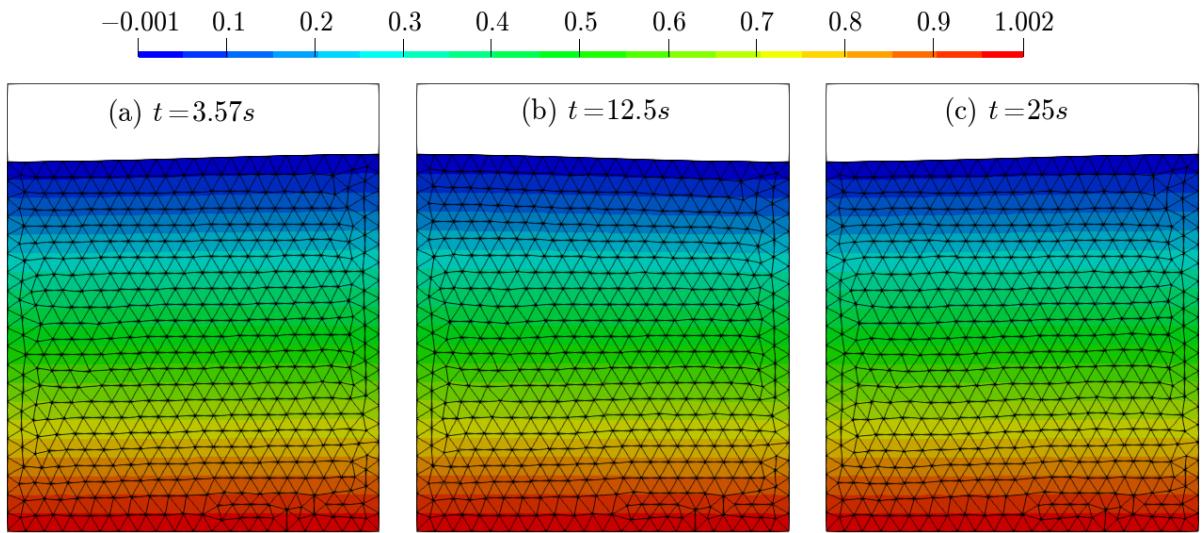
Nas Figs. 66 e 67 são mostradas as configurações deformadas para ambas as malhas em determinados passos de tempo, onde é possível observar visualmente o comportamento oscilatório demonstrado na Figura 65. Também são mostrados em mapas de cores os campos de pressão em cada caso. Por se tratar de um tanque com variações baixas na

Figura 65 – Altura da superfície livre nas extremidades esquerda e direita do recipiente com relação ao tempo



superfície livre, é possível observar que as pressões são aproximadamente constantes ao longo do seu comprimento, e variam de forma linear ao longo de sua altura, coincidindo com resultados clássicos da hidrodinâmica.

Figura 66 – Configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores



8.3.2.2 Colapso de barragem sob superfície lisa

Neste exemplo, simula-se o colapso de uma coluna de água sob seu peso próprio, considerando os dados dispostos na [Figura 68](#). Novamente são consideradas malhas T3 e T10, e são adotadas condições de deslizamento na parede e no chão. Neste caso, foi necessária a estabilização PSPG para regularizar os campos de pressão encontrados, sendo o parâmetro α_{pspg} da Eq. (8.13) tomado igual a 1. Além disso, são adotados os parâmetros de ?? para o integrador Newmark- β a fim de dissipar as altas frequências obtidas: $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$.

Apesar de ser um problema com grandes deformações, e que pode evoluir indefinidamente à medida que o tempo avança, é possível simula-lo de forma relativamente adequada

Figura 67 – Configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores

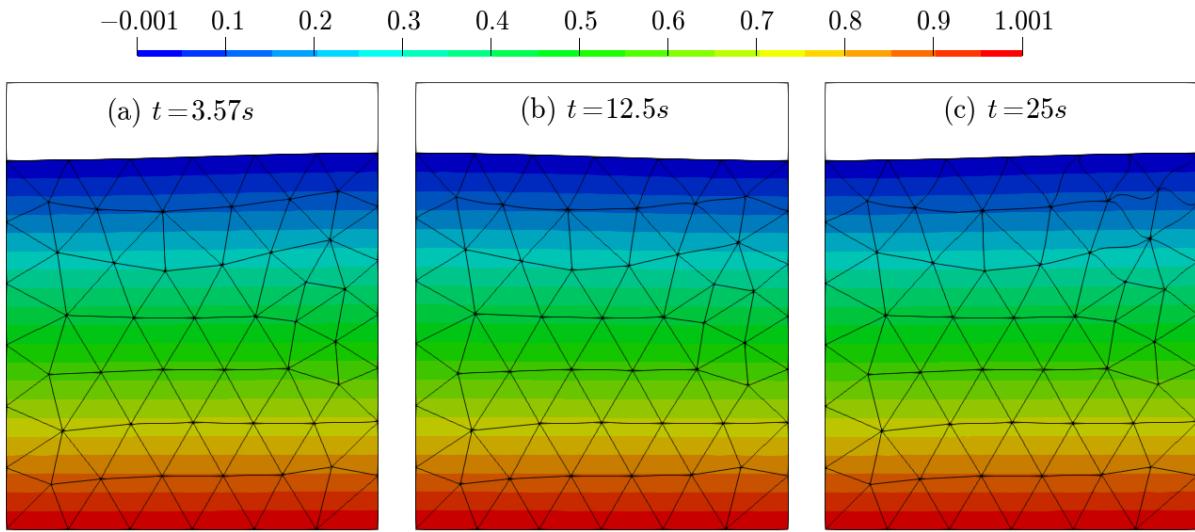
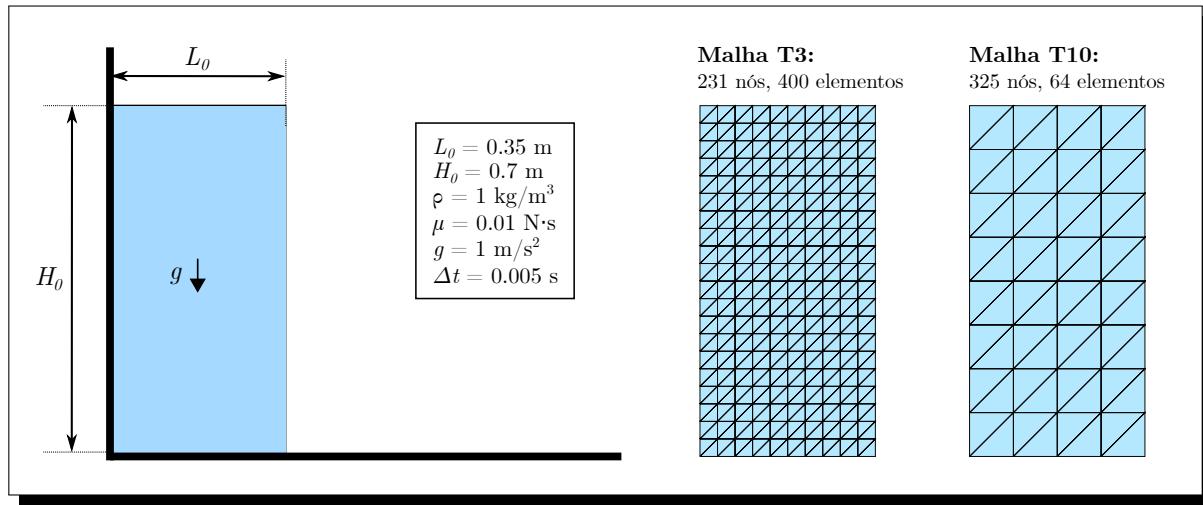


Figura 68 – Geometria e dados do exemplo: colapso de barragem sob superfície lisa



com o Método dos Elementos Finitos, uma vez que não são identificadas mudanças excessivas na estrutura topológica da malha, como formação de vórtices e tentativas de separação de domínios.

Nas Figs. 69 e 70 são mostradas as configurações deformadas em determinados passos de tempo para ambas as malhas consideradas, sendo o tempo marcado em sua forma adimensional $t^* = t\sqrt{2g/L_0}$. Embora o comportamento geral do problema seja similar para ambos os casos, é possível observar que, nas presentes condições, o caso com elementos T10 apresentou resultados levemente mais regulares, sem oscilações geométricas da malha como as observadas na Figura 69.

Na Figura 71 são apresentados os resultados de variação do comprimento e de pressão ao longo do tempo adimensional. O primeiro, apresentado na Figura 71(a), é tomado como L/L_0 , onde L é a distância entre as extremidades inferiores esquerda e direita do domínio em cada passo de tempo, e $L_0 = 0,35\text{m}$ é o comprimento original da coluna de água. O

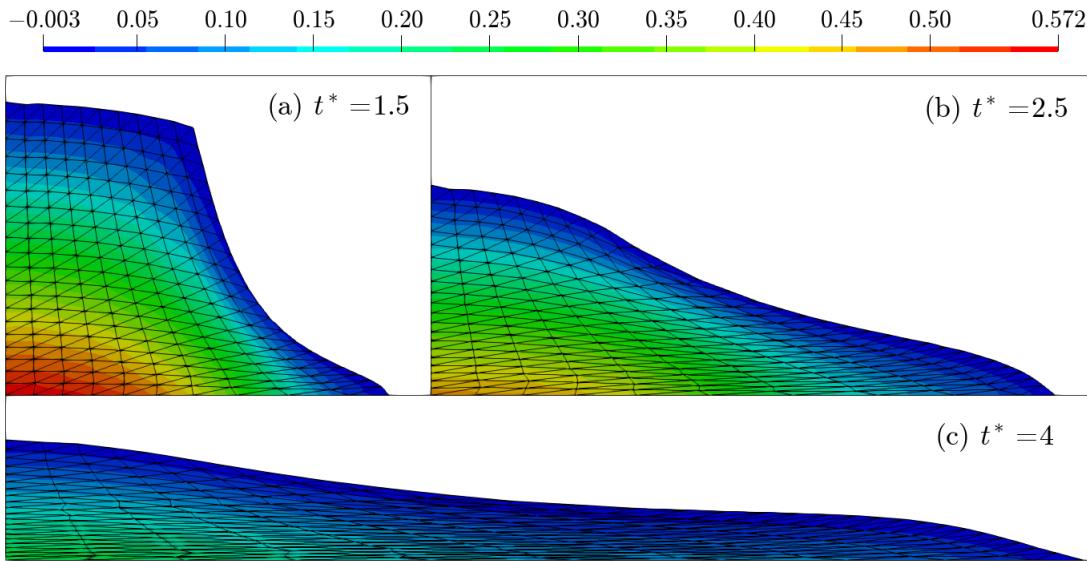
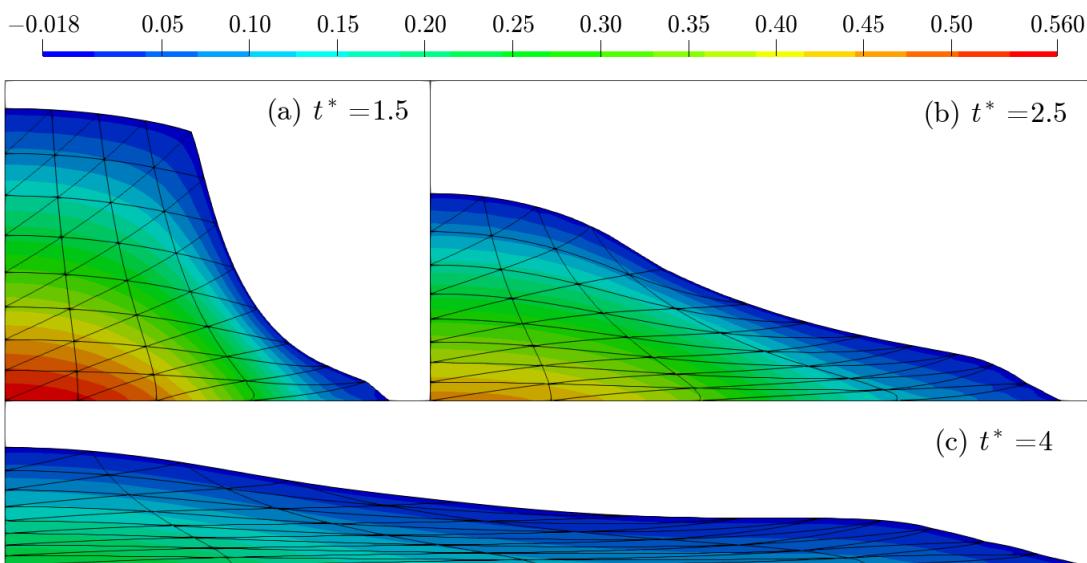
Figura 69 – Configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores**Figura 70** – Configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores

gráfico obtido é comparado com os resultados numéricos de ??) e com os experimentais de ??), mostrando uma excelente concordância. Já a pressão, apresentada na Figura 71(b), é medida na extremidade inferior esquerda do domínio, e é comparada com os resultados numéricos de ??), mostrando também concordância satisfatória.

8.3.2.3 Fluido sob tensão superficial: caso 2D

Neste exemplo, analisamos o efeito da tensão superficial sobre um fluido Newtoniano incompressível com domínio inicial quadrilateral conforme a Fig. 72. Devido à simetria do problema, apenas um quadrante do domínio é discretizado, aplicando-se as devidas condições de contorno nas interfaces com os eixos de simetria. Nenhuma força é aplicada no domínio além da tensão superficial σ_s prescrita no contorno externo. O valor de σ_s é considerado constante ao longo do contorno e do tempo.

Figura 71 – Gráficos ao longo do tempo adimensional de (a) Variação do comprimento do domínio e (b) Pressão medida no ponto inferior esquerdo

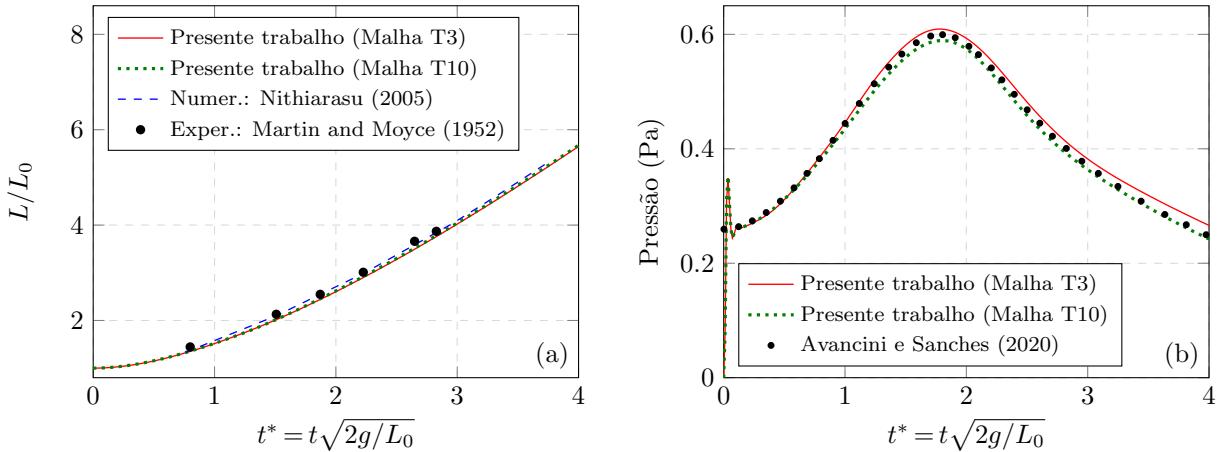
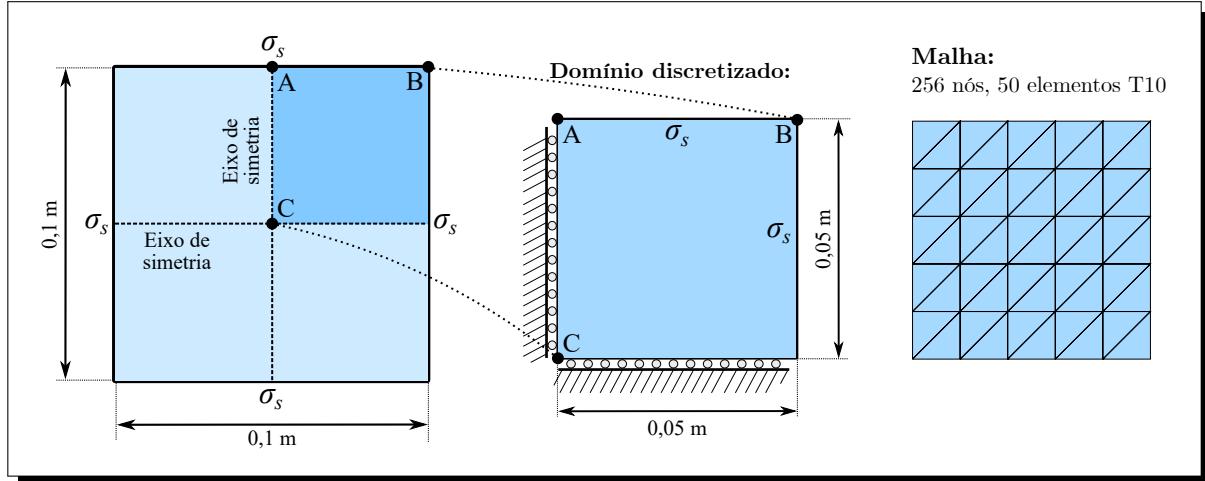


Figura 72 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 2D



Para a discretização espacial, emprega-se uma malha regular composta por 50 elementos finitos do tipo T10. Para a discretização temporal, consideram-se 4000 passos de tempo com $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-3}$ s, e utiliza-se o integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$. Além disso, aplica-se a estabilização PSPG neste exemplo, sendo o parâmetro α_{pspg} da Eq. (8.13) tomado igual a 1000.

A fim de verificar o comportamento do problema em diversas situações, múltiplas análises são realizadas, variando três parâmetros: a viscosidade (μ), a massa específica (ρ_0 ou ρ), e a tensão superficial (σ_s).

Inicialmente, fixamos os parâmetros $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$, e variamos o parâmetro de viscosidade em cinco casos: $1 \cdot 10^{-2}$, $5 \cdot 10^{-3}$, $1 \cdot 10^{-3}$, $5 \cdot 10^{-4}$ e $1 \cdot 10^{-4}$ N·s. A Fig. 73 mostra, para cada um desses casos, a evolução da distância entre os pontos A e C (indicados na Fig. 72) e a pressão no ponto C. Além disso, as Figs. 74 a 76 mostram as configurações deformadas em determinados instantes para três casos distintos de viscosidade, com campo de pressão ilustrado em mapa de cores.

Figura 73 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, considerando diferentes valores de viscosidade

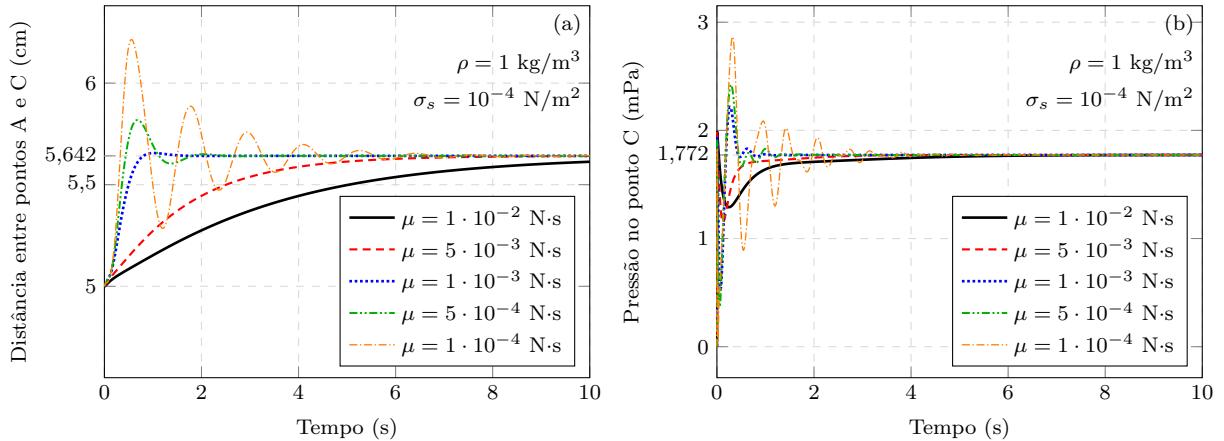


Figura 74 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 10^{-3} \text{ N}\cdot\text{s}$, $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$

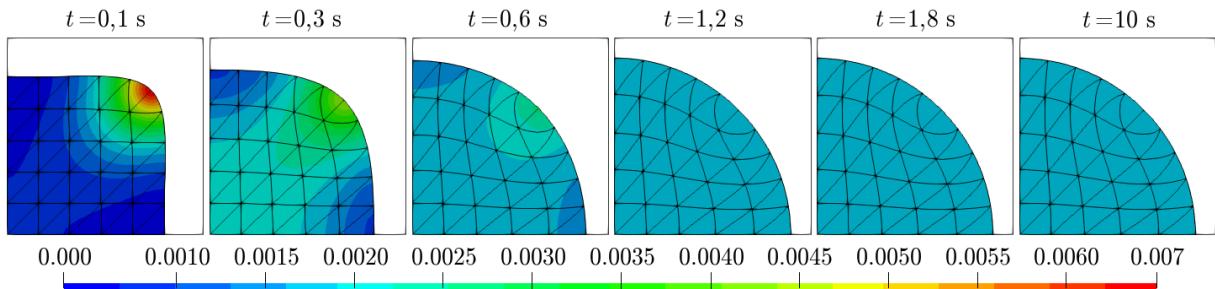


Figura 75 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 5 \cdot 10^{-4} \text{ N}\cdot\text{s}$, $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$

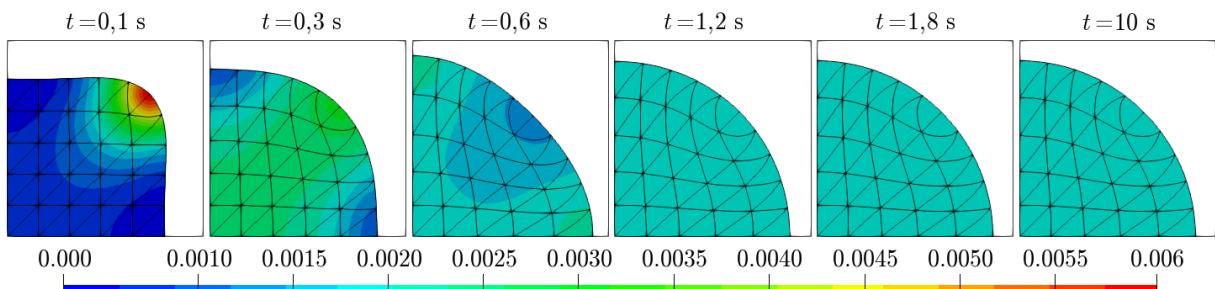
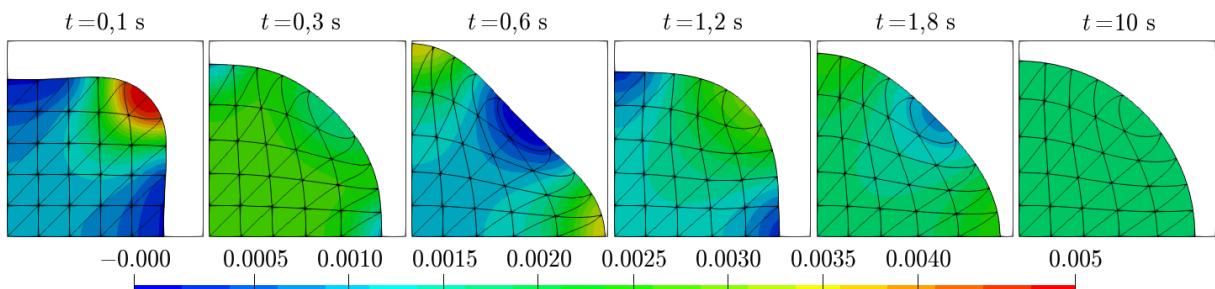


Figura 76 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o caso com $\mu = 10^{-4} \text{ N}\cdot\text{s}$, $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$



Conforme discutido na Seção 8.3.1.1, a tensão superficial tende a minimizar a área da superfície para um dado volume fixo (ou área fixa, no caso 2D), fazendo com que o domínio

inicialmente quadrilateral adquira uma forma circular à medida que o tempo avança. Essa tendência pode ser observada em todos os casos analisados, embora o comportamento do material até atingir sua forma estabilizada varie de acordo com os parâmetros adotados.

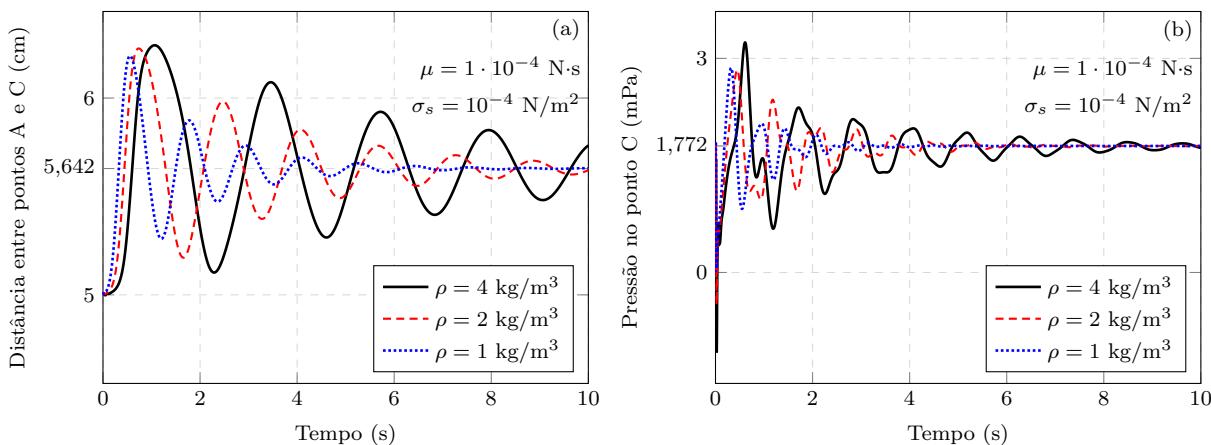
A variação da viscosidade, por exemplo, influencia diretamente no perfil oscilatório do material. Como pode ser notado nas Figs. 73 a 76, os casos com menor viscosidade tendem a oscilar mais antes de estabilizar, enquanto os casos com maior viscosidade apresentam uma convergência mais suave, sendo mais lenta conforme o parâmetro μ aumenta.

Como o material é incompressível, a área do quadrante discretizado ($A = 0,05^2 = 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$) é mantida fixa durante o processo. Assim, é possível calcular de forma analítica o raio do círculo resultante como $R = \sqrt{4A/\pi} \approx 0,0564 \text{ m}$. É possível observar na Fig. 73(a) que a distância entre os pontos A e C tende para esse raio, independentemente do perfil oscilatório, o que demonstra uma coerência nos resultados.

Sabendo que a curvatura média de um cilindro é $\kappa = 1/(2R)$, também podemos calcular a pressão resultante no domínio de forma analítica como $p = 2\sigma_s\kappa = \sigma_s/R$. Com $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$, obtemos $p \approx 0,001772 \text{ Pa}$. Novamente, constatamos que as pressões na Fig. 73(b) tendem para esse valor, reforçando a consistência do modelo.

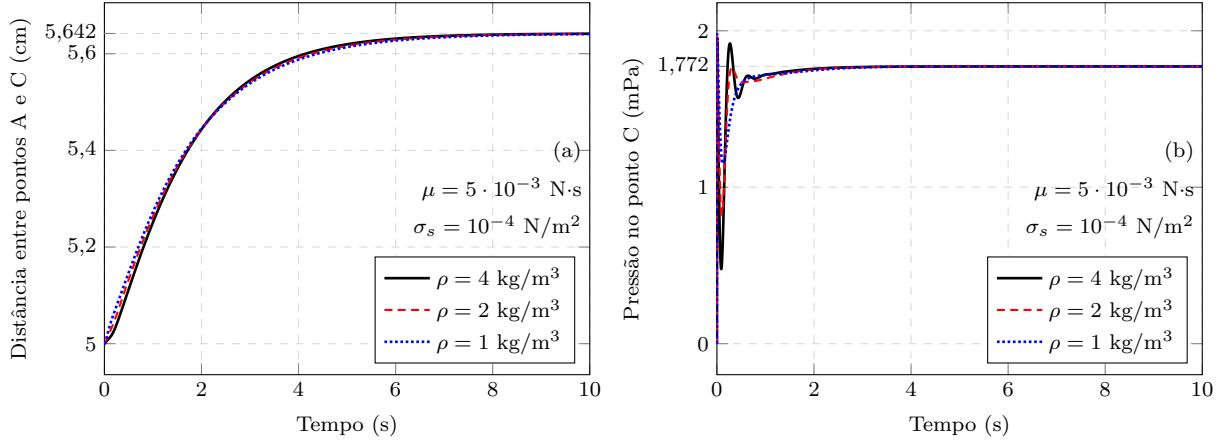
Seguindo para uma segunda análise, avaliamos a influência da massa específica sobre o problema. Neste caso, fixamos os parâmetros μ e σ_s , e variamos ρ_0 em três casos: 4, 2 e 1 kg/m^3 . Os gráficos resultantes dessa análise para $\mu = 10^{-4} \text{ N}\cdot\text{s}$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$ são apresentados na Fig. 77, e para $\mu = 5 \cdot 10^{-3} \text{ N}\cdot\text{s}$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$ são apresentados na Fig. 78.

Figura 77 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 10^{-4} \text{ N}\cdot\text{s}$, $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$, e diferentes valores de massa específica



Como pode ser observado, a variação da massa específica não altera substancialmente o perfil oscilatório, mas impacta diretamente a frequência da oscilação, afetando assim o tempo necessário para estabilização quando a oscilação é mais pronunciada, como nos casos de baixa viscosidade. Dentre os gráficos apresentados na Fig. 77, por exemplo, o menor tempo de estabilização foi obtido para $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$, enquanto os casos com valores mais altos de ρ demandaram um tempo mais prolongado, sendo o período total considerado na análise (10 s) insuficiente para uma convergência satisfatória.

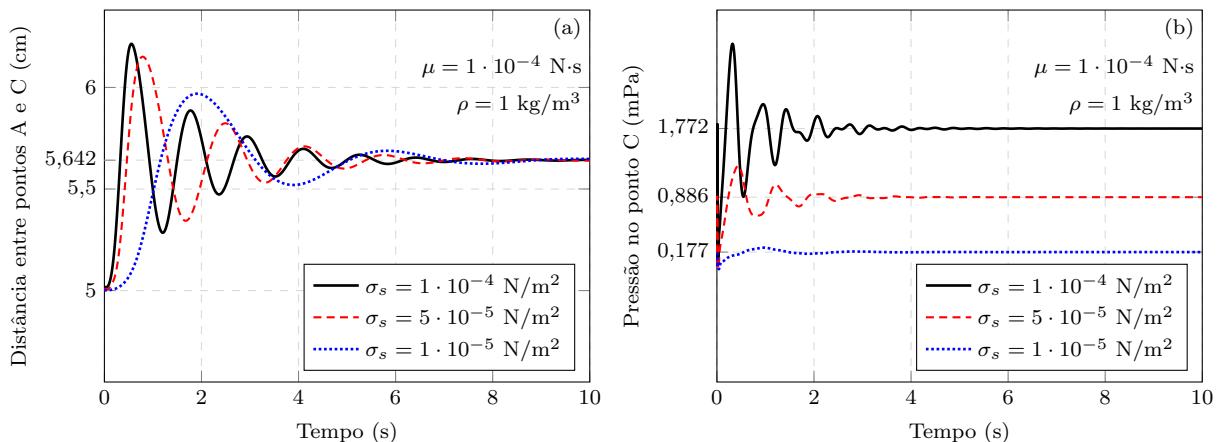
Figura 78 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m², e diferentes valores de massa específica



Já no caso da Fig. 78, onde a viscosidade é mais alta e a oscilação menos significativa, a variação da massa específica tem pouca influência nos resultados. Particularmente na Fig. 78(a), os gráficos demonstram comportamentos quase idênticos durante toda a análise. Na Fig. 78(b) também pode ser observada uma rápida convergência dos resultados, embora hajam algumas divergências no início da análise.

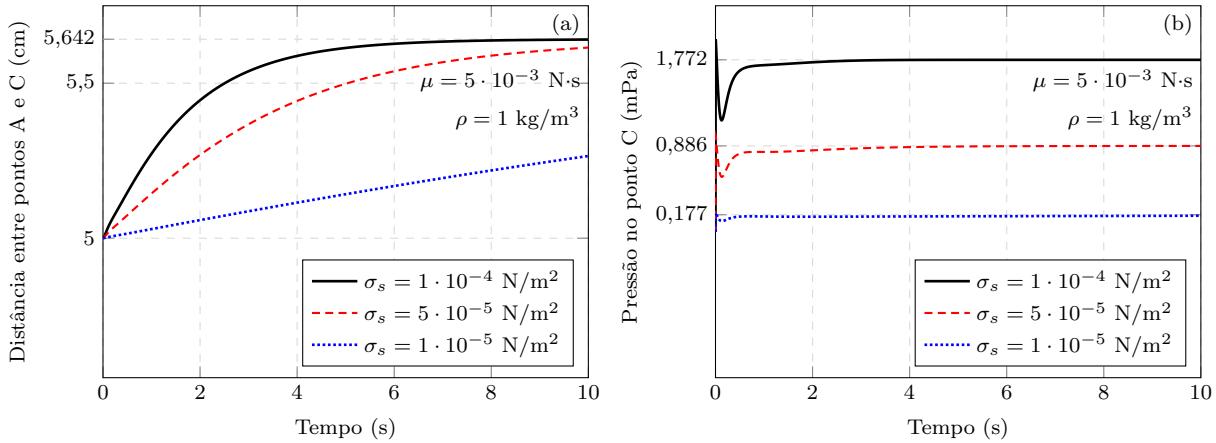
Por fim, analisamos a influência da tensão superficial sobre o problema. Neste caso, fixamos os parâmetros μ e ρ_0 , e variamos σ_s em três casos: $1 \cdot 10^{-4}$, $5 \cdot 10^{-5}$ e $1 \cdot 10^{-5}$ N/m². Os gráficos resultantes para $\mu = 10^{-4}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m³ são apresentados na Fig. 79, e para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m³ são apresentados na Fig. 80.

Figura 79 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 10^{-4}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m³, e diferentes valores de tensão superficial



Embora o raio do círculo resultante não varie em função de σ_s , nota-se que o valor estabilizado da pressão varia, uma vez que, conforme deduzido anteriormente, sua expressão analítica é $p = \sigma_s/R$. Para os casos considerados de σ_s , essa expressão resulta nos valores $1,772 \cdot 10^{-3}$, $0,886 \cdot 10^{-3}$ e $0,177 \cdot 10^{-3}$ Pa, produzindo gráficos de pressão com alinhamentos distintos, como pode ser visto nas Figs. 79(b) e 80(b).

Figura 80 – Gráficos ao longo do tempo de (a) distância entre pontos A e C, e (b) Pressão medida no ponto C, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m³, e diferentes valores de tensão superficial



Avaliando mais profundamente a influência de σ_s sobre os resultados, percebemos comportamentos distintos de acordo com o nível de viscosidade considerado. Para o caso com $\mu = 10^{-4}$ N·s, a variação de σ_s afeta a frequência das oscilações, mas não altera significativamente o tempo de estabilização. Já no caso com $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, onde a viscosidade é suficientemente alta para que não sejam visíveis oscilações, o tempo de estabilização da distância entre os pontos A e C é fortemente influenciado pela tensão superficial, sendo mais longo conforme σ_s diminui. No entanto, esse comportamento não se generaliza para os gráficos de pressão, que convergem rapidamente para as respostas analíticas independentemente do valor de σ_s .

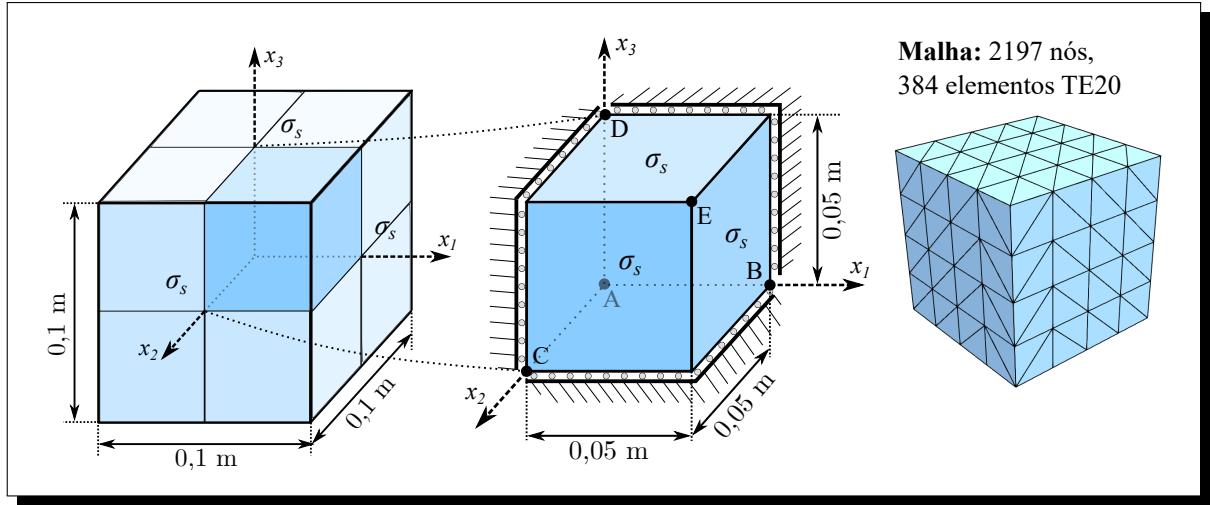
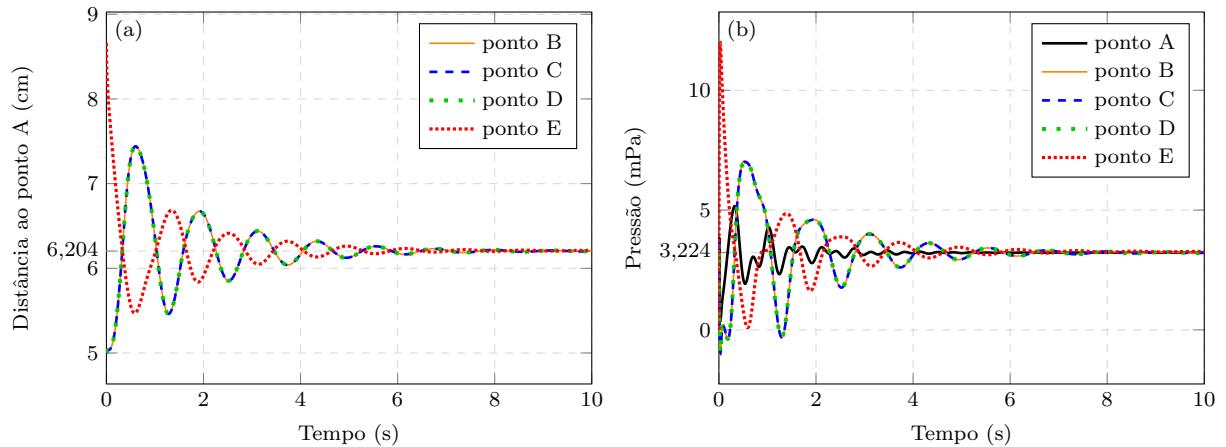
8.3.2.4 Fluido sob tensão superficial: caso 3D

Para ilustrar o efeito da tensão superficial em um caso tridimensional, propõe-se nesta seção uma generalização do exemplo anterior, considerando um fluido Newtoniano incompressível com domínio inicial em forma de cubo, conforme a Fig. 81. Utilizando novamente a simetria do problema, discretizamos apenas um octante do domínio, aplicando as condições de contorno apropriadas nas interfaces com os eixos de simetria. Neste caso, fixamos a tensão superficial no contorno externo em $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m², constante ao longo do tempo, e os parâmetros do material em $\mu = 10^{-4}$ N·s e $\rho_0 = \rho = 1$ kg/m³.

Utiliza-se uma malha regular composta por 384 elementos finitos tetraédricos de terceira ordem (TE20). Os demais parâmetros da análise são similares aos do exemplo anterior: 4000 passos de tempo com $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-3}$ s; integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$; e estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1000$.

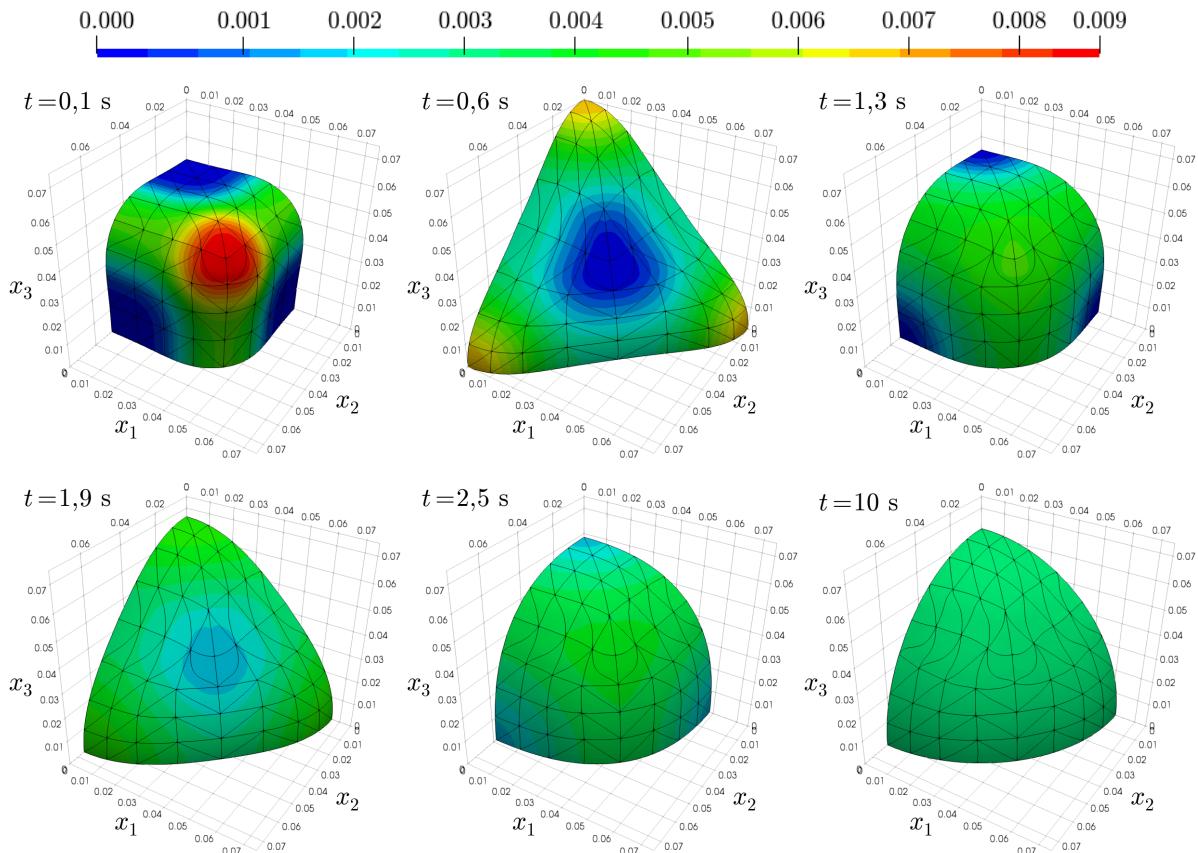
Na Fig. 82(a), avaliamos a distância entre diversos pontos do contorno externo (indicados na Fig. 81) e o centro do domínio (ponto A). Na Fig. 82(b), são apresentados os gráficos de pressão ao longo do tempo para os mesmos pontos. Por fim, na Fig. 83, ilustramos as configurações deformadas do domínio discretizado em determinados instantes da análise, com campo de pressão em mapa de cores.

Podemos observar novamente um comportamento oscilatório com estabilização gradual.

Figura 81 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D**Figura 82** – Gráficos de (a) distância ao ponto A e (b) pressão, para diversos pontos do contorno sob tensão superficial em 3D

Neste caso, o efeito da tensão superficial faz com que a forma cúbica do domínio tenda a assumir uma configuração esférica. Dada a incompressibilidade do material, o volume do octante discretizado ($V = 0,05^3 = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$) é mantido fixo ao longo do processo. Assim, podemos calcular o raio da esfera resultante analiticamente como $R = \sqrt[3]{6V/\pi} \approx 0,06204 \text{ m}$. Como a curvatura média da esfera é $1/R$, a pressão resultante no domínio também pode ser calculada de forma analítica como $p = 2\sigma_s\kappa = 2\sigma_s/R \approx 3,224 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$. Nota-se que, na Fig. 82, as pressões tendem a esse valor, e os gráficos das distâncias medidas tendem ao raio previamente calculado, demonstrando a consistência dos resultados obtidos.

Figura 83 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D



Capítulo 9

Mudança de fase

A mudança de fase é o processo no qual um material reorganiza sua estrutura molecular ou atômica, alternando entre diferentes estados físicos, como sólido, líquido e gasoso. Em geral, esse fenômeno ocorre devido à variação de temperatura e pressão no material. Entretanto, na mudança de fase entre os estados sólido e líquido, o efeito da pressão geralmente exerce uma influência secundária, sendo a temperatura o fator principal a ser considerado.

Neste capítulo, apresentamos um modelo numérico para a mudança de fase do estado sólido para o líquido (fusão), e do líquido para o sólido (solidificação). Inicialmente, focamos em um contexto puramente térmico, desconsiderando deformações e demais efeitos mecânicos, ou seja, mantendo os pontos do domínio fixos no espaço. Esse tipo de problema tem como objetivo descrever matematicamente como a interface entre as fases sólida e líquida se move ao longo do tempo, sendo comumente conhecido como problema de Stefan. Os métodos de solução nesse caso já são bem consolidados na literatura, sendo utilizados como referências os trabalhos de ??, ??, ?? e ??).

Por fim, partimos para o problema termo-mecânico da mudança de fase, onde o material pode deformar-se durante o processo. Nesta etapa, são utilizados como referência os trabalhos de ???, ??) e ??), embora a formulação desenvolvida no presente trabalho seja original.

9.1 Formulação puramente térmica

Durante a fusão, o material absorve energia para a reestruturação das moléculas. Durante a solidificação, o material libera energia. A medida de energia que controla esses processos é denominada entalpia. Definimos a entalpia específica por unidade de volume na configuração inicial como

$$h = \psi + \theta\eta + Jp \quad (9.1)$$

onde, conforme definido nos capítulos anteriores, ψ é a energia livre de Helmholtz por unidade de volume na configuração inicial, θ a temperatura absoluta, η a entropia por unidade de volume na configuração inicial, J o jacobiano ou deformação volumétrica, e p a pressão.

No contexto puramente térmico, ψ depende apenas da temperatura, e a entropia é dada por $\eta = -\partial\psi/\partial\theta$, conforme visto na Eq. (3.27). Logo, a entalpia e a sua taxa são dadas pelas expressões:

$$h = \psi - \theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + Jp \quad (9.2)$$

$$\dot{h} = \cancel{\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\dot{\theta}} - \dot{\theta}\cancel{\frac{\partial\psi}{\partial\theta}} - \theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta} + Jp + J\dot{p} = -\theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta} + Jp + J\dot{p}. \quad (9.3)$$

Os termos envolvendo as taxas do Jacobiano (\dot{J}) e da pressão (\dot{p}) são particularmente relevantes para materiais gasosos, devido às mudanças volumétricas significativas que ocorrem com variações de pressão e temperatura. No entanto, para sólidos e líquidos, onde as variações volumétricas são geralmente muito pequenas, esses termos podem ser considerados insignificantes em comparação com os demais, sendo comumente desprezados. Assim, temos:

$$\dot{h} \approx -\theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta} = \theta \frac{\partial\eta}{\partial\theta}\dot{\theta} = \theta\dot{\eta} \quad (9.4)$$

Aplicando a Eq. (9.4) na Eq. (3.28), podemos reescrever a equação da condução de calor puramente térmica na forma

$$\dot{h} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \quad (9.5)$$

Em casos onde não ocorra mudança de fase, a Eq. (9.5) deve coincidir com a Eq. (3.35). Logo, teríamos $\dot{h} = c_v\dot{\theta}$, onde c_v é o calor específico volumétrico do material. Essa relação é válida tanto para sólidos quanto para fluidos. Dado que c_v é um parâmetro positivo, ela indica que variações positivas na entalpia resultam em variações positivas na temperatura, e vice-versa. Entretanto, durante o processo de mudança de fase, a relação entre entalpia e temperatura se altera, pois parte da energia é utilizada para os rearranjos moleculares, e não apenas para o aumento da temperatura.

A mudança de fase pode ser classificada como isotérmica ou não-isotérmica. Na mudança de fase isotérmica, toda a energia fornecida ou retirada do sistema é utilizada exclusivamente para a mudança de estado, não havendo variações de temperatura durante o processo. Já na mudança de fase não-isotérmica, apenas parte da energia é convertida, resultando em variações de temperatura ao longo do processo.

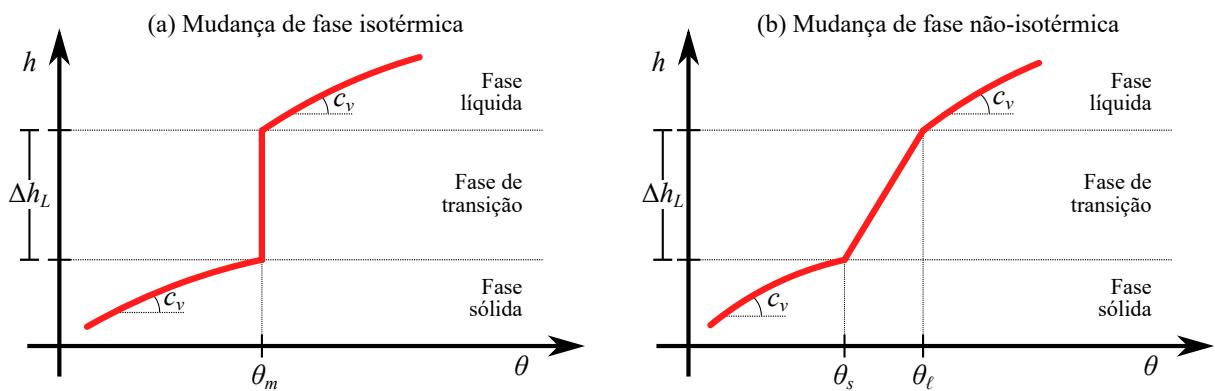
A quantidade de energia absorvida ou liberada (i.e. a variação de entalpia) durante a mudança de fase é denominada calor latente, denotada por Δh_L . O calor latente é uma propriedade intrínseca do material. Para mudanças de fase entre sólido e líquido, onde o efeito da pressão não é significativo, ele pode ser tratado como um parâmetro fixo.

As temperaturas nas quais ocorrem as transições de fase também podem ser consideradas parâmetros fixos do material nessas condições. A mudança de fase isotérmica é caracterizada por uma única temperatura de fusão ou solidificação, denotada por θ_m . Quando a temperatura do material é inferior a θ_m , ele está na fase sólida; quando a temperatura é superior a θ_m , ele está na fase líquida; e quando a temperatura é exatamente igual a θ_m , ele está em uma fase de transição, também conhecida como fase pastosa.

Em contraste, a mudança de fase não-isotérmica é caracterizada por duas temperaturas: a temperatura limite do estado sólido, denotada por θ_s , e a temperatura limite do estado líquido, denotada por θ_ℓ . Neste caso, quando a temperatura do material é inferior a θ_s , ele está na fase sólida; quando a temperatura é superior a θ_ℓ , ele está na fase líquida; e quando a temperatura está entre θ_s e θ_ℓ , ele está na fase de transição.

A Fig. 84 ilustra a relação característica entre entalpia e temperatura para os casos isotérmico e não-isotérmico, indicando as fases associadas a cada intervalo. Esses gráficos são específicos de cada material, podendo apresentar uma configuração linear por partes ou totalmente não-linear.

Figura 84 – Relações características entre entalpia e temperatura



No caso isotérmico, a entalpia do sistema não pode ser unicamente determinada pela temperatura, devido à descontinuidade do gráfico durante a mudança de fase. Por esse motivo, formulações tradicionais de transferência de calor baseadas puramente em temperatura, como a apresentada no Capítulo 3, não são capazes de modelar esse problema de forma exata. Algumas abordagens alternativas para lidar com esse desafio são:

- Usar um modelo não-isotérmico aproximadamente equivalente, tomando as temperaturas limite como $\theta_s = \theta_m - \Delta\theta_m$ e $\theta_\ell = \theta_m + \Delta\theta_m$, onde $\Delta\theta_m$ é uma variação de temperatura suficientemente pequena. É importante destacar que, além de aproximado, esse método pode apresentar instabilidades numéricas caso $\Delta\theta_m$ seja muito pequeno. Entretanto, é uma alternativa de simples implementação;
- Formular as equações da termodinâmica em termos da entalpia, com base na Eq. (9.5), tratando-a como a variável principal do sistema, ao invés da temperatura (??). Essa estratégia é eficaz, pois a temperatura pode sempre ser unicamente determinada pela entalpia, enquanto a recíproca não é válida.

Neste trabalho, focaremos apenas na mudança de fase não-isotérmica. Em casos onde for necessário modelar materiais com mudança de fase isotérmica, adotaremos a abordagem aproximada descrita no item (a).

9.1.1 Modelo de mudança de fase não-isotérmica

Com base na Fig. 84(b), vamos supor que a entalpia varia linearmente em relação à temperatura durante a mudança de fase. Conforme discutido anteriormente, a inclinação dessa reta possui efeito similar ao calor específico volumétrico.

Para modelar esse comportamento, admitimos que a energia livre de Helmholtz pode ser decomposta na seguinte forma:

$$\psi(\theta) = \psi_\theta(\theta) + \psi_L(\theta), \quad (9.6)$$

onde ψ_θ é a parcela associada ao calor específico do material, que pode ser definida de forma análoga à Eq. (3.32), e ψ_L é uma parcela associada ao calor latente. Para representar o efeito desejado, a parcela de calor latente pode ser definida como

$$\psi_L(\theta) = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} \left(\theta - \theta_s - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_s} \right) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L \left(1 - \theta \frac{\ln(\theta_\ell/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} \right) & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.7)$$

Essa energia é expressa utilizando como referência a temperatura limite do sólido (θ_s). Destacamos, no entanto, que essa escolha é arbitrária e poderia ser feita com base em outra temperatura de referência, desde que se mantenham consistentes as derivadas necessárias para as equações subsequentes.

A partir disso, podemos definir a parcela da entropia associada ao calor latente por meio da expressão

$$\eta_L(\theta) = -\frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \Delta h_L \frac{\ln(\theta/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L \frac{\ln(\theta_\ell/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.8)$$

Assim, a parcela de entalpia associada ao calor latente é calculada como

$$h_L(\theta) = \psi_L + \theta \eta_L = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \Delta h_L \frac{\theta - \theta_s}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.9)$$

Essa definição é consistente com o modelo almejado, pois apresenta uma variação linear de entalpia entre 0 e Δh_L ao longo da mudança de fase. Ao adicionar o efeito do calor específico, obtemos o comportamento ilustrado na Fig. 84(b).

Utilizando as expressões anteriores, podemos calcular a taxa de entalpia total neste caso como

$$\dot{h} = -\theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \dot{\theta} = -\theta \left(\frac{\partial^2 \psi_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \psi_L}{\partial \theta^2} \right) \dot{\theta} = (c_v + c_v^L) \dot{\theta}, \quad (9.10)$$

onde c_v^L é o calor específico volumétrico latente, definido pela expressão

$$c_v^L = -\theta \frac{\partial^2 \psi_L}{\partial \theta^2} = \theta \frac{\partial \eta_L}{\partial \theta} = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell, \end{cases} \quad (9.11)$$

e c_v é o calor específico volumétrico do material, já apresentado nos capítulos anteriores, sendo definido neste contexto como

$$c_v = -\theta \frac{\partial^2 \psi_\theta}{\partial \theta^2}. \quad (9.12)$$

Vale destacar que, para representar fielmente o comportamento da Fig. 84(b), o valor de c_v deveria ser nulo durante a fase de transição, uma vez que o valor de c_v^L na Eq. (9.11) já representa exatamente a inclinação do gráfico nessa fase. Alternativamente, pode-se manter a continuidade de c_v , ajustando apenas o valor de Δh_L para refletir a variação de entalpia desejada. Neste trabalho, adotamos essa última abordagem.

Aplicando a Eq. (9.10) na Eq. (9.5), obtém-se, enfim, a equação da condução de calor local Lagrangiana considerando a mudança de fase não-isotérmica:

$$(c_v + c_v^L) \dot{\theta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \quad (9.13)$$

Como podemos observar, o efeito do calor latente na equação de calor é similar ao efeito do calor específico, sendo a sua contribuição relevante apenas durante a mudança de fase. O termo $c_v + c_v^L$ pode ser tratado como um calor específico volumétrico efetivo, tornando a implementação numérica quase completamente similar à apresentada na Seção 3.5, com a única diferença sendo a presença de descontinuidades no calor específico, dada a definição de c_v^L . Conforme será visto na próxima seção, essas descontinuidades podem causar instabilidades e problemas de convergência, exigindo técnicas adicionais de ajuste do modelo numérico.

9.1.2 Implementação numérica

Partindo da Eq. (9.13), e aplicando os mesmos procedimentos detalhados no Capítulo 3, podemos construir um sistema de equações para resolver globalmente o problema térmico utilizando o método dos elementos finitos. Esse sistema seguirá a forma apresentada na Eq. (3.63), diferenciando-se apenas na definição da matriz $[\mathbf{C}]$, que agora deve levar em conta tanto o calor específico volumétrico (c_v) quanto o calor específico latente (c_v^L).

A descontinuidade de c_v^L introduz automaticamente uma não-linearidade ao problema, ainda que o sistema possa ser linear por partes. Para lidar com essa não-linearidade, o procedimento básico é o seguinte para cada passo de tempo:

1. Inicialmente, consideram-se as temperaturas iguais às do passo anterior.
2. Para cada ponto de integração do domínio, determina-se, a partir da temperatura, se o ponto está na fase sólida, líquida ou de transição;
3. Se o ponto estiver na fase de transição, adiciona-se a parcela $c_v^L = \Delta h_L / (\theta_\ell - \theta_s)$ ao calor específico volumétrico; caso contrário, $c_v^L = 0$, logo não se adiciona nada;
4. Integram-se as contribuições de todos os pontos de integração, resolve-se o sistema global e atualizam-se as temperaturas;
5. Com as temperaturas atualizadas, realiza-se novamente o procedimento descrito no item 2. Se houver mudança de fase em algum ponto, o passo de tempo deve ser recalculado, e segue-se para o item 3 e adiante. Caso não haja mudança, finaliza-se o passo de tempo.

No entanto, esse processo iterativo pode falhar quando não houver estabilização de temperatura e fase em algum ponto do domínio, levando a repetições infinitas. Isso é especialmente crítico nos passos de tempo onde ocorre a mudança de fase.

Para exemplificar esse problema, imagine que em um determinado passo de tempo um ponto do material passa da fase sólida para a fase de transição. Na primeira tentativa, será utilizado o calor específico volumétrico da fase sólida (c_v), e a temperatura calculada será maior que θ_s , levando o ponto à fase de transição. Inicia-se, portanto, uma segunda tentativa, onde é utilizado o calor específico da fase de transição ($c_v + c_v^L$). Como esse calor específico é maior, isso resulta em uma temperatura menor em comparação à tentativa anterior. Caso essa temperatura seja inferior a θ_s , o ponto retorna à fase sólida, e a primeira tentativa se repetirá, causando um ciclo interminável de iterações.

Isso ocorre pois, no esquema iterativo apresentado, as variações de temperatura calculadas em cada tentativa levam em conta apenas os parâmetros da fase daquela tentativa. Mas, na realidade, a temperatura percorre as duas fases entre os passos de tempo, devendo, portanto, receber influência de ambas. Para levar esse fato em conta, podemos expressar a variação de temperatura $\Delta\theta$ como a soma das parcelas $\Delta\theta_L$ e $\Delta\theta - \Delta\theta_L$, onde $\Delta\theta_L$ é a variação de temperatura que ocorre dentro da fase de transição, e $\Delta\theta - \Delta\theta_L$ é a variação de temperatura que ocorre fora da fase de transição. Uma vez que cada uma dessas componentes está associada a um calor específico diferente, podemos calcular um calor específico volumétrico efetivo (c_v^{ef}) tal que:

$$(c_v^{ef})\Delta\theta = \underbrace{(c_v)(\Delta\theta - \Delta\theta_L)}_{\text{Fase líquida ou sólida}} + \underbrace{\left(c_v + \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s}\right)\Delta\theta_L}_{\text{Fase de transição}}. \quad (9.14)$$

Rearranjando a Eq. (9.14), obtemos a seguinte expressão para c_v^{ef} :

$$c_v^{ef} = c_v + \left(\frac{\Delta\theta_L}{\Delta\theta}\right) \cdot \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s}. \quad (9.15)$$

Isto é, a parcela de calor latente é ponderada pela porcentagem da variação de temperatura que efetivamente ocorre dentro da fase de transição ($\Delta\theta_L/\Delta\theta$). A expressão que reflete essa porcentagem varia conforme o tipo de mudança de fase que ocorre no passo de tempo. Por exemplo, para uma mudança da fase sólida para a fase de transição, temos $\Delta\theta_L = \theta - \theta_s$. Logo, $\Delta\theta_L/\Delta\theta = (\theta - \theta_s)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$, onde θ_{ant} é a temperatura do ponto no passo anterior.

Para fins de generalização, a Eq. (9.15) também pode ser aplicada em passos de tempo sem mudança de fase. Nesse caso, o coeficiente $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ assume o valor 1 se o ponto estiver na fase de transição, e 0 se estiver nas fases líquida ou sólida, refletindo a definição de c_v^L dada na Eq. (9.11). Na Tabela 8, são apresentadas as expressões de $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ para cada possibilidade de variação de fase entre os passos de tempo.

Tabela 8 – Coeficiente de ponderação para a parcela latente do calor específico

| Variação de fase entre os passos de tempo | $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ |
|---|--|
| Sólido → Transição | $(\theta - \theta_s)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Transição → Sólido | $(\theta_s - \theta_{\text{ant}})/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Transição → Líquido | $(\theta_\ell - \theta_{\text{ant}})/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Líquido → Transição | $(\theta - \theta_\ell)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Sólido → Líquido | $(\theta_\ell - \theta_s)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Líquido → Sólido | $(\theta_s - \theta_\ell)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$ |
| Sólido → Sólido | 0 |
| Líquido → Líquido | 0 |
| Transição → Transição | 1 |

Portanto, a matriz $[\mathbf{C}]$ da Eq. (3.63) é dada por

$$[\mathbf{C}]_{ij} = \int_{\Omega_0} c_v^{\text{ef}} \varphi^i \varphi^j dV_0 = \int_{\Omega_0} \left(c_v + \frac{\Delta\theta_L}{\Delta\theta} \cdot \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} \right) \varphi^i \varphi^j dV_0, \quad (9.16)$$

onde o coeficiente $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ deve ser determinado caso a caso, levando em conta a mudança de fase ocorrida em cada ponto de integração do domínio. Também é importante notar que, nos casos onde há mudança de fase, a expressão de $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ depende da temperatura atual, que não é conhecida durante o processo de solução. Assim, o sistema de equações (3.63) torna-se não-linear, demandando métodos iterativos de solução, como o de Newton-Raphson. Apesar desse aumento na complexidade do algoritmo, a estratégia apresentada garante a convergência da solução sem a necessidade de modificações significativas no modelo.

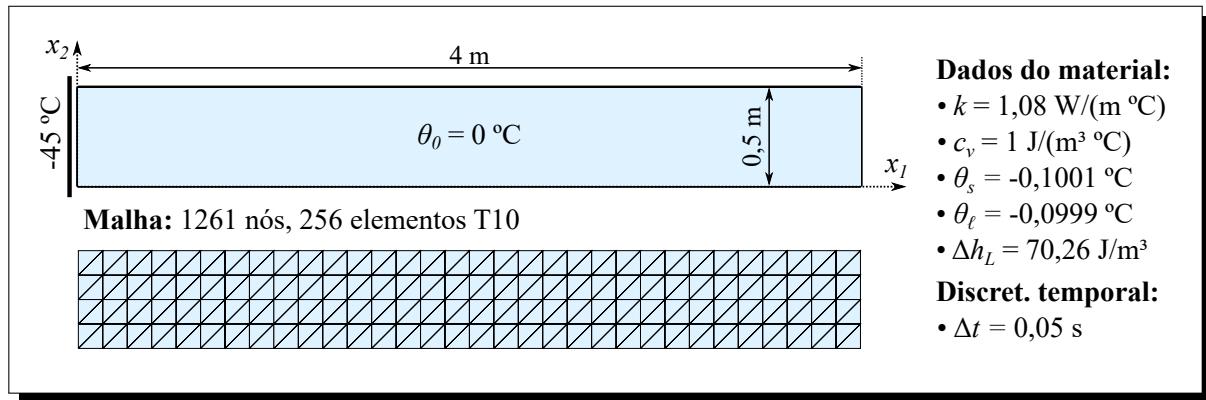
Outra alternativa para contornar o problema de convergência discutido previamente é a aplicação de técnicas de regularização, que suavizam o gráfico de entalpia por temperatura, eliminando as descontinuidades de c_v^L . Essa abordagem pode ser vista, por exemplo, em ??). No entanto, é importante observar que essas técnicas essencialmente modificam o

modelo, ainda que de forma aproximada, podendo ou não representar com precisão o comportamento real do material.

9.1.3 Exemplo de verificação: solidificação de chapa ao longo de um eixo

Para verificar numericamente o algoritmo desenvolvido, simula-se o exemplo de uma chapa retangular com as condições dispostas na Fig. 85. Inicialmente, a chapa encontra-se na fase líquida, com temperatura de $0\text{ }^{\circ}\text{C}$. Devido a uma temperatura prescrita constante de $-45\text{ }^{\circ}\text{C}$ na sua extremidade esquerda, a chapa solidifica-se ao longo do eixo x_1 conforme o tempo avança. Trata-se, portanto, de um problema essencialmente unidimensional, embora seja discretizado em um domínio bidimensional.

Figura 85 – Dados do exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo



Por ter sua resposta analítica conhecida, este problema é amplamente abordado na literatura como um *benchmark* para modelos numéricos de mudança de fase, sendo alguns exemplos os trabalhos de ??) e ??). Originalmente, a mudança de fase é considerada isotérmica, com temperatura de solidificação de $\theta_m = -0,1 \text{ } ^{\circ}\text{C}$. Neste trabalho, adaptamos o modelo para uma versão não-isotérmica aproximada, com variação de $\Delta\theta_m = 10^{-4} \text{ } ^{\circ}\text{C}$, resultando nas temperaturas limites de $\theta_s = -0,1001 \text{ } ^{\circ}\text{C}$ e $\theta_l = -0,0999 \text{ } ^{\circ}\text{C}$.

Na Fig. 86 são apresentados os mapas de temperatura e de fase para determinados instantes da análise, ilustrando a evolução do processo de solidificação no domínio. Na Fig. 87(a) é mostrada a evolução da temperatura em um ponto localizado a 1 m da extremidade esquerda. Na Fig. 87(b), é apresentado o gráfico da posição da interface de mudança de fase ao longo do tempo, tomada como a coordenada x_1 onde a temperatura vale $-0,1 \text{ } ^{\circ}\text{C}$. Os gráficos são comparados com as respostas analíticas extraídas de ??), mostrando excelente concordância.

9.2 Formulação termo-mecânica

Em problemas de mudança de fase envolvendo efeitos mecânicos, deve-se levar em conta que sólidos e líquidos possuem comportamentos constitutivos diferentes, sendo necessário utilizar um modelo que leve em conta a variação de resposta mecânica ao transitar entre

Figura 86 – Mapa de cores de temperatura e fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo

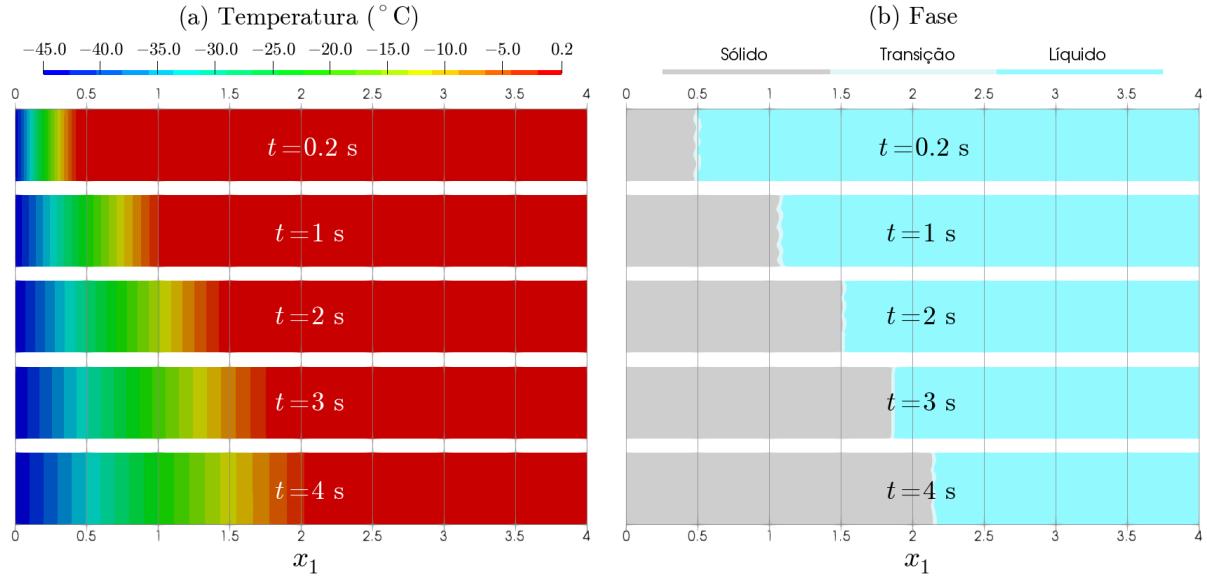
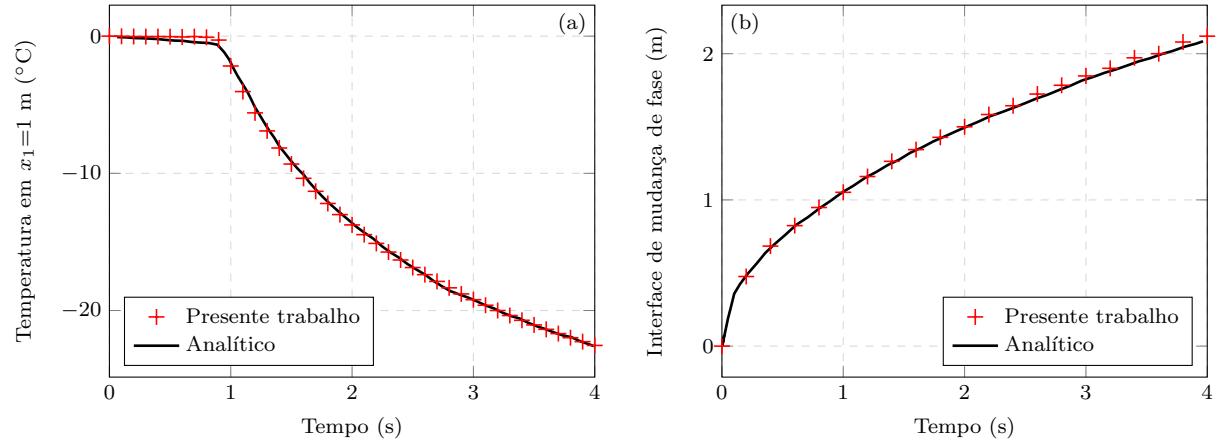


Figura 87 – Gráficos de (a) temperatura no ponto $x_1 = 1\text{ m}$ e (b) posição da interface de mudança de fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo



as fases. Neste contexto, propõe-se uma formulação Lagrangiana unificada, combinando os desenvolvimentos previamente apresentados ao longo deste trabalho.

Para a fase sólida, consideramos os modelos constitutivos discutidos nos Capítulos 4 a 6. Para a fase líquida, utilizamos o modelo de fluido Newtoniano apresentado na Seção 8.3. Para a fase de transição, podemos tratar o material como um compósito, representando-o por uma combinação dos modelos de sólido e de líquido.

9.2.1 Cinemática

O uso de uma formulação totalmente Lagrangiana impõe certos desafios na definição do modelo, uma vez que a configuração indeformada do corpo varia ao longo do processo, e pode não coincidir com a configuração inicial. De fato, a configuração indeformada de um ponto no estado sólido será aquela na qual esse ponto se tornou sólido, isto é, a configuração no momento da mudança de fase. Em contrapartida, essa preocupação é menos relevante

na transição da fase sólida para a líquida, pois o modelo constitutivo de fluido é baseado em grandezas Eulerianas e, portanto, sua resposta independe da configuração de referência.

A consideração da fase de transição adiciona mais um grau de complexidade ao problema, pois, nessa fase, o domínio apresenta simultaneamente porções sólidas e líquidas, tornando necessário um modelo que leve em conta a influência de ambos os estados.

Para tratar essas particularidades, faz-se uma distinção entre as deformações ocorridas nos estados sólido e líquido. Utilizando a decomposição multiplicativa, podemos escrever a parcela mecânica do gradiente da função mudança de configuração como

$$\mathbf{F}_m = \mathbf{F}_s \mathbf{F}_\ell, \quad (9.17)$$

onde \mathbf{F}_s é a parcela sólida, e \mathbf{F}_ℓ a parcela líquida. Dependendo do modelo de sólido adotado, \mathbf{F}_s pode ser decomposto em parcelas mecânicas adicionais, como elásticas, viscosas e plásticas, seguindo as cinemáticas descritas nos Capítulos 5 e 6.

Com base em conceitos previamente discutidos sobre a decomposição multiplicativa, a forma apresentada na Eq. (9.17) sugere a existência de uma configuração intermediária líquida (Ω_ℓ). Como \mathbf{F}_s é definido sobre essa configuração intermediária, esta assume o significado de configuração indeformada do sólido, garantindo a consistência do modelo independentemente da configuração inicial adotada.

A abordagem apresentada permite que as deformações sólidas e líquidas sejam tratadas individualmente. Quando o material encontra-se no estado sólido, apenas \mathbf{F}_s é atualizado; quando o material encontra-se no estado líquido, apenas \mathbf{F}_ℓ é atualizado; quando o material encontra-se no estado de transição, ambos serão atualizados, e a evolução de cada componente irá depender da proporção local entre sólido e líquido, que, por sua vez, é definida em função da temperatura.

Partindo de \mathbf{F}_s e \mathbf{F}_ℓ , e utilizando expressões análogas às Eqs. (2.2), (2.3), (2.6), (2.8) e (2.11), podemos definir componentes sólidas e líquidas do alongamento à direita de Cauchy-Green (\mathbf{C}_s e \mathbf{C}_ℓ), deformação de Green-Lagrange (\mathbf{E}_s e \mathbf{E}_ℓ), velocidade da mudança de configuração (\mathbf{L}_s e \mathbf{L}_ℓ), taxa de deformação de engenharia (\mathbf{D}_s e \mathbf{D}_ℓ), e Jacobiano (J_s e J_ℓ), respectivamente.

Considerando um modelo de expansão térmica isotrópico similar ao descrito nas Seções 4.3 e 6.1, podemos expressar o gradiente da função mudança de configuração total como

$$\mathbf{F} = \lambda_\theta \mathbf{F}_m = \lambda_\theta \mathbf{F}_s \mathbf{F}_\ell, \quad (9.18)$$

onde λ_θ representa o alongamento térmico. As relações cinemáticas apresentadas na Seção 6.1 também podem ser adaptadas para o presente contexto. Em particular:

$$\mathbf{C}_m = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{C}, \quad (9.19)$$

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_\ell^{-T} \mathbf{C}_m \mathbf{F}_\ell^{-1} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_\ell^{-T} \mathbf{C} \mathbf{F}_\ell^{-1}, \quad (9.20)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_m = \lambda_\theta^{-2} \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m = \lambda_\theta^{-2} \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^{-3} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}, \quad \text{e} \quad (9.21)$$

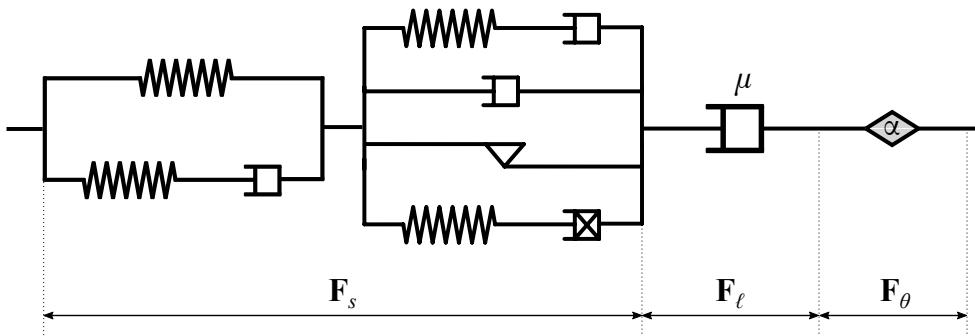
$$\dot{\mathbf{E}}_s = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_\ell^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}_\ell^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_s \mathbf{L}_\ell) - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_s. \quad (9.22)$$

9.2.2 Base termodinâmica

Conforme visto nos capítulos anteriores, o modelo constitutivo de um sólido possui componentes hiperelásticos, definidos através da energia livre de Helmholtz, e componentes dissipativos, cujas leis de evolução são definidas utilizando a segunda lei da termodinâmica. Por outro lado, o modelo constitutivo de fluido possui um caráter totalmente dissipativo, não armazenando energia. Reologicamente, o comportamento de um fluido pode ser representado por um pistão, similarmente ao efeito da viscosidade no sólido.

Neste trabalho, assumimos que a fase de transição é representada reologicamente por uma associação em série entre os modelos de sólido, fluido, e de expansão térmica. Para o caso onde o sólido é um material viscoelástico-viscoplástico, por exemplo, o modelo é ilustrado na Fig. 88.

Figura 88 – Modelo reológico para a fase de transição, considerando um sólido viscoelástico-viscoplástico



Generalizando o conceito discutido na Seção 4.3, podemos escrever a energia livre de Helmholtz do modelo como:

$$\psi = \psi_\theta + \psi_L + \lambda^3 \psi_m, \quad (9.23)$$

onde ψ_θ e ψ_L são as parcelas térmicas discutidas na Seção 9.1.1, e ψ_m representa a parcela mecânica, que pode ser adicionalmente decomposta como

$$\psi_m = \psi_m^{\text{vol}} + \psi_m^{\text{iso}} \quad (9.24)$$

onde ψ_m^{vol} denota sua parcela volumétrica, e ψ_m^{iso} sua parcela isocórica.

Assumindo que tanto o sólido quanto o fluido sejam incompressíveis, e seguindo a formulação apresentada na Seção 8.1, temos:

$$\psi_m^{\text{vol}} = -p \ln(J_m), \quad (9.25)$$

onde $J_m = \det \mathbf{F}_m$ é o Jacobiano mecânico. Embora utilizemos essa definição no presente trabalho, a formulação apresentada pode ser generalizada considerando casos compressíveis, quase-incompressíveis, ou demais modelos volumétricos.

A parcela isocórica da energia mecânica, por sua vez, deverá ser tratada individualmente em cada fase. Para a fase líquida, a componente isocórica é totalmente dissipativa, logo $\psi_m^{\text{iso}} = 0$. Para a fase sólida, temos $\psi_m^{\text{iso}} = \psi_s^{\text{iso}}$, onde ψ_s^{iso} é a energia livre de Helmholtz

mecânica isocórica do modelo sólido. Para a fase de transição, assumimos que ψ_s^{iso} é uma porcentagem da energia mecânica, ou seja, $\psi_s^{\text{iso}} = \omega_s \psi_m^{\text{iso}}$, onde ω_s é um valor entre 0 e 1 que depende da temperatura atual no ponto. Para garantir a continuidade da energia, ω_s deve variar continuamente de 0 a 1 quando a temperatura varia de θ_ℓ a θ_s .

Com base nessas suposições, podemos estabelecer a seguinte definição:

$$\psi_m^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) = \begin{cases} \psi_s^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \omega_s^{-1}(\theta) \psi_s^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell, \end{cases} \quad (9.26)$$

onde $\boldsymbol{\chi}$ representa, de forma geral, as variáveis internas do modelo sólido, incluindo, por exemplo, as deformações viscosas, plásticas, e as variáveis associadas aos modelos de encruamento. Assim, ψ_s^{iso} pode representar qualquer modelo de sólido dentre os discutidos nos Capítulos 4 a 6, apenas substituindo as deformações mecânicas totais por medidas de deformação sólidas (\mathbf{E}_s ou \mathbf{C}_s).

Considerando as variáveis independentes de cada termo apresentado, calculamos a taxa da energia livre de Helmholtz por meio da seguinte expressão:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} \dot{\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \dot{\theta} + \lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} : \dot{\mathbf{E}}_m + \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \right) + \lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} : \dot{\mathbf{E}}_s + \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \quad (9.27)$$

Aplicando as relações cinemáticas dadas nas Eqs. (9.21) e (9.22), e manipulando algebraicamente, temos:

$$\dot{\psi} = \left(\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} + \lambda_\theta \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}}, \quad (9.28)$$

onde \mathbf{M}_m é o tensor de Mandel mecânico, definido na configuração intermediária térmica, dado pela expressão

$$\mathbf{M}_m = \mathbf{C}_m \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_m}, \quad (9.29)$$

que resulta em

$$\text{tr} \mathbf{M}_m = \mathbf{C}_m : \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_m} = \mathbf{C}_m : \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \mathbf{C}_s : \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s}. \quad (9.30)$$

Aplicando a Eq. (9.28) na primeira lei da termodinâmica, Eq. (3.20), temos

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \\ & - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \end{aligned} \quad (9.31)$$

E aplicando na segunda lei da termodinâmica, Ineq. (3.21), temos

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \\ & - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Utilizando essas expressões como base, derivam-se as relações constitutivas do material. O procedimento adotado varia conforme a fase, sendo detalhado individualmente para cada caso nas seções seguintes.

9.2.3 Modelo constitutivo da fase sólida

Na fase sólida ($\theta \leq \theta_s$), temos $\psi_m^{\text{iso}} = \psi_s^{\text{iso}}$, e consideramos que a variação de deformação líquida é nula, ou seja, $\mathbf{L}_\ell = \mathbf{0}$. Assim, a Eq. (9.31) resulta em

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \end{aligned} \quad (9.33)$$

e a Ineq. (9.32) resulta em

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (9.34)$$

Segundo o procedimento de ??), as expressões acima devem ser válidas para qualquer processo termodinâmico, ou seja, para quaisquer valores das taxas $\dot{\theta}$, $\dot{\mathbf{E}}$ e \dot{p} . Essa condição é atendida se os conjugados termodinâmicos dessas taxas forem nulos, o que resulta nas seguintes relações constitutivas:

$$\eta = - \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \lambda_\theta^2 (\text{tr} \mathbf{M}_m - 3\psi_m) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.35)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad \text{e} \quad (9.36)$$

$$\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} = 0, \quad (9.37)$$

onde a última é a condição de incompressibilidade, abordada no Capítulo 8. O termo $\partial \psi_s^{\text{iso}} / \partial \mathbf{E}_s$ representa a tensão isocórica do modelo sólido isolado, definida, neste caso, na configuração intermediária líquida. Em particular, quando não há deformações líquidas (i.e. $\mathbf{F}_\ell = \mathbf{I}$), a Eq. (9.36) recai exatamente na tensão dos modelos sólidos discutidos em capítulos anteriores.

Relacionando as Eqs. (9.30) e (9.36), verificamos que $\text{tr } \mathbf{M}_m = \lambda_\theta^{-3} \mathbf{C} : \mathbf{S}$. Logo, podemos reescrever a equação da entropia como

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.38)$$

que é análoga à Eq. (6.27), aplicada no caso puramente sólido, com exceção do termo de calor latente. As leis de evolução das variáveis internas também devem seguir exatamente as mesmas expressões do caso puramente sólido.

Aplicando as Eqs. (9.36) a (9.38) na Eq. (9.33) e na Ineq. (9.34), podemos reescrever a primeira e segunda leis da termodinâmica por expressões análogas às já apresentadas em capítulos anteriores:

$$\theta \dot{\eta} + \boldsymbol{\nabla}_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad \text{e} \quad (9.39)$$

$$d_{\text{int}} = d_m - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \boldsymbol{\nabla}_0 \theta \geq 0, \quad (9.40)$$

onde a taxa de dissipação mecânica (d_m) na fase sólida provém apenas das variáveis internas, sendo definida de forma genérica como

$$d_m = -\lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \quad (9.41)$$

Para sólidos hiperelásticos, a equação acima é nula. Para sólidos com modelo viscoelástico-viscoplástico, esta é equivalente à forma já apresentada na Eq. (6.31).

A implementação numérica do modelo segue uma abordagem totalmente similar ao caso puramente sólido. Para garantir a convergência quadrática da solução não-linear, calculamos o operador tangente consistente (\mathfrak{C}) através da derivada da Eq. (9.36) com relação a \mathbf{E} . Considerando que \mathbf{F}_ℓ é constante na fase sólida, e utilizando a relação cinemática (9.19), temos

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}^{\text{vol}} + \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{C}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{E}_m} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad (9.42)$$

onde $\mathfrak{C}^{\text{vol}}$ e $\mathfrak{C}_s^{\text{iso}}$ são definidos, respectivamente, como

$$\mathfrak{C}^{\text{vol}} = \frac{\partial^2 \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m \otimes \partial \mathbf{E}_m} \quad \text{e} \quad \mathfrak{C}_s^{\text{iso}} = \frac{\partial^2 \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s \otimes \partial \mathbf{E}_s}, \quad (9.43)$$

e $\partial \mathbf{E}_s / \partial \mathbf{E}_m$ pode ser calculado com base na Eq. (9.20):

$$\frac{\partial (E_s)_{ij}}{\partial (E_m)_{kl}} = \frac{\partial (C_s)_{ij}}{\partial (C_m)_{kl}} = (F_\ell)_{ki}^{-1} (F_\ell)_{lj}^{-1}. \quad (9.44)$$

Para o modelo incompressível apresentado na Eq. (9.25), as parcelas volumétricas da tensão e do operador tangente consistente resultam, respectivamente, em

$$\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} = -p \mathbf{C}_m^{-1} \quad \text{e} \quad \mathfrak{C}^{\text{vol}} = -2p \frac{\partial \mathbf{C}_m^{-1}}{\partial \mathbf{C}_m}. \quad (9.45)$$

No Quadro 1, apresenta-se um resumo esquemático do modelo discutido nesta seção.

Quadro 1 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase sólida ($\theta \leq \theta_s$)

1. **Dados:** θ , \mathbf{F} , $\mathbf{F}_\ell^{\text{ant}}$, $\boldsymbol{\chi}^{\text{ant}}$.
2. A partir de θ , calcula-se λ_θ utilizando o modelo de expansão térmica. Disto, temos:

$$\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_m - \mathbf{I}).$$
3. Toma-se $\mathbf{F}_\ell = \mathbf{F}_\ell^{\text{ant}}$, e calcula-se $\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_m \mathbf{F}_\ell^{-1}$. Disto, temos:

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_s^T \mathbf{F}_s \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_s = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_s - \mathbf{I}).$$
4. Atualizam-se as variáveis internas do sólido ($\boldsymbol{\chi}$), caso existam, por meio das suas respectivas leis de evolução.
5. A partir de \mathbf{C}_s e/ou \mathbf{E}_s , calcula-se $\partial\psi_s^{\text{iso}}/\partial\mathbf{E}_s$ utilizando o modelo de sólido.
6. A partir de \mathbf{C}_m e/ou \mathbf{E}_m , calcula-se $\partial\psi_m^{\text{vol}}/\partial\mathbf{E}_m$ utilizando o modelo volumétrico. Caso o modelo seja incompressível, deve-se aplicar ainda a condição de incompressibilidade.
7. Calcula-se a tensão \mathbf{S} por meio da Eq. (9.36) e o operador tangente consistente \mathfrak{C} por meio da Eq. (9.42).

9.2.4 Modelo constitutivo da fase líquida

Na fase líquida ($\theta \geq \theta_\ell$), a parcela ψ_m^{iso} é nula, bem como todas as suas derivadas. Além disso, não há variação nas deformações sólidas e nas suas variáveis internas, isto é, $\dot{\mathbf{F}}_s = \dot{\boldsymbol{\chi}} = \mathbf{0}$. Assim, a Eq. (9.31) resulta em

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi_L}{\partial\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}} \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_m \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} \right) \dot{\theta} \\ & - \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} + \mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \end{aligned} \quad (9.46)$$

e a Ineq. (9.32) resulta em

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi_L}{\partial\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}} \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr } \mathbf{M}_m \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} \right) \dot{\theta} \\ & - \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} + \mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0, \end{aligned} \quad (9.47)$$

onde \mathbf{S}' é a parcela isocórica da tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, definida como

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\mathbf{E}_m}. \quad (9.48)$$

Pelo procedimento de Coleman-Noll, a condição $\mathbf{S}' = \mathbf{0}$ seria capaz de atender as leis da termodinâmica. No entanto, essa solução trivial não representa o comportamento viscoso do fluido. Para garantir o caráter dissipativo do sistema, adotaremos um modelo que permita valores positivos de $\mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}}$, ainda respeitando as leis da termodinâmica.

Dado que $\dot{\mathbf{E}}_s = \mathbf{0}$, podemos reescrever a Eq. (9.22) como

$$\dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^2 \mathbf{F}_\ell^T \operatorname{sim} (\mathbf{C}_s \mathbf{L}_\ell) \mathbf{F}_\ell + \lambda_\theta \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m. \quad (9.49)$$

Utilizando a relação acima, e realizando determinadas manipulações algébricas, obtemos:

$$\mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^2 \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \mathbf{L}_\ell + \lambda_\theta \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m : \mathbf{S}'. \quad (9.50)$$

O tensor $\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T$ representa uma componente da tensão de Mandel na configuração intermediária líquida. Para materiais isotrópicos, é possível demonstrar que ele é simétrico, logo

$$\lambda_\theta^2 \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \mathbf{L}_\ell = \lambda_\theta^2 \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \operatorname{sim} (\mathbf{L}_\ell) = \lambda_\theta^2 \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \mathbf{D}_\ell. \quad (9.51)$$

Esse termo representa a taxa de dissipação devida às deformações viscosas do líquido, definida por unidade de volume na configuração inicial. Para expressá-la por unidade de volume na configuração intermediária líquida, dividimos por $J_\theta J_\ell = \lambda_\theta^3 J_\ell$, o que resulta em $\lambda_\theta^{-1} J_\ell^{-1} \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \mathbf{D}_\ell$. Logo, $\lambda_\theta^{-1} J_\ell^{-1} \mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T$ é conjugado termodinâmico de \mathbf{D}_ℓ . Para garantir a não-negatividade da dissipação, podemos adotar uma relação linear entre esses termos. Em particular, para um fluido Newtoniano, adotamos:

$$2\mu \mathbf{D}_\ell = \lambda_\theta^{-1} J_\ell^{-1} \mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T, \quad (9.52)$$

onde μ é o parâmetro de viscosidade do líquido. Nota-se que, ao formular o modelo com base na configuração intermediária líquida, garantimos que a resposta seja independente da configuração inicial, mantendo a consistência da formulação.

Sabendo que $\dot{\mathbf{E}}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{D}_\ell \mathbf{F}_\ell$, podemos rearranjar a Eq. (9.52) na seguinte lei constitutiva:

$$\mathbf{S}' = 2\mu \lambda_\theta J_\ell \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}, \quad (9.53)$$

o que resulta em

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + 2\mu \lambda_\theta J_\ell \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}. \quad (9.54)$$

Essa equação é uma generalização do modelo de fluido Newtoniano incompressível apresentado na Seção 8.3. Nos casos onde não há deformações sólidas ou térmicas, temos $\mathbf{C}_m = \mathbf{C}_\ell = \mathbf{C}$, $\dot{\mathbf{E}}_\ell = \dot{\mathbf{E}}$, $J_\ell = J$ e $\lambda_\theta = 1$, fazendo com que a Eq. (9.53) recaia na Eq. (8.16).

O último termo da Eq. (9.50) contribui para o conjugado termodinâmico de $\dot{\theta}$ nas Eqs. (9.46) e (9.47). Igualando esse conjugado a zero, e manipulando algebraicamente, podemos obter a seguinte expressão para a entropia:

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \theta} + \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}} \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.55)$$

que é similar à Eq. (9.38) da fase sólida, considerando $\psi_m = \psi_m^{\text{vol}}$. A condição de incompressibilidade, dada na Eq. (9.37), mantém-se válida no presente contexto.

Aplicando essas relações constitutivas na Eq. (9.46) e na Eq. (9.47), obtemos novamente as expressões dadas na Eq. (9.39) e na Ineq. (9.40) para as leis da termodinâmica, sendo a taxa de dissipação mecânica, neste caso, definida como

$$d_m = \lambda_\theta^2 (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \mathbf{D}_\ell = 2\mu\lambda_\theta^3 J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\|. \quad (9.56)$$

A partir das relações cinemáticas das Eqs. (9.19) e (9.21), temos $\partial \mathbf{E}_m / \partial \mathbf{E} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{II}$, $\partial \dot{\mathbf{E}}_m / \partial \dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{II}$ e $\partial \ddot{\mathbf{E}}_m / \partial \mathbf{E} = -2\lambda_\theta^{-3} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{II}$. Utilizando essas relações, podemos calcular o operador tangente consistente e o operador de viscosidade do modelo na fase líquida, respectivamente, como

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}_m} : \frac{\partial \mathbf{E}_m}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_m} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_m}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m - 2\lambda_\theta^{-2} \dot{\lambda}_\theta \mathcal{D}_m \quad (9.57)$$

$$\mathcal{D} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_m} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_m}{\partial \dot{\mathbf{E}}} = \lambda_\theta^{-1} \mathcal{D}_m \quad (9.58)$$

onde \mathfrak{C}_m e \mathcal{D}_m são os operadores tangente consistente e de viscosidade do modelo de fluido puramente mecânico, que podem ser calculados por expressões análogas às da Seção 8.3. Levando em conta que $\dot{\lambda}_\theta = (\partial \lambda_\theta / \partial \theta) \dot{\theta} \approx \alpha \dot{\theta}$, o último termo da Eq. (9.57) pode ser desprezado para materiais com coeficiente de expansão térmica α muito pequeno.

No Quadro 2, apresenta-se um resumo esquemático do modelo discutido nesta seção.

Quadro 2 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase líquida ($\theta \geq \theta_\ell$)

1. **Dados:** $\theta, \dot{\theta}, \mathbf{F}, \dot{\mathbf{F}}, \mathbf{F}_s^{\text{ant}}$
2. A partir de θ , calcula-se λ_θ utilizando o modelo de expansão térmica. Disto, temos:

$$\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_m - \mathbf{I}).$$
3. Toma-se $\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_s^{\text{ant}}$, e calcula-se $\mathbf{F}_\ell = \mathbf{F}_s^{-1} \mathbf{F}_m$. Disto, temos $J_\ell = \det \mathbf{F}_\ell$, e:

$$\mathbf{C}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{F}_\ell \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_\ell = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_\ell - \mathbf{I}).$$
4. A partir de $\dot{\theta}$, calcula-se $\dot{\lambda}_\theta = (\partial \lambda_\theta / \partial \theta) \dot{\theta}$. Disto, temos:

$$\dot{\mathbf{F}}_m = \lambda_\theta^{-1} (\dot{\mathbf{F}} - \dot{\lambda}_\theta \mathbf{F}_m) \quad \rightarrow \quad \dot{\mathbf{F}}_\ell = \mathbf{F}_s^{-1} \dot{\mathbf{F}}_m \quad \rightarrow \quad \dot{\mathbf{E}}_\ell = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{F}}_\ell^T \mathbf{F}_\ell + \mathbf{F}_\ell^T \dot{\mathbf{F}}_\ell).$$
5. A partir de \mathbf{C}_m e/ou \mathbf{E}_m , calcula-se $\partial \psi_m^{\text{vol}} / \partial \mathbf{E}_m$ utilizando o modelo volumétrico. Caso o modelo seja incompressível, deve-se aplicar ainda a condição de incompressibilidade.
6. Calcula-se a tensão \mathbf{S} por meio da Eq. (9.54), o operador tangente consistente \mathfrak{C} por meio da Eq. (9.57), e o operador de viscosidade \mathcal{D} pela Eq. (9.58).

9.2.5 Modelo constitutivo da fase de transição

Na fase de transição ($\theta_s < \theta < \theta_\ell$), temos $\psi_m^{\text{iso}} = \omega_s^{-1} \psi_s^{\text{iso}}$. Dessa forma, a Eq. (9.31) pode ser expressa como

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \omega_s^{-1} \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell \\ & - \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \end{aligned} \quad (9.59)$$

e a Ineq. (3.21) como

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \omega_s^{-1} \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell \\ & - \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (9.60)$$

Aplicando o procedimento de Coleman-Noll de forma similar ao caso sólido, obtemos novamente as Eqs. (9.35) ou (9.38) para a entropia, e a Eq. (9.37) para a condição de incompressibilidade. Já a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, neste caso, é dada por:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \lambda_\theta \omega_s^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T}. \quad (9.61)$$

Adicionalmente, para as deformações líquidas, definimos uma lei de evolução que atenda a segunda lei da termodinâmica. Analisando as Eq. (9.59) e Ineq. (9.60), podemos observar que o conjugado termodinâmico de \mathbf{L}_ℓ , neste caso, é o tensor de Mandel sólido, definido na configuração intermediária líquida. Similarmente à Seção 9.2.4, adotamos uma relação viscosa linear entre essas grandezas. Porém, neste caso, a evolução é ponderada por uma função ω_ℓ , que representa a porcentagem líquida local. Assim, temos:

$$2\mu \mathbf{L}_\ell = \frac{\omega_\ell}{\omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \Rightarrow \dot{\mathbf{F}}_\ell = \frac{\omega_\ell}{2\mu \omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell, \quad (9.62)$$

onde μ é o parâmetro de viscosidade do líquido. Naturalmente, ω_ℓ depende da temperatura, variando continuamente de 0 a 1 quando a temperatura varia de θ_s para θ_ℓ .

Partindo da Eq. (9.62), e considerando a simetria do tensor de Mandel, podemos escrever

$$\dot{\mathbf{E}}_\ell = \frac{\omega_\ell}{2\mu \omega_s J_\ell} \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell. \quad (9.63)$$

Isolando $\partial \psi_s^{\text{iso}} / \partial \mathbf{E}_s$ na equação acima, e aplicando na Eq. (9.61), obtemos a seguinte forma alternativa para a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + 2\mu \lambda_\theta J_\ell \omega_\ell^{-1} \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}. \quad (9.64)$$

Essa forma é análoga à Eq. (9.54) da fase líquida, com a diferença que a componente isocórica é multiplicada por ω_ℓ^{-1} , assim como a componente isocórica do sólido é multiplicada por ω_s^{-1} na Eq. (9.61). Invertendo, isso nos leva a concluir que a “parcela líquida” da tensão (associada às taxas das deformações líquidas) é ω_ℓ vezes a tensão total, enquanto a “parcela sólida” (associada às deformações sólidas) é ω_s vezes a tensão total. Em outras palavras, o modelo proposto para a fase de transição é uma combinação ponderada dos modelos da fase líquida e sólida, influenciando a evolução de cada componente da deformação com base nas funções ω_ℓ e ω_s .

Consideramos ainda que as leis de evolução das variáveis internas do sólido são ponderadas por ω_s . Assim, para o modelo viscoelástico-viscoplástico, as leis de evolução das Eqs. (5.13), (5.14), (5.16), (5.17), e (5.18) são substituídas, respectivamente, por:

$$\mathbf{L}_v = \frac{\omega_s}{\eta} \mathbf{M}_e^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_v = \frac{\omega_s}{\eta} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v, \quad (9.65)$$

$$\mathbf{L}_p = \omega_s \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_p = \omega_s \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p, \quad (9.66)$$

$$\mathbf{L}_{p_i} = \omega_s \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{p_i} = \omega_s \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i}, \quad (9.67)$$

$$\mathbf{L}_{\tilde{p}_v} = \frac{\omega_s}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{\tilde{p}_v} = \frac{\omega_s}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}, \quad (9.68)$$

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{2}{3}} \omega_s \dot{\gamma}. \quad (9.69)$$

Considerando as relações constitutivas apresentadas, a Eq. (9.59) e a Ineq. (9.60) resultam, novamente, nas formas da Eq. (9.39) e da Ineq. (9.40), sendo a taxa de dissipação mecânica, neste caso, definida como

$$d_m = 2\mu\lambda_\theta^3 \omega_\ell^{-1} J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\| - \lambda_\theta^3 \omega_s^{-1} \left(\frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \quad (9.70)$$

9.2.5.1 Definição dos multiplicadores sólido e líquido

A definição dos multiplicadores $\omega_s(\theta)$ e $\omega_\ell(\theta)$ deve levar em conta certas regras para garantir a consistência da formulação. Conforme estabelecido anteriormente, para assegurar a continuidade da energia livre de Helmholtz na Eq. (9.26) e da taxa de deformação líquida na Eq. (9.62), $\omega_s(\theta)$ e $\omega_\ell(\theta)$ devem ser contínuos para temperaturas no intervalo entre θ_s e θ_ℓ , e devem atender as condições $\omega_s(\theta_\ell) = \omega_\ell(\theta_s) = 0$ e $\omega_s(\theta_s) = \omega_\ell(\theta_\ell) = 1$.

Considerando uma variação linear dos multiplicadores, podemos assumir $\omega_s = f_s$ e $\omega_\ell = f_\ell$, onde f_s e f_ℓ são as frações sólida e líquida lineares, respectivamente, definidas como:

$$f_s = \begin{cases} 1 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\theta_\ell - \theta}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad \text{e} \quad f_\ell = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\theta - \theta_s}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 1 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.71)$$

Nota-se que essa definição engloba também os intervalos de temperatura fora da fase de transição, tornando geral o modelo descrito nessa seção. De fato, para $\omega_\ell = 0$ e $\omega_s = 1$, verifica-se que o modelo da fase de transição recai no modelo da fase sólida, e para $\omega_\ell = 1$ e $\omega_s = 0$, ele recai no modelo da fase líquida.

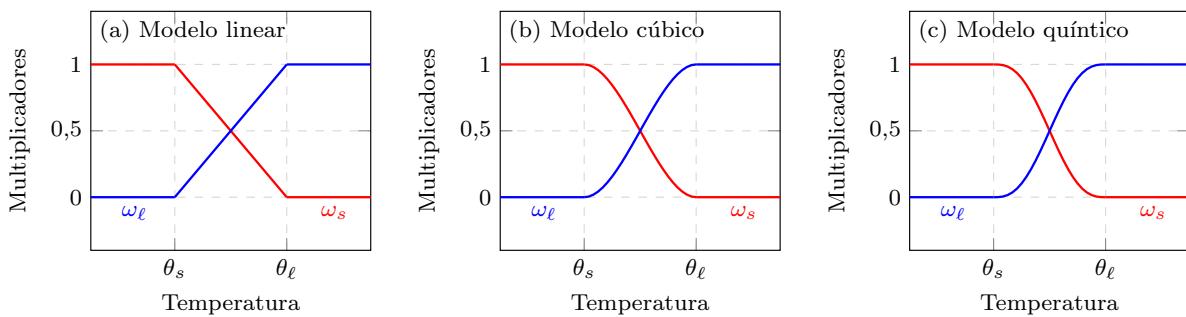
Embora f_s e f_ℓ sejam funções contínuas da temperatura, suas derivadas primeiras e segundas não são contínuas nos pontos onde ocorrem mudanças de fase, o que pode afetar a suavidade da resposta em determinados casos. Levando isso em conta, podemos refinar o modelo incorporando algumas condições adicionais para ω_s e ω_ℓ .

Para garantir a continuidade das derivadas primeiras, impomos as condições $\omega'_s(\theta_s) = \omega'_\ell(\theta_\ell) = \omega'_s(\theta_\ell) = \omega'_\ell(\theta_s) = 0$; e para garantir também a continuidade das derivadas segundas, impomos as condições $\omega''_s(\theta_s) = \omega''_\ell(\theta_\ell) = \omega''_s(\theta_\ell) = \omega''_\ell(\theta_s) = 0$. No primeiro caso, utilizamos funções polinomiais de terceira ordem, enquanto no segundo utilizamos funções de quinta ordem. Em ambos os casos, as funções podem ser escritas em termos de f_s e f_ℓ , através das expressões dispostas na Tabela 9. Na Fig. 89, ilustramos os gráficos de ω_s e ω_ℓ para cada um dos modelos considerados.

Tabela 9 – Modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido

| Modelo | ω_s | ω_ℓ |
|----------|------------------------------|---------------------------------------|
| Linear | f_s | f_ℓ |
| Cúbico | $3f_s^2 - 2f_s^3$ | $3f_\ell^2 - 2f_\ell^3$ |
| Quíntico | $6f_s^5 - 15f_s^4 + 10f_s^3$ | $6f_\ell^5 - 15f_\ell^4 + 10f_\ell^3$ |

Figura 89 – Gráficos dos modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido



Neste trabalho, adotamos apenas combinações de multiplicadores que são complementares entre si, ou seja, $\omega_s + \omega_\ell = 1$. No entanto, outros tipos de combinações para a fase de transição também podem ser aplicados sem comprometer a consistência do modelo, desde que a continuidade com as fases sólida e líquida seja mantida. As expressões de ω_s e ω_ℓ devem ser avaliadas caso a caso, variando de acordo com o comportamento constitutivo do material analisado na fase de transição.

9.2.5.2 Implementação numérica

Na fase de transição, o comportamento constitutivo é análogo ao de um modelo sólido com viscosidade, e a evolução das deformações líquidas é definida puramente pela Eq. (9.62). Para a integração temporal dessa lei de evolução, utilizamos o método implícito de Euler, que resulta em

$$\mathbf{R}_\ell = \mathbf{F}_\ell - \mathbf{F}_\ell^{\text{ant}} - \Delta t \frac{\omega_\ell}{2\mu\omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell = \mathbf{0}, \quad (9.72)$$

onde $\mathbf{F}_\ell^{\text{ant}}$ é o valor de \mathbf{F}_ℓ no passo anterior, e Δt é a variação de tempo entre os passos. Nota-se que \mathbf{C}_s e $\partial \psi_s^{\text{iso}} / \partial \mathbf{E}_s$ também dependem de \mathbf{F}_ℓ . Logo, a Eq. (9.72) é um sistema não-linear, sendo resolvido, neste trabalho, pelo método de Newton-Raphson.

As leis de evolução das variáveis internas do sólido também são integradas pela mesma estratégia. Para o modelo viscoelástico-viscoplástico, elas seguem expressões análogas às apresentadas na Seção 5.4, adicionando-se apenas o multiplicador sólido. Ou seja:

$$\mathbf{R}_v = \mathbf{F}_v - \mathbf{F}_v^{\text{ant}} - \frac{\Delta t \omega_s}{\eta} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v = \mathbf{0}, \quad (9.73)$$

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{F}_p - \mathbf{F}_p^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = \mathbf{0}, \quad (9.74)$$

$$\mathbf{R}_{p_i} = \mathbf{F}_{p_i} - \mathbf{F}_{p_i}^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} = \mathbf{0}, \quad (9.75)$$

$$\mathbf{R}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} - \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{\text{ant}} - \frac{\Delta t \omega_s}{\eta_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{0}, \quad \text{e} \quad (9.76)$$

$$R_\kappa = \kappa - \kappa^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \sqrt{\frac{2}{3}} = 0. \quad (9.77)$$

A condição de consistência segue ainda as expressões dadas pelas equações (5.25) ou (5.26), a depender do tipo de plasticidade (independente de taxa ou viscosa).

Uma vez conhecidas as deformações líquidas e sólidas, podemos calcular a tensão pelas equações (9.61) ou (9.64). Em teoria, ambas são equivalentes para temperaturas entre θ_s e θ_ℓ , sendo a Eq. (9.61) indeterminada para $\theta \geq \theta_\ell$ (pois $\omega_s = 0$), e a Eq. (9.64) indeterminada para $\theta \leq \theta_s$ (pois $\omega_\ell = 0$). No entanto, do ponto de vista computacional, alguns cuidados devem ser tomados também nas proximidades dessas indeterminações. A Eq. (9.61) tende a causar instabilidades numéricas quando ω_s é muito pequeno (ou seja, temperaturas muito próximas de θ_ℓ), enquanto a Eq. (9.64) tende a causar instabilidades quando ω_ℓ é muito pequeno (ou seja, temperaturas muito próximas de θ_s).

Para contornar esse problema, estabelecemos subintervalos específicos de utilização para cada equação. Optamos por dividir o intervalo de temperaturas exatamente na metade, através da seguinte estratégia: para $f_\ell \leq 0,5$ (ou $f_s \geq 0,5$), utilizamos a Eq. (9.61); para $f_\ell > 0,5$ (ou $f_s < 0,5$), utilizamos a Eq. (9.64). Essa estratégia evita divisão por números muito pequenos, minimizando as chances de instabilidades numéricas.

Para o cálculo do operador tangente consistente, devemos adotar uma estratégia que leve em conta a lei de evolução líquida, seguindo procedimentos análogos aos descritos na

Seção 5.5. Expressando \mathbf{S} apenas em função de \mathbf{E} e \mathbf{F}_ℓ , temos:

$$\Delta \mathbf{S} \approx \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \Delta \mathbf{F}_\ell. \quad (9.78)$$

Como o resíduo \mathbf{R}_ℓ é nulo para todo passo de tempo, a seguinte aproximação é válida:

$$\Delta \mathbf{R}_\ell \approx \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \Delta \mathbf{F}_\ell \approx \mathbf{0} \Rightarrow \Delta \mathbf{F}_\ell \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}. \quad (9.79)$$

Aplicando a Eq. (9.79) na Eq. (9.78), temos, enfim

$$\Delta \mathbf{S} \approx \left[\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} \right] : \Delta \mathbf{E}. \quad (9.80)$$

Logo, por associação com a Eq. (5.27), o operador tangente consistente do modelo pode ser definido como

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}}, \quad (9.81)$$

onde as derivadas $\partial \mathbf{S}/\partial \mathbf{E}$ e $\partial \mathbf{S}/\partial \mathbf{F}_\ell$ devem ser calculadas a partir da expressão efetivamente utilizada para calcular \mathbf{S} .

Caso \mathbf{S} seja calculado pela Eq. (9.61), temos

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}^{\text{vol}} + \lambda_\theta^{-1} \omega_s^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{C}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{E}_m} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad \text{e} \quad (9.82)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} = \lambda_\theta \omega_s^{-1} \left[\mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{C}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T} + \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^{-1}}{\partial \mathbf{F}_\ell} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} + \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^{-T}}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right], \quad (9.83)$$

onde $\mathfrak{C}^{\text{vol}}$, $\mathfrak{C}_s^{\text{iso}}$ e $\partial \mathbf{E}_s/\partial \mathbf{E}_m$ são dados nas Eqs. (9.43) e (9.44), e $\partial \mathbf{E}_s/\partial \mathbf{F}_\ell = \frac{1}{2} \partial \mathbf{C}_s/\partial \mathbf{F}_\ell$ pode ser calculado a partir da relação cinemática (9.20).

Caso \mathbf{S} seja calculado pela Eq. (9.64), temos

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}^{\text{vol}} + 4\mu \lambda_\theta^{-1} J_\ell \omega_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_m^{-1}}{\partial \mathbf{C}_m} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}, \quad \text{e} \quad (9.84)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} = 2\mu \lambda_\theta J_\ell \omega_\ell^{-1} \left(\mathbf{C}_m^{-1} \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \mathbf{C}_\ell^{-1} + \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \frac{\partial \mathbf{C}_\ell^{-1}}{\partial \mathbf{C}_\ell} : \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right), \quad (9.85)$$

onde, para fins de simplificação, desprezamos a derivada de J_ℓ , o que não afeta significativamente o modelo incompressível, uma vez que J_ℓ tende a ser unitário nesse caso. A derivada $\partial \dot{\mathbf{E}}_\ell/\partial \mathbf{F}_\ell$ pode ser aproximada, sem causar perda significativa de convergência, como

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \approx \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{E}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} = \frac{1}{2\Delta t} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell}, \quad (9.86)$$

e, sabendo que $\mathbf{C}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{F}_\ell$, podemos calcular $\partial \mathbf{C}_\ell/\partial \mathbf{F}_\ell$ em notação indicial como

$$\frac{\partial (C_\ell)_{ij}}{\partial (F_\ell)_{kl}} = \delta_{il}(F_\ell)_{kj} + (F_\ell)_{ki}\delta_{jl}. \quad (9.87)$$

No Quadro 3, apresentamos um resumo esquemático do modelo para a fase de transição, sintetizando os passos discutidos ao longo desta seção.

Quadro 3 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase de transição ($\theta_s < \theta < \theta_\ell$)

1. **Dados:** θ , \mathbf{F} , $\mathbf{F}_\ell^{\text{ant}}$, $\boldsymbol{\chi}^{\text{ant}}$
2. A partir de θ , calcula-se λ_θ utilizando o modelo de expansão térmica. Disto, temos:

$$\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_m - \mathbf{I}).$$
3. Resolve-se a lei de evolução líquida (9.72) pelo método de Newton-Raphson:
 - a) Como tentativa inicial, assume-se $\mathbf{F}_\ell = \mathbf{F}_\ell^{\text{ant}}$.
 - b) Calcula-se $\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_m \mathbf{F}_\ell^{-1} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_s = \mathbf{F}_s^T \mathbf{F}_s \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_s = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_s - \mathbf{I})$.
 - c) Atualizam-se as variáveis internas do sólido ($\boldsymbol{\chi}$), caso existam, por meio das suas respectivas leis de evolução.
 - d) A partir de \mathbf{C}_s e/ou \mathbf{E}_s , calcula-se $\partial\psi_s^{\text{iso}}/\partial\mathbf{E}_s$ utilizando o modelo de sólido.
 - e) Calculam-se \mathbf{R}_ℓ e $\partial\mathbf{R}_\ell/\partial\mathbf{F}_\ell$. A correção das deformações líquidas ($\Delta\mathbf{F}_\ell$) é obtida solucionando-se o sistema linear ($\partial\mathbf{R}_\ell/\partial\mathbf{F}_\ell$): $\Delta\mathbf{F}_\ell = -\mathbf{R}_\ell$.
 - f) Se $\|\Delta\mathbf{F}_\ell\|$ for menor que uma tolerância pré-estabelecida, a solução do sistema é concluída. Caso contrário, $\Delta\mathbf{F}_\ell$ é adicionada a \mathbf{F}_ℓ , e retorna-se ao passo b).
4. A partir de \mathbf{C}_m e/ou \mathbf{E}_m , calcula-se $\partial\psi_m^{\text{vol}}/\partial\mathbf{E}_m$ utilizando o modelo volumétrico. Caso o modelo seja incompressível, deve-se aplicar ainda a condição de incompressibilidade.
5. Se $f_\ell \leq 0,5$, utiliza-se a Eq. (9.61) para o cálculo de \mathbf{S} , e as Eqs. (9.82) e (9.83) para o cálculo das derivadas $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{E}$ e $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{F}_\ell$.
 Se $f_\ell > 0,5$, utiliza-se a Eq. (9.64) para o cálculo de \mathbf{S} , e as Eqs. (9.84) e (9.85) para o cálculo das derivadas $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{E}$ e $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{F}_\ell$.
6. Calcula-se \mathbf{C} pela Eq. (9.81), utilizando as derivadas obtidas no passo anterior.

9.2.6 Equação da condução de calor

Conforme visto nas Seções 9.2.3 a 9.2.5, podemos expressar a primeira lei da termodinâmica, de forma geral, como

$$\theta\dot{\eta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad (9.88)$$

ou, utilizando a abordagem baseada em entalpia, discutida na Seção 9.1:

$$\dot{h} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad (9.89)$$

onde a taxa de dissipação mecânica é definida como

$$d_m = \begin{cases} -\lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial\psi_s^{\text{iso}}}{\partial\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right) & , \text{ para } \theta \leq \theta_s, \\ 2\mu\lambda_\theta^3\omega_\ell^{-1}J_\ell\|\mathbf{D}_\ell\| - \lambda_\theta^3\omega_s^{-1} \left(\frac{\partial\psi_s^{\text{iso}}}{\partial\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell, \\ 2\mu\lambda_\theta^3 J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\| & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.90)$$

A taxa de entropia pode ser desenvolvida de forma análoga à apresentada na Seção 6.4. Dessa forma, a Eq. (9.88) resulta novamente na forma da Eq. (6.45), diferenciando-se apenas pela adição do calor específico volumétrico latente. Ou seja, a equação da condução de calor é expressa, neste contexto, como

$$(c_v^* + c_v^L) \dot{\theta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = r + \beta d_m - \theta q_m, \quad (9.91)$$

onde, novamente, o coeficiente β é introduzido para levar em conta o efeito do trabalho frio. O calor específico volumétrico efetivo (c_v^*) e o termo de acoplamento termo-mecânico (q_m) são calculados por expressões similares às apresentadas na Seção 6.4.

Em geral, fenômenos envolvendo mudança de fase envolvem trocas de calor com grandes variações de temperatura, enquanto os fenômenos mecânicos dissipativos provocam variações de temperatura relativamente pequenas. Dessa forma, nesta seção, optamos por desprezar o efeito da dissipação mecânica e dos termo de acoplamento termo-mecânico na Eq. (9.91). Além disso, para simplificar os exemplos propostos e dar maior foco ao comportamento constitutivo, desconsideramos a parcela mecânica do calor específico volumétrico, adotando $c_v^* = c_v$, onde c_v é um parâmetro dado do material.

Com essas considerações, a equação da condução de calor resulta na forma puramente térmica apresentada na Eq. (9.13), devendo ser utilizadas as mesmas estratégias de implementação numérica discutidas na Seção 9.1.2. Vale ressaltar que isso não elimina a influência do problema mecânico sobre o térmico, especialmente em casos com grandes deformações, uma vez que alterações significativas na configuração do domínio impactam a distribuição de temperatura. Para o acoplamento termo-mecânico, seguimos utilizando o método bloco-iterativo descrito na Seção 4.5.1.

9.2.7 Exemplos numéricos

Nesta seção, são propostos exemplos numéricos representativos para caracterizar o comportamento constitutivo do modelo proposto, bem como verificar a sua consistência. Os exemplos iniciais (subseções 9.2.7.1 e 9.2.7.2) abordam problemas locais, ou pontuais, onde estamos interessados apenas em calcular a tensão a partir da deformação, da temperatura e de suas respectivas taxas, sem considerar o domínio ao redor. Já nos demais exemplos, o modelo constitutivo é incorporado ao Método dos Elementos Finitos, permitindo a análise de problemas mais complexos com domínios bidimensionais ou tridimensionais.

9.2.7.1 Problema local de deformação monotônica com solidificação

Neste exemplo, estamos interessados em analisar o comportamento constitutivo de um ponto comprimido uniaxialmente ao mesmo tempo que sofre mudança da fase líquida para a sólida. Consideramos que a componente uniaxial da deformação linear de engenharia ($\varepsilon_{11} = F_{11} - 1$) varia linearmente entre 0 e $-0,4$ com uma taxa constante de $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,4/t_{\max}$, onde t_{\max} é o tempo máximo da análise. Simultaneamente, aplicamos uma temperatura prescrita variando linearmente entre 50°C e 0°C . Consideramos três diferentes valores de

t_{\max} : 25, 5 e 1 s, resultando em taxas distintas de deformação e temperatura. Em todos os casos, aplica-se uma discretização temporal com 400 passos de tempo.

Para a fase líquida, adotamos o modelo de fluido Newtoniano incompressível, e para a fase sólida, um material hiperelástico neo-Hookeano, também incompressível. Os parâmetros relevantes para esse problema são dispostos na Tabela 10. Observa-se que, por ser um material incompressível, o parâmetro Λ do modelo neo-Hookeano não se aplica. Além disso, não consideramos expansão/contração térmica neste caso.

Tabela 10 – Parâmetros do material utilizado nas análises de problemas locais com mudança de fase

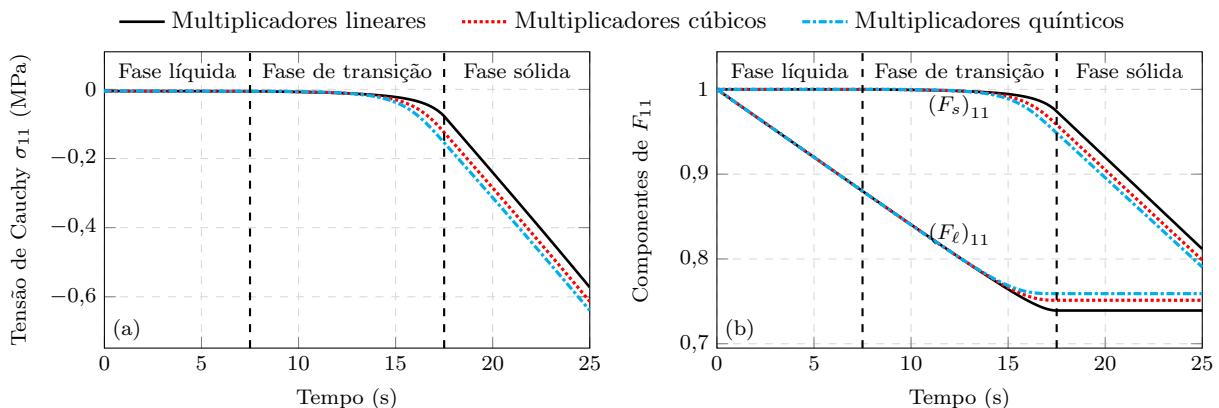
| μ (MPa·s) | G (MPa) | θ_s ($^{\circ}$ C) | θ_ℓ ($^{\circ}$ C) |
|---------------|-----------|----------------------------|-------------------------------|
| 0,1 | 1 | 15 | 30 |

Os resultados para os três casos de t_{\max} são apresentados nas Figs. 90 a 92. Em cada caso, são mostrados os gráficos de tensão de Cauchy uniaxial (σ_{11}), e os componentes sólido e líquido de F_{11} , com as fases do material indicadas nos seus respectivos intervalos de tempo.

O principal ponto a ser analisado neste problema é a continuidade da resposta obtida. Uma vez que cada fase é governada por um modelo constitutivo diferente, cabe verificar se a transição entre as fases ocorre de forma suave. Para isso, são testados os três modelos de multiplicadores dispostos na Tabela 9 para a fase de transição.

No caso com $t_{\max} = 25$ s (Fig. 90), a taxa de deformação é muito pequena, resultando em tensões significativamente menores na fase líquida em comparação com a fase sólida. Nesse caso, não há descontinuidades perceptíveis nos gráficos, e a transição ocorre de forma suave para todos os modelos de multiplicadores, embora as respostas variem entre esses modelos a partir da fase de transição, como esperado.

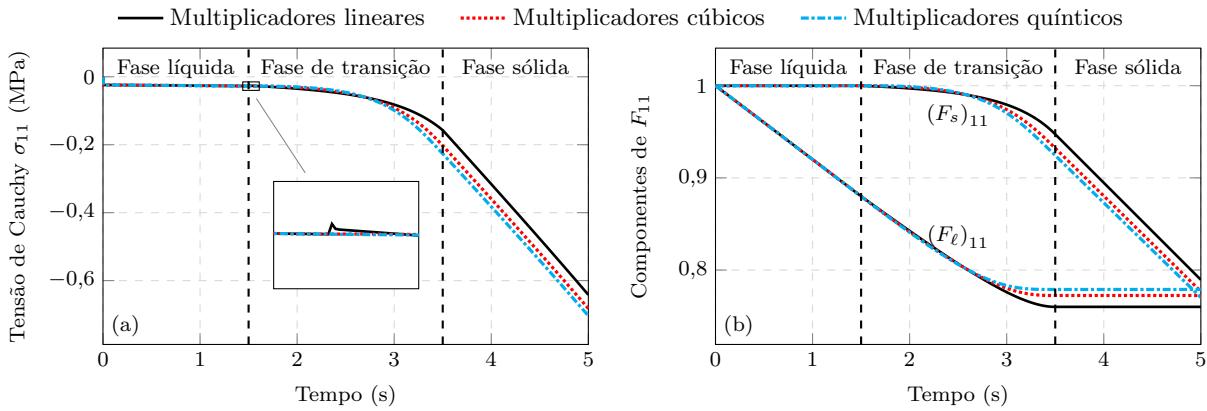
Figura 90 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,016 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -2 \text{ }^{\circ}\text{C/s}$



No caso com $t_{\max} = 5$ s (Fig. 91), surge uma pequena descontinuidade nas tensões entre a fase líquida e a de transição para o modelo com multiplicadores lineares, apesar de essa descontinuidade apenas ser perceptível no gráfico ampliado. Já nos casos com

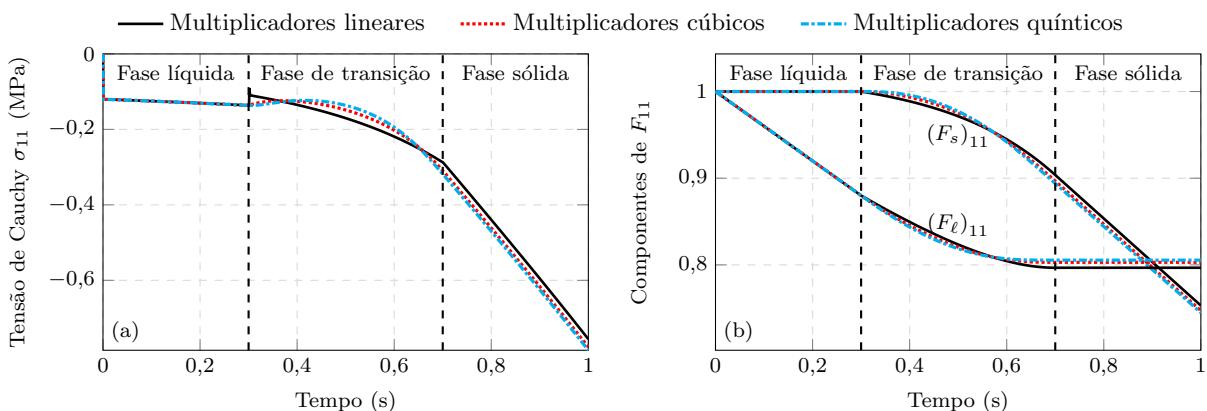
multiplicadores cúbicos e quínticos, a transição das tensões se mostra suave mesmo no gráfico ampliado.

Figura 91 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -10^\circ\text{C/s}$



Por fim, no caso com $t_{\max} = 1 \text{ s}$ (Fig. 92), a descontinuidade das tensões para o modelo com multiplicadores lineares se torna mais expressiva, mostrando irregularidades no início da fase de transição. Além disso, podemos observar uma quebra de suavidade das tensões, ou seja, uma mudança abrupta na inclinação da curva, entre as fases de transição e sólida. Para o modelo com multiplicadores cúbicos, a resposta é contínua, mas também é possível perceber uma quebra de suavidade entre as fases líquida e de transição. Já o modelo quíntico permanece contínuo e suave ao longo de todas as transições.

Figura 92 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -50^\circ\text{C/s}$



Os gráficos das componentes sólida e líquida de F_{11} mostram evoluções consistentes com suas respectivas fases, e mantêm-se contínuos em todos os casos, independentemente do modelo adotado para os multiplicadores. A única quebra de suavidade perceptível ocorre no gráfico de $(F_s)_{11}$ para $t_{\max} = 1$, entre as fases líquida e de transição, coincidindo com o ponto de descontinuidade no gráfico de tensão.

Vale observar que quebras de continuidade ou de suavidade não necessariamente indicam uma falha no modelo, mas sim uma característica intrínseca do mesmo. Ao aplica-lo em um

contexto prático, é importante verificar o comportamento do material analisado, e utilizar o modelo que melhor se adeque a esse comportamento, seja ele contínuo ou não. Neste trabalho, caracterizamos apenas algumas opções de multiplicadores, mas as possibilidades de ajustes são infinitas.

9.2.7.2 Problema local de deformação monotônica com fusão

Nesta subseção, apresentamos um exemplo similar ao anterior, porém, com mudança da fase sólida para a líquida. Mantemos as deformações prescritas, os parâmetros do material (Tabela 10), os tempos máximos de análise, e a discretização temporal, mas neste caso variamos as temperaturas linearmente de 0 °C para 50 °C ao longo do tempo.

Os resultados para os três casos de t_{\max} são apresentados nas Figs. 93 a 95. Dado que as tensões na fase sólida são maiores em comparação com a fase líquida, e aumentam progressivamente com as deformações, é natural observar uma alteração no perfil de transição em relação ao exemplo anterior. Embora a tendência seja a diminuição da tensão ao longo da fase de transição, ela atinge o seu valor de pico nessa fase. Esses picos se mostram mais acentuados nos modelos cúbicos e quínticos.

Figura 93 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,016 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 2 \text{ }^{\circ}\text{C/s}$

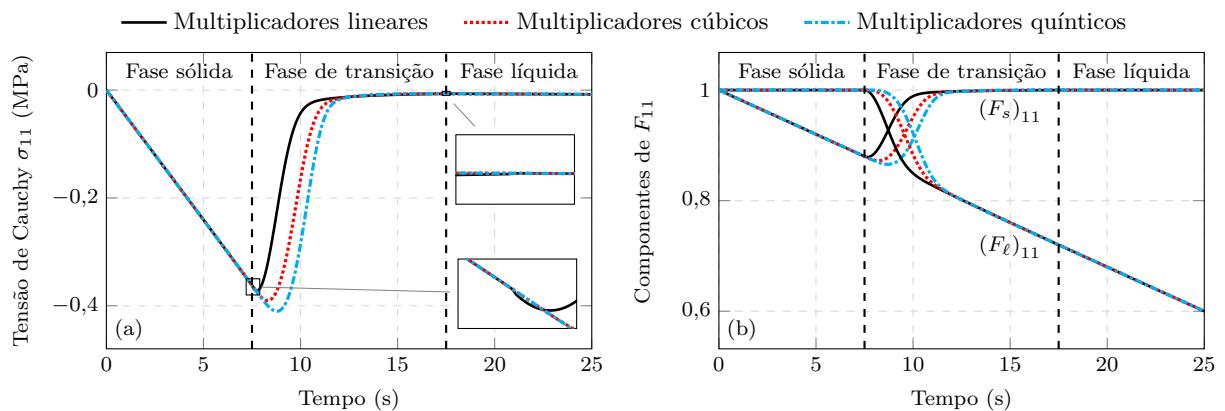


Figura 94 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 10 \text{ }^{\circ}\text{C/s}$

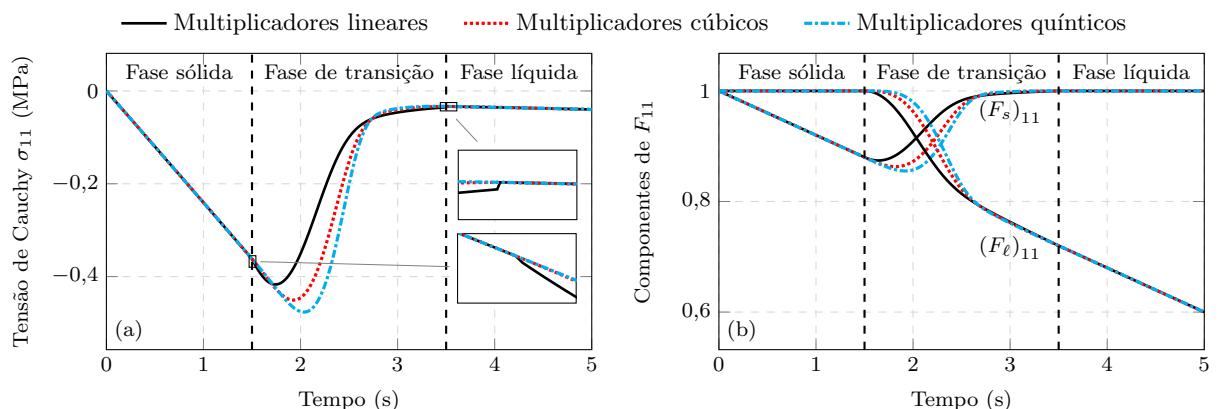
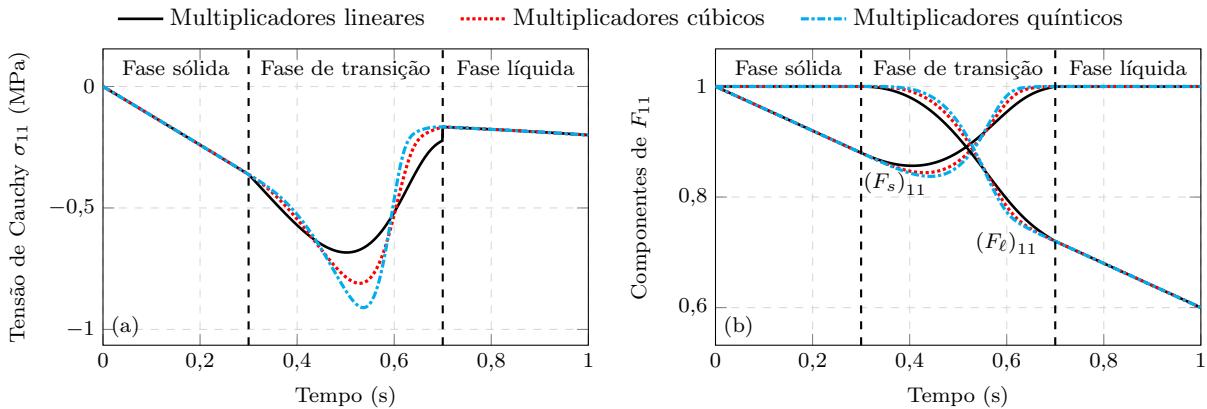


Figura 95 – Gráficos de (a) tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} , para os casos com $\dot{\varepsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\theta = 50^\circ\text{C}/\text{s}$



Nos gráficos de $(F_s)_{11}$ e $(F_\ell)_{11}$, observamos novamente um comportamento consistente, com a componente sólida diminuindo gradativamente até zero à medida que a mudança de fase avança, enquanto a componente líquida tende à deformação total.

As descontinuidades e quebras de suavidade são análogas às observadas no exemplo anterior, ocorrendo nas mesmas transições de fases para os mesmos casos. A única diferença é o caso com $t_{\max} = 25 \text{ s}$ (Fig. 93), onde a mudança de inclinação da curva de tensão entre as fases sólida e de transição é evidente no gráfico ampliado do modelo com multiplicadores lineares. Por outro lado, a descontinuidade entre as fases de transição e líquida nesse mesmo gráfico permanece praticamente imperceptível, mesmo na versão ampliada, ao contrário dos casos com $t_{\max} = 5 \text{ s}$ e $t_{\max} = 1 \text{ s}$.

9.2.7.3 Prensagem de cilindro solidificado

Este exemplo possui como principal objetivo verificar a consistência cinemática do modelo em uma análise bidimensional. Inicialmente, simulamos um líquido com formato retangular que, sob a ação de uma tensão superficial, torna-se eventualmente um círculo/cilindro. Após assumir esse formato, o material é solidificado e submetido à prensagem por uma parede rígida móvel. Em uma outra análise, simulamos um sólido já no formato cilíndrico com raio equivalente, submetido à mesma prensagem. Durante a fase sólida, os dois casos tratam-se essencialmente do mesmo problema, mas utilizam configurações iniciais diferentes – retangular líquido no primeiro, e circular sólida no segundo. Para que o modelo de mudança de fase seja consistente, é necessário que as duas respostas coincidam apesar das diferentes referências Lagrangianas.

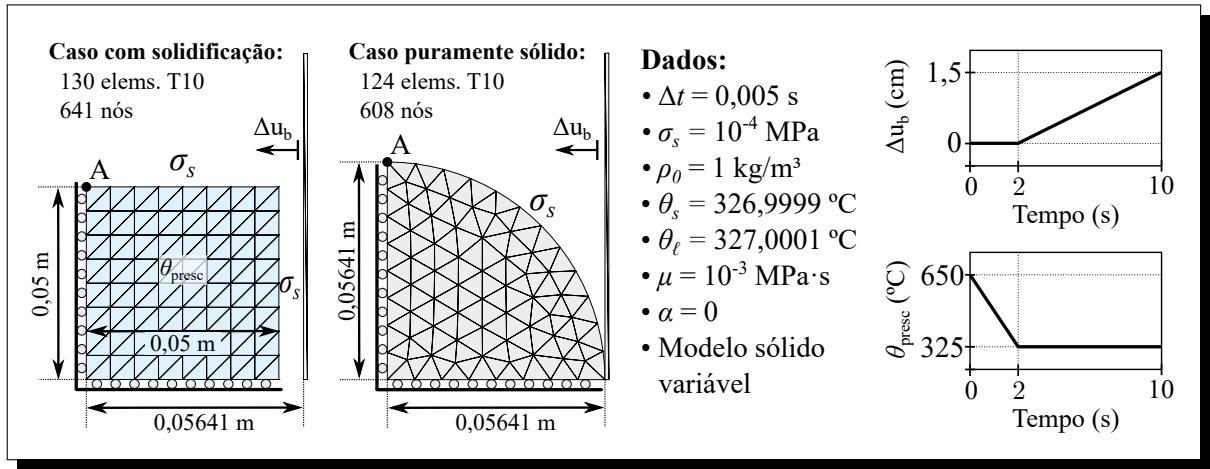
Os dados do exemplo para as duas análises são dispostos na Fig. 96, incluindo as malhas utilizadas. Aproveitando a simetria dos problemas, apenas um quadrante das geometrias são discretizadas, com as devidas condições de contorno aplicadas nas interfaces dos eixos de simetria. De forma a simplificar o exemplo e mantê-lo direcionado aos objetivos propostos, desconsideramos o peso próprio e demais forças externas além da tensão superficial, bem como o efeito da contração térmica. Aplica-se a estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1$, e

utiliza-se o integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$.

Para o caso com solidificação, aplica-se uma temperatura prescrita constante ao longo do domínio, dispensando a necessidade de resolver a equação da condução de calor. Essa temperatura é reduzida de 650°C para 325°C ao longo de 2 segundos, o que corresponde aproximadamente ao instante da mudança de fase, já que a temperatura de solidificação é cerca de 327°C . Esse intervalo de tempo é suficiente para que o líquido se estabilize na configuração cilíndrica. Como o intervalo entre θ_s e θ_ℓ é muito pequeno, o modelo constitutivo da fase de transição é irrelevante para esse problema. Após os 2 segundos iniciais, é aplicado um deslocamento prescrito progressivo na parede rígida, que entra em contato com o sólido, provocando a prensagem.

No caso puramente sólido, desconsidera-se a variação térmica, e mantém-se uma configuração praticamente estática nos 2 segundos iniciais antes do início da prensagem. Para garantir a objetividade da comparação, a tensão superficial permanece sendo aplicada neste caso, apesar de seu efeito ser desprezível no sólido.

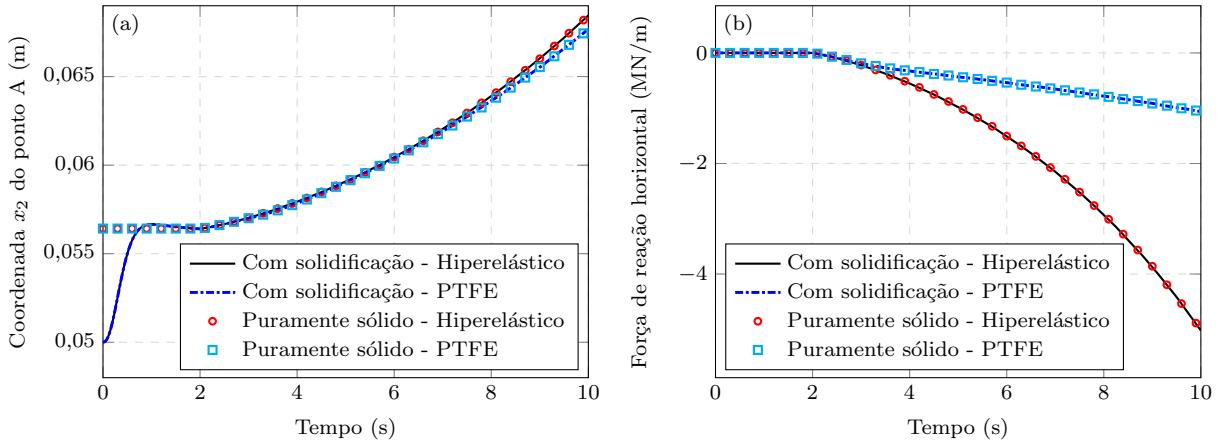
Figura 96 – Dados para o exemplo de prensagem de cilindro solidificado



Para demonstrar a consistência da formulação em diferentes cenários, consideramos dois materiais para a fase sólida. No primeiro, utilizamos um modelo hiperelástico incompressível com $G = 160 \text{ MPa}$. No segundo cenário, aplicamos o material PTFE, utilizando o modelo viscoelástico-viscoplástico com parâmetros calibrados na Tabela 1. O modelo do PTFE neste caso é adaptado para o caso incompressível, o que significa que a contribuição volumétrica associada ao parâmetro Λ é ignorada e substituída pela condição de incompressibilidade.

Na Fig. 97(a), os gráficos mostram a evolução da coordenada x_2 (eixo vertical) no ponto A, situado na extremidade superior da configuração circular. A origem do eixo x_2 é tomada no centro do círculo. Na Fig. 97(b), os gráficos mostram a evolução da força de reação horizontal, calculada como a resultante das forças de reação em todos os nós restritos horizontalmente. A comparação das curvas nesses gráficos revela uma ótima correspondência entre os casos com solidificação e o puramente sólido, para ambos os materiais considerados. Naturalmente, essa correspondência é avaliada apenas após os 2 segundos iniciais da análise, onde os problemas analisados passam a coincidir.

Figura 97 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de cilindro solidificado



As configurações deformadas dos problemas, com componente σ_{11} da tensão de Cauchy em mapa de cores, estão apresentadas nas Figs. 98 e 99 para o material hiperelástico e o PTFE, respectivamente. Em ambas as figuras, são mostradas lado a lado as configurações do caso puramente sólido (à esquerda, espelhado) e do caso com solidificação (à direita), permitindo uma comparação visual dos resultados nos instantes selecionados. Mesmo com as malhas distintas, é possível observar uma excelente concordância em todos os casos a partir de 2 segundos.

Figura 98 – Configurações deformadas para o material hiperelástico, com σ_{11} em mapa de cores

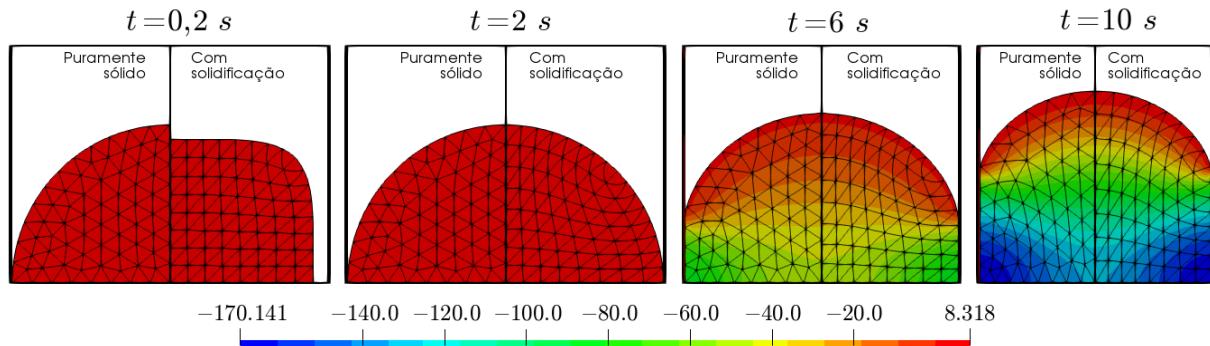
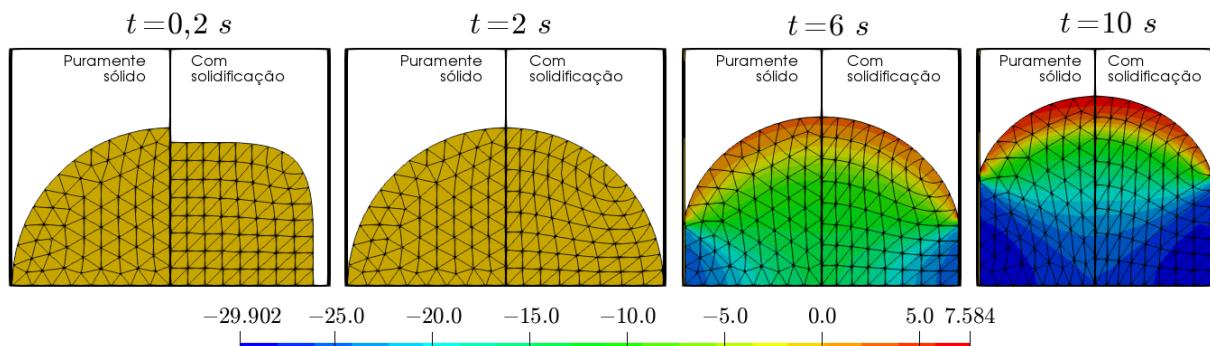


Figura 99 – Configurações deformadas para o PTFE, com σ_{11} em mapa de cores

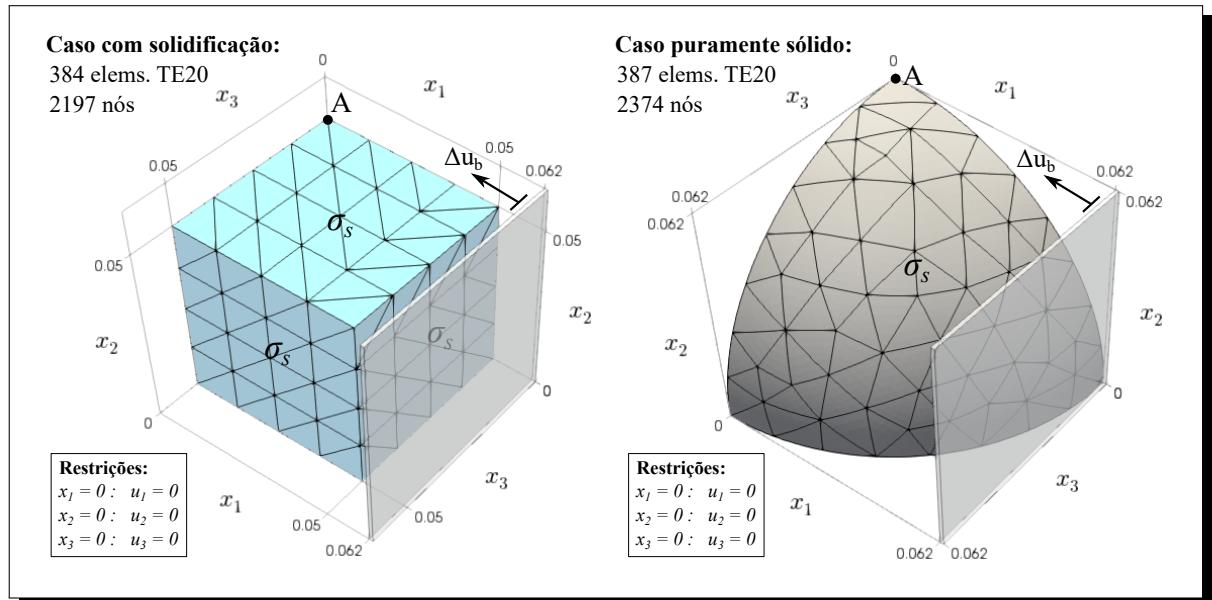


9.2.7.4 Prensagem de esfera solidificada

Similarmente ao exemplo anterior, este caso busca verificar a consistência cinemática do modelo, mas desta vez em uma análise tridimensional. Simulamos um líquido em formato cúbico que, sob a ação de uma tensão superficial, eventualmente se transforma em uma esfera. Após assumir essa forma, o material é solidificado e submetido à prensagem por uma parede rígida móvel. Novamente, comparamos a resposta com um caso puramente sólido, onde, desde o início da análise, o material já possui formato esférico de raio equivalente e encontra-se na fase sólida.

Na Fig. 100, são apresentadas as geometrias, malhas, e condições de contorno para cada caso. Devido à simetria do problema, apenas um octante é discretizado, sendo aplicadas as devidas condições de contorno nos eixos de simetria. Os demais dados da análise, incluindo os materiais utilizados e temperaturas prescritas, são exatamente iguais aos do exemplo anterior. Porém, neste caso, analisamos também um cenário com contração térmica, aplicando o modelo exponencial com $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$. Para permitir a comparação entre os casos com solidificação e o puramente sólido no cenário com contração térmica, a mesma variação de temperatura é aplicada em ambos durante os 2 segundos iniciais da análise.

Figura 100 – Geometrias para o exemplo de prensagem de esfera solidificada



Assim como no exemplo anterior, utilizamos como base de comparação os gráficos da coordenada x_2 no ponto A e força de reação horizontal (eixo x_1) ao longo do tempo. Esses gráficos são mostrados nas Figs. 101 e 102 para os casos com $\alpha = 0$ e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, respectivamente. O primeiro caso apresenta perfis similares aos do exemplo anterior. Já no segundo caso, podemos perceber uma redução da coordenada x_2 , devido ao efeito da contração térmica. Naturalmente, a contração também ocorre no eixo x_1 , o que retarda o

instante no qual a parede entra em contato com o sólido, consequentemente alterando a evolução das forças de reação.

Novamente, os gráficos demonstram uma excelente correspondência entre os casos com solidificação e puramente sólido, a partir dos 2 segundos iniciais, independentemente do material e do coeficiente α adotados. Isso sugere a consistência do modelo proposto de mudança de fase, mesmo em problemas tridimensionais sob diferentes condições.

Figura 101 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de esfera solidificada com $\alpha = 0$

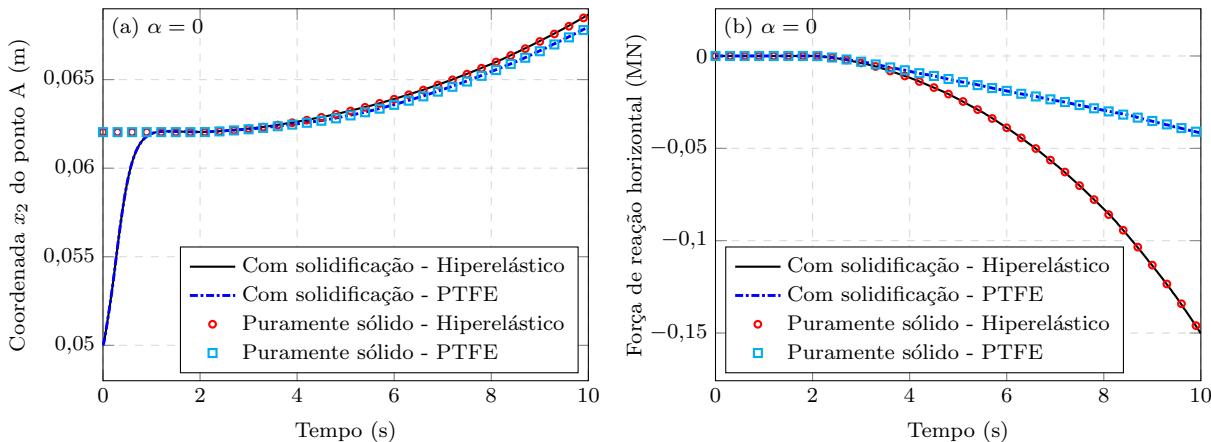
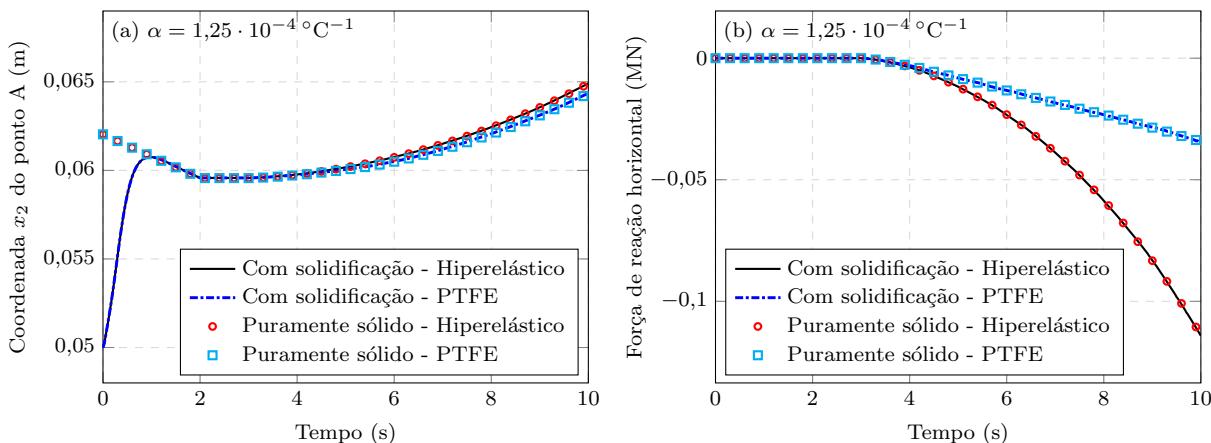


Figura 102 – Gráficos de (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal para o problema de prensagem de esfera solidificada com $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$



Nas Figs. 103 a 106, apresentamos as configurações deformadas para todas as variações consideradas de materiais e dos coeficientes α . Em cada instante de tempo selecionado, mostramos o caso puramente sólido à esquerda, e o caso com solidificação à direita (espelhado), permitindo uma comparação visual direta. Nos mapas de cores, são exibidos os valores da pressão, em MPa. Novamente, para instantes a partir de 2 segundos, as figuras mostram excelente concordância entre os dois casos, apesar das diferentes malhas adotadas.

A parede rígida foi omitida das figuras para não obstruir a visualização dos resultados, mas o efeito da prensagem é evidente nos instantes de 6 e 10 segundos. O impacto da

contração térmica nas configurações deformadas é sutil, mas a variação no volume pode ser percebida ao comparar as configurações do caso puramente sólido nos instantes de 0,2 e 2 segundos das Figs. 104 e 106.

Figura 103 – Configurações deformadas para material hiperelástico e $\alpha = 0$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores

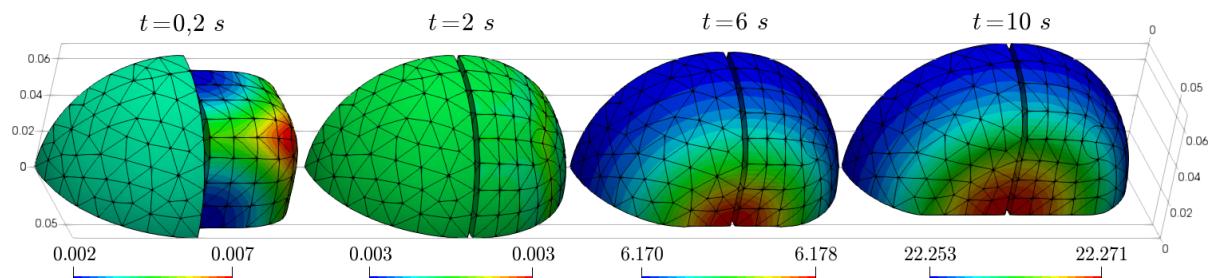


Figura 104 – Configurações deformadas para material hiperelástico e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores

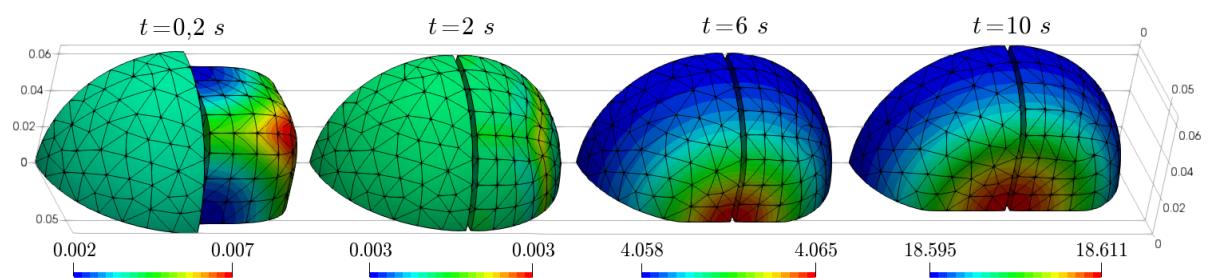


Figura 105 – Configurações deformadas para PTFE e $\alpha = 0$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores

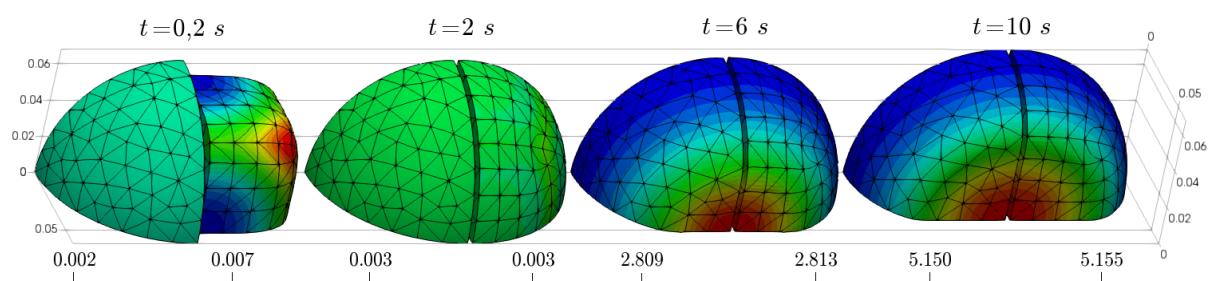
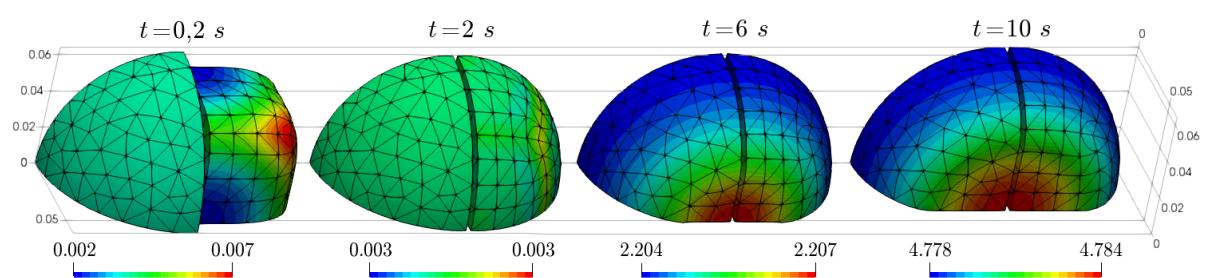


Figura 106 – Configurações deformadas para PTFE e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, com caso puramente sólido à esquerda e com solidificação à direita, e pressão (MPa) em mapa de cores

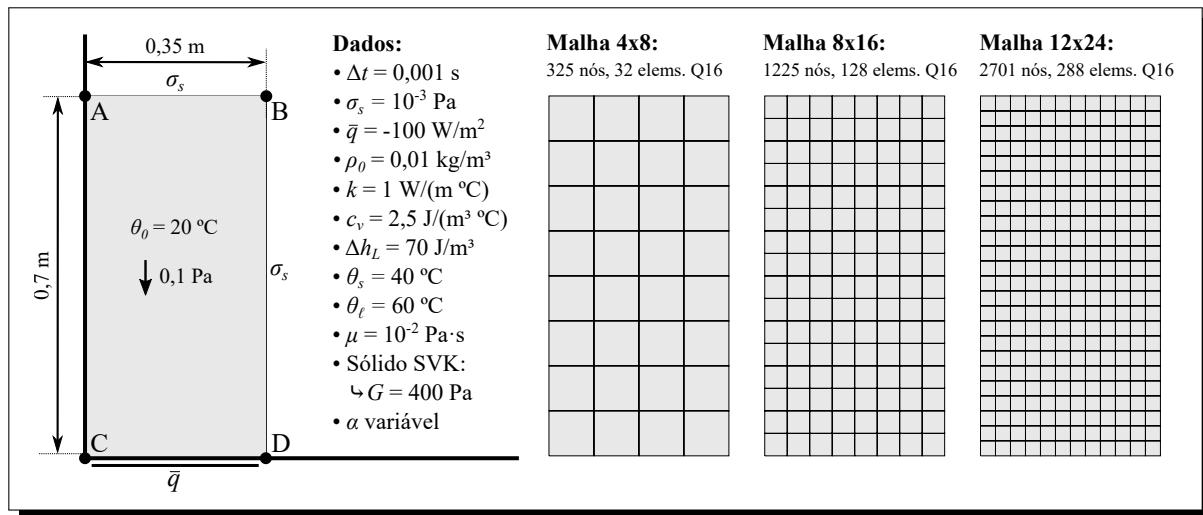


9.2.7.5 Derretimento de coluna: caso 2D

Nesta seção, propomos uma generalização do problema apresentado na Seção 8.3.2.2, incorporando a mudança de fase. Neste caso, o domínio é inicialmente sólido e, através de um fluxo de calor aplicado em sua extremidade inferior, sua temperatura aumenta progressivamente, causando um derretimento gradual do material, que se propaga da base para o topo.

Os dados do exemplo estão dispostos na Fig. 107, incluindo geometria, condições de contorno, e parâmetros do material e da análise. As forças aplicadas incluem apenas o peso próprio e uma tensão superficial constante ao longo do tempo. Para a fase sólida, onde a rigidez é elevada, espera-se que essas forças provoquem apenas pequenas deformações. Assim, optamos por utilizar a lei de Saint Venant-Kirchhoff nessa fase, com estado plano de deformações (EPD).

Figura 107 – Dados do exemplo de derretimento de coluna 2D



Inicialmente, realizamos uma análise com o objetivo de verificar a sensibilidade dos resultados à discretização espacial, considerando as três malhas distintas da Fig. 107. Nesta análise, não aplicamos expansão térmica, e utilizamos apenas o modelo com multiplicadores quínticos (Tabela 9) para a fase de transição.

Na Fig. 108(a), é apresentado o gráfico de deslocamento horizontal no ponto D (canto inferior direito) ao longo do tempo. Como esperado, os deslocamentos são muito pequenos nos instantes iniciais (fase sólida), aumentando gradualmente à medida que o domínio passa pelas fases de transição e líquida. Podemos observar que esse gráfico apresenta resultados idênticos para as três malhas consideradas, ...

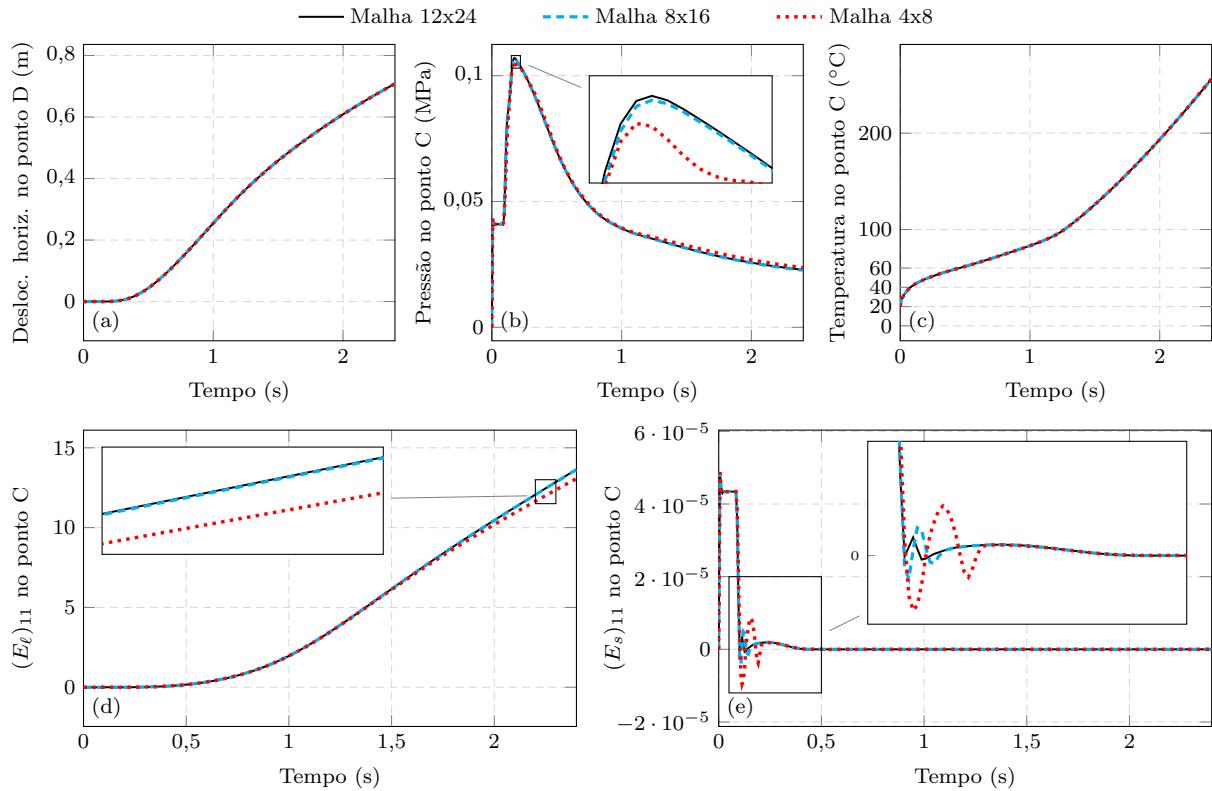
Além disso, na Fig. 108

, são apresentados os gráficos de deslocamento horizontal no ponto D (canto inferior direito), pressão no ponto C (canto inferior esquerdo), temperatura, e componentes líquida e sólida da deformação de Green-Lagrange no eixo horizontal.

Em seguida, utilizando apenas a malha 12x24, comparamos

é incorporada a expansão térmica exponencial com $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, considerando apenas a malha 12x24. Em todos os casos, são comparados os três modelos de multiplicadores da Tabela 9 para a fase de transição.

Figura 108



São ilustrados em mapas de cores as fases durante o processo (sólido, transição e líquido), as temperaturas, e as pressões.

9.2.7.6 Derretimento de coluna: caso 3D

Figura 109 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com $\alpha = 0$, e fases em mapa de cores

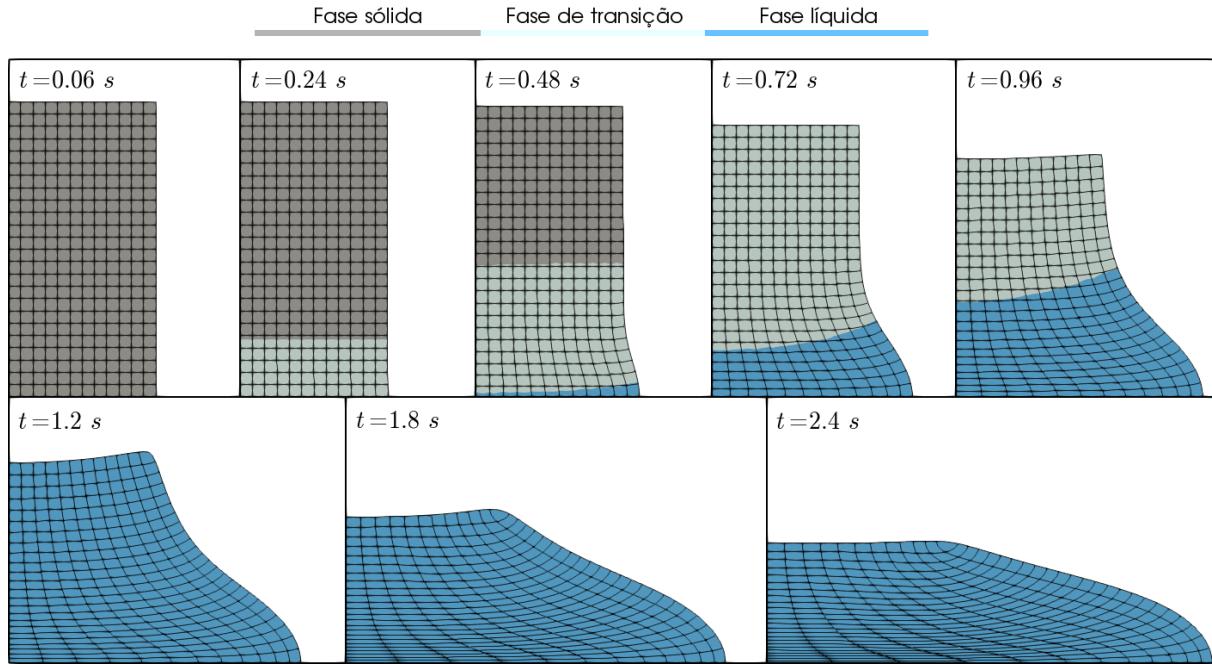


Figura 110 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com pressões (Pa) em mapa de cores, $\alpha = 0$, multiplicadores quínticos e malha 12x24

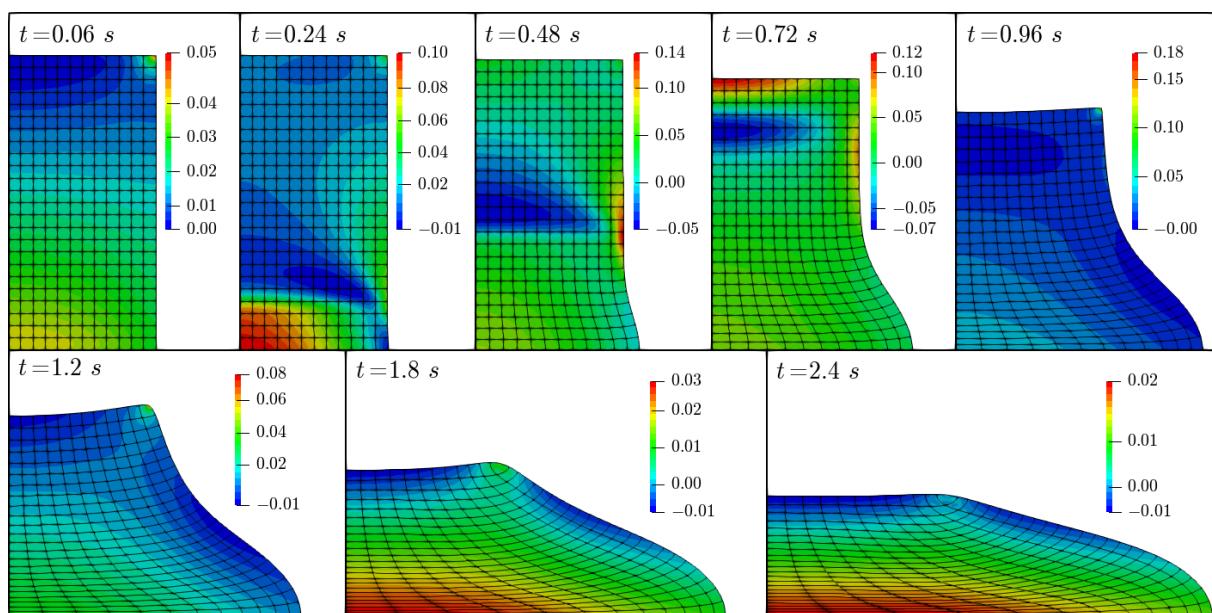


Figura 111 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna com pressões (Pa) em mapa de cores, $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$, multiplicadores quínticos e malha 12x24

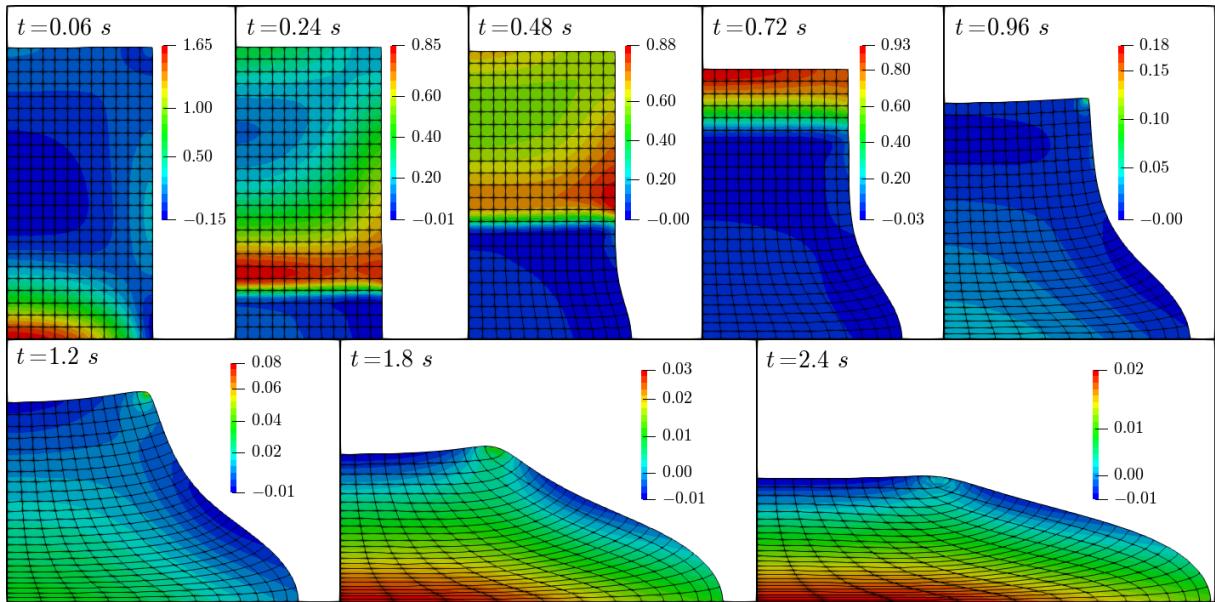


Figura 112

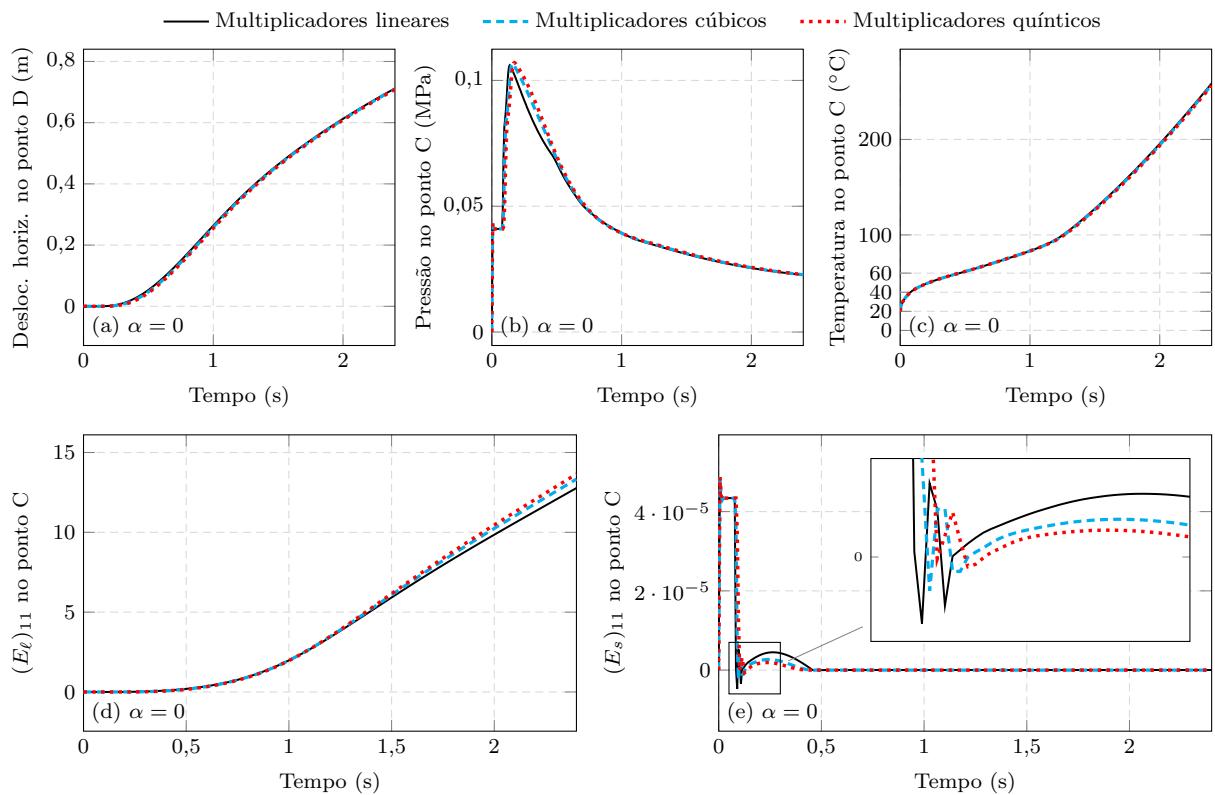


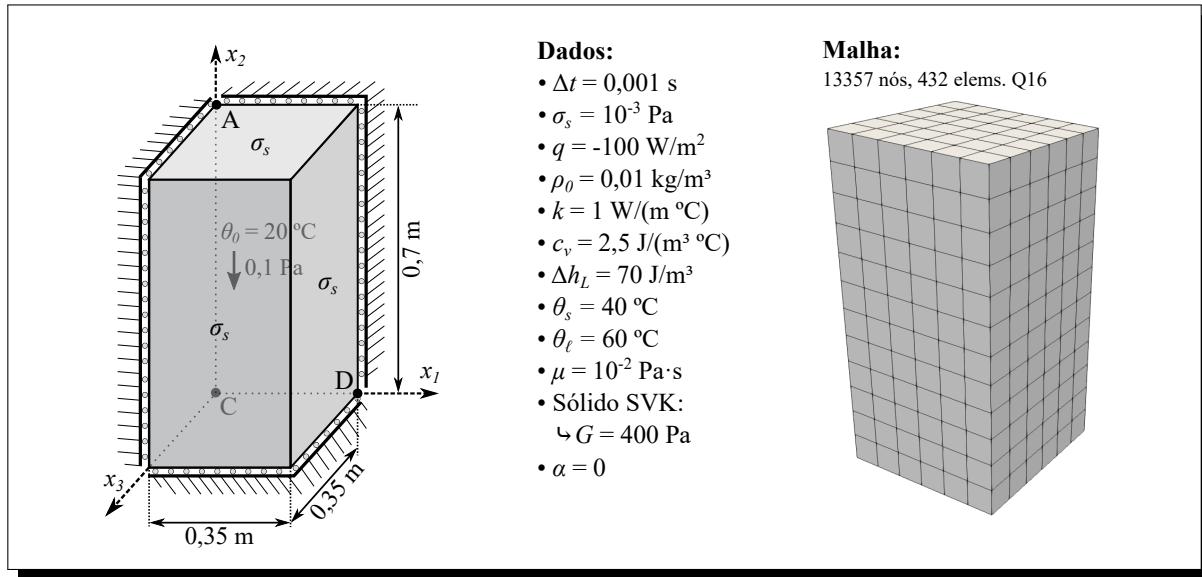
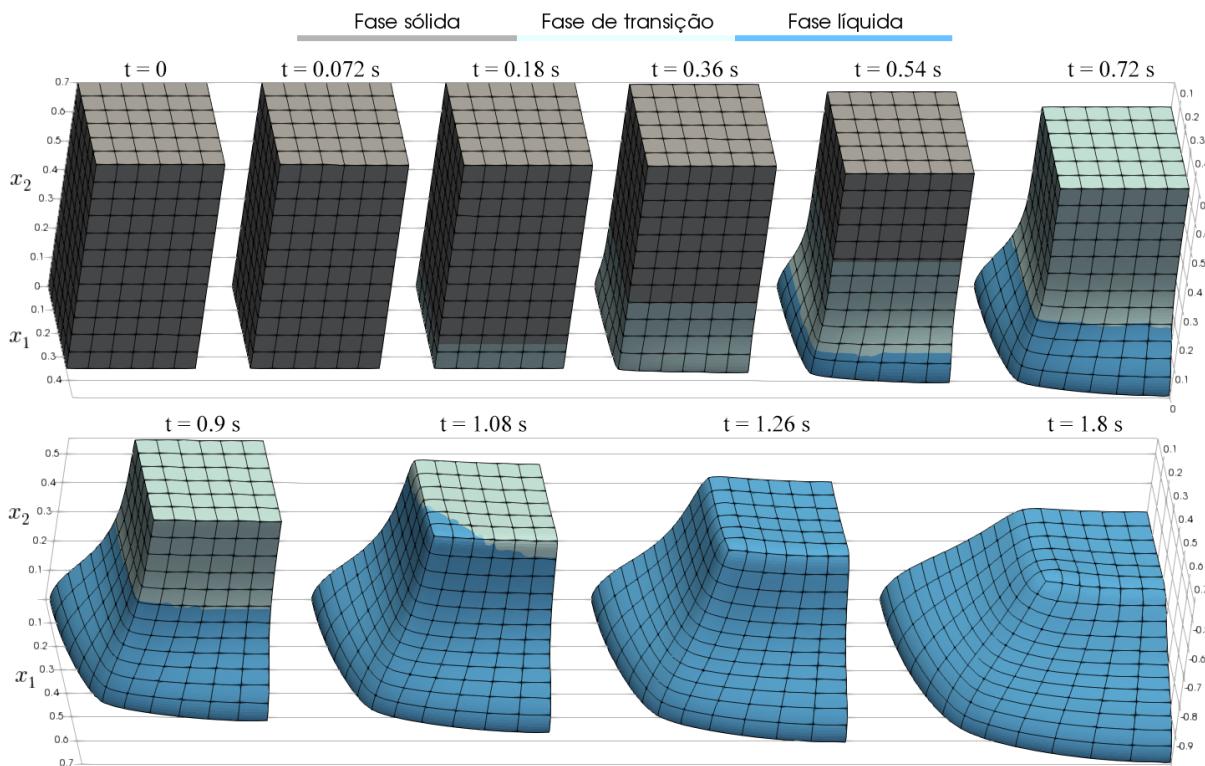
Figura 113 – Dados do exemplo de derretimento de coluna 3D**Figura 114 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna 3D com multiplicadores quínticos, e fases em mapa de cores**

Figura 115 – Configurações deformadas para o problema de derretimento de coluna 3D com multiplicadores quínticos, e pressão (Pa) em mapa de cores

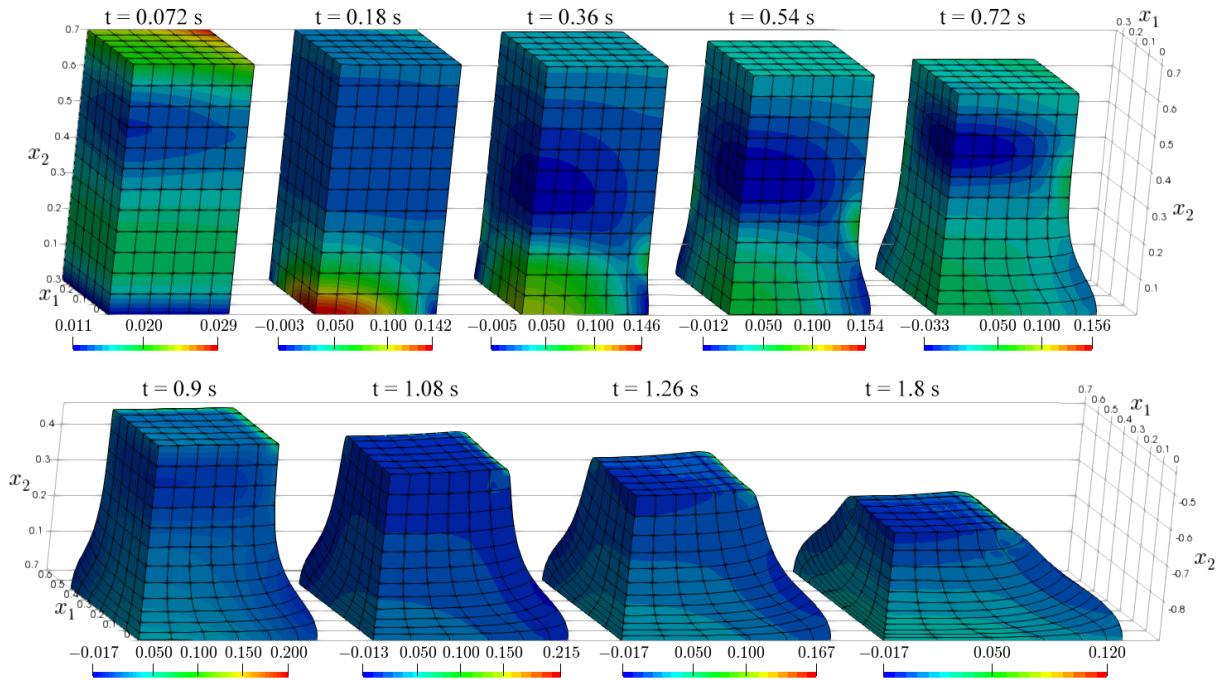
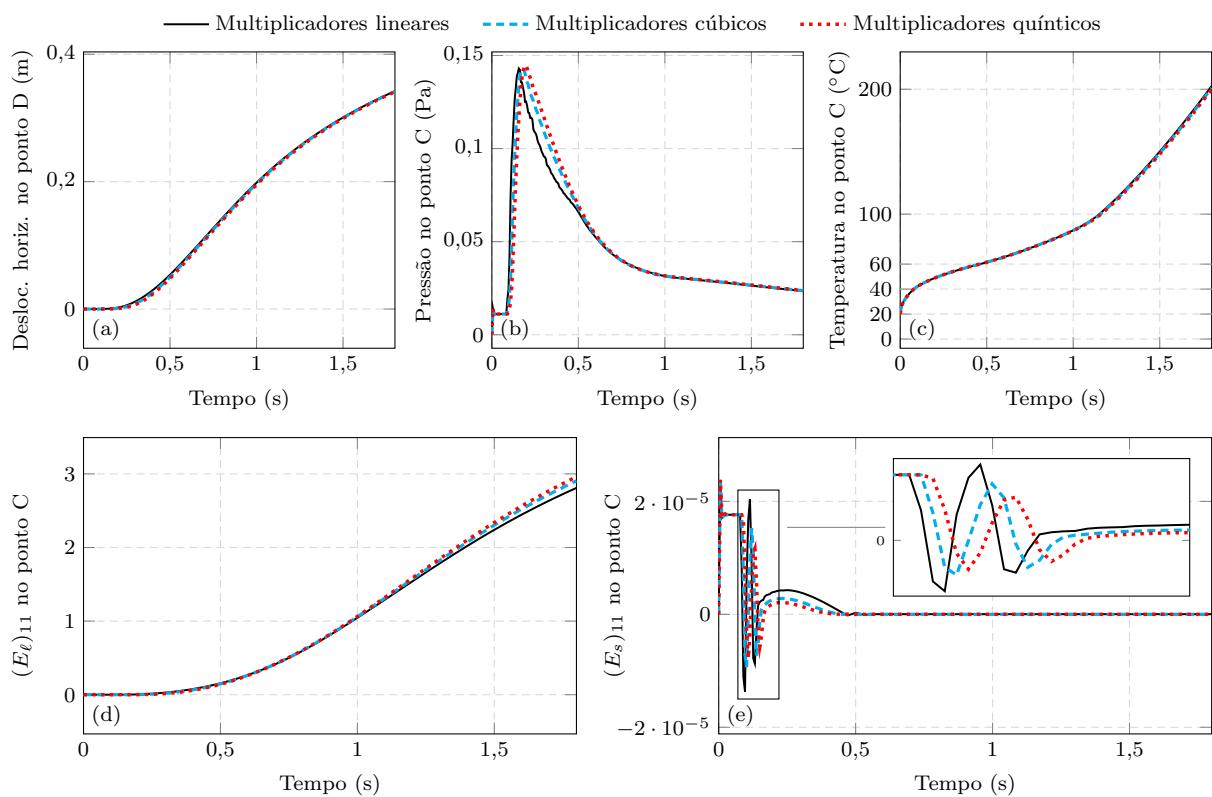


Figura 116



Capítulo 10

Conclusões

Os resultados deste trabalho podem ser melhor analisados separando-os em três grupos: desenvolvimento e validação de modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico, desenvolvimento de modelos constitutivos termo-mecânicos e análise de problemas de contato com atrito.

10.1 Modelo viscoelástico-viscoplástico

Os desenvolvimentos relacionados ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico neste trabalho, com relação à ??), foram a inclusão de uma parcela de encruamento cinemático viscoso, e a aplicação do modelo ao material politetrafluoretileno (PTFE). A formulação é descrita no [Capítulo 5](#), sendo a aplicação feita na [seção 5.7](#).

A calibração dos parâmetros para a simulação do comportamento de sólidos de PTFE foi realizada a partir dos resultados experimentais de tensão uniaxial com carregamento monotônico, obtidos em ??). Conforme observado na [Figura 25](#), o modelo desenvolvido foi capaz de acomodar satisfatoriamente os resultados das quatro diferentes taxas de deformação aplicadas, sendo constatada a importância do componente viscoso de encruamento cinemático. Em seguida, foi realizada a validação do modelo com os ensaios de fluência e relaxação, também obtidos em ??). Nesses casos, a previsão numérica mostrou-se satisfatória, e bastante próxima dos resultados experimentais, conforme apresentado nas Subseções [5.7.2](#) e [5.7.3](#). Observou-se, no entanto, que os erros ocorridos após o primeiro intervalo de relaxação se devem ao componente viscoso de encruamento cinemático, mostrando que, apesar de ser necessário para representar o comportamento em diferentes taxas, esse componente ainda pode ser aprimorado, a fim de reduzir a queda nos valores de tensão ao longo de intervalos de tempo muito grandes.

No contexto puramente numérico, foi feita ainda uma avaliação da propriedade de conservação dos volumes inelásticos, onde concluiu-se que, para todos os casos, o erro dos jacobianos apresenta convergência de primeira ordem (ver [Figura 27](#)). Além disso, a fim de melhor caracterizar o comportamento constitutivo do modelo, os ensaios de relaxação e fluência foram estendidos para as demais taxas de tensão e deformação.

Por fim, o modelo desenvolvido foi aplicado a exemplos tridimensionais utilizando o

método dos elementos finitos, sendo analisados aspectos numéricos como performance computacional, malha e influência da discretização temporal. Para o exemplo simulado ([subseção 5.7.4](#)), observou-se uma variação expressiva nos resultados com o refinamento da malha, mas pouca variação com o refinamento temporal. Entretanto, a escolha do número de passos de tempo mostrou-se importante para garantir a convergência do método de Newton-Raphson, especialmente considerando a alta não-linearidade do modelo em regime de grandes deformações.

10.2 Modelos constitutivos termo-mecânicos

O código de elementos finitos desenvolvido foi aperfeiçoado com a inclusão dos efeitos térmicos, a partir da formulação termodinâmica descrita no [Capítulo 4](#). Com relação às equações da condução de calor, foi utilizada a lei de Fourier, sendo consideradas até o momento condições de contorno de convecção, temperatura e fluxo prescrito. A fim de verificar o algoritmo de solução das temperaturas, foi simulado inicialmente um exemplo térmico isento de deformações. Os resultados desse exemplo, apresentados na [subseção 3.5.1](#), são comparados com os do *software ANSYS*, mostrando excelente concordância.

Em seguida, a formulação foi aplicada a modelos termo-elásticos baseados nas decomposições aditiva e multiplicativa, considerando leis de expansão térmica linear e exponencial. O acoplamento termo-mecânico foi implementado utilizando um método particionado forte (implícito) do tipo bloco-iterativo. Observa-se, a partir dos resultados da [subseção 4.6.1](#), que a influência do problema mecânico sobre o campo de temperaturas torna-se significativa em casos de grandes deformações, mesmo sendo desconsiderado o termo de acoplamento nas equações da condução de calor. Já a influência das temperaturas sobre o campo de deformações é considerada no modelo constitutivo do sólido.

Na [subseção 4.6.2](#), esses modelos foram aplicados a um problema de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura. Por ser um problema isostático, a expectativa inicial era que as tensões fossem nulas, porém isso foi observado apenas nos modelos utilizando a lei de expansão térmica exponencial, sendo, nos casos de expansão linear, manifestadas tensões residuais. Apesar disso, em ambos os casos as deformações térmicas são muito maiores que as deformações mecânicas, garantindo que não hajam diferenças significativas entre as decomposições aditiva e multiplicativa. Já na [subseção 4.6.3](#), o mesmo exemplo é apresentado considerando também carregamentos mecânicos, sendo possível observar diferenças maiores entre as duas decomposições.

Na [subseção 4.6.4](#) é proposto um problema termo-elástico com altos níveis de deformações, a fim de se analisar as limitações dos modelos adotados. Conclui-se, a partir desse exemplo, que os modelos utilizando a decomposição aditiva podem apresentar problemas de inversão do material, sendo, portanto, inadequados para casos de grandes deformações. O mesmo pode ser dito para modelos utilizando a lei de expansão térmica linear, conforme já havia sido discutido nas seções teóricas. Já o modelo utilizando a decomposição multiplicativa e lei de expansão térmica exponencial mostrou-se consistente mesmo nos elevados

níveis de deformações a que foi submetido.

Em seguida, foi desenvolvido um modelo termo-viscoelástico-viscoplástico, considerando o acoplamento entre os modelos termo-mecânico e viscoelástico-viscoplástico já introduzidos. Com base nos resultados obtidos anteriormente, esse modelo levou em conta apenas a decomposição multiplicativa e a lei de expansão térmica exponencial. Observa-se que modelos termo-mecânicos inelásticos demandam um cuidado adicional, uma vez que sua natureza dissipativa é capaz de gerar calor ao sistema sem que esse tenha sido aplicado previamente. Tal comportamento foi comprovado pelas equações de dissipação mecânica obtidas, derivadas da aplicação da primeira e segunda leis da termodinâmica sob o modelo constitutivo.

10.3 Análise de problemas de contato

Foi implementado um modelo numérico de contato em duas e três dimensões utilizando a estratégia nó-a-superfície com multiplicadores de Lagrange, e considerando atrito de Coulomb. Além da abordagem tradicional, aplicada em ??), o modelo foi aprimorado para uma melhor precisão quando aplicado a elementos de alta ordem: as coordenadas adimensionais de contato são adicionadas como parâmetros do sistema, e a detecção do contato é feita pela estratégia da intersecção das trajetórias. A descrição detalhada desse modelo é realizada no [Capítulo 7](#), com exemplos numéricos apresentados na [seção 7.4](#). Em geral, observou-se que o modelo aprimorado exibe resultados similares ao original, utilizando, porém, menos etapas de convergência, uma vez que as coordenadas adimensionais são atualizadas a cada iteração em conjunto com as demais variáveis do sistema, ao invés de serem atualizadas ao final do processo de Newton-Raphson, forçando o re-cálculo do sistema.

O primeiro exemplo, apresentado na [subseção 7.4.1](#), tem como intuito verificar o modelo implementado, sendo observada uma excelente concordância com a referência, tanto em duas quanto em três dimensões. Nas subseções [7.4.2](#) e [7.4.3](#) são apresentados ainda dois exemplos tridimensionais, com e sem atrito, para demonstrar as aplicações do algoritmo desenvolvido. Exemplos adicionais de conformação de metais são ainda apresentados nas ??, incluindo dobramento direcionado e extrusão. Esses exemplos são similares aos propostos em ??), com a diferença que foi considerado atrito. No primeiro, observa-se que o atrito provoca poucas diferenças na forma final da chapa, sendo, no entanto, altamente relevante para a força de reação do problema. Um resultado similar pode ser concluído a partir do exemplo de extrusão, porém, observa-se que, além de influenciar nas forças de reação, o coeficiente de atrito também provoca mudanças na configuração interna da chapa.