

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Engenharia de São Carlos

**Análise numérica de fenômenos termomecânicos com
mudança de fase sólido-líquido considerando grandes
deformações**

Péricles Rafael Pavão Carvalho

Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (Engenharia de Estruturas) da Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Péricles Rafael Pavão Carvalho

**Análise numérica de fenômenos termomecânicos com
mudança de fase sólido-líquido considerando grandes
deformações**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (Engenharia de Estruturas) da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Estruturas

Orientador: Prof. Dr. Rodolfo André Kuche Sanches

Universidade de São Paulo

**São Carlos
2024**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

C331a Carvalho, Péricles Rafael Pavão
Análise numérica de fenômenos termomecânicos
com mudança de fase sólido-líquido considerando grandes
deformações / Péricles Rafael Pavão Carvalho;
orientador Rodolfo André Kuche Sanches. São Carlos,
2024.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Civil (Engenharia de Estruturas) e Área de
Concentração em Estruturas -- Escola de Engenharia de
São Carlos da Universidade de São Paulo, 2024.

1. mudança de fase. 2. termomecânica. 3.
termodinâmica. 4. fluidos Newtonianos. 5. modelo termo-
viscoelástico-viscoplástico. 6. materiais
incompressíveis. 7. grandes deformações. 8. contato. I.
Título.

Agradecimentos

Aos meus pais, que sempre me guiaram pelo melhor caminho possível, e fizeram tudo ao seu alcance para me apoiar em cada passo da minha jornada.

À minha esposa Wanessa, pelo apoio e companheirismo em todos os momentos. Te amo!

Ao Professor Rodolfo, que foi o melhor orientador que eu poderia ter escolhido, tanto profissionalmente quanto pessoalmente.

A todos os professores e funcionários do SET. Em especial aos Professores Coda, Paccola e Proença, pelas brilhantes aulas, e ao Dorival, pelo suporte técnico essencial.

A todos os amigos do SET que tive o prazer de conviver ao longo destes anos. Infelizmente são muitos para listar todos, mas faço questão de citar o Murilo, o Henrique, e o Caio, que estiveram comigo desde o começo do mestrado, ajudando onde fosse necessário. A turma de 2017 foi especial em vários sentidos, um deles sendo o espírito de cooperação. Também preciso agradecer ao Giovane, meu veterano e irmão de orientador, que me ajudou muito na pesquisa e abriu as portas para que eu pudesse fazer o intercâmbio. E, claro, não posso deixar de mencionar a galera do cafézinho e os novos membros da DO-03, em especial Matheus, Luizão, Daniel, Wellington e Wanderson. Há muitos outros para citar, mas o parágrafo já está longo demais!

A todos os amigos que fiz no intercâmbio. Aos Professores Sergio Idelsohn e Alessandro Franci, que me receberam em Barcelona de portas abertas e com toda a simpatia. Sou muito grato pela oportunidade de ter vivido essa experiência incrível.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processo Nº 2018/23957-2, pelo financiamento da pesquisa e do intercâmbio.

A todos que me apoiaram ao longo desta jornada.

RESUMO

CARVALHO, P. R. P. **Análise numérica de fenômenos termomecânicos com mudança de fase sólido-líquido considerando grandes deformações.** 2024. 277p. Tese - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2024.

Motivado pelos recentes avanços na manufatura aditiva e em outros processos de fabricação de elementos estruturais, este trabalho dedica-se ao desenvolvimento de uma ferramenta numérica para simular problemas termomecânicos, incluindo mudança de fase sólido-líquido e situações de contato. O escopo desta pesquisa inclui o desenvolvimento de modelos constitutivos termo-viscoelástico-viscoplásticos para sólidos submetidos a grandes deformações, enquanto a fase líquida é representada pelo modelo Newtoniano incompressível. A formulação apresentada utiliza uma descrição totalmente Lagrangiana e termodinamicamente consistente: tanto os modelos constitutivos quanto a equação da condução de calor baseiam-se nas leis da termodinâmica. Ambos são definidos a partir da energia livre de Helmholtz, de onde derivam a tensão e a entropia. A solução numérica do problema físico é realizada pelo método dos elementos finitos, com uma abordagem baseada em temperaturas nodais para o problema térmico, e em posições nodais para o problema mecânico. Para a simulação de sólidos e fluidos incompressíveis, emprega-se uma formulação mista do método dos elementos finitos baseada em posições e pressões nodais. O contato entre corpos é modelado utilizando o método nó-a-superfície com multiplicadores de Lagrange. Para o problema termomecânico 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 sólida e líquida. 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; termomecânica; termodinâmica; fluidos Newtonianos; modelo termo-viscoelástico-viscoplástico; materiais incompressíveis; grandes deformações; contato.

ABSTRACT

CARVALHO, P. R. P. **Numerical analysis of thermomechanical phenomena with solid-liquid phase change considering large deformations**. 2024. 277p. Thesis (PhD. in Civil Engineering (Structural Engineering)) – School of Engineering of São Carlos, University of São Paulo, São Carlos, 2024.

Motivated by recent advances in additive manufacturing and by other manufacturing processes for structural elements, we develop a numerical framework for simulating thermomechanical problems, including solid-liquid phase change and contact. The scope of this research includes the formulation of large strain thermo-viscoelastic-viscoplastic constitutive models to represent the solid phase of materials, while the liquid phase is represented by the incompressible Newtonian model. The proposed thermomechanical framework employs a total Lagrangian description and is thermodynamically consistent: both, the constitutive models and the heat conduction equation are based on the laws of thermodynamics, defined by the Helmholtz free energy, from which stress and entropy are derived. The numerical solution of the physical problem is performed using the finite element method, with a temperature-based approach for the thermal problem and a position-based approach for the mechanical problem. For the simulation of incompressible solids and fluids, a mixed FEM formulation based on position and pressure is employed. Contact between bodies is modeled using the node-to-surface scheme with Lagrange multipliers. For the thermomechanical problem of solid-liquid phase change, we propose a total Lagrangian model based on the multiplicative decomposition of the mechanical deformation gradient into solid and liquid components. The evolution of each component is governed by its corresponding constitutive model. This approach ensures a consistent kinematic description for large strain problems. Representative numerical examples are simulated to verify the developed computational code and to demonstrate the characteristics of the developed models.

Keywords: phase change; thermomechanics; thermodynamics; Newtonian fluids; thermo-viscoelastic-viscoplastic model; incompressible materials; large deformation; contact.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Mudanças de configuração de um corpo deformável	44
Figura 2 – Mapeamento de um elemento finito em suas configurações inicial e final	49
Figura 3 – Dados do exemplo puramente térmico	62
Figura 4 – Comparação entre os campos de temperatura obtidos neste trabalho (à esquerda) e no <i>software</i> ANSYS (à direita) para o tempo de análise 100s.	62
Figura 5 – Temperatura (em °C) ao longo do tempo nos pontos A e B do exemplo puramente térmico.	63
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	63
Figura 7 – Mapeamento da configuração intermediária no modelo termo-elástico .	73
Figura 8 – Esquema de acoplamento bloco-iterativo para o problema termo-elástico	78
Figura 9 – Dados do exemplo de cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos	79
Figura 10 – Configuração deformada e campo de temperatura (em °C) para o pri- meiro e último passo do carregamento mecânico	79
Figura 11 – Deslocamento e temperatura vs. tempo no ponto A	80
Figura 12 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura	81
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	81
Figura 14 – Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura: (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da deformação, calculados na borda inferior do meio do vão	82
Figura 15 – Dados do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento	82
Figura 16 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento, 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	83
Figura 17 – Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento: (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da deformação, calculados na borda inferior do meio do vão	83
Figura 18 – Cubo sob deformações térmicas excessivas - Descrição do problema e da discretização	84

Figura 19 – Resultados para o ponto A vs. tempo: (a) temperatura, (b) alongamento térmico, e componentes (c) E_{11} e (d) E_{22} de deformação de Green-Lagrange	85
Figura 20 – Tensão σ_{11} sobre a configuração deformada para o modelo baseado na decomposição multiplicativa e lei exponencial	86
Figura 21 – Modelo reológico visco-elasto-plástico	87
Figura 22 – Configurações intermediárias para as decomposições multiplicativas aplicadas ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico	89
Figura 23 – Fluxograma do algoritmo previsão-correção para marcha no tempo em modelo viscoelástico-viscoplástico	93
Figura 24 – Estimativa inicial dos parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico a partir das tangentes das curvas experimentais	98
Figura 25 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico em material politetrafluoretileno (PTFE)	99
Figura 26 – Ensaio de carregamento monotônico desconsiderando o encruamento cinemático viscoso ($\tilde{c} = 0$), com (a) $c = 51,71$ MPa e (b) $c = 59,98$ MPa	100
Figura 27 – Análise do Jacobiano	100
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 $\dot{\epsilon} = 0,01 \text{ s}^{-1}$.	102
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.	102
Figura 30 – (a) Tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6 h e taxa de tensão de 0,1755 MPa/s.	103
Figura 31 – (a) Tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6h e taxa de tensão variável.	103
Figura 32 – Dados para o exemplo do cilindro parcialmente comprimido	104
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.	105
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	106
Figura 35 – Malha vs. custo computacional: (a) tempo de processamento para diferentes malhas e (b) número de iterações por passo de tempo	108
Figura 36 – Cilindro parcialmente comprimido sob fluência - Dependência da discretização temporal: (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	109

Figura 37 – Ensaio de carregamento monotônico em PTFE considerando efeitos termomecânicos: (a) temperatura e (b) tensão-deformação	120
Figura 38 – Taxas de trabalho para ensaios de carregamento monotônico em PTFE	121
Figura 39 – Geometria e condições de contorno para o cubo de PTFE parcialmente carregado	121
Figura 40 – Cubo parcialmente comprimido: (a) deslocamento vertical no ponto A e (b) temperatura no ponto B.	122
Figura 41 – Cubo parcialmente carregado: distribuição do componente de tensão normal de Cauchy vertical (σ_{22}) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento	122
Figura 42 – Cubo parcialmente carregado: distribuição do componente vertical da deformação de Green-Lagrange (E_{22}) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento	123
Figura 43 – Cubo parcialmente carregado: distribuição de temperatura (θ) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento	123
Figura 44 – Cubo parcialmente carregado: taxas de trabalho	124
Figura 45 – Comparação entre os modelos reológicos viscosos convencional e paramétrico	125
Figura 46 – Correlações das curvas experimentais de tensão-deformação com modelos hiperelásticos	129
Figura 47 – Funções paramétricas polinomiais	130
Figura 48 – Funções paramétricas sigmóides	131
Figura 49 – Curvas de relaxação para $\epsilon = -59,1\%$, considerando funções paramétricas polinomiais e diferentes parâmetros de viscosidade	132
Figura 50 – Curvas de relaxação para $\epsilon = -59,1\%$, considerando funções paramétricas sigmóides e diferentes parâmetros de viscosidade	133
Figura 51 – Curvas de relaxação para diferentes números de pontos de integração - Modelo Cúbico	134
Figura 52 – Curvas de relaxação para diferentes números de pontos de integração - Modelo Sigmoide IV	134
Figura 53 – Dependência do número de pontos de quadratura: (a) convergência do erro L_1 e (b) tempo de processamento.	135
Figura 54 – Curvas tensão-deformação para ensaios monotônicos	136
Figura 55 – (a) Taxa de dissipação mecânica e (b) dissipação mecânica para ensaios monotônicos	137
Figura 56 – Taxas de trabalho para ensaios monotônicos a diferentes taxas de deformação	137
Figura 57 – Ensaio de relaxação uniaxial compressiva em diferentes níveis de deformação: (a) Curvas de relaxação e (b) Tensão-Deformação	139
Figura 58 – Resultados numéricos de dissipação mecânica e taxa de energia livre de Helmholtz ao longo do tempo para os ensaios de relaxação	139

Figura 59 – Carregamento monotônico com salto na taxa de deformação: (a) tensão vs. deformação e (b) taxas de trabalho vs. deformação.	140
Figura 60 – Funções selecionadas para $p(\theta)$ e $q(\theta)$	143
Figura 61 – Curvas de tensão-deformação para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes casos de temperatura prescrita	143
Figura 62 – Análise das taxas de trabalho para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes casos de temperatura prescrita	144
Figura 63 – Curvas de entropia para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} sob cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica	145
Figura 64 – Taxa de entropia e termo de acoplamento termomecânico para ensaios monotônicos com $ \dot{\epsilon} = 10^{-1}$ s^{-1} sob cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica	146
Figura 65 – Análise de convergência do erro da taxa de entropia para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = 10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica	146
Figura 66 – Evolução ao longo do tempo de (a) dissipação mecânica, (b) termo de acoplamento termomecânico e (c) capacidade térmica volumétrica efetiva, para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas	148
Figura 67 – Variação da temperatura ao longo do tempo para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas	148
Figura 68 – Curvas tensão-deformação para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas	149
Figura 69 – Análises das taxas de trabalho para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas	149
Figura 70 – Componentes da taxa de entropia mecânica para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1}$ s^{-1} em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas	150
Figura 71 – Geometria e condições de contorno para o cubo de Adiprene-L100 parcialmente carregado	151
Figura 72 – Análise de convergência de malha para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo de cubo parcialmente carregado	152
Figura 73 – Análise de convergência de malha para a temperatura média no exemplo de cubo parcialmente carregado	152
Figura 74 – Configurações deformadas finais para o exemplo de cubo parcialmente carregado com diferentes malhas, com mapas de cores ilustrando as temperaturas (θ)	152

Figura 75 – Análise de convergência temporal para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo de cubo parcialmente carregado	153
Figura 76 – Análise de convergência temporal para a temperatura média no exemplo de cubo parcialmente carregado	153
Figura 77 – Análise de convergência temporal para o (a) termo de acoplamento termomecânico total e (b) dissipação mecânica total	154
Figura 78 – Configurações deformadas finais para o exemplo do cubo parcialmente carregado com diferentes discretizações temporais, com mapas de cores ilustrando as temperaturas (θ)	154
Figura 79 – Análise de convergência dos pontos de integração para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo do cubo parcialmente carregado	155
Figura 80 – Análise de convergência dos pontos de integração para a temperatura média no exemplo do cubo parcialmente carregado	155
Figura 81 – Configurações deformadas finais para o exemplo do cubo parcialmente carregado com diferentes valores de n_p , coloridas pela temperatura (θ)	156
Figura 82 – Tempos de processamento computacional para as análises de convergência de malha, tempo e n_p no exemplo do cubo parcialmente carregado	156
Figura 83 – Resultados do deslocamento vertical e variação de temperatura para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais	157
Figura 84 – Configurações finais do exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais, com mapas de cores ilustrando a temperatura (θ)	157
Figura 85 – Configurações finais do exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais, com mapas de cores ilustrando o componente vertical da tensão de Cauchy (σ_{yy})	158
Figura 86 – Análises das taxas de trabalho total para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais	158
Figura 87 – Análises da taxa total de entropia para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais	159
Figura 88 – Dados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico	168
Figura 89 – 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	169
Figura 90 – Dados do exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico	170
Figura 91 – (a) Força de reação vertical e (b) configuração deformada final para exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico	170
Figura 92 – Dados do exemplo de contato entre lajes	171
Figura 93 – Reações de apoio nas direções (a) x_2 , (b) x_1 e x_3 para o exemplo de contato entre lajes	171

Figura 94 – 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	172
Figura 95 – Dados do exemplo de dobramento simples de chapa metálica	173
Figura 96 – 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	173
Figura 97 – Dados do exemplo de dobramento direcionado (<i>draw bending</i>) de barra metálica	174
Figura 98 – Configurações deformadas do exemplo de dobramento direcionado para o caso sem atrito, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores	175
Figura 99 – Configurações deformadas finais do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito, comparadas com o exemplo de dobramento simples	175
Figura 100 – Gráficos de força de reação horizontal do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito	175
Figura 101 – Dados do exemplo de extrusão	176
Figura 102 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão sem atrito, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores	177
Figura 103 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão com $\bar{\mu} = 0,1$, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores	177
Figura 104 – Extrusão: (a) força de reação horizontal e (b) deslocamento no ponto A	178
Figura 105 – Dados para o exemplo do cubo hiperelástico com tensão uniaxial	183
Figura 106 – Configurações deformadas finais para os casos com (a) $\Lambda = 10^0$ MPa, (b) $\Lambda = 10^2$ MPa e (c) modelo incompressível	184
Figura 107 – (a) deslocamento vertical por força aplicada e (b) deslocamento horizontal/transversal por força aplicada	184
Figura 108 – (a) tensão de Cauchy uniaxial por força aplicada e (b) pressão por força aplicada	185
Figura 109 – (a) Jacobiano por força aplicada e (b) $ J - 1 $ por Λ para os modelos compressíveis	185
Figura 110 – Representação visual do fenômeno da tensão superficial	187
Figura 111 – Representação visual de elementos de curva utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial	190
Figura 112 – Representação visual de elementos triangulares utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial	191
Figura 113 – Representação de força resultante de tensão superficial em nó de canto	191

Figura 114–Análise de convergência de pontos de integração para tensão superficial em (a) elementos de curva e (b) elementos triangulares	192
Figura 115–Geometria e dados do exemplo: <i>Sloshing</i> de pequena amplitude	193
Figura 116– <i>Sloshing</i> : altura da superfície livre nas extremidades esquerda e direita do recipiente com relação ao tempo	194
Figura 117– <i>Sloshing</i> : configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores	194
Figura 118– <i>Sloshing</i> : configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores	194
Figura 119–Geometria e dados do exemplo: colapso de barragem sob superfície lisa	195
Figura 120–Barragem: configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores	196
Figura 121–Barragem: configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores	196
Figura 122–Barragem: (a) Variação do comprimento do domínio e (b) Pressão medida no ponto inferior esquerdo, ao longo do tempo adimensional	197
Figura 123–Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 2D	197
Figura 124–(a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, considerando diferentes valores de viscosidade	198
Figura 125–Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 10^{-3}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ²	198
Figura 126–Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 5 \cdot 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ²	198
Figura 127–Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ²	199
Figura 128–(a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² , e diferentes valores de massa específica	200
Figura 129–(a) Distância entre pontos A e C, e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m ² , e diferentes valores de massa específica	200
Figura 130–(a) Distância entre pontos A e C e (b) Pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ , e diferentes valores de tensão superficial	201
Figura 131–(a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m ³ , e diferentes valores de tensão superficial	201
Figura 132–Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D	202

Figura 133–(a) Distância ao ponto A e (b) pressão ao longo o tempo, para diversos pontos do contorno sob tensão superficial em 3D	203
Figura 134–Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D	203
Figura 135–Relações características entre entalpia e temperatura	207
Figura 136–Dados do exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo	212
Figura 137–Mapa de cores de temperatura e fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo	213
Figura 138–(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	213
Figura 139–Modelo reológico para a fase de transição, considerando um sólido viscoelástico-viscoplástico	215
Figura 140–Gráficos dos modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido	224
Figura 141–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,016 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -2^\circ\text{C/s}$	229
Figura 142–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -10^\circ\text{C/s}$	230
Figura 143–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -50^\circ\text{C/s}$	230
Figura 144–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,016 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 2^\circ\text{C/s}$	231
Figura 145–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 10^\circ\text{C/s}$	232
Figura 146–(a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 50^\circ\text{C/s}$	232
Figura 147–Compressão diametral de cilindro solidificado: dados do exemplo	233
Figura 148–Compressão diametral de cilindro solidificado: (a) Coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo	234
Figura 149–Compressão diametral de cilindro solidificado: configurações deformadas para o material hiperelástico, com σ_{11} em mapa de cores	235
Figura 150–Compressão diametral de cilindro solidificado: configurações deformadas para o PTFE, com σ_{11} em mapa de cores	235
Figura 151–Compressão diametral de esfera solidificada: dados geométricos e condições de contorno	236
Figura 152–Compressão diametral de esfera solidificada: (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo para $\alpha = 0$	237
Figura 153–Compressão diametral de esfera solidificada: (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo para $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$	237

Figura 154 – 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	237
Figura 155 – 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	238
Figura 156 – 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	238
Figura 157 – 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	238
Figura 158 – Derretimento de coluna 2D: dados do exemplo	239
Figura 159 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes malhas, com $\alpha = 0$ e multiplicadores quárticos	240
Figura 160 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com fases em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 0$, e multiplicadores quárticos	241
Figura 161 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com pressões (Pa) em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 0$, e multiplicadores quárticos	241
Figura 162 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores, com $\alpha = 0$ e malha 12x24	242
Figura 163 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores, com $\alpha = 10^{-4} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ e malha 12x24	243
Figura 164 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com pressões (Pa) em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 10^{-4} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, e multiplicadores quárticos	243
Figura 165 – Derretimento de coluna 3D: dados do exemplo	244
Figura 166 – Derretimento de coluna 3D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores	245
Figura 167 – Derretimento de coluna 3D: configurações deformadas com multiplicadores quárticos, e fases em mapa de cores	245
Figura 168 – Derretimento de coluna 3D: configurações deformadas com multiplicadores quárticos, e pressão (Pa) em mapa de cores	246
Figura 169 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: dados do exemplo	247
Figura 170 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa líquida do problema, com pressão (Pa) em mapas de cores	247

Figura 171–Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa de mudança de fase do problema, com fases indicadas em mapas de cores	248
Figura 172–Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa pós-solidificação do problema, com pressão (Pa) em mapas de cores	248
Figura 173–Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para o caso puramente sólido, com pressão (Pa) em mapas de cores	249
Figura 174–Moldagem de material elasto-plástico solidificado: (a) Tensão de Cauchy em A e (b) coordenadas x_2 em B ao longo do tempo	249

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros do modelo viscoelástico-viscoplástico calibrados para o politetrafluoretileno	99
Tabela 2 – Dependência de malha para o cilindro parcialmente comprimido sob fluência	107
Tabela 3 – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência	108
Tabela 4 – Parâmetros térmicos utilizados para o material politetrafluoretileno (PTFE)	119
Tabela 5 – Parâmetros calibrados dos modelos hiperelásticos	128
Tabela 6 – Funções paramétricas polinomiais	130
Tabela 7 – Funções paramétricas sigmóides	131
Tabela 8 – Parâmetros do modelo viscoelástico para o material Adiprene-L100	132
Tabela 9 – Pontos de interpolação para $p(\theta)$ e $q(\theta)$	142
Tabela 10 – Parâmetros do material <i>Mild Steel Ck15</i> , retirados de Heeres, Suiker e Borst (2002)	172
Tabela 11 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos de curva sujeitos a tensão superficial, utilizando 20 pontos de integração da quadratura de Gauss	189
Tabela 12 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos triangulares sujeitos a tensão superficial, utilizando 79 pontos de integração da quadratura de Dunavant	190
Tabela 13 – Pontos de integração selecionados para tensão superficial em diversos tipos de elementos, utilizando o critério $e < 10^{-3}$	192
Tabela 14 – Coeficiente de ponderação para a parcela latente do calor específico	211
Tabela 15 – Modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido	224
Tabela 16 – Parâmetros do material utilizado nas análises de problemas locais com mudança de fase	229

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase sólida ($\theta \leq \theta_s$)	219
Quadro 2 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase líquida ($\theta \geq \theta_\ell$)	221
Quadro 3 – Resumo esquemático do modelo constitutivo mecânico para a fase de transição ($\theta_s < \theta < \theta_\ell$)	227

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	29
1.1	Objetivos	30
1.2	Justificativa	30
1.3	Estado da arte	31
1.3.1	Mecânica dos sólidos computacional	31
1.3.2	Modelos viscoelástico-viscoplásticos	32
1.3.3	Transferência de calor e modelos termomecânicos	33
1.3.4	Modelos numéricos de contato	35
1.3.5	Dinâmica dos fluidos computacional	36
1.3.6	Mudança de fase	38
1.4	Metodologia	39
2	MECÂNICA DO CONTÍNUO	43
2.1	Cinemática dos corpos deformáveis	43
2.1.1	Medidas de deformação	44
2.1.2	Fórmulas da mudança de volume e área	45
2.1.3	Princípio da conservação da massa	45
2.2	Equilíbrio	46
2.2.1	Energia de deformação	47
2.2.2	Energia cinética	47
2.2.3	Energia potencial das forças externas	48
2.3	Método dos elementos finitos aplicado ao problema mecânico .	48
2.3.1	Discretização espacial	48
2.3.2	Equações de equilíbrio	49
2.3.3	Integração temporal - Método de Newmark- β	50
2.3.4	Linearização das equações de equilíbrio	51
3	TERMODINÂMICA E TRANSFERÊNCIA DE CALOR	53
3.1	Primeira lei da termodinâmica	53
3.2	Segunda lei da termodinâmica	55
3.3	Energia livre de Helmholtz	55
3.4	Equação da condução de calor	56
3.4.1	Lei de Fourier	58
3.4.2	Condição de convecção	59
3.5	Método dos elementos finitos aplicado ao problema térmico . .	60
3.5.1	Exemplo numérico: problema puramente térmico	61

4	MODELO TERMO-ELÁSTICO	65
4.1	Modelos constitutivos hiperelásticos	65
4.1.1	Modelo de Saint Venant-Kirchhoff	65
4.1.2	Modelo Neo-Hookeano	66
4.1.3	Modelo Neo-Hookeano aprimorado	67
4.1.4	Modelo de Blatz-Ko	67
4.1.5	Estado plano de deformação e de tensão	67
4.2	Base termodinâmica	68
4.3	Decomposição aditiva	69
4.4	Decomposição multiplicativa	72
4.4.1	Equivalência entre leis de expansão térmica	75
4.5	Equação termo-elástica da condução de calor	76
4.6	Solução numérica da termo-elasticidade	76
4.6.1	Acoplamento termomecânico	77
4.7	Exemplos numéricos	77
4.7.1	Cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos	78
4.7.2	Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura	80
4.7.3	Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento	82
4.7.4	Cubo sob deformações térmicas excessivas	84
5	MODELO VISCOELÁSTICO-VISCOPLÁSTICO	87
5.1	Cinemática	88
5.2	Energia, tensão e dissipação	88
5.3	Critério de escoamento e leis de evolução	90
5.4	Solução numérica	92
5.5	Operador tangente consistente	94
5.6	Definição da energia livre de Helmholtz	95
5.7	Aplicação ao material politetrafluoretileno (PTFE)	96
5.7.1	Definição dos parâmetros	96
5.7.2	Ensaio de relaxação	101
5.7.3	Ensaio de fluência	101
5.7.4	Cilindro parcialmente comprimido	103
5.7.4.1	Ensaio de fluência: análise de dependência de malha	104
5.7.4.2	Ensaio de fluência: análise de dependência do passo de tempo	107
6	MODELO TERMO-VISCOELÁSTICO-VISCOPLÁSTICO	111
6.1	Cinemática	111
6.2	Energia, tensão e dissipação	112
6.3	Operador tangente consistente	116
6.4	Equação da condução de calor	116
6.5	Exemplos numéricos aplicados ao PTFE	118

6.5.1	Ensaios de carregamento monotônico	119
6.5.2	Cubo parcialmente carregado	120
6.6	Modelo com viscosidade aprimorada	123
6.7	Aplicação de modelo termo-viscoelástico: Adiprene-L100	126
6.7.1	Problemas puramente mecânicos	126
6.7.1.1	Correlações com modelos puramente hiperelásticos	127
6.7.1.2	Definição das funções paramétricas e do coeficiente de viscosidade	128
6.7.1.3	Análise de convergência para a integração numérica	131
6.7.1.4	Validação com ensaios de deformação monotônica à temperatura ambiente	135
6.7.1.5	Validação com curvas de relaxação adicionais	138
6.7.1.6	Validação com ensaio de salto na taxa de deformação	140
6.7.2	Problemas termomecânicos	141
6.7.2.1	Ensaios de deformação monotônica em diferentes temperaturas	141
6.7.2.1.1	Temperaturas constantes - calibração	141
6.7.2.1.2	Ensaios adiabáticos	146
6.7.2.2	Cubo parcialmente carregado	150
6.7.2.3	Convergência	151
6.7.2.3.1	Análises com diferentes temperaturas iniciais	156
7	MODELO NUMÉRICO DE CONTATO	161
7.1	Discretização pelo método nó-a-superfície	162
7.2	Detecção do contato	163
7.3	Imposição das condições de contato	163
7.3.1	Contato sem atrito	164
7.3.2	Contato com atrito de Coulomb	165
7.3.2.1	Condição de aderência	166
7.3.2.2	Condição de deslizamento	167
7.4	Exemplos numéricos	168
7.4.1	Contato entre cilindro e bloco hiperelástico	168
7.4.2	Contato entre esfera e bloco hiperelástico	169
7.4.3	Contato entre lajes em balanço	170
7.4.4	Dobramento simples de chapa metálica	172
7.4.5	Dobramento direcionado (<i>draw bending</i>) de barra metálica	173
7.4.6	Extrusão	176
8	SÓLIDOS E FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS	179
8.1	Formulação mista do MEF para materiais incompressíveis	179
8.1.1	Discretização do problema	180
8.1.2	Formulação estabilizada	181
8.2	Sólidos incompressíveis	183
8.2.1	Exemplo numérico: cubo hiperelástico com tensão uniaxial	183

8.3	Fluidos Newtonianos incompressíveis	185
8.3.1	Tensão superficial	187
8.3.1.1	Forças resultantes em elementos isolados e análise de pontos de integração	189
8.3.2	Exemplos numéricos de escoamentos de fluidos	193
8.3.2.1	<i>Sloshing</i> de pequena amplitude	193
8.3.2.2	Colapso de barragem sob superfície lisa	193
8.3.2.3	Fluido sob tensão superficial: caso 2D	196
8.3.2.4	Fluido sob tensão superficial: caso 3D	202
9	MUDANÇA DE FASE	205
9.1	Formulação puramente térmica	205
9.1.1	Modelo de mudança de fase não-isotérmica	207
9.1.2	Implementação numérica	209
9.1.3	Exemplo de verificação: solidificação de chapa ao longo de um eixo	211
9.2	Formulação termomecânica	212
9.2.1	Cinemática	213
9.2.2	Base termodinâmica	214
9.2.3	Modelo constitutivo da fase sólida	217
9.2.4	Modelo constitutivo da fase líquida	219
9.2.5	Modelo constitutivo da fase de transição	221
9.2.5.1	Definição dos multiplicadores sólido e líquido	223
9.2.5.2	Implementação numérica	225
9.2.6	Equação da condução de calor	227
9.2.7	Exemplos numéricos	228
9.2.7.1	Problema local de deformação monotônica com solidificação	228
9.2.7.2	Problema local de deformação monotônica com fusão	231
9.2.7.3	Compressão diametral de cilindro solidificado	232
9.2.7.4	Compressão diametral de esfera solidificada	235
9.2.7.5	Derretimento de coluna: caso 2D	238
9.2.7.6	Derretimento de coluna: caso 3D	244
9.2.7.7	Moldagem de material elasto-plástico solidificado	246
10	CONCLUSÃO	251
10.1	Modelo viscoelástico-viscoplástico	251
10.2	Modelos constitutivos termomecânicos	252
10.3	Problemas de contato	254
10.4	Materiais incompressíveis	255
10.5	Mudança de fase	255
10.6	Continuidade da pesquisa e sugestões para trabalhos futuros	257
	REFERÊNCIAS	259

Capítulo 1

Introdução

O recente avanço nos processos de manufatura aditiva (impressão 3D) motiva o estudo de modelos termomecânicos 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 mecânica, extrusão, forjamento e fundição de metais.

Com essa motivação, propõe-se o desenvolvimento e a implementação de um modelo numérico para a análise de problemas termomecânicos, 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 em conta também os campos da mecânica dos fluidos e das ciências térmicas. Para permitir uma maior gama de aplicações, faz-se necessário o desenvolvimento de modelos constitutivos inelásticos para grandes deformações, incluindo modelos termo-viscoelástico-viscoplásticos. Trata-se, portanto, de uma proposta abrangente, com contribuições que focam tanto na análise multifísica quanto na simulação de problemas não lineares complexos da mecânica dos sólidos.

Para esse fim, desenvolve-se um código computacional cuja principal ferramenta numérica é o método dos elementos finitos (MEF), utilizando como ponto de partida os desenvolvimentos de [Carvalho \(2019\)](#). 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 ([CODA, 2018](#)). Nos casos de materiais incompressíveis, adota-se uma formulação mista baseada em posições e pressões, conforme detalhado por [Avancini e Sanches \(2020\)](#). O código é continuamente aprimorado ao longo da pesquisa, incorporando os diversos modelos desenvolvidos.

Neste capítulo, são apresentadas as informações gerais do trabalho, incluindo objetivos, justificativa, estado da arte e metodologia. 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 total para a simulação termomecânica 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 (CARVALHO, 2019), do 2D para o 3D;
- 2) Desenvolvimento e implementação de acoplamento termomecânico no programa desenvolvido, com modelos constitutivos termo-elásticos e termo-viscoelástico-viscoplásticos;
- 3) Calibração e validação dos modelos constitutivos de sólidos 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 demandarem muito tempo. Já as soluções analíticas, quando disponíveis, estão restritas a casos muito específicos, onde o modelo pode contar com hipóteses simplificadoras. Dessa forma, a alternativa numérica se destaca pela sua generalidade e praticidade. Com os recursos computacionais em crescente desenvolvimento, essas análises tornam-se cada vez mais viáveis, proporcionando maior rapidez e exatidão na simulação de problemas nas mais diversas esferas científicas.

No contexto da simulação de materiais viscoelástico-viscoplásticos submetidos a grandes deformações, mudança de fase devido à 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 essas aplicações, a conformação mecânica, extrusão, laminação, forjamento 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, como a temperatura ideal, de modo a obter um produto de melhor qualidade. Pode-se citar também as aplicações no campo da balística,

onde o objeto de estudo é o impacto de projéteis em altas temperaturas e velocidades com meios fluidos ou sólidos.

Outro desenvolvimento que vem sendo impulsionado nos últimos anos e que aumenta a demanda pelo tema é a tecnologia de manufatura aditiva, ou impressão 3D, que vem revolucionando o mercado pela sua grande versatilidade, sendo utilizada para fabricar desde pequenos objetos até estruturas altamente complexas.

Este trabalho justifica-se não apenas por oferecer uma ferramenta computacional para a simulação realista dos diversos processos de fabricação mencionados e de outros problemas termomecânicos, mas também por contribuir para o desenvolvimento teórico dos 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 em análises de sólidos e estruturas, e que também tem sido aplicada em diversos outros âmbitos científicos, é o Método dos Elementos Finitos (MEF). 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 [Turner et al. \(1956\)](#) e [Turner, Dill e Martin \(1960\)](#). Entretanto, de acordo com [Bathe \(2006\)](#), o termo “Método dos elementos finitos” foi cunhado apenas em [Clough \(1960\)](#).

Desenvolvido inicialmente no contexto de problemas lineares com pequenos deslocamentos, o método foi rapidamente estendido para casos com grandes deslocamentos, considerando uma análise não-linear geométrica. Entre alguns trabalhos clássicos que contribuíram para o desenvolvimento do método no cenário não-linear, podem ser citados, por exemplo, [Bathe, Ramm e Wilson \(1975\)](#), [Argyris et al. \(1979\)](#), [Crisfield \(1997\)](#), [Bonet e Wood \(1997\)](#) e [Zienkiewicz e Taylor \(2005\)](#). As bases da mecânica dos sólidos não linear são amplamente discutidas nos trabalhos de [Ogden \(1997\)](#) e [Holzapfel \(2000\)](#), em uma perspectiva mais abrangente, não limitada ao MEF.

Uma das estratégias mais utilizadas para a análise de problemas com não-linearidades geométricas é a formulação corrotacional ([BELYTSCHKO; SCHWER; KLEIN, 1977](#); [ARGYRIS, 1982](#); [CRISFIELD, 1990](#); [CAMPELLO; PIMENTA; WRIGGERS, 2011](#)). Para lidar com as não-linearidades associadas a grandes rotações e deslocamentos, esta abordagem separa os movimentos de corpo rígido das deformações internas do material, utilizando um sistema de referência local que ajusta-se à rotação da estrutura. São utilizados como parâmetros do problema os deslocamentos e rotações nodais. Contudo,

devido à não comutatividade das rotações, a aplicação dessa formulação requer técnicas adicionais de aproximação, como as fórmulas de Euler-Rodrigues (CAMPELLO; PIMENTA; WRIGGERS, 2003; PIMENTA; CAMPELLO; WRIGGERS, 2004).

Coda (2003) apresenta uma formulação totalmente Lagrangiana do MEF que utiliza como parâmetros nodais as posições dos nós a partir de um eixo de coordenadas fixo, ao invés dos deslocamentos, como é feito tradicionalmente. Uma abordagem semelhante pode ser encontrada em Bonet et al. (2000). Esse método possui as vantagens de considerar naturalmente a não linearidade geométrica, ser construído diretamente sobre o conceito isoparamétrico, e proporcionar uma implementação computacional didaticamente simples. Uma descrição detalhada da formulação pode ser encontrada em Coda (2018).

Vários trabalhos que atestam a confiabilidade do método dos elementos finitos baseado em posições podem ser citados. Em Coda e Greco (2004), ele é aplicado na análise estática de pórticos bidimensionais sob grandes deslocamentos. Já em Greco et al. (2006), utilizam-se elementos de treliças espaciais com modelo constitutivo elasto-plástico. Em Greco e Coda (2006), foi considerada a análise dinâmica 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 Coda e Paccola (2009) e Sanches e Coda (2013), onde é mostrada uma prova da conservação da quantidade de movimento.

1.3.2 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 Lammens et al. (2017) 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 Lai e Bakker (1995) para o polietileno de alta densidade (PEAD), e em Khan e Zhang (2001), Rae e Dattelbaum (2004) e Rae e Brown (2005) 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 Frank e Brockman (2001), Kim e Muliana (2009) e Miled, Doghri e Delannay (2011), 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 Kröner (1960) e Lee (1969). 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 Haupt (1985), Simo (1992), Khan e Huang (1995), Simo e Hughes (2000) e Rubert (1997). Destaca-se ainda o trabalho de Mandel (1973), que serviu como ponto de partida para modelos Lagrangianos baseados

na segunda lei da termodinâmica, como os de Svendsen (1998), Svendsen et al. (1998), Dettmer e Reese (2004) e Pascon e Coda (2013a). Em relação ao problema viscoplástico, podem ser citados os trabalhos de Ibrahimbegović e Chorfi (2000), Mähler, Ekh e Runesson (2001) e Garino et al. (2013), onde são feitas generalizações dos modelos de Perzyna (1966) e/ou de Duvaut e Lions (1976) 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 Reese e Govindjee (1997), Huber e Tsakmakis (2000), Petiteau et al. (2013) e Pascon e Coda (2017). Nesses, as deformações viscosas são tratadas como variáveis internas, em contraste aos modelos de convolução, onde o comportamento viscoso é descrito por meio de integrais hereditárias (SIMO, 1987; LEMAITRE; CHABOCHE, 1985; HOLZAPFEL, 1996; LEMAITRE, 2001).

Nos modelos viscoelástico-viscoplásticos, pode-se realizar a decomposição multiplicativa entre as parcelas viscoelásticas e viscoplásticas. Tal estratégia é aplicada, por exemplo, nos trabalhos de Nguyen et al. (2016) e Gudimetla e Doghri (2017), sendo nesse último utilizada uma formulação termodinâmica. Já no trabalho de Perić e Dettmer (2003), 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 Holmes, Loughran e Suehrcke (2006), Pouriayevali et al. (2013) e Abdul-Hameed et al. (2014). O comportamento viscoelástico-viscoplástico também é estudado em materiais do tipo asfáltico (DRESCHER; KRINGOS; SCARPAS, 2010; DARABI et al., 2011), materiais com *self-healing* (SHAHSAVARI et al., 2016), e até mesmo em materiais metálicos sob altas temperaturas (BENAARBIA; ROUSE; SUN, 2018).

Por fim, observações devem ser feitas com relação aos efeitos de Bauschinger e *Ratcheting* (CHABOCHE, 1986; MOLLICA; RAJAGOPAL; SRINIVASA, 2001; OLIVEIRA et al., 2007), 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 (ARMSTRONG; FREDERICK, 1966). Uma generalização desse modelo ao caso de grandes deformações é feita por Lion (2000), onde propõe-se a separação dos efeitos na micro-estrutura do material utilizando a decomposição multiplicativa. Essa estratégia é utilizada também nos trabalhos de Vladimirov, Pietryga e Reese (2007), Vladimirov, Pietryga e Reese (2010) e Brepols, Vladimirov e Reese (2014), aplicada a modelos elasto-plásticos.

1.3.3 Transferência de calor e modelos termomecânicos

As origens do estudo de condução térmica se devem a Fourier (1822), Duhamel (1837a) e Duhamel (1837b), 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 [Biot \(1956\)](#), 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 [Dillon \(1962\)](#), 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 [Truesdell et al. \(2004\)](#), [Parkus \(2012\)](#), [Holzapfel \(2000\)](#) e [Dhondt e Sons \(2004\)](#), 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 [Lienhard \(2011\)](#) e [Lewis, Nithiarasu e Seetharamu \(2004\)](#).

O conceito de decomposição multiplicativa, utilizado até então para tratamento de problemas elasto-plásticos, foi adaptado para os modelos termo-elásticos originalmente em [Stojanović, Djurić e Vujosević \(1964 apud VUJOŠEVIĆ; LUBARDA, 2002\)](#), 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 [Lu e Pister \(1975\)](#) e [Imam e Johnson \(1998\)](#), sendo desenvolvida em [Mićunović \(1974\)](#) e [Vujošević e Lubarda \(2002\)](#), e desde então amplamente aplicada em modelos termo-elásticos de deformações finitas, como por exemplo nos trabalhos de [Wang e Zhao \(2011\)](#), [Sadik e Yavari \(2017\)](#) e [Joulin, Xiang e Latham \(2020\)](#).

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 [Yu, Maniatty e Knorr \(1997\)](#) e [Hartmann \(2012\)](#), sendo no último apresentada 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 ([KAMLAH; HAUPT, 1997](#)). Diversos estudos são direcionados a determinar a porcentagem da taxa de trabalho plástico efetivamente convertida em calor. De acordo com [Rosakis et al. \(2000\)](#), tal porcentagem é tipicamente adotada constante entre 80% e 100%, porém, os experimentos de [Mason, Rosakis e Ravichandran \(1994\)](#) comprovam que essa porcentagem apresenta uma grande dependência da deformação e da taxa de deformação.

Para o caso termo-viscoelástico com grandes deformações, o trabalho de [Reese e Govindjee \(1997\)](#) é um dos pioneiros no desenvolvimento de um modelo totalmente acoplado e termodinamicamente consistente. Formulações com acoplamento entre a plasticidade e o campo térmico, denominadas termo-plásticas, foram apresentadas em [Dillon \(1963\)](#), [Mandel \(1973\)](#) e [Coleman e Owen \(1979\)](#). Nesse último, são empregadas a primeira e a segunda leis da termodinâmica, e utiliza-se a inequação de Clausius-Duhem, conforme abordado por [Coleman e Noll \(1963\)](#). Tal base termodinâmica deu origem ao trabalho de [Green e Naghdi \(1965\)](#), no qual desenvolve-se uma teoria geral de elasto-plasticidade

contínua (LEE; CHEN, 2001), e Coleman e Gurtin (1967), no qual a temperatura é tratada como uma variável interna. Outros exemplos de formulações termodinâmicas que acoplam efeitos térmicos com modelos constitutivos inelásticos podem ser encontrados em Mähler, Ekh e Runesson (2001), Abu Al-Rub e Darabi (2012), Krairi e Doghri (2014) e Krairi et al. (2019). Uma revisão bibliográfica detalhada sobre modelos termomecânicos em geral, incluindo a termo-plasticidade, pode ser encontrada no trabalho de Carrazedo (2009).

1.3.4 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 (JOHNSON, 1987). Entre trabalhos clássicos que moldaram o conhecimento nessa linha de pesquisa, valem ser citados os de Hughes et al. (1976), Chaudhary e Bathe (1986) e Benson e Hallquist (1990).

Em problemas onde pode-se garantir a coincidência das malhas na região do contato, uma das formulações mais simples é a Nó-a-Nó (WRIGGERS, 2006), 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 Hughes et al. (1976) e Hallquist (1979), 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 Wriggers (2006). Outros exemplos de trabalhos que utilizam essa abordagem são Bathe e Chaudhary (1985), Hallquist, Goudreau e Benson (1985), Simo, Wriggers e Taylor (1985) e Papadopoulos e Taylor (1992). 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 Bernardi, Debit e Maday (1990) e foi aperfeiçoado em Bernardi, Maday e Patera (1994), apenas como uma formulação matemática que proporciona uma técnica de compatibilização de domínios, sendo utilizado em problemas de contato primeiramente por Belgacem, Hild e Laborde (1998). 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 Puso e Laursen (2004). 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 Nó-a-Segmento. Entre

outros trabalhos que utilizam o método, podem ser citados [Fischer e Wriggers \(2005\)](#), [Yang, Laursen e Meng \(2005\)](#), [Hartmann e Ramm \(2008\)](#).

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 repentinas 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 [Chaudhary e Bathe \(1986\)](#). Técnicas para resolver essa inconformidade podem ser vistas, por exemplo, em [Carpenter, Taylor e Katona \(1991\)](#), [Taylor e Papadopoulos \(1993\)](#), [Solberg e Papadopoulos \(1998\)](#) e [Hu \(1997\)](#). O último propõe novos parâmetros para o algoritmo de Newmark que levam a resultados estáveis e precisos mesmo para problemas de impacto com altas frequências, desde que utilizados passos de tempo suficientemente pequenos. Entre outros trabalhos que confirmam a eficiência desse estudo, podem ser citados os de [Greco \(2004\)](#), [Marques \(2006\)](#) e [Minski \(2008\)](#).

Quanto ao problema de contato termomecânico, a transferência de calor entre os corpos depende não apenas da área de contato, mas também da pressão de contato atuante. De acordo com [Wriggers \(2006\)](#), 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 [Zavarise, Wriggers e Schrefler \(1995\)](#), 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 [Song e Yovanovich \(1988\)](#), e um modelo simplificado baseado na rigidez de Vickers, presente em [Wriggers \(2006\)](#), ambos dependentes da pressão aplicada. Além disso, para as áreas que não se encontram efetivamente em contato, [Zavarise et al. \(1992\)](#) considera modelos de transferência de calor por radiação e condução através do ar.

1.3.5 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 [Zienkiewicz e Taylor \(2000\)](#), 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 [Dick \(2009\)](#), 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 devido aos termos

convectivos, e, nos casos onde a convecção é dominante, implica no aparecimento de variações espúrias nas variáveis transportadas (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000; BROOKS; HUGHES, 1982). 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) Brooks e Hughes (1982) 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 resistência às tensões de cisalhamento, podendo deformar-se indefinidamente. Isso resulta em métodos que utilizam malhas de elementos finitos fixas no espaço (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000; DICK, 2009; BAZILEVS; TAKIZAWA; TEZDUYAR, 2013). Assim, para que sejam simulados problemas com contornos móveis, são necessárias técnicas alternativas, tais como a descrição Lagrangiana-Euleriana Arbitrária (DONEA; GIULIANI; HALLEUX, 1982; FERNANDES; CODA; SANCHES, 2018) ou as formulações espaço-tempo (BAZILEVS; TAKIZAWA; TEZDUYAR, 2013; TEZDUYAR; BEHR; LIOU, 1992). Para problemas com mudanças topológicas que não podem ser acomodadas pela malha, como separação ou junção de subdomínios, uma alternativa ainda no contexto Euleriano é a técnica de contornos imersos (PESKIN, 1972), onde as interfaces podem se mover dentro da malha, sendo mapeadas por funções do tipo *Level-Set*.

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 Bach e Hassager (1985), é apresentada uma abordagem Lagrangiana utilizando velocidades e pressões como parâmetros nodais. Uma formulação similar é apresentada em Ramaswamy e Kawahara (1987), sendo aplicada a problemas de colapso de barragem, oscilações não-lineares, e instabilidade de Rayleigh-Taylor. No trabalho de Radovitzky e Ortiz (1998) é considerada ainda uma estratégia de remalhamento para contornar o problema de distorções excessivas na malha. Mais recentemente, em Avancini e Sanches (2020), 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 com maiores distorções, incluindo mudanças topológicas, tornam-se convenientes as abordagens que tratam o fluido como um conjunto de partículas interagindo entre si. O trabalho de Gingold e Monaghan (1977) 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 Koshizuka e Oka (1996). 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 (LANCASTER;

SALKAUSKAS, 1981), como o *Hp Clouds* (DUARTE; ODEN, 1996).

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 Idelsohn, Oñate e Pin (2004). 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 Idelsohn et al. (2006), o PFEM foi aplicado a problemas de interação fluido-estrutura, contando com uma técnica simples denominada *alpha-shape* para reconhecimento do contato. Em Aubry, Idelsohn e Oñate (2005), o método é utilizado para casos incluindo condução e difusão térmica, e em Idelsohn, Mier-Torrecilla e Oñate (2009) para fluidos heterogêneos, mostrando excelentes resultados.

Em Idelsohn et al. (2008), 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 Franci, Oñate e Carbonell (2016), tal técnica é estendida, tratando o domínio sólido com o MEF tradicional. A formulação unificada é aplicada também em Franci et al. (2017) para problemas de interação fluido-estrutura envolvendo efeitos termomecânicos e mudança de fase.

Originalmente, o PFEM utiliza uma abordagem baseada em velocidade e pressão, tendo sido adaptada para posição e pressão nos trabalhos de Avancini (2018), Avancini (2024) e Avancini et al. (2024). Essa nova estratégia oferece diversas vantagens, destacando-se pela maior facilidade de acoplamento monolítico com sólidos, os quais tradicionalmente empregam abordagens baseadas em deslocamento ou posição.

1.3.6 Mudança de fase

O estudo da mudança de fase 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 denominada problema de contornos 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 (CRANK, 1987). Esse problema é caracterizado por um conjunto de condições de contorno aplicadas na interface entre as fases, que garantem a continuidade do domínio.

Do ponto de vista puramente térmico, o problema da mudança de fase é bem consolidado na literatura. Diversas estratégias numéricas de solução são frequentemente utilizadas, como o método das diferenças finitas (SHAMSUNDAR; SPARROW, 1975), o método dos elementos de contorno (O'NEILL, 1983), o método dos elementos finitos (SALCUDEAN; ABDULLAH, 1988; VOLLER; SWAMINATHAN; THOMAS, 1990), e o método dos elementos finitos estendido (CHESSA; SMOLINSKI; BELYTSCHKO, 2001). Nesse último,

a descontinuidade das fases é representada em termos de parâmetros nodais adicionais. Também podem ser citados trabalhos baseados em métodos de movimentação de malha, como o de [Albert e O'Neill \(1986\)](#).

Enquanto nas formulações clássicas de transferência de calor a temperatura é geralmente a variável principal do sistema, no contexto de mudança de fase são comuns abordagens que utilizam a entalpia como a variável principal ([ROLPH; BATHE, 1982](#); [NEDJAR, 2002](#)). Ainda assim, formulações baseadas em temperatura também são encontradas em estudos de mudança de fase, como no trabalho de [Celentano, Oñate e Oller \(1994\)](#). Outra abordagem que também utiliza o conceito de entalpia é o método baseado em termos-fonte ([REDDY; REDDY, 1992](#)).

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 [Baldoni e Rajagopal \(1997\)](#), considerando, além da condução térmica, os efeitos convectivos do fluido. Nesse, o fluido é considerado Newtoniano e o sólido elástico.

Entre formulações termomecânicas que incluem aplicações numéricas, podem ser citados os trabalhos de [Zabaras e Ruan \(1990\)](#), onde foi aplicada uma técnica de remalhamento; e [Celentano, Oller e Oñate \(1996\)](#), [Koric, Hibbeler e Thomas \(2009\)](#) e [Cervera, Saracibar e Chiumenti \(1999\)](#), aplicados à solidificação de metais fundidos. No último, a fase líquida é tratada como um material viscoelástico degenerado, seguindo o modelo de Norton. Outras referências em mudança de fase termomecânica incluem os trabalhos de [Frémond \(2012\)](#) e [Vasilyeva, Ammosov e Vasil'ev \(2021\)](#).

Devido à sua capacidade de modelar problemas com grandes variações topológicas, o Método dos Elementos Finitos e Partículas (PFEM) é frequentemente aplicado a problemas de fusão e propagação de polímeros e materiais termoplásticos em incêndios, como nos trabalhos de [Oñate, Rossi e Idelsohn \(2009\)](#), [Oñate et al. \(2010\)](#) e [Oñate et al. \(2013\)](#). Outras aplicações do PFEM ao problema da mudança de fase incluem os trabalhos de [Bobach et al. \(2021\)](#) e [Franci et al. \(2017\)](#), sendo esse último aplicado à simulação do derretimento do núcleo de reatores nucleares. Nesse, utiliza-se uma formulação denominada “unificada” para tratamento de problemas de interação fluido-estrutura. 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.

1.4 Metodologia

Utiliza-se como ponto de partida o trabalho de mestrado de [Carvalho \(2019\)](#), no qual foi desenvolvido um código computacional para mecânica dos sólidos não linear, em linguagem Fortran e baseado no Método dos Elementos Finitos. Esse código incorporou a análise de sólidos sob grandes deslocamentos, grandes deformações e contato, incluindo modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico. Neste trabalho, ele foi transcrito 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 ordens de aproximação linear, quadrática e cúbica.

Assim como em [Carvalho \(2019\)](#), utiliza-se como base para as implementações deste trabalho a formulação do Método dos Elementos Finitos baseada em posições, conforme descrita em [Coda \(2018\)](#). Tendo sido desenvolvida originalmente no contexto de sólidos, esse método foi estendido para o caso de fluidos incompressíveis em [Avancini e Sanches \(2020\)](#), 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 termomecânicos 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 ([KRÖNER, 1960](#); [LEE, 1969](#)), 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 interpenetração 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 termomecânica 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 *softwares* e bibliotecas de código aberto em ambiente Linux. A linguagem C++ mostra-se adequada para as implementações deste trabalho, pelo seu desempenho ([ROBISON, 1996](#)), e por ser orientada a objeto, facilitando a modularidade e a organização do código, o que é vantajoso para

problemas multifísicos e com múltiplas variações de modelos constitutivos.

Para a solução dos sistemas lineares, emprega-se a biblioteca PETSc ([BALAY et al., 2023](#)), que é otimizada para desempenho em arquiteturas paralelas, oferecendo uma ampla gama de *solvers* e preconditionadores adequados às características específicas de cada problema. Para geração de malhas, visualização de pós-processamento e geração de gráficos, são utilizados, respectivamente, os *softwares* *Gmsh* ([GEUZAINÉ; REMACLE, 2009](#)), *ParaView* ([AYACHIT, 2015](#)) e *Gnuplot* ([WILLIAMS; KELLEY, 2013](#)).

Capítulo 2

Mecânica do contínuo

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 no caso da descrição Lagrangiana total); e a Euleriana, ou espacial, onde toma-se como referência a configuração deformada atual do corpo.

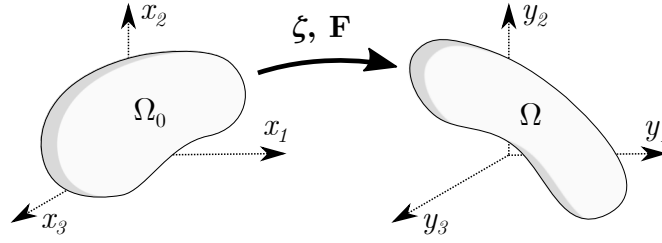
Neste trabalho, opta-se por utilizar a descrição Lagrangiana total, por ser mais adequada para tratar problemas de sólidos, especialmente em modelos constitutivos complexos, onde o histórico de deformações a partir da configuração indeformada é importante. Para fluidos, embora formulações Eulerianas sejam mais comumente utilizadas, a descrição Lagrangiana também se mostra adequada em problemas de superfície livre com deformações finitas, que são o foco deste trabalho. Maiores detalhes sobre os temas abordados neste capítulo podem ser encontrados em [Ogden \(1997\)](#), [Bonet e Wood \(1997\)](#), [Holzapfel \(2000\)](#) e [Coda \(2018\)](#).

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

Fonte: Carvalho (2019)

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:

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

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

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, tem-se $\mathbf{C} = \mathbf{F} = \mathbf{I}$ e $\mathbf{E} = \mathbf{0}$. Outra característica conveniente do tensor de Green-Lagrange é que, para pequenas deformações, ele 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

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

e o ponto sobrescrito ($\dot{}$) indica derivada no tempo.

Outra grandeza de particular utilidade neste trabalho é o gradiente da velocidade da mudança de configuração, definido por $\mathbf{L} = \nabla \cdot \dot{\boldsymbol{\zeta}}$, onde ∇ denota o gradiente com relação à configuração atual. Apesar de ser uma grandeza Euleriana, ele pode ser escrito em termos de \mathbf{F} pela seguinte relação:

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

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 $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$, é denominado taxa de deformação Euleriana, enquanto \mathbf{W} é denominado tensor taxa de rotação, ou vorticidade, também uma medida Euleriana. 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, $J = \det \mathbf{F}$ deve ser estritamente maior que zero. Caso contrário, ocorre 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 a 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 [Holzapfel \(2000\)](#) e [Ogden \(1997\)](#).

2.1.3 Princípio da conservação da massa

Outra propriedade que deve ser observada no equacionamento dos problemas mecânicos, e que auxilia a conversão entre equações Lagrangianas e Eulerianas, 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) devem ter a mesma massa. Assim, denotando

por dm a massa de um volume infinitesimal, e aplicando a fórmula da mudança de volume, resulta:

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

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 estacionariedade da energia mecânica implica que a condição de equilíbrio é obtida quando a primeira variação do funcional é nula, ou seja

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

Escrevendo Π_{mec} em função do campo de posições atuais (\mathbf{y}), segue que

$$\delta \Pi_{\text{mec}} = \frac{\partial \Pi_{\text{mec}}}{\partial \mathbf{y}} \cdot \delta \mathbf{y} = \left(\frac{\partial \Pi_{\text{def}}}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\partial \Pi_{\text{cin}}}{\partial \mathbf{y}} - \frac{\partial \Pi_{\text{ext}}}{\partial \mathbf{y}} \right) \cdot \delta \mathbf{y} = 0. \quad (2.18)$$

Assim, pela arbitrariedade de $\delta \mathbf{y}$, a condição de equilíbrio se traduz como

$$\frac{\partial \Pi_{\text{def}}}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\partial \Pi_{\text{cin}}}{\partial \mathbf{y}} - \frac{\partial \Pi_{\text{ext}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{0}, \quad (2.19)$$

cujos termos representam, respectivamente, as forças internas, inerciais e externas.

Ademais, a segunda variação de Π_{mec} pode fornecer informações sobre a natureza do equilíbrio: se for positiva, o equilíbrio é estável; se for negativa, é instável; e se for nula, é indiferente.

2.2.1 Energia de deformação

A energia de deformação está relacionada ao trabalho realizado pelas forças internas, sendo definida pela integral

$$\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \Psi dV_0, \quad (2.20)$$

onde Ψ é a densidade de energia de deformação, associada ao modelo constitutivo do material. Uma vez que a formulação descrita é totalmente Lagrangiana, a integral (2.20) é calculada no volume inicial, e, portanto, Ψ é definida por unidade de volume na configuração inicial. A variação da energia de deformação pode ser escrita como

$$\delta\Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \delta\Psi dV_0 = \int_{\Omega_0} \frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{E}} : \delta\mathbf{E} dV_0 = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \delta\mathbf{E} dV_0 = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \delta\mathbf{C} dV_0, \quad (2.21)$$

onde

$$\mathbf{S} = \frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{E}} \quad (2.22)$$

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 (OGDEN, 1997; HOLZAPFEL, 2000), relaciona-lo ao tensor das tensões de Cauchy, $\boldsymbol{\sigma}$, pela expressão:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T, \quad (2.23)$$

de onde pode-se concluir também que \mathbf{S} é simétrico. A relação entre \mathbf{S} e \mathbf{E} estabelecida pela Eq. (2.21) é denominada conjugação energética, isto é, diz-se que \mathbf{S} é conjugado energético de \mathbf{E} .

Como será visto em capítulos posteriores, a energia de deformação é frequentemente decomposta em parcelas volumétricas e isocóricas. Para materiais incompressíveis, a parcela volumétrica é nula. Além disso, para fluidos Newtonianos, a parcela isocórica também é nula, ou seja, não há energia de distorção acumulada, e todo o trabalho associado às forças internas é dissipado. Nesse caso, bem como em outros modelos dissipativos, a tensão \mathbf{S} não é mais obtida pela Eq. (2.22), mas sim a partir das leis da termodinâmica, como será discutido em capítulos posteriores.

2.2.2 Energia cinética

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

$$\Pi_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0, \quad (2.24)$$

onde ρ e ρ_0 são as densidades 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. (2.24) 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:

$$\delta\Pi_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \frac{d}{dt} (\dot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}}) \delta t dV = \int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \dot{\mathbf{y}} \delta t dV_0 = \int_{\Omega_0} \rho_0 \ddot{\mathbf{y}} \cdot \delta \mathbf{y} dV_0, \quad (2.25)$$

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, pode-se escrever a energia potencial das forças externas como

$$\Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y} dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \mathbf{y} dV_0. \quad (2.26)$$

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, segue que:

$$\delta \Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{y} dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{y} dV_0. \quad (2.27)$$

2.3 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 [Coda \(2018\)](#), 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.

2.3.1 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.

Os elementos são definidos em coordenadas adimensionais, denotadas por $\boldsymbol{\xi}$, 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:

$$\boldsymbol{\zeta}_0(\boldsymbol{\xi}) = \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{x}_\alpha, \text{ e} \quad (2.28)$$

$$\boldsymbol{\zeta}_1(\boldsymbol{\xi}) = \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{y}_\alpha, \quad (2.29)$$

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, pode-se 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:

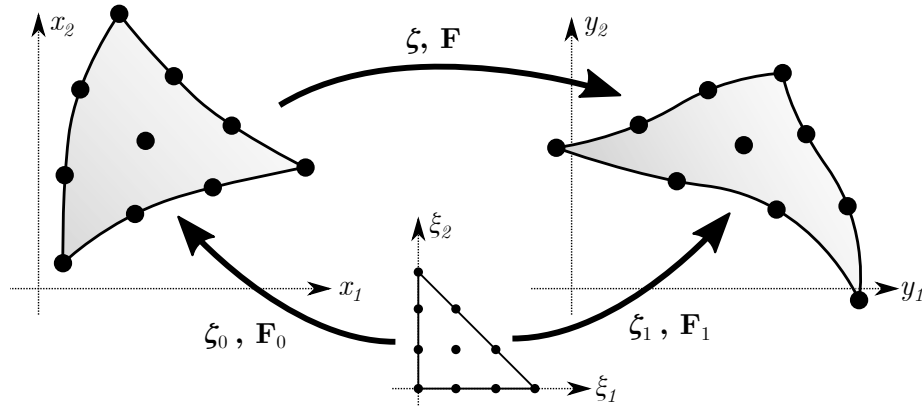
$$\mathbf{F} = \nabla_0 \cdot (\zeta_1 \circ \zeta_0^{-1}) = \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.30)$$

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:

$$\mathbf{F}_0 = \frac{\partial \zeta_0}{\partial \xi} = \mathbf{x}_\alpha \otimes \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \xi}, \text{ e} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{F}_1 = \frac{\partial \zeta_1}{\partial \xi} = \mathbf{y}_\alpha \otimes \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \xi}. \quad (2.32)$$

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



Fonte: [Carvalho \(2019\)](#)

A partir da Eq. (2.30), também pode se escrever a taxa do gradiente da função mudança de configuração como

$$\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}_1 \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.33)$$

onde

$$\dot{\mathbf{F}}_1 = \frac{\partial \dot{\zeta}_1}{\partial \xi} = \dot{\mathbf{y}}_\alpha \otimes \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \xi}. \quad (2.34)$$

Aplicando as Eqs. (2.30) e (2.33) nas Eqs. (2.3) e (2.4), pode-se calcular o tensor de deformação de Green-Lagrange e sua taxa por meio das expressões

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} - \mathbf{I} \right), \text{ e} \quad (2.35)$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\dot{\mathbf{F}}_1^T \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^T \dot{\mathbf{F}}_1 \right) \mathbf{F}_0^{-1} = \text{sim} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \dot{\mathbf{F}}_1^T \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} \right), \quad (2.36)$$

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

2.3.2 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](#), pode-se escreve-la agora 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, toma-se $\delta \mathbf{y} = \varphi_\alpha \delta \mathbf{y}_\alpha$, onde $\delta \mathbf{y}_\alpha$ são os valores nodais das funções ponderadoras. Assim, a variação da energia cinética, Eq. (2.25), pode ser escrita como:

$$\delta \Pi_{\text{cin}} = \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi_\alpha \varphi_\beta \ddot{\mathbf{y}}_\beta \cdot \delta \mathbf{y}_\alpha dV_0. \quad (2.37)$$

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

$$\delta \Pi_{\text{ext}} = \int_{\Gamma} \varphi_\alpha \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{y}_\alpha dS_0 + \int_{\Omega_0} \varphi_\alpha \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{y}_\alpha dV_0. \quad (2.38)$$

Já a variação da energia de deformação pode ser reescrita como

$$\delta \Pi_{\text{def}} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \right) \cdot \delta \mathbf{y}_\alpha dV_0. \quad (2.39)$$

As integrais são calculadas neste trabalho por integração numérica, sendo realizadas no caso das Eqs. (2.38) e (2.39) sobre todos os elementos que contêm o nó α , e no caso da Eq. (2.37) sobre todos os elementos que contêm os nós α e β . Aplicando essas expressões na Eq. (2.17), resulta

$$\left(\mathbf{f}_\alpha^{\text{iner}} + \mathbf{f}_\alpha^{\text{int}} - \mathbf{f}_\alpha^{\text{ext}} \right) \cdot \delta \mathbf{y}_\alpha = 0, \quad (2.40)$$

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

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{iner}} = \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi_\alpha \varphi_\beta \ddot{\mathbf{y}}_\beta dV_0, \quad (2.41)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{int}} = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} dV_0, \quad \text{e} \quad (2.42)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{ext}} = \int_{\Gamma} \varphi_\alpha \mathbf{p} dS_0 + \int_{\Omega_0} \varphi_\alpha \mathbf{b} dV_0, \quad (2.43)$$

Pela arbitrariedade de $\delta \mathbf{y}_\alpha$, a Eq. (2.40) implica que, para cada nó α , a seguinte equação de equilíbrio é válida:

$$\mathbf{g}_\alpha = \mathbf{f}_\alpha^{\text{iner}} + \mathbf{f}_\alpha^{\text{int}} - \mathbf{f}_\alpha^{\text{ext}} = \mathbf{0}, \quad (2.44)$$

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 equação linearizadas são discutidas posteriormente na [subseção 2.3.4](#).

2.3.3 Integração temporal - Método de Newmark- β

O método de Newmark- β (NEWMARK, 1959) 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:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_s + \dot{\mathbf{y}}_s \Delta t + [(1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{y}}_s + 2\beta \ddot{\mathbf{y}}] \frac{\Delta t^2}{2}, \quad \text{e} \quad (2.45)$$

$$\dot{\mathbf{y}} = \dot{\mathbf{y}}_s + (1 - \gamma) \Delta t \ddot{\mathbf{y}}_s + \gamma \Delta t \ddot{\mathbf{y}}, \quad (2.46)$$

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. (2.45) e (2.46), é possível escrever as velocidades e acelerações no passo atual como

$$\dot{\mathbf{y}} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t} \mathbf{y} + \mathbf{r}_s - \gamma \Delta t \mathbf{q}_s \quad \text{e} \quad (2.47)$$

$$\ddot{\mathbf{y}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{y} - \mathbf{q}_s, \quad (2.48)$$

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

$$\mathbf{r}_s = \dot{\mathbf{y}}_s + \Delta t(1 - \gamma) \ddot{\mathbf{y}}_s \quad \text{e} \quad (2.49)$$

$$\mathbf{q}_s = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{y}_s + \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{y}}_s + \left(\frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{y}}_s. \quad (2.50)$$

Substituindo-se a Eq. (2.48) na Eq. (2.41), as forças inerciais podem ser escritas como

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{iner}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi_\alpha \varphi_\beta \mathbf{y}_\beta dV_0 - \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi_\alpha \varphi_\beta \mathbf{q}_s^\beta dV_0. \quad (2.51)$$

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 Hu (1997), onde adotam-se os parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 3/2$.

2.3.4 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. (2.44) com relação aos parâmetros nodais.

Como as forças externas são consideradas conservativas, suas derivadas com relação às posições são nulas. Já as derivadas das forças inerciais são calculadas a partir da Eq. (2.51) como:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_\alpha^{\text{iner}}}{\partial \mathbf{y}_\beta} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \int_{\Omega_0} \rho_0 \varphi_\alpha \varphi_\beta dV_0, \quad (2.52)$$

e as derivadas das forças internas são calculadas a partir da Eq. (2.42) como:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_\alpha^{\text{int}}}{\partial \mathbf{y}_\beta} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha \otimes \mathbf{y}_\beta} + \mathbf{c} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \right) dV_0 \quad (2.53)$$

onde

$$\mathbf{c} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} \right) \quad (2.54)$$

é o operador tangente consistente do modelo constitutivo, já definido para os modelos da seção 4.1. As derivadas da deformação de Green-Lagrange com relação às posições podem ser calculadas pelas seguintes equações:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^T \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \right) \mathbf{F}_0^{-1} = \text{sym} \left(\mathbf{F}_0^{-T} \frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_0^{-1} \right), \quad \text{e} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha \otimes \mathbf{y}_\beta} = \frac{1}{2} \mathbf{F}_0^{-T} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}_\beta} + \frac{\partial \mathbf{F}_1^T}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \right) \mathbf{F}_0^{-1}, \quad (2.56)$$

onde, a partir da Eq. (2.32), segue que

$$\frac{\partial (F_1)_{ij}}{\partial y_k^\alpha} = I_{ik} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \xi_j}. \quad (2.57)$$

Adota-se como critério de parada para o método de Newton-Raphson a condição $\|\{\Delta \mathbf{y}\}\| / \|\{\mathbf{y}\}\| \leq 10^{-6}$, onde $\{\mathbf{y}\}$ é o vetor de posições nodais, $\{\Delta \mathbf{y}\}$ é o vetor de variação das posições nodais entre as iterações, e $\|\cdot\|$ indica a norma L_2 desses vetores.

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 termomecânicos desenvolvidos neste trabalho.

3.1 Primeira lei da termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica, também conhecida como lei da conservação da energia, afirma que a taxa da energia interna de um sistema, somada à taxa da energia cinética, é igual à taxa do trabalho realizado sobre o sistema mais o calor adicionado, isto é:

$$\dot{\Pi}_{\text{int}} + \dot{\Pi}_{\text{cin}} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{y}} dS_0 + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{y}} dV_0 + \Theta, \quad (3.1)$$

onde Π_{int} representa a energia interna do sistema, Π_{cin} representa a energia cinética, definida de acordo com a Eq. (2.24), \mathbf{p} e \mathbf{b} são as forças de contorno e de volume, respectivamente, definidas na subseção 2.2.3, e Θ representa o fluxo de calor absorvido ou liberado pelo sistema.

A energia interna neste contexto não deve ser confundida com a energia de deformação, apresentada na Eq. (2.20), 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:

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

onde e é a densidade Lagrangiana de energia interna, ou energia interna por unidade de volume na configuração inicial.

O termo Θ abrange qualquer calor absorvido ou liberado, tanto internamente quanto por meio da superfície de contorno. Assim, pode-se defini-lo como:

$$\Theta = - \int_{\Gamma} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega_0} r dV_0, \quad (3.3)$$

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 absorvido ou liberado por unidade de volume na configuração inicial.

Alternativamente, aplicando o teorema da divergência na primeira parcela da Eq. (3.3), pode-se escrever

$$\Theta = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.4)$$

Nas Eqs. (3.3) e (3.4), \mathbf{q} e \mathbf{n} são definidos na configuração atual. Para obter uma expressão totalmente Lagrangiana para Θ , pode-se 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), é possível escrever Θ em sua forma totalmente Lagrangiana como:

$$\Theta = - \int_{\Gamma_0} \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_0 dS_0 + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.7)$$

Utilizando novamente o teorema da divergência, isso resulta em:

$$\Theta = - \int_{\Omega_0} \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 dV_0 + \int_{\Omega_0} r dV_0. \quad (3.8)$$

As taxas $\dot{\Pi}_{\text{int}}$ e $\dot{\Pi}_{\text{cin}}$ podem ser facilmente calculadas derivando as equações (3.2) e (2.24), respectivamente, em relação ao tempo. Ao aplicar essas taxas, juntamente com a Eq. (3.8), na Eq. (3.1), pode-se expressar a primeira lei da termodinâmica de forma totalmente Lagrangiana como:

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

Uma forma mais conveniente da Eq. (3.9) pode ser obtida com a aplicação do princípio da taxa de trabalho (PARKUS, 2012). Tal princípio estabelece que a taxa da energia cinética é igual à taxa do trabalho das forças externas e internas. Utilizando as equações (2.21), (2.25) e (2.27), obtém-se:

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

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

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

Pela arbitrariedade do volume, é possível ainda expressá-la na seguinte forma local Lagrangiana:

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

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 algebricamente, 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:

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

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 pode ser entendida como a parcela da densidade de energia interna que pode ser convertida em trabalho útil, sendo utilizada para definir o

modelo constitutivo do material. Ela é definida, por unidade de volume na configuração inicial, como:

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

Quando ψ é escrita apenas em função das medidas de deformação, ela pode ser associada à densidade de energia de deformação Ψ , definida na subseção 2.2.1 (HOLZAPFEL, 2000). Entretanto, no caso geral, ela pode também incluir parcelas que dependem da temperatura, caracterizando o modelo constitutivo tanto do ponto de vista mecânico quanto térmico.

A partir da Eq. (3.18), segue que

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

Aplicando essa expressão na 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:

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

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

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

Para problemas puramente térmicos, onde desprezam-se as deformações e os demais efeitos mecânicos (ou seja, $\Omega_0 = \Omega$), a energia livre de Helmholtz pode ser expressa como uma função apenas da temperatura, isto é, $\psi = \psi(\theta)$. Assim, segue que:

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

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 (COLEMAN; NOLL, 1963). 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, adota-se predominantemente c_v ao longo deste trabalho, para manter a abordagem totalmente Lagrangiana.

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, pode-se definir a energia livre de Helmholtz pela expressão dada em Vujošević e Lubarda (2002):

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

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 equação pode ainda ser escrita em forma variacional ao ser multiplicada por uma função ponderadora $\delta\theta$, isto é:

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

Além disso, integrando-a no volume inicial, ela é escrita 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 termomecânico, 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. (4.24) 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 que haja necessidade de reformular os demais termos da equação.

3.4.2 Condição de convecção

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, tem-se:

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

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:

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

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 2.3](#).

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:

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

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

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

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:

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

onde \mathbf{F}_0 é definido conforme a Eq. (2.31).

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

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

sendo \mathbf{F}_1 definido conforme a Eq. (2.32).

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:

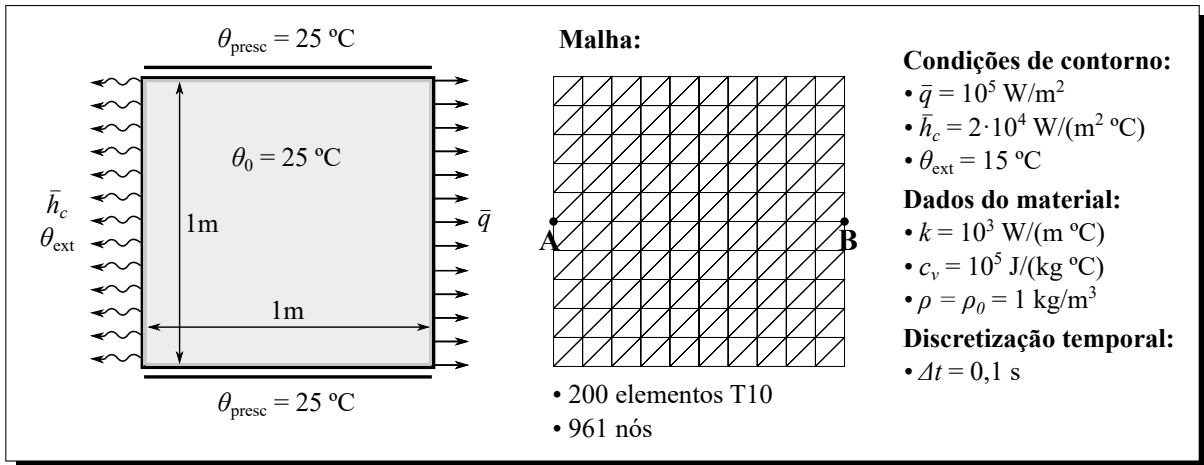
$$(\Delta t^{-1}[\mathbf{C}] + [\mathbf{K}]) \cdot \{\theta\} = \{\mathbf{F}\} + \Delta t^{-1}[\mathbf{C}] \cdot \{\theta\}_{\text{ant}}, \quad (3.63)$$

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

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 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 estão dispostos na [Figura 3](#).

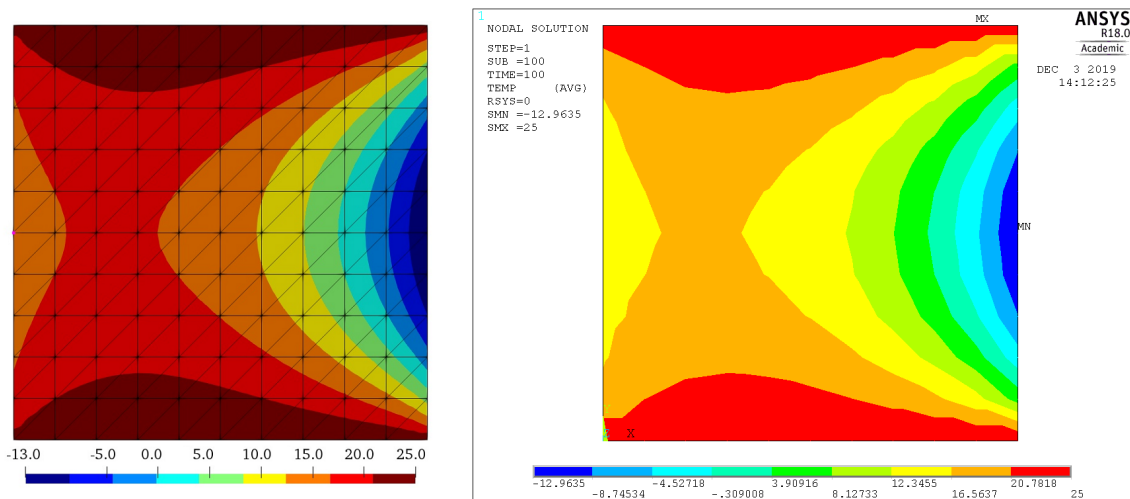
Figura 3 – Dados do exemplo puramente térmico



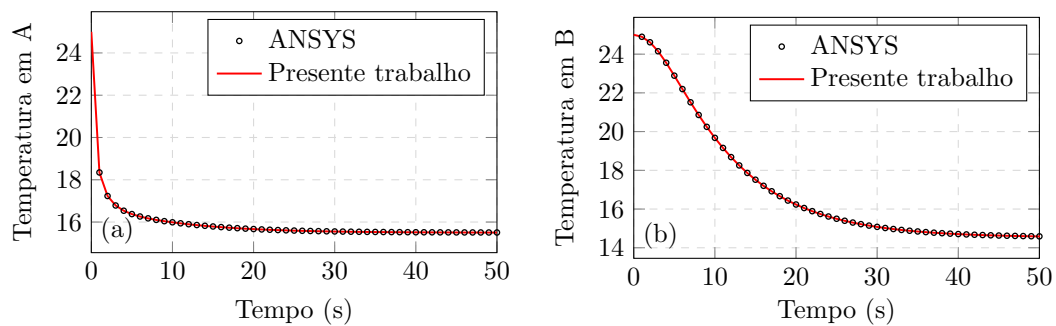
Fonte: Elaborado pelo autor

Os resultados são comparados com resultados obtidos pelo *software* ANSYS, mostrando excelente concordância conforme atestam as Figuras 4 a 6. Na Figura 4, comparam-se 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.

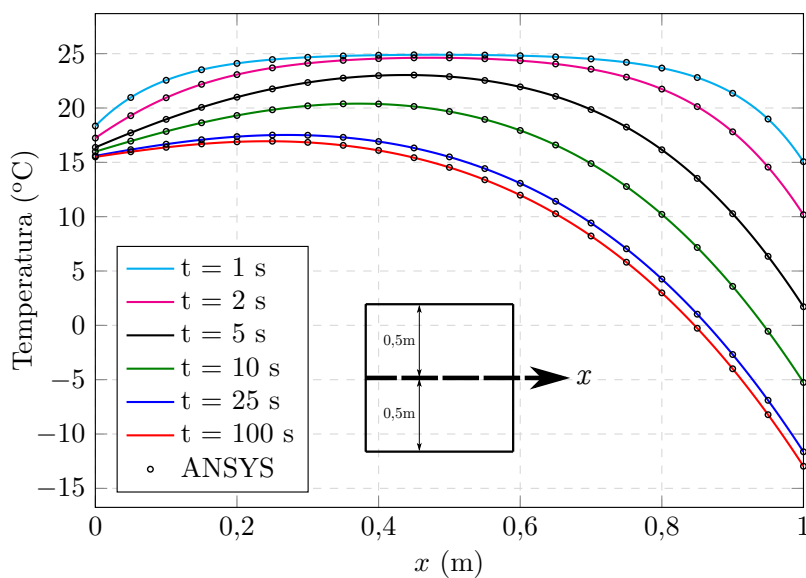
Figura 4 – Comparação entre os campos de temperatura obtidos neste trabalho (à esquerda) e no *software* ANSYS (à direita) para o tempo de análise 100s.



Fonte: Elaborado pelo autor

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

Fonte: Elaborado pelo autor

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

Fonte: Elaborado pelo autor

Capítulo 4

Modelo termo-elástico

Neste capítulo, são tratados modelos com acoplamento termomecânico, 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. Antes de discutir o problema acoplado, são introduzidas algumas variações de modelos hiperelásticos utilizadas ao longo deste trabalho.

4.1 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, ele deriva de uma expressão explícita para Ψ ou ψ , diz-se que o modelo é hiperelástico.

Desconsideram-se, por enquanto, os efeitos térmicos, e analisam-se modelos puramente hiperelásticos, nos quais Ψ é escrito diretamente em função das deformações totais (\mathbf{C} ou \mathbf{E}). Para garantir que a resposta seja independente da escolha de eixos coordenados, escreve-se Ψ em função dos invariantes de \mathbf{C} , definidos como

$$I_1 = \text{tr}(\mathbf{C}), \quad (4.1)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} [\text{tr}(\mathbf{C})^2 - \text{tr}(\mathbf{C}^2)], \quad \text{e} \quad (4.2)$$

$$I_3 = \det(\mathbf{C}), \quad (4.3)$$

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

4.1.1 Modelo de Saint Venant-Kirchhoff

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

$$\Psi = \frac{1}{2}(\Lambda - G)I_1^2 + GI_2 = G \text{tr}(\mathbf{E}^2) + \frac{1}{2}\Lambda \text{tr}(\mathbf{E})^2, \quad (4.4)$$

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:

$$\Lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad \text{e} \quad G = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (4.5)$$

Da Eq. (4.4), pode-se calcular a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie como:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} = \Lambda \operatorname{tr}(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2G\mathbf{E}. \quad (4.6)$$

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

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \Lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2G\mathbf{II}, \quad (4.7)$$

onde \mathbf{II} é o tensor identidade de quarta ordem, definido em forma indicial como $\mathbf{II}_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{jl}$, sendo δ_{ik} o delta de Kronecker. 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:

$$\Psi = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathfrak{C} : \mathbf{E}, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{S} = \mathfrak{C} : \mathbf{E}. \quad (4.9)$$

Apesar de simples, a lei de Saint Venant-Kirchhoff deve ser limitada ao caso de pequenas deformações, pois ela permite a inversão do material, isto é, valores negativos de jacobiano, quando submetida a tensões compressivas suficientemente grandes.

4.1.2 Modelo Neo-Hookeano

Para problemas envolvendo grandes deformações, utiliza-se neste trabalho o modelo constitutivo Neo-Hookeano definido pela seguinte energia específica de deformação (SZE; ZHENG; LO, 2004):

$$\Psi = \frac{\Lambda}{2} \left(\ln \sqrt{I_3} \right)^2 + \frac{G}{2} \left(I_1 - 3 - \ln \sqrt{I_3} \right) = \frac{\Lambda}{2} (\ln J)^2 + G (\operatorname{tr} \mathbf{E} - \ln J). \quad (4.10)$$

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

$$\mathbf{S} = \Lambda \ln(J) \mathbf{C}^{-1} + G(\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}), \quad (4.11)$$

$$\mathfrak{C} = \Lambda \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + 2\Lambda \ln(J) \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} - 2G \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}}. \quad (4.12)$$

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.

4.1.3 Modelo Neo-Hookeano aprimorado

Determinados materiais podem apresentar um comportamento não-linear mais complexo, com módulo de elasticidade transversal variando significativamente em função das deformações. Para esses casos, apresenta-se uma generalização do modelo neo-Hookeano, onde:

$$\Psi = \frac{\Lambda}{2} (\ln J)^2 + \frac{G}{a+1} \left[(\text{tr } \mathbf{E} - \ln J + \gamma_0)^{a+1} - (\gamma_0)^{a+1} \right]. \quad (4.13)$$

Os parâmetros adicionais γ_0 e a podem ser calibrados para representar a resposta não-linear específica do material. Quando $\gamma_0 = a = 0$, o modelo se reduz ao caso neo-Hookeano discutido na subseção anterior.

Da Eq. (4.13), derivam as seguintes expressões para o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e operador tangente consistente:

$$\mathbf{S} = \Lambda (\ln J) \mathbf{C}^{-1} + G (\text{tr } \mathbf{E} - \ln J + \gamma_0)^a (\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}), \quad e \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{c} = \Lambda \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + 2 [\Lambda (\ln J) - G (\text{tr } \mathbf{E} - \ln J + \gamma_0)^a] \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \\ + aG (\text{tr } \mathbf{E} - \ln J + \gamma_0)^{a-1} (\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}). \end{aligned} \quad (4.15)$$

4.1.4 Modelo de Blatz-Ko

Outro modelo hiperelástico utilizado neste trabalho, embora mais raramente, é o de Blatz-Ko (BLATZ; KO, 1962). Aplica-se a versão simplificada do modelo, onde:

$$\Psi = \frac{G}{2} \left(\frac{I_2}{I_3} + 2\sqrt{I_3} - 5 \right). \quad (4.16)$$

Isso resulta nas seguintes expressões para o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e operador tangente consistente:

$$\mathbf{S} = G \left(J \mathbf{C}^{-1} - \mathbf{C}^{-2} \right), \quad e \quad (4.17)$$

$$\mathfrak{c} = G \left(2J \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} + J \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2 \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{C}^{-1} - 2 \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \right). \quad (4.18)$$

4.1.5 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. Para isso, duas aproximações são comumente adotadas: estado plano de deformação (EPD) e estado plano de tensão (EPT).

No EPD, considera-se que os componentes de deformação que atuam na terceira dimensão são nulos, isto é, $E_{13} = E_{23} = E_{31} = E_{32} = E_{33} = 0$, e portanto a lei constitutiva pode ser resolvida diretamente. Já no EPT, esses termos devem ser calculados de forma que os componentes de tensão que atuam na terceira dimensão sejam nulos, isto é, $S_{13} = S_{23} = S_{31} = S_{32} = S_{33} = 0$, gerando 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 nos demais modelos, 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 hiperelásticos. Em particular, os mesmos procedimentos para o EPD e o EPT podem ser reaproveitados aos modelos termomecânicos e inelásticos apresentados posteriormente neste trabalho.

4.2 Base termodinâmica

Inicia-se nesta seção a discussão sobre modelos termomecânicos. Nesse contexto, a densidade de energia de deformação (Ψ) não representa o comportamento constitutivo em sua totalidade, devendo ser substituída pela energia livre de Helmholtz (ψ), que também abrange os efeitos térmicos.

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

$$\dot{\psi}(\mathbf{E}, \theta) = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta}. \quad (4.19)$$

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

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} - \mathbf{S} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \eta \right) \dot{\theta} + \theta \dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (4.20)$$

$$d_{\text{int}} = \left(\mathbf{S} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \left(\eta + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (4.21)$$

Seguindo o postulado de [Coleman e Noll \(1963\)](#), as expressões acima devem ser válidas para qualquer processo termodinâmico, ou seja, para quaisquer valores das taxas $\dot{\theta}$ e $\dot{\mathbf{E}}$. Essa condição é atendida se os termos entre parênteses forem nulos, o que resulta nas seguintes relações constitutivas:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \quad \text{e} \quad \eta = -\frac{\partial \psi}{\partial \theta}. \quad (4.22)$$

Consequentemente, a Eq. (4.20) e a Ineq. (4.21) resultam nas seguintes expressões:

$$\theta \dot{\eta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \quad (4.23)$$

$$\mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \leq 0. \quad (4.24)$$

As Eqs. (4.22) são denominadas relações constitutivas do material. A primeira é análoga à Eq. (2.22), sendo incorporada ao problema mecânico, e a segunda é análoga à Eq. (3.27), sendo incorporada ao problema térmico. A partir da Eq. (4.22), obtém-se:

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \dot{\theta} = \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \frac{c_v}{\theta} \dot{\theta}, \quad (4.25)$$

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

$$\mathbf{T}_{\mathbf{E}} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}}. \quad (4.26)$$

Aplicando-se a Eq. (4.25) na Eq. (4.23), resulta a equação local de condução de calor para o problema termo-elástico:

$$\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 + \theta \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + c_v \dot{\theta} = r. \quad (4.27)$$

O termo $\theta \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}}$ é denominado termo de acoplamento termo-elástico, responsável por transmitir o calor gerado ou absorvido 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:

$$\psi(\mathbf{E}, \theta) = \psi_m(\mathbf{E}, \theta) + \psi_\theta(\theta). \quad (4.28)$$

Para a parcela térmica, pode-se utilizar a lei dada por Vujošević e Lubarda (2002), apresentada na Eq. (3.32). Isto é:

$$\psi_\theta(\theta) = (c_0 - c_\gamma \theta_0) \left(\theta - \theta_0 - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right) - \frac{1}{2} c_\gamma (\theta - \theta_0)^2. \quad (4.29)$$

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 4.1. Resta, portanto, avaliar como será definido o tensor \mathbf{E}_e . Neste trabalho, duas formas serão discutidas: a decomposição aditiva e a multiplicativa.

4.3 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:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_\theta \quad (4.30)$$

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:

$$\mathbf{E}_\theta = (\theta - \theta_0)\boldsymbol{\alpha}, \quad (4.31)$$

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, segue que $\boldsymbol{\alpha} = \alpha\mathbf{I}$, onde α é um coeficiente único de expansão térmica. Assim, a Eq. (4.31) pode ser escrita como:

$$\mathbf{E}_\theta = \alpha(\theta - \theta_0)\mathbf{I}, \quad (4.32)$$

de forma que

$$\mathbf{E}_e = \mathbf{E} - \alpha(\theta - \theta_0)\mathbf{I}. \quad (4.33)$$

Observa-se, no entanto, que a lei linear dada na Eq. (4.31) 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 4.1. Assim, calcula-se o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e o operador tangente consistente pelas expressões:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} \boldsymbol{\Pi} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e}, \quad (4.34)$$

$$\mathbf{c} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} \boldsymbol{\Pi} = \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{E}_e} = \frac{d}{d\mathbf{E}_e} \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} \right). \quad (4.35)$$

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, pode-se partir da seguinte definição:

$$\psi_m = \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{E}} \mathbf{S} d\mathbf{E}. \quad (4.36)$$

Após efetuar a mudança de variáveis de \mathbf{E} para \mathbf{E}_e , o limite inferior $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ se torna, pela Eq. (4.30), $\mathbf{E}_e = -\mathbf{E}_\theta$, e o limite superior se torna o próprio \mathbf{E}_e . Assim, a integral (4.36) pode ser reescrita como

$$\psi_m = \int_{-\mathbf{E}_\theta}^{\mathbf{E}_e} \mathbf{S} d\mathbf{E}_e = \tilde{\psi}_m|_{(\mathbf{E}_e)} - \tilde{\psi}_m|_{(-\mathbf{E}_\theta)}, \quad (4.37)$$

onde $\tilde{\psi}_m$ é a expressão da lei hiperelástica, aplicada em \mathbf{E}_e na primeira parcela da Eq. (4.37), e aplicada em $-\mathbf{E}_\theta$ na segunda parcela. Uma vez que a segunda parcela depende apenas

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 4.4.1.

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:

$$\psi_m = \frac{1}{2} \mathbf{E}_e : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e - \frac{1}{2} \mathbf{E}_\theta : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_\theta, \quad (4.38)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} = \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e. \quad (4.39)$$

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, obtém-se, ao derivar a Eq. (4.38):

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_\theta} : \frac{\partial \mathbf{E}_\theta}{\partial \theta} = (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e) : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} - (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_\theta) : \frac{\partial \mathbf{E}_\theta}{\partial \theta} \quad (4.40)$$

Substituindo-se na Eq. (4.40) a lei de expansão térmica linear dada pelas Eqs. (4.32) e (4.33) e desenvolvendo-se algebricamente, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = -\alpha (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}) : \mathbf{I} = -\alpha \text{tr} (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}), \quad (4.41)$$

de onde, com a aplicação da Eq. (4.22), pode-se obter a entropia:

$$\eta = - \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \right) = \alpha \text{tr} (\mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}) - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (4.42)$$

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

$$\mathbf{T}_E = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} = \alpha \mathbf{I} : \mathfrak{C}_{SVK}, \quad (4.43)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (4.44)$$

Conforme visto na Eq. (4.44), 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}_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:

$$\psi_m = \frac{\Lambda}{2} \ln(J_e)^2 + \frac{G}{2} (\text{tr} \mathbf{C}_e - 3 - 2 \ln J_e) - \frac{\Lambda}{2} \ln(\bar{J}_\theta)^2 - \frac{G}{2} (\text{tr} \bar{\mathbf{C}}_\theta - 3 - 2 \ln \bar{J}_\theta), \quad (4.45)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} = \Lambda \ln(J_e) \mathbf{C}_e^{-1} + G(\mathbf{I} - \mathbf{C}_e^{-1}), \quad (4.46)$$

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e \otimes \partial \mathbf{E}_e} = \Lambda \mathbf{C}_e^{-1} \otimes \mathbf{C}_e^{-1} + 2\Lambda \ln(J_e) \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e} - 2G \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e}, \quad (4.47)$$

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. (4.45) em relação à temperatura, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_m}{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta} : \frac{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta}{\partial \theta} = \mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \theta} - \bar{\mathbf{S}}_\theta : \frac{\partial \bar{\mathbf{E}}_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.48)$$

onde

$$\bar{\mathbf{S}}_\theta = 2 \frac{\partial \psi_m}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta} = \Lambda \ln(\bar{J}_\theta) \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} + G(\mathbf{I} - \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}). \quad (4.49)$$

Substituindo-se na Eq. (4.48) a lei de expansão térmica linear dada pelas Eqs. (4.31) e (4.33) e desenvolvendo algebricamente, resulta:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = -\alpha \mathbf{S} : \mathbf{I} + \alpha \bar{\mathbf{S}}_\theta : \mathbf{I} = -\alpha(\text{tr } \mathbf{S} - \text{tr } \bar{\mathbf{S}}_\theta) \quad (4.50)$$

de onde, com a aplicação da Eq. (4.22), pode-se obter a entropia:

$$\eta = - \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \right) = \alpha(\text{tr } \mathbf{S} - \text{tr } \bar{\mathbf{S}}_\theta) - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma(\theta - \theta_0). \quad (4.51)$$

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

$$\mathbf{T}_E = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{S}} : \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \alpha \mathbf{I} : \mathfrak{C}, \quad (4.52)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma(\theta - \theta_0) - \alpha^2 \theta \mathbf{I} : (\mathfrak{C} - \bar{\mathfrak{C}}_\theta) : \mathbf{I}. \quad (4.53)$$

onde

$$\bar{\mathfrak{C}}_\theta = \Lambda \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1} + 2\Lambda \ln(\bar{J}_\theta) \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta} - 2G \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta^{-1}}{\partial \bar{\mathbf{C}}_\theta}. \quad (4.54)$$

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,

$$c_v \approx c_0 + c_\gamma(\theta - \theta_0), \quad (4.55)$$

que equivale à Eq. (4.44) obtida anteriormente.

4.4 Decomposição multiplicativa

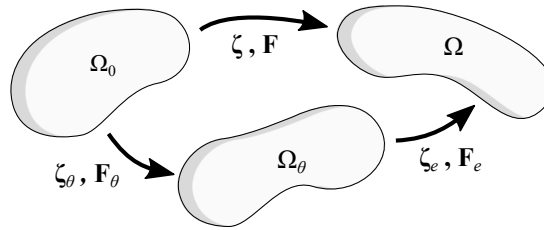
A decomposição multiplicativa baseia-se no conceito de configuração intermediária, isto é, uma configuração Ω_θ do corpo onde apenas deformações térmicas estão presentes. Denota-se por ζ_θ a função que mapeia o corpo em sua configuração inicial (Ω_0) para a

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, segue que:

$$\mathbf{F} = \nabla_0 \cdot (\zeta_e \circ \zeta_\theta) = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_\theta, \quad (4.56)$$

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

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



Fonte: Elaborado pelo autor

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

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_e - \mathbf{I}), \quad (4.57)$$

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_\theta - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_\theta - \mathbf{I}), \quad (4.58)$$

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:

$$\mathbf{E}_e = \mathbf{F}_\theta^{-T}(\mathbf{E} - \mathbf{E}_\theta)\mathbf{F}_\theta^{-1}. \quad (4.59)$$

Observa-se que, para pequenas deformações térmicas, $\mathbf{F}_\theta \approx \mathbf{I}$, logo a Eq. (4.59) 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 4.1](#). Como as demais passagens deste trabalho utilizam a versão Lagrangiana da energia livre, torna-se necessário recuperá-la a partir da seguinte expressão:

$$\psi_m = J_\theta \tilde{\psi}_m, \quad (4.60)$$

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:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}} = J_\theta \frac{\partial \tilde{\psi}_m}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} = J_\theta \mathbf{F}_\theta^{-1} \mathbf{S}_e \mathbf{F}_\theta^{-T}, \quad (4.61)$$

onde

$$\mathbf{S}_e = \frac{\partial \tilde{\psi}_m}{\partial \mathbf{E}_e} \quad (4.62)$$

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:

$$\mathbf{F}_\theta = \lambda_\theta \mathbf{I}, \quad (4.63)$$

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

$$\lambda_\theta = 1 + \alpha(\theta - \theta_0), \quad (4.64)$$

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

$$\lambda_\theta = e^{\alpha(\theta - \theta_0)} \quad (4.65)$$

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 aproximadamente coincidentes.

Aplicando a Eq. (4.63) nas Eqs. (4.58) a (4.61), as relações cinemáticas e constitutivas podem ser reescritas como:

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2}(\lambda_\theta^2 - 1)\mathbf{I}, \quad (4.66)$$

$$\mathbf{E}_e = \lambda_\theta^{-2}\mathbf{E} + \frac{1}{2}(\lambda_\theta^{-2} - 1)\mathbf{I}, \quad (4.67)$$

$$\psi_m = \lambda_\theta^3 \tilde{\psi}_m, \quad (4.68)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \mathbf{S}_e. \quad (4.69)$$

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

$$\mathfrak{c} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta \frac{\partial \mathbf{S}_e}{\partial \mathbf{E}_e} : \frac{\partial \mathbf{E}_e}{\partial \mathbf{E}} = \frac{1}{\lambda_\theta} \frac{\partial \mathbf{S}_e}{\partial \mathbf{E}_e} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{c}_e, \quad (4.70)$$

onde

$$\mathfrak{c}_e = \frac{\partial \mathbf{S}_e}{\partial \mathbf{E}_e} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_e} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}_m}{\partial \mathbf{E}_e} \right) \quad (4.71)$$

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:

$$\psi_m = \frac{1}{2} \lambda_\theta^3 \mathbf{E}_e : \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e, \quad (4.72)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \mathfrak{C}_{SVK} : \mathbf{E}_e, \quad (4.73)$$

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_{SVK}. \quad (4.74)$$

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

$$\psi_m = \frac{\lambda_\theta^3 \Lambda}{2} \ln(J_e)^2 + \frac{\lambda_\theta^3 G}{2} (\text{tr } \mathbf{C}_e - 3 - 2 \ln J_e), \quad (4.75)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \Lambda \ln(J_e) \mathbf{C}_e^{-1} + \lambda_\theta G (\mathbf{I} - \mathbf{C}_e^{-1}), \quad (4.76)$$

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \Lambda \mathbf{C}_e^{-1} \otimes \mathbf{C}_e^{-1} + 2 \lambda_\theta^{-1} \Lambda \ln(J_e) \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e} - 2 \lambda_\theta^{-1} G \frac{\partial \mathbf{C}_e^{-1}}{\partial \mathbf{C}_e}. \quad (4.77)$$

De maneira geral, a derivada de ψ_m com relação à temperatura pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} = \frac{\partial(\lambda_\theta^3 \tilde{\psi}_m)}{\partial \lambda_\theta} \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} = \left(3 \lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m - \mathbf{S}_e : \mathbf{C} \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.78)$$

onde, novamente, considera-se que os parâmetros do material não variam com a temperatura. Aplicando a Eq. (4.78) na Eq. (4.22), obtém-se a seguinte expressão para a entropia:

$$\eta = \left(\mathbf{S}_e : \mathbf{C} - 3 \lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} - (c_0 - c_\gamma \theta_0) \ln \left(\frac{\theta_0}{\theta} \right) + c_\gamma (\theta - \theta_0). \quad (4.79)$$

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

$$\mathbf{T}_E = \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} = \left(\lambda_\theta^{-2} \mathfrak{C}_e : \mathbf{C} - \mathbf{S}_e \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (4.80)$$

$$c_v = \theta \frac{\partial \eta}{\partial \theta} = c_0 + c_\gamma (\theta - \theta_0) + \theta \left(\mathbf{S}_e : \mathbf{C} - 3 \lambda_\theta^2 \tilde{\psi}_m \right) \frac{\partial^2 \lambda_\theta}{\partial \theta^2} \quad (4.81)$$

$$+ \theta \left(-\lambda_\theta^{-3} \mathbf{C} : \mathfrak{C}_e : \mathbf{C} - 6 \lambda_\theta \tilde{\psi}_m + 3 \lambda_\theta^{-1} \mathbf{S}_e : \mathbf{C} \right) \left(\frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right)^2. \quad (4.82)$$

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 (4.44).

4.4.1 Equivalência entre leis de expansão térmica

Neste trabalho, são aplicadas as leis de expansão térmica linear e exponencial, definidas conforme as Eqs. (4.64) e (4.65) 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 \mathbf{E}_θ ao invés de λ_θ , sendo necessário utilizar a Eq. (4.66) para relacioná-las. Portanto, aplicando nessa as Eqs. (4.64) e (4.65), pode-se escrever as leis linear e exponencial, respectivamente, como:

$$\mathbf{E}_\theta = \left[\alpha(\theta - \theta_0) + \frac{1}{2}\alpha^2(\theta - \theta_0)^2 \right] \mathbf{I}, \text{ e} \quad (4.83)$$

$$\mathbf{E}_\theta = \frac{1}{2}(e^{2\alpha(\theta - \theta_0)} - 1)\mathbf{I}. \quad (4.84)$$

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. (4.32). Naturalmente, considerando a hipótese $\alpha \ll 1$, o segundo termo da Eq. (4.83) 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. (4.83) é considerada para a lei linear.

4.5 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. (4.27). Aplicando-se também a lei de Fourier, de forma análoga à subseção 3.4.1, resulta:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Omega_0} c_v \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 \\ & - \int_{\Omega_0} r \delta\theta dV_0 + \int_{\Omega_0} \theta \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}} \delta\theta dV_0 = 0. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Nota-se que a única diferença entre a Eq. (4.85) 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.

4.6 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 termomecânico limita-se a algumas aproximações e considerações importantes:

1. Os modelos adotados são isotrópicos, isto é, $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$, $\mathbf{K} = k \mathbf{I}$ e $\mathbf{K}_0 = k \mathbf{J} \mathbf{C}^{-1}$.
2. O 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 $c_v = c_0$.

4.6.1 Acoplamento termomecânico

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 ($\theta \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}}$), 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 termomecânico pode 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.

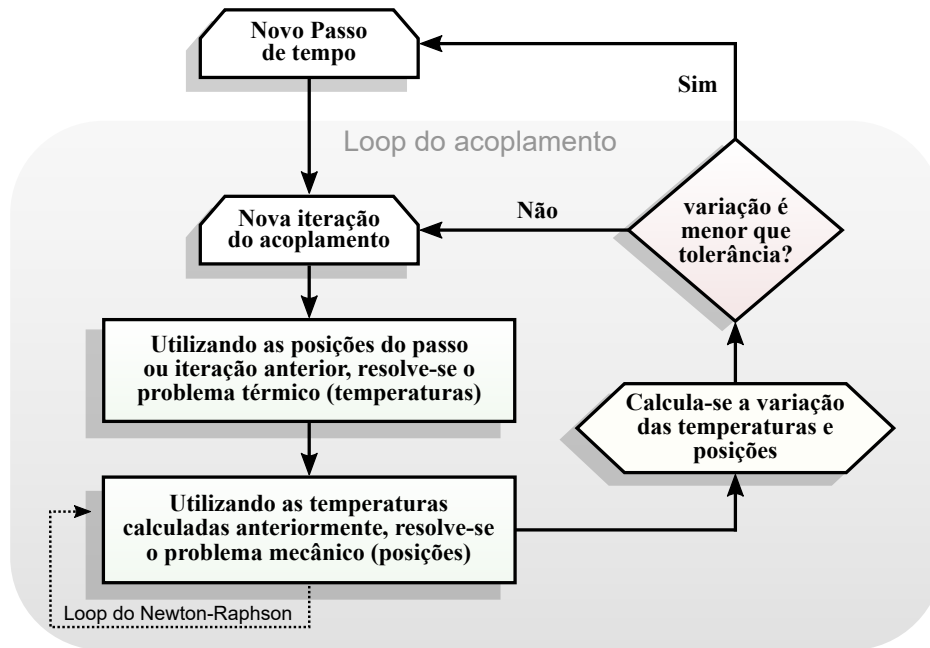
Já no acoplamento particionado, os problemas térmico e mecânico são resolvidos isoladamente, com trocas de informação feitas de forma explícita ou implícita durante o processo de solução dos sistemas. Na forma explícita, também chamada de acoplamento fraco, a troca de informações é feita apenas uma vez 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.

4.7 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 contemple 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

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



Fonte: Elaborado pelo autor

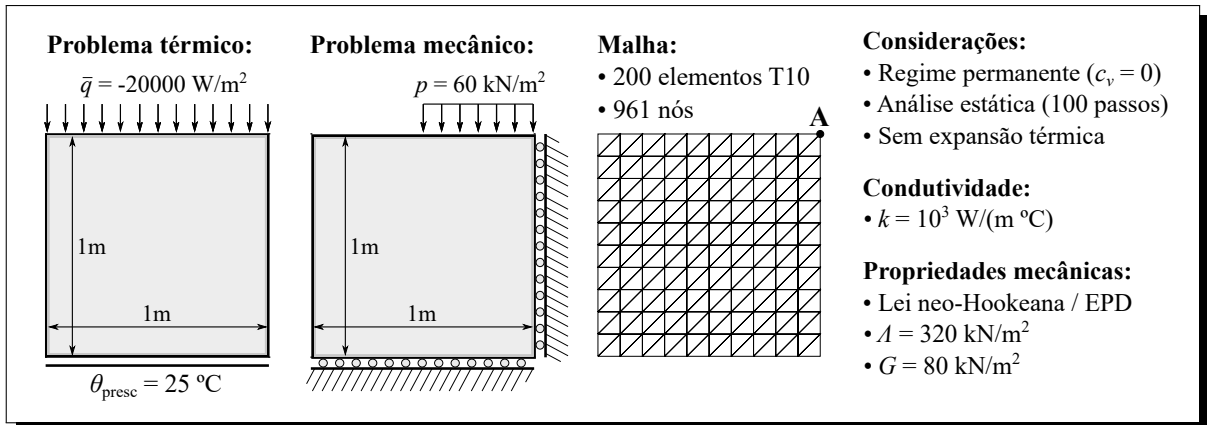
do terceiro eixo, e toma-se espessura unitária em todos os exemplos.

Com relação ao modelo constitutivo mecânico, aplicam-se os estados planos de tensão e de deformação, conforme discutidos na [subseção 4.1.5](#). O EPD neste caso é considerado a partir das deformações totais ao invés das deformações elásticas, isto é, toma-se $E_{33} = 0$. 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 4.1.5](#).

4.7.1 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](#).

As propriedades físicas 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 $c_e = c_v = 0$).

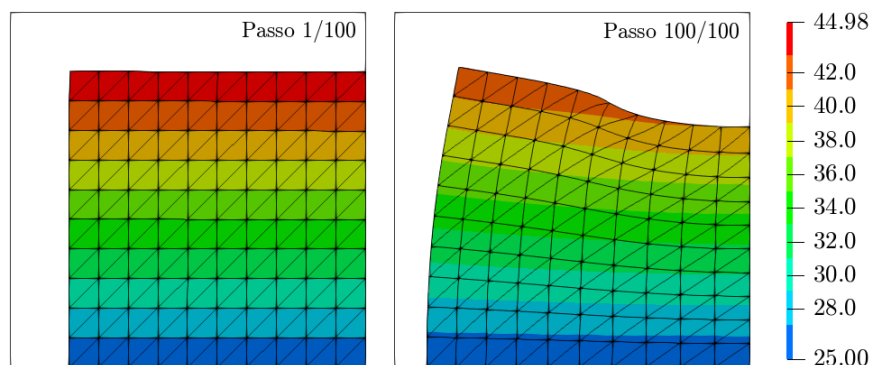
Figura 9 – Dados do exemplo de cubo parcialmente comprimido sob efeitos térmicos

Fonte: Elaborado pelo autor

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

$$\bar{q} = -k \frac{(\theta_{\text{topo}} - \theta_{\text{presc}})}{h} \Rightarrow -20000 = -1000 \cdot (\theta_{\text{topo}} - 25) \Rightarrow \theta_{\text{topo}} = 45^\circ\text{C}. \quad (4.86)$$

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.

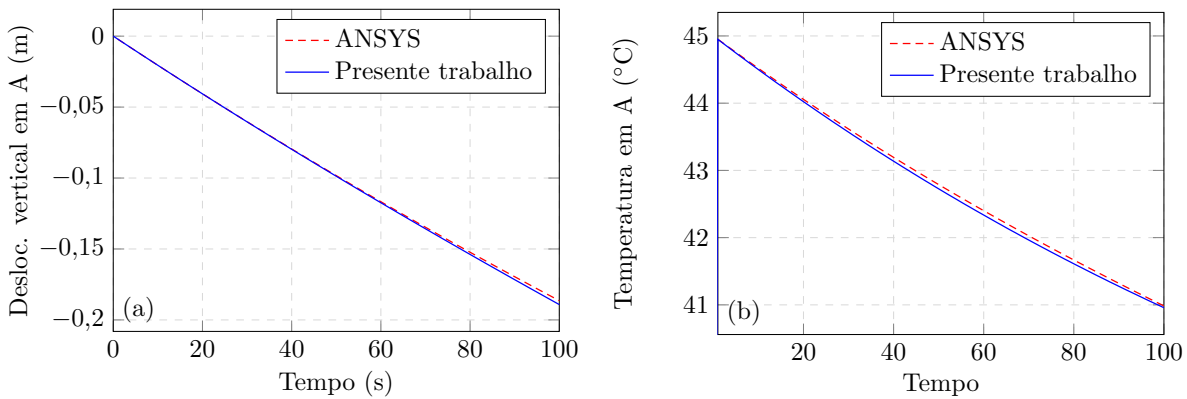
Figura 10 – Configuração deformada e campo de temperatura (em $^\circ\text{C}$) para o primeiro e último passo do carregamento mecânico

Fonte: Elaborado pelo autor

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°C) e varia conforme o nível

de deformação aumenta, até um valor limite de aproximadamente 41°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



Fonte: Elaborado pelo autor

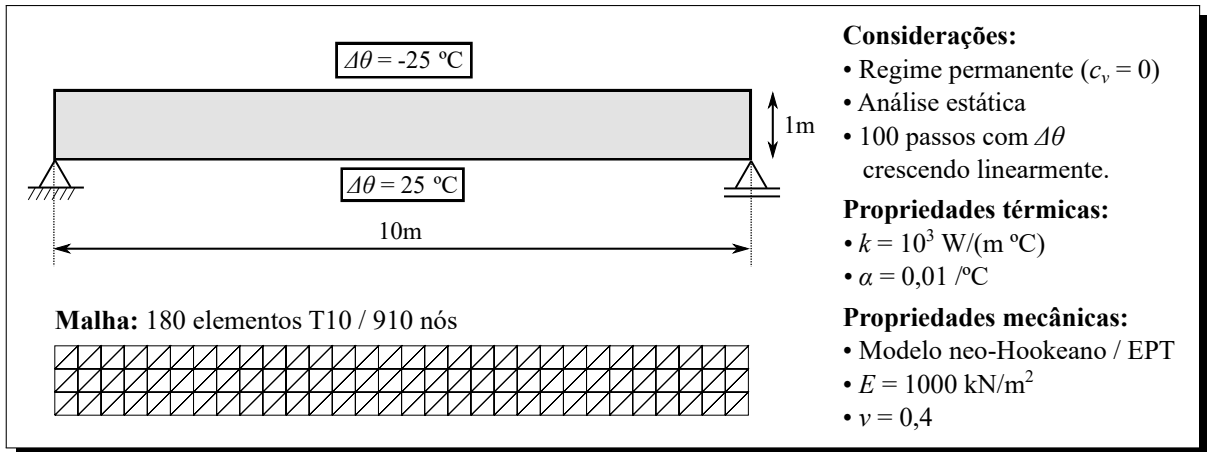
4.7.2 Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura

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](#).

Por se tratar de uma viga isostática simétrica, sujeita apenas a carregamentos térmicos, sabe-se que as reações de apoio mecânicas devem ser nulas. No entanto, isso não impede que se manifestem tensões internas no domínio da viga, decorrentes de incompatibilidades entre as deformações puramente térmicas e os deslocamentos, que são compensadas com o surgimento de deformações elásticas.

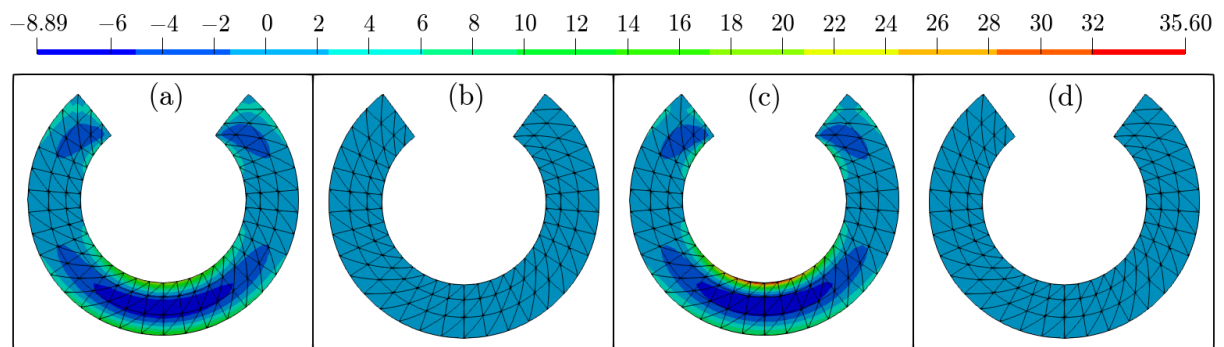
Na [Figura 13](#), apresentam-se as configurações deformadas e o componente σ_{11} das tensões de Cauchy para o último passo de tempo em cada um dos casos analisados, onde o eixo 1 é o eixo horizontal reto da viga indeformada. As configurações deformadas tendem a um formato quase circular, pois as variações de temperatura são uniformes ao longo do eixo longitudinal da viga, gerando um perfil de deformações térmicas idêntico para todas as seções transversais.

Observa-se que as tensões são evidentes apenas nos casos em que foi adotada a lei de expansão térmica linear, o que indica uma incompatibilidade entre o campo de

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

Fonte: Elaborado pelo autor

deformações térmicas neste caso e a configuração deformada da viga, resultando em componentes elásticos compensatórios. Por outro lado, para a lei exponencial, as tensões obtidas (e, conseqüentemente, as deformações elásticas) são desprezíveis, sugerindo que essa abordagem proporciona uma melhor compatibilização das deformações térmicas neste exemplo.

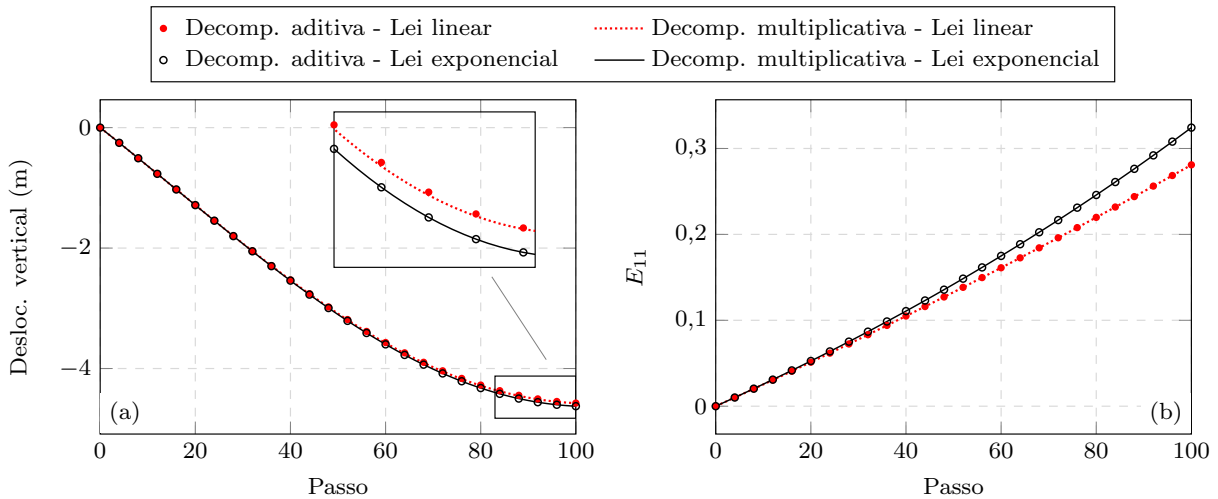
Figura 13 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapoada sujeita a variação de temperatura, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decomp. aditiva com lei exponencial, (c) decomp. multiplicativa com lei linear e (d) decomp. multiplicativa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

Fonte: Elaborado pelo autor

Pelo fato de as deformações elásticas neste problema serem muito pequenas, 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 elásticas são maiores.

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

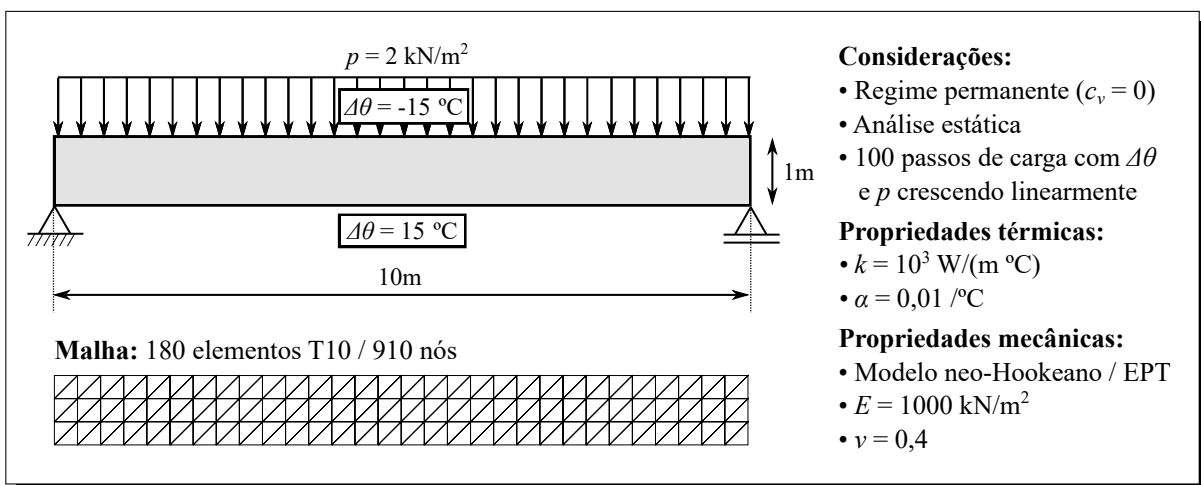


Fonte: Elaborado pelo autor

4.7.3 Viga biapoiada sujeita a variação de temperatura e carregamento

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.

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

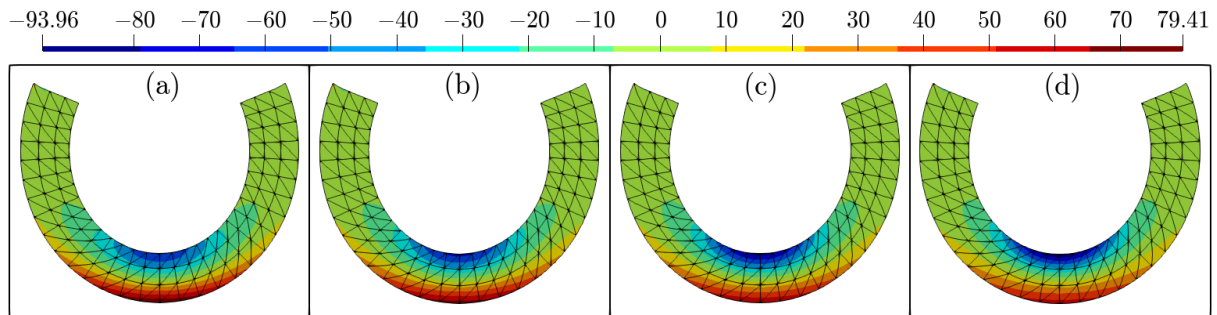


Fonte: Elaborado pelo autor

Como consequência das deformações mecânicas decorrentes do carregamento aplicado, o campo dos componentes horizontais de tensão passam a apresentar uma disposição mais

alinhada aos resultados da mecânica clássica, com tensão de tração na borda inferior da viga, e tensões de compressão na borda superior (ver Figura 16). A configuração deformada diferencia-se do caso anterior, apresentando um formato ligeiramente menos circular pelo fato de as deformações serem maiores no meio do vão.

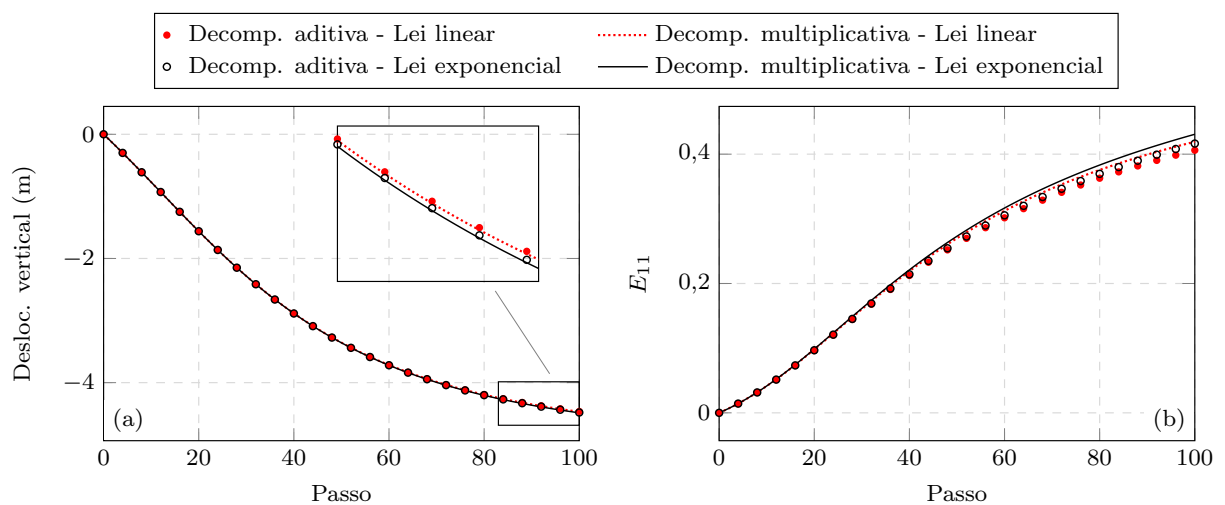
Figura 16 – Componente σ_{11} da tensão de Cauchy no último passo do exemplo de viga biapojada sujeita a variação de temperatura e carregamento, utilizando (a) decomposição aditiva com lei de expansão térmica linear, (b) decomp. aditiva com lei exponencial, (c) decomp. multiplicativa com lei linear e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



Fonte: Elaborado pelo autor

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 17 – Viga biapojada sujeita a variação de temperatura e carregamento: (a) deslocamento vertical e (b) componente E_{11} da deformação, calculados na borda inferior do meio do vão

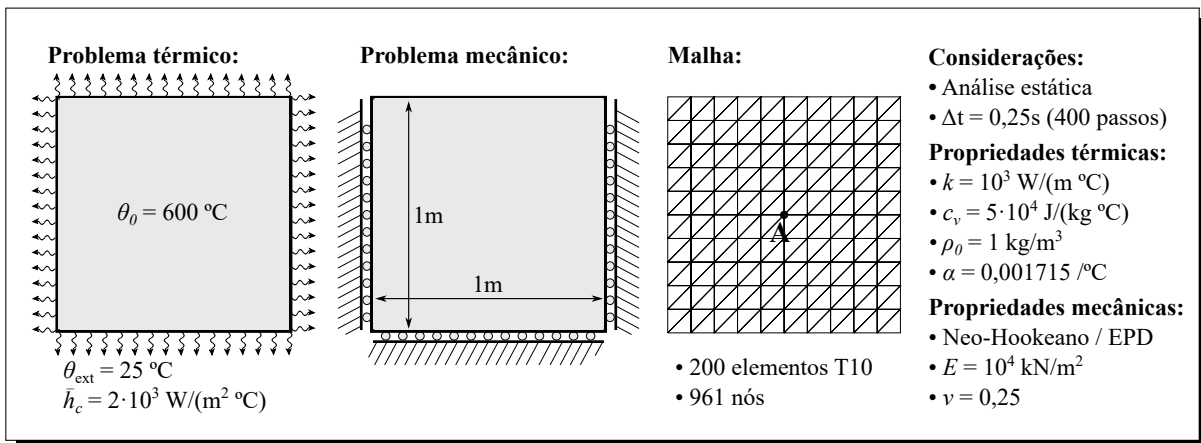


Fonte: Elaborado pelo autor

4.7.4 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 $600\text{ }^{\circ}\text{C}$, submetido a uma temperatura ambiente de $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 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 $\Delta t = 0,25\text{ s}$. Já o problema mecânico é resolvido desprezando-se as parcelas dinâmicas (análise estática). Os demais dados do problema são dispostos na [Figura 18](#).

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



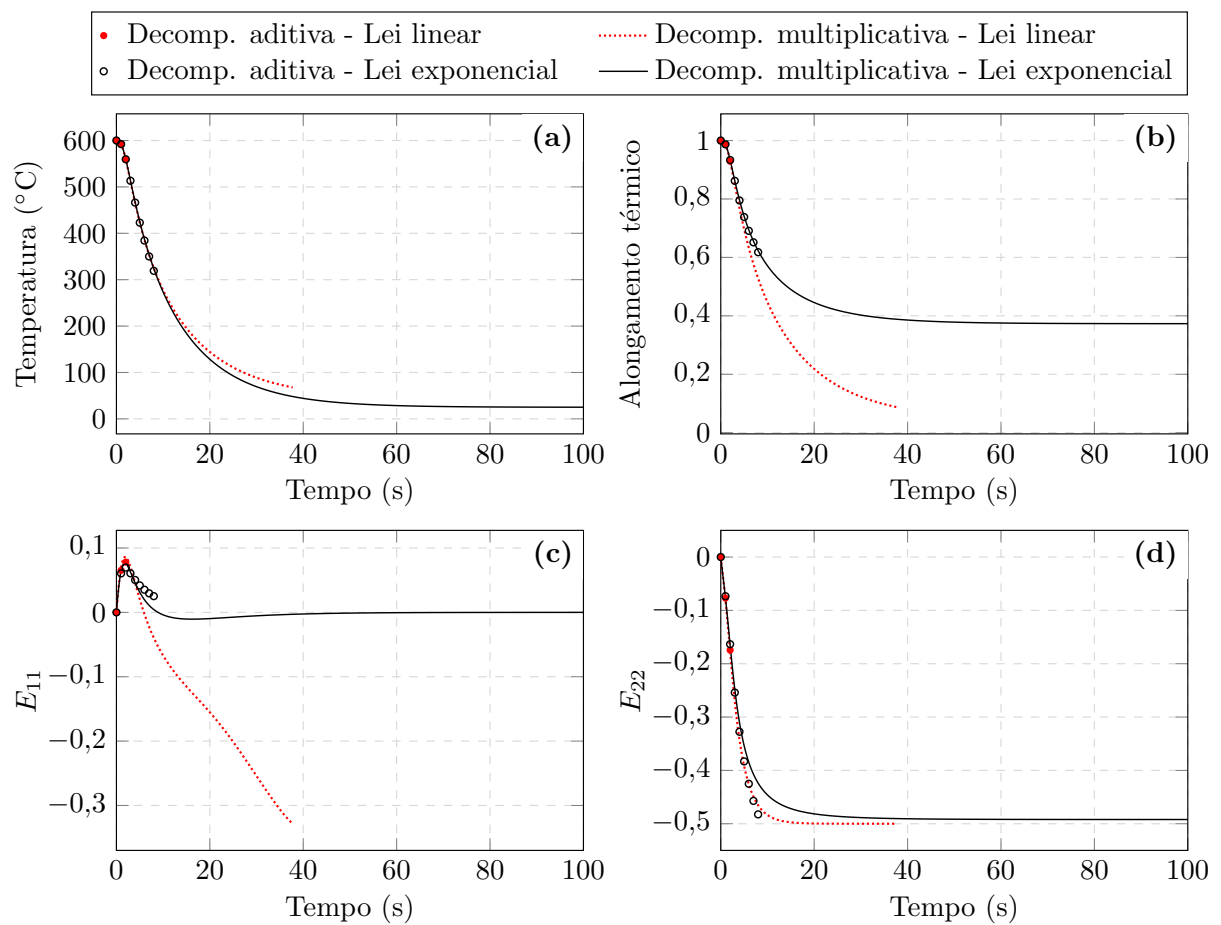
Fonte: Elaborado pelo autor

Novamente, são aplicados os modelos baseados nas decomposições aditiva e multiplicativa e as leis de expansão térmica linear e exponencial. Dessas quatro combinações, o 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, causando erros de convergência no processo iterativo de solução do sistema não linear. Para o caso de decomposição multiplicativa com lei de expansão térmica linear, o erro ocorreu 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 é atingido no ponto A, a interrupção do processamento indica que ele é 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.

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

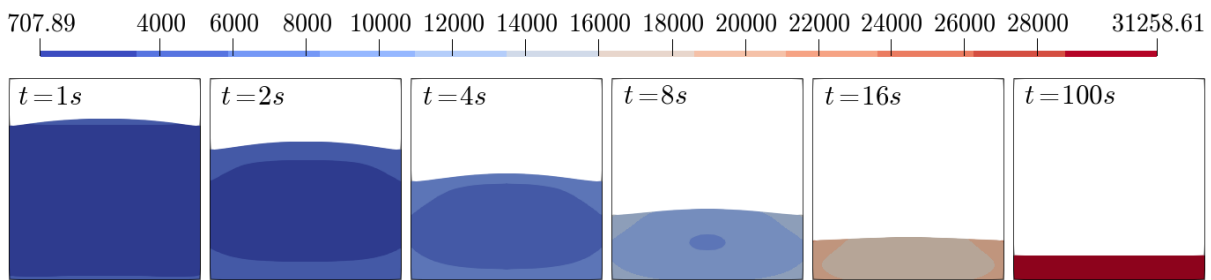


Fonte: Elaborado pelo autor

Na Figura 20, são mostradas as configurações deformadas para diversos passos de 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



Fonte: Elaborado pelo autor

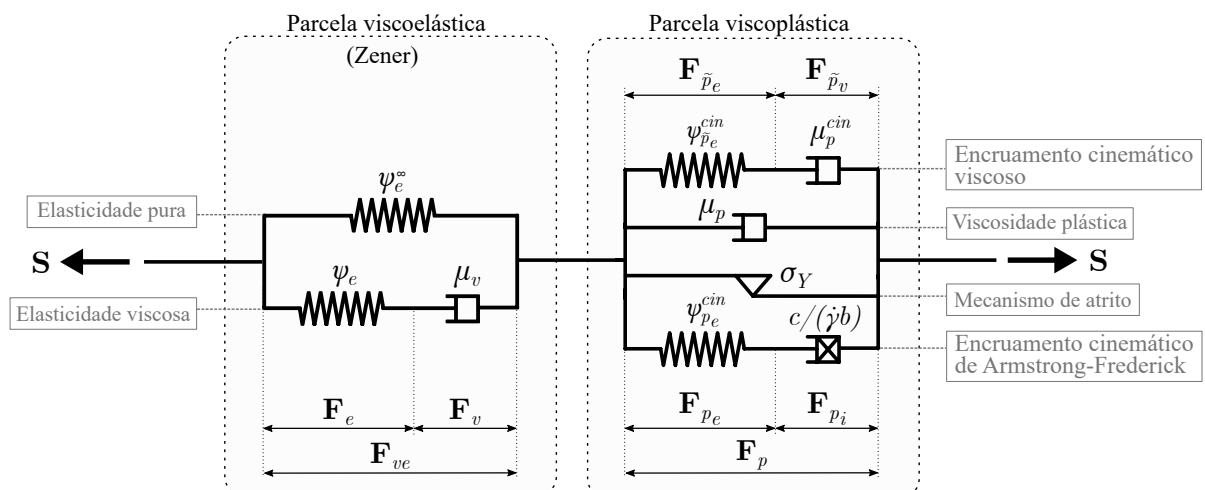
Capítulo 5

Modelo viscoelástico-viscoplástico

O modelo viscoelástico-viscoplástico apresentado neste trabalho é baseado no de [Carvalho \(2019\)](#), sendo adicionada uma parcela de encruamento cinemático viscoso a fim de contemplar a dependência temporal da rigidez plástica. Os resultados deste capítulo são apresentados também em [Carvalho, Coda e Sanches \(2023\)](#).

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 ([ZENER; SIEGEL, 1949](#)), 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 μ_p . Além disso, com base na proposta de [Lion \(1997\)](#), é possível decompor a deformação plástica em parcelas “plásticas-elástica” e “plásticas-inelástica”, que representam, na micro-escala, a deformação induzida por discordâncias e a deformação irreversível devido a escorregamentos nos cristais, respectivamente. Com essa ideia, é possível incorporar no modelo a lei de encruamento cinemático de Armstrong-Frederick

Figura 21 – Modelo reológico visco-elasto-plástico



Fonte: Adaptado de [Carvalho \(2019\)](#)

(ARMSTRONG; FREDERICK, 1966), considerando que as parcelas plásticas-elásticas são representadas por uma mola com rigidez “ c ” e as parcelas 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 μ_p^{cin} , causando um efeito de variação 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, apresentada na seção 4.4 aplicada ao caso termo-elástico. Nesse contexto, o gradiente da função mudança de configuração é expresso como:

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

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, a deformação viscoelástica pode ser decomposta nas parcelas elástica (\mathbf{F}_e) e viscosa (\mathbf{F}_v), isto é,

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

e a deformação plástica pode ser decomposta nas parcelas plástica-elástica e plástica-inelástica, conforme comentado anteriormente, de duas formas:

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

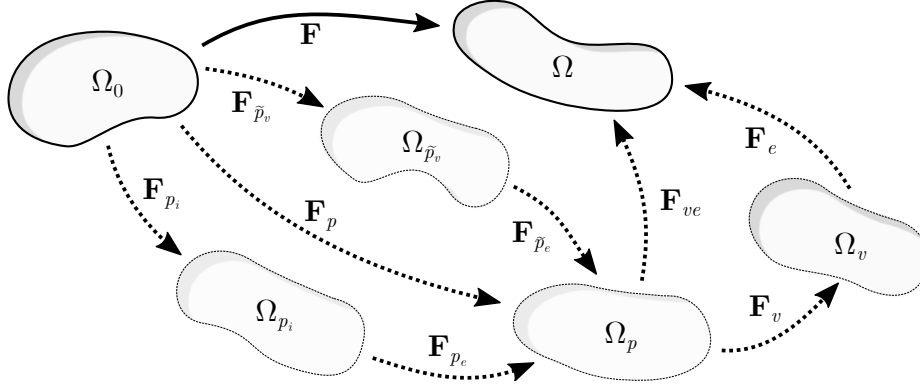
onde a primeira decomposição é utilizada para representar o encruamento cinemático pseudo-viscoso, e a segunda o encruamento cinemático viscoso. Conforme discutido na seção 4.4, cada decomposição multiplicativa está associada a uma configuração intermediária do sólido. Na Figura 22 essas configurações 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 $\mathbf{F}_{(\cdot)}$, pode-se definir tensores associados ao alongamento à direita de Cauchy-Green, $\mathbf{C}_{(\cdot)}$, à deformação de Green-Lagrange, $\mathbf{E}_{(\cdot)}$, à velocidade da mudança de configuração, $\mathbf{L}_{(\cdot)}$, e à taxa de deformação, $\mathbf{D}_{(\cdot)}$, por expressões análogas às Eqs. (2.2), (2.3), (2.6) e (2.8), respectivamente.

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.

Figura 22 – Configurações intermediárias para as decomposições multiplicativas aplicadas ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico



Fonte: Adaptado de [Carvalho \(2019\)](#)

Na parcela viscoelástica, essas energias são denotadas por ψ_e^∞ e ψ_e , sendo a primeira associada aos efeitos de longo prazo, escrita em função da deformação viscoelástica total; e a segunda associada ao estado não-equilibrado ou transitório, escrita em função da deformação puramente elástica. Para a parcela viscoplástica, as molas $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ são 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:

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

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_e^∞ , ψ_e , $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ e $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ possam ser definidas sem que haja qualquer preocupação relacionada à conversão de volumes, ao contrário do caso termo-elástico (seção 4.4).

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 a taxa da energia livre de Helmholtz. Com base na Eq. (5.4), escreve-se:

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

Utilizando-se as relações cinemáticas obtidas pela decomposição multiplicativa, e aplicando-se determinadas manipulações algébricas na Eq. (5.5), discutidas com mais

detalhes em [Carvalho \(2019\)](#), a inequação de Clausius-Duhem pode ser expressa por:

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

Conforme postulado por [Coleman e Noll \(1963\)](#), 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:

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

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 denominada tensão relativa, definida como:

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

e os demais tensores são expressos como

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

sendo denominados tensores de Mandel, definidos nas suas respectivas configurações intermediárias. Para modelos isotrópicos, é possível verificar que os tensores de Mandel são simétricos ([SVENDSEN, 1998](#)). 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.

Os modelos de plasticidade adotados neste trabalho são classificados em dois tipos: plasticidade independente de taxa e viscoplasticidade. No primeiro, a evolução da deformação plástica independe da taxa de aplicação das deformações e das tensões, como ocorre nos modelos elasto-plásticos clássicos. Nesse caso, aplica-se a seguinte condição para o critério de escoamento: $\Phi \leq 0$.

No caso viscoplástico, utiliza-se neste trabalho o modelo de [Perzyna \(1966\)](#), onde a evolução da deformação plástica é descrita por uma expressão que leva em conta a sua dependência temporal. Ao contrário do caso independente de taxa, nesse modelo, Φ pode assumir valores positivos.

As chamadas leis de evolução são expressões para \mathbf{L}_v , \mathbf{L}_p , \mathbf{L}_{p_i} , $\mathbf{L}_{\tilde{p}_v}$ e $\dot{\kappa}$ que definem a evolução dos seus respectivos componentes, escolhidas de forma que a Ineq. (5.8) seja atendida. Utilizando a relação $\mathbf{L}_{(\cdot)} = \dot{\mathbf{F}}_{(\cdot)} \mathbf{F}_{(\cdot)}^{-1}$, é possível escrever essas expressões utilizando as taxas dos componentes 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 [Carvalho \(2019\)](#). Para a lei de evolução viscosa, pode-se tomar

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

onde μ_v 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 $\mathbf{N}_p = \Sigma^D / \|\Sigma^D\|$ é o tensor que controla a direção da evolução plástica e $\dot{\gamma}$ é o multiplicador plástico.

No modelo de plasticidade independente de taxa, o multiplicador plástico é determinado associando-se a lei de evolução com uma condição de complementaridade, também conhecida como condição de Kuhn-Tucker, expressa por:

$$\dot{\gamma} \Phi = 0. \quad (5.15)$$

Essa condição implica que, quando $\Phi < 0$, o multiplicador plástico deve ser nulo ($\dot{\gamma} = 0$), caracterizando um regime elástico ou viscoelástico. Por outro lado, quando o multiplicador plástico é diferente de zero ($\dot{\gamma} \neq 0$), indicando um regime plástico, a função de escoamento deve ser nula ($\Phi = 0$).

Já no modelo viscoplástico de [Perzyna \(1966\)](#), o multiplicador plástico é definido diretamente pela seguinte expressão:

$$\dot{\gamma} = \frac{\langle \Phi^* \rangle}{\mu_p}, \quad (5.16)$$

onde μ_p é o parâmetro de viscosidade plástica, $\langle \cdot \rangle$ denota o colchete de Macaulay, isto é, $\langle \Phi^* \rangle = (\Phi^* + |\Phi^*|)/2$, e Φ^* 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

$$\Phi^* = e^{m\Phi} - 1, \quad (5.17)$$

onde m é um parâmetro de calibração do material.

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

$$\mathbf{L}_{p_i} = \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{p_i} = \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} \quad (5.18)$$

$$\mathbf{L}_{\tilde{p}_v} = \frac{1}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{\tilde{p}_v} = \frac{1}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}. \quad (5.19)$$

A Eq. (5.18) 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. (5.19) 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:

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma}. \quad (5.20)$$

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), (5.18), (5.19), e (5.20) na Ineq. (5.8), de onde, utilizando a propriedade tensorial $\mathbf{A} : \mathbf{A}^D = \|\mathbf{A}^D\|^2$, resulta

$$d_{\text{int}} = \dot{\gamma} \|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \frac{1}{\mu_v} \|\mathbf{M}_e^D\|^2 + \dot{\gamma} \frac{b}{c} \|\mathbf{M}_p^D\|^2 + \frac{1}{\mu_p^{\text{cin}}} \|\mathbf{M}_{\tilde{p}}^D\|^2 + \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma} \sigma_\kappa. \quad (5.21)$$

A partir do critério de escoamento (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. (5.21) também são maiores ou iguais a zero, a condição $d_{\text{int}} \geq 0$ é satisfeita.

Utilizando um procedimento análogo ao apresentado em Carvalho (2019), 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 (5.18) a (5.20), escrevem-se as formas discretas no tempo:

$$\mathbf{R}_v = \mathbf{F}_v - \mathbf{F}_v^{\text{ant}} - \frac{\Delta t}{\mu_v} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v = \mathbf{0}, \quad (5.22)$$

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{F}_p - \mathbf{F}_p^{\text{ant}} - \Delta \gamma \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = \mathbf{0}, \quad (5.23)$$

$$\mathbf{R}_{p_i} = \mathbf{F}_{p_i} - \mathbf{F}_{p_i}^{\text{ant}} - \Delta\gamma \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} = \mathbf{0}, \quad (5.24)$$

$$\mathbf{R}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} - \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{\text{ant}} - \frac{\Delta t}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{0}, \quad \text{e} \quad (5.25)$$

$$R_\kappa = \kappa - \kappa^{\text{ant}} - \Delta\gamma \sqrt{\frac{2}{3}} = 0, \quad (5.26)$$

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 complementaridade. Para materiais com plasticidade independente de taxa, tem-se:

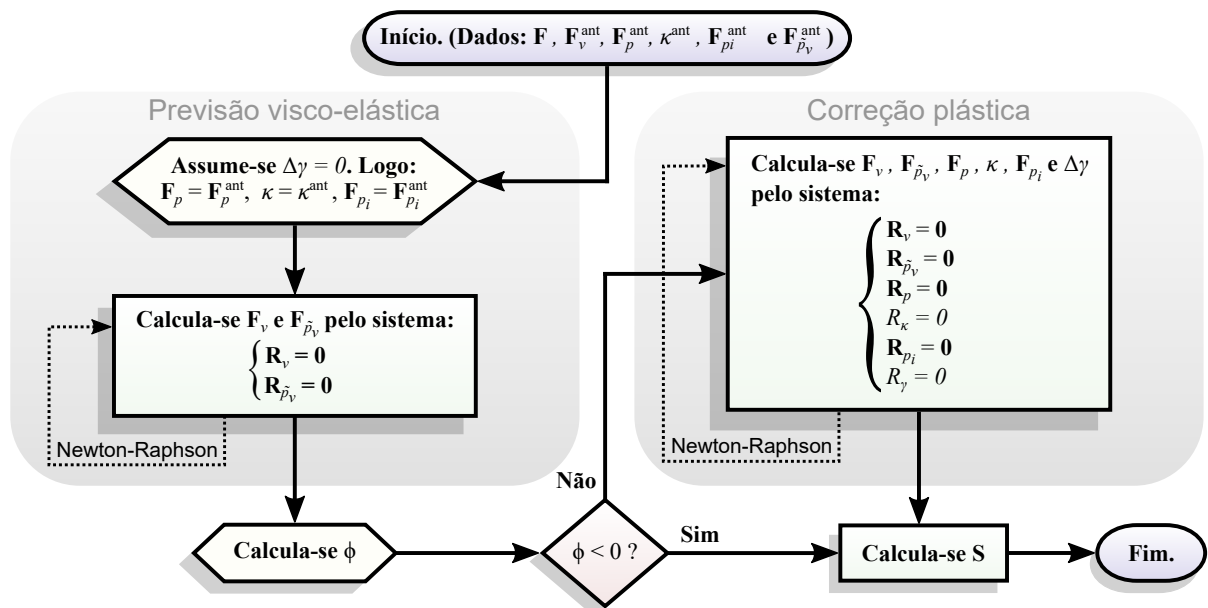
$$R_\gamma = \Phi = 0. \quad (5.27)$$

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

$$R_\gamma = \Delta\gamma - \Delta t \frac{\langle \Phi^* \rangle}{\mu_p} = 0. \quad (5.28)$$

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 (DETTMER; REESE, 2004; VLADIMIROV; PIETRYGA; REESE, 2007), e, portanto, requer um intervalo de tempo suficientemente pequeno para evitar discrepâncias, como pode ser visto nas análises realizadas em Tsakmakis e Willuweit (2003) e Carvalho (2019).

Figura 23 – Fluxograma do algoritmo previsão-correção para marcha no tempo em modelo viscoelástico-viscoplástico



Fonte: Elaborado pelo autor

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:

$$\Delta \mathbf{S} = \mathfrak{C} : \Delta \mathbf{E} \quad (5.29)$$

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:

$$\Delta \mathbf{S} \approx \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p. \quad (5.30)$$

Para que a Eq. (5.30) possa ser associada à forma da Eq. (5.29), 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, além da aplicação de uma condição de consistência.

A condição de consistência pode ser expressa, no contexto numérico, como

$$\Delta \gamma \Delta R_\gamma = 0. \quad (5.31)$$

Essa condição implica que, caso o material esteja em regime plástico, e portanto $\Delta \gamma > 0$, ΔR_γ deve ser nulo. No caso viscoplástico, R_γ é dado pela Eq. (5.28). Dessa forma, o valor de ΔR_γ pode ser aproximado por:

$$\frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \kappa} \Delta \kappa + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{p_i}} : \Delta \mathbf{F}_{p_i} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \gamma} \Delta \gamma \approx 0. \quad (5.32)$$

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:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} : \Delta \mathbf{F}_v + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \approx \mathbf{0}, \quad e \quad (5.33)$$

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p + \frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} \approx \mathbf{0}, \quad (5.34)$$

de onde resulta:

$$\Delta \mathbf{F}_v \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \right), \quad e \quad (5.35)$$

$$\Delta \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} \right)^{-1} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} : \Delta \mathbf{F}_p \right). \quad (5.36)$$

Aplicando-se as Eqs. (5.35) e (5.36) na Eq. (5.32), e substituindo as variações $\Delta \mathbf{F}_p$, $\Delta \kappa$ e $\Delta \mathbf{F}_{p_i}$ pelas leis de evolução discretizadas (5.23), (5.26) e (5.24), chega-se a:

$$\mathbf{D}_E : \Delta \mathbf{E} + D_\gamma \Delta \gamma \approx 0 \quad (5.37)$$

onde

$$\mathbf{D}_{\mathbf{E}} = \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}}, \quad \text{e} \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} D_\gamma = & \left[\frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_p} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} - \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_{\tilde{p}_v}}{\partial \mathbf{F}_p} \right] : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \\ & + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \kappa} \sqrt{\frac{2}{3}} + \frac{b}{c} \frac{\partial R_\gamma}{\partial \mathbf{F}_{p_i}} : (\mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i}) + \frac{\partial R_\gamma}{\partial \gamma}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Da Eq. (5.37), segue-se que

$$\Delta \gamma \approx \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}, \quad (5.40)$$

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 , tem-se:

$$\Delta \mathbf{F}_p = \Delta \gamma \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p \approx (\mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}) \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = [(\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}}] : \Delta \mathbf{E}. \quad (5.41)$$

Aplicando a Eq. (5.41) na Eq. (5.35), resulta:

$$\Delta \mathbf{F}_v \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} \right] : \Delta \mathbf{E}, \quad (5.42)$$

e, finalmente, aplicando as Eqs. (5.41) e (5.42) na Eq. (5.30), e associando-a com a Eq. (5.29), define-se o operador tangente consistente do modelo viscoelástico-viscoplástico pela seguinte expressão:

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}} \right] + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_p} : (\mathbf{N}_p \mathbf{F}_p) \otimes \mathbf{D}_{\gamma, \mathbf{E}}. \quad (5.43)$$

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. (5.43) pode ser simplificada para

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_v} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{F}_v} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \mathbf{E}}. \quad (5.44)$$

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_e^∞ , ψ_e , $\psi_{p_e}^{\text{cin}}$ 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 com grandes deformações, as leis hiperelásticas neste trabalho utilizam o modelo neo-Hookeano, conforme descrito na [subseção 4.1.2](#). Dessa forma, as parcelas ψ_e^∞ e ψ_e são escritas como

$$\psi_e^\infty = \frac{\Lambda}{2} (\ln J_{ve})^2 + G_{ve} (\text{tr } \mathbf{E}_{ve} - \ln J_{ve}), \quad \text{e} \quad (5.45)$$

$$\psi_e = G_e (\text{tr } \mathbf{E}_e - \ln J_e), \quad (5.46)$$

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 no componente viscoelástico. Isso ocorre pois, pela propriedade da conservação do volume viscoso, deve-se 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

$$\psi_{pe}^{\text{cin}} = \frac{c}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_{pe} - \ln J_{pe}), \quad e \quad (5.47)$$

$$\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}} = \frac{\tilde{c}}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_{\tilde{p}_e} - \ln J_{\tilde{p}_e}), \quad (5.48)$$

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. (5.18) 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, para a definição dos parâmetros do modelo constitutivo e validação, são utilizados os resultados experimentais de Khan e Zhang (2001), onde foram realizados ensaios de tensão uniaxial com carregamento monotônico, relaxação e fluência. Nos ensaios com carregamento monotônico, são 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 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 todos os ensaios são de compressão em temperatura ambiente. Dessa forma, a caracterização mecânica do PTFE neste trabalho é limitada a essas condições.

5.7.1 Definição dos parâmetros

Conforme mencionado anteriormente, os parâmetros são definidos com base nas 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 considerando problemas quase-estáticos (desprezando-se as parcelas inerciais), em 250 passos de tempo. O valor

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

máximo de deformação considerado foi de 0,3321, resultando nos seguintes valores de Δt , da menor taxa para a maior: 265,68 s, 13,284 s, 0,13284 s e 0,0013284 s.

Na primeira etapa, são calibrados os parâmetros viscoelásticos Λ , G_e , G_{ve} e μ_v , 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 Khan e Zhang (2001), uma vez que não foram apresentados os resultados de deformações transversais. No entanto, baseado nos estudos de Rae e Dattelbaum (2004), esses foram arbitrados neste trabalho com valores entre 0,46 e 0,48.

Os parâmetros Λ e G_e podem então ser obtidos pela Eq. (4.5) a partir de um módulo 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-se em conta as seguintes propriedades do modelo viscoelástico:

- Para intervalos de tempo suficientemente grandes, o pistão de viscosidade μ_v tende a dissipar a energia elástica ψ_e . Portanto, taxas de deformação menores estão associadas puramente à rigidez E_{ve} .
- Para intervalos de tempo suficientemente pequenos, a dissipação do pistão de viscosidade μ_v é desprezível, o que significa que ambas as parcelas ψ_e e ψ_e^∞ 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 μ_v , são modificados manualmente para um melhor ajuste das curvas.

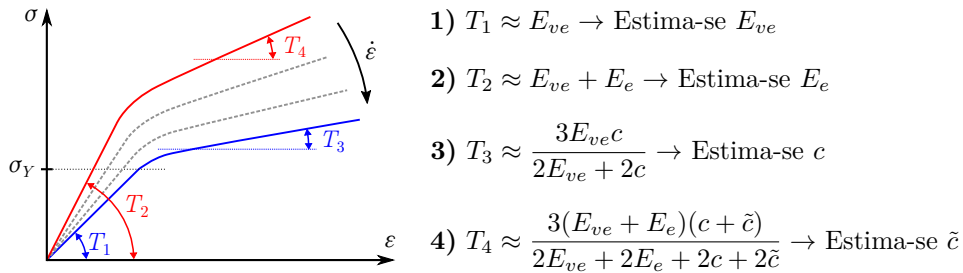
Parte-se então para a calibração dos parâmetros viscoplásticos. O parâmetro σ_Y é aproximadamente a tensão de transição entre os trechos viscoelásticos e viscoplásticos, logo pode ser extraído diretamente do gráfico de tensão-deformação. Nesse sentido, utilizam-se como referência os gráficos de menores 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 intervalos de tempo suficientemente grandes, o pistão de viscosidade μ_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 intervalos de tempo suficientemente pequenos, a dissipação do pistão de viscosidade μ_p^{cin} é desprezível, o que significa que ambas as parcelas $\psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}$ 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 (4.5), 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 tem-se $K = 3c/2$, e para as taxas maiores, $K = 3(c + \tilde{c})/2$. Novamente, considera-se $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ como menor taxa, portanto o valor estimado de c é obtido igualando sua tangente da curva para essa taxa a $3E_{ve}c/(2E_{ve} + 2c)$. Já a tangente da curva com maior taxa de deformação, 1 s^{-1} , é igualada a $3(E_{ve} + E_e)(c + \tilde{c})/(2E_{ve} + 2E_e + 2c + 2\tilde{c})$, de onde estima-se o valor de \tilde{c} . O processo descrito para a 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



Fonte: Elaborado pelo autor

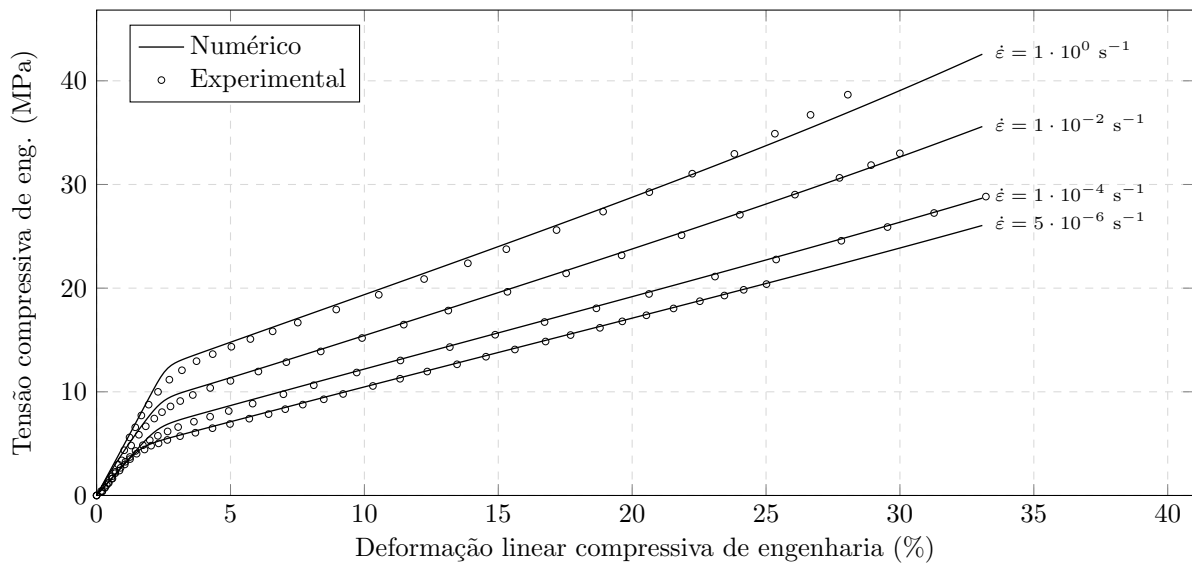
Os valores finais de rigidez plástica, bem como os parâmetros b , μ_p^{cin} , μ_p e m , são calibrados manualmente. O parâmetro b está associado à evolução da rigidez plástica com o nível de deformação, e pode ser calibrado utilizando apenas o gráfico com menor taxa. Já a constante μ_p^{cin} está associada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

Os parâmetros calibrados são apresentados na Tabela 1, enquanto os gráficos comparativos do modelo experimental com o numérico calibrado são apresentados na Figura 25, a qual mostra os valores de deformação linear de engenharia por tensão nominal (ou tensão de engenharia), sendo essa última calculada, nesse caso, pela expressão $\bar{\sigma}_{11} = J\sigma_{11}/F_{11} = F_{11}S_{11}$.

Como é possível observar, o modelo apresentado é 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 é 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 politetrafluoretileno

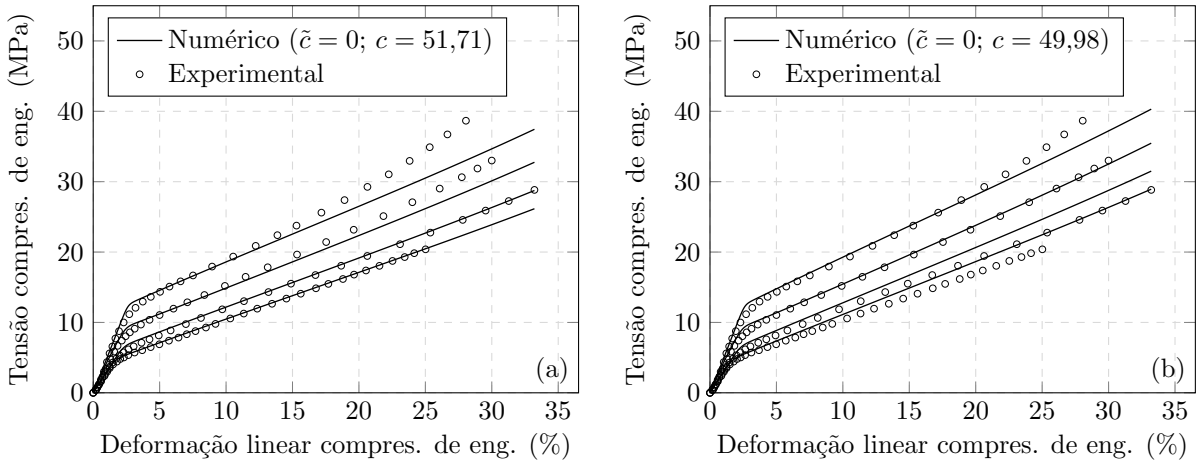
Parâmetros viscoelásticos						
Λ (MPa)	G_{ve} (MPa)	G_e (MPa)	μ_v (MPa·s)			
1866.89	97.98	64.2614	172.37			
Parâmetros viscoplásticos						
σ_Y (MPa)	c (MPa)	b	\tilde{c} (MPa)	μ_p^{cin} (MPa·s)	μ_p (s)	m (MPa ⁻¹)
2.41	51.71	4	8.27	172.37	$9 \cdot 10^6$	2

Fonte: Elaborado pelo autor**Figura 25** – Comparação entre resultados experimentais e numéricos para o ensaio de carregamento monotônico em material politetrafluoretileno (PTFE)**Fonte:** Elaborado pelo autor

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 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.

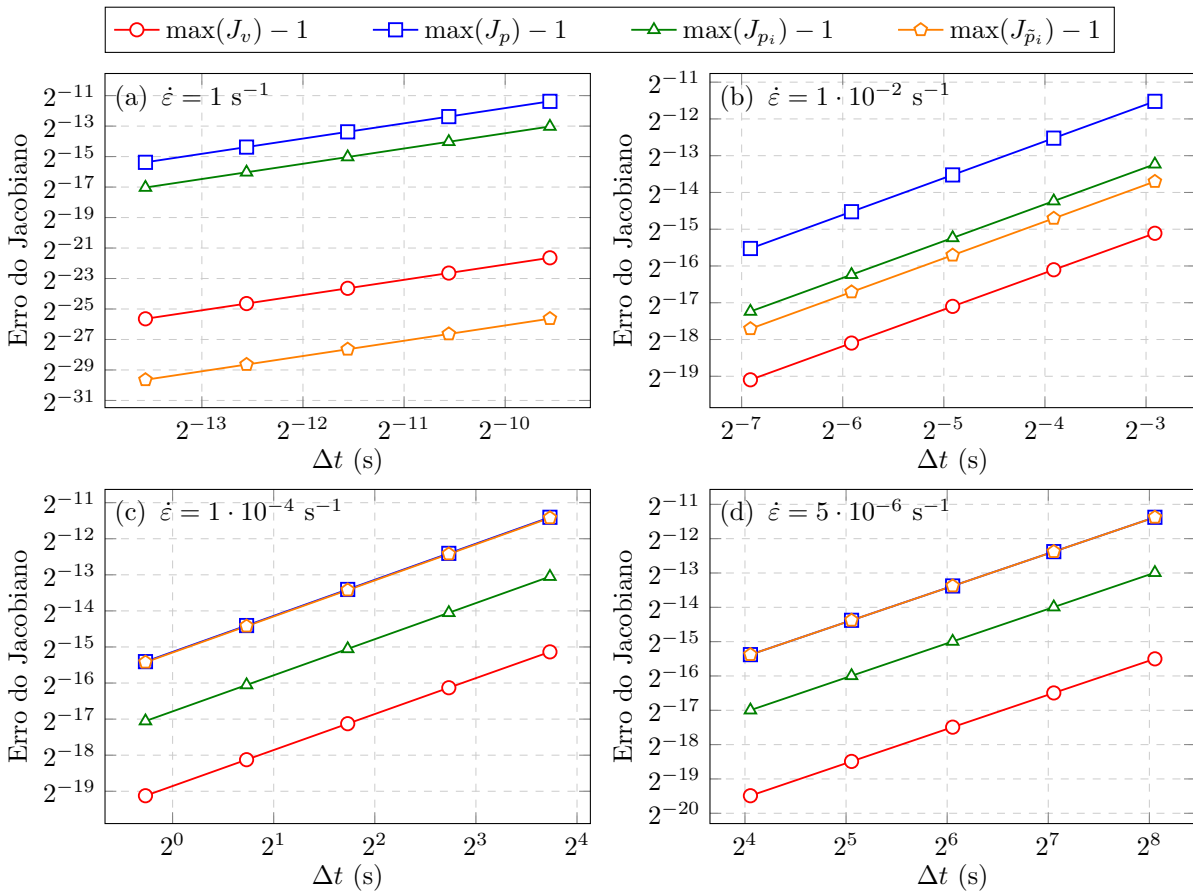
Neste mesmo exemplo, considerando-se os parâmetros originais, realiza-se uma análise da propriedade da conservação do volume inelástico. Na [Figura 27](#) são mostrados os erros dos jacobianos J_v , J_p , J_{p_i} e $J_{\tilde{p}_v}$ para as 4 diferentes taxas de deformação, com 5 diferentes valores de Δt . As inclinações das retas são, em todos os casos, próximas de 1,

Figura 26 – Ensaio de carregamento monotônico desconsiderando o encruamento cinemático viscoso ($\tilde{c} = 0$), com (a) $c = 51,71$ MPa e (b) $c = 59,98$ MPa



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 27 – Análise do Jacobiano



Fonte: Elaborado pelo autor

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.

5.7.2 Ensaio de relaxação

O ensaio de relaxação apresentado em Khan e Zhang (2001) é realizado em três etapas de carregamento, intercaladas por duas etapas de intervalo, e seguidas por 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, a deformação é mantida fixa por 6 h, 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.

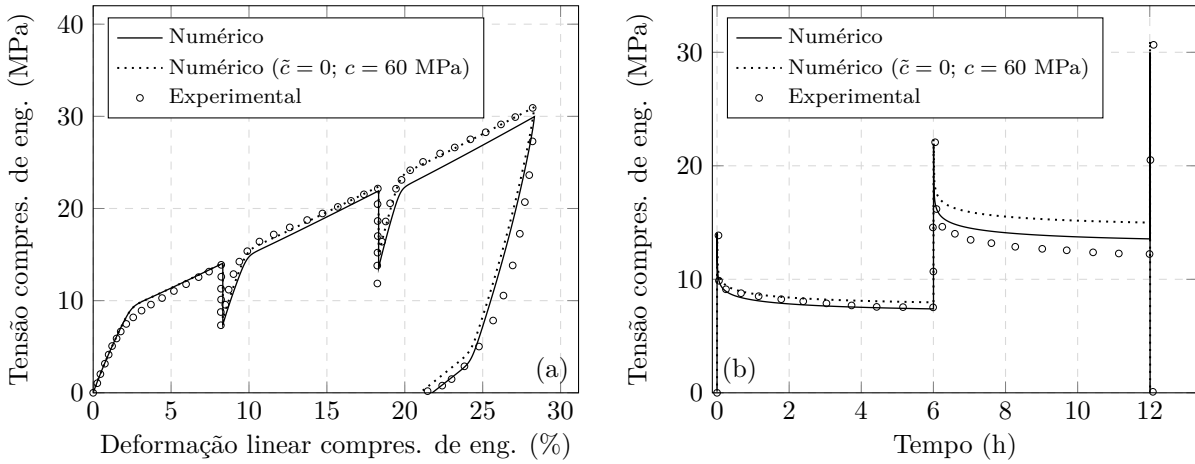
Na Figura 28 são mostrados os resultados dessa análise e comparados com a resposta experimental. Nota-se, em geral, uma boa concordância, especialmente para a primeira curva de relaxação da Figura 28(b), onde as respostas são praticamente coincidentes. No entanto, a partir da segunda fase de carregamento,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

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 fluência

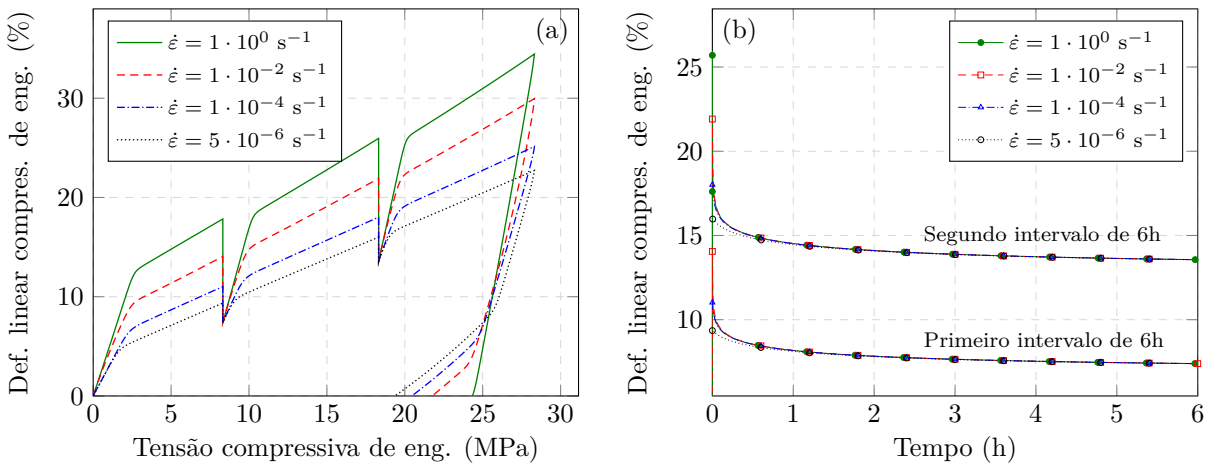
Neste caso, ao invés de deformação prescrita, aplica-se tensão de engenharia prescrita (ou força distribuída). Novamente, consideram-se três etapas de carregamento, cada uma seguida por uma etapa de intervalo, sendo utilizadas as mesmas discretizações temporais

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 $\dot{\epsilon} = 0,01 \text{ s}^{-1}$.



Fonte: Elaborado pelo autor

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.

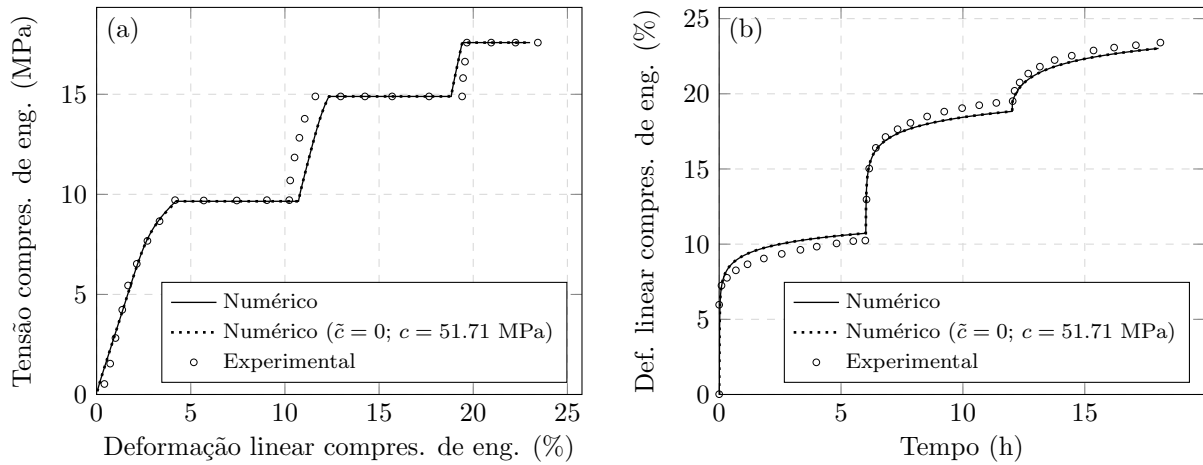


Fonte: Elaborado pelo autor

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, a tensão é mantida fixa por 6 h, 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 experimentais na [Figura 30](#), onde, novamente, pode ser visto uma conformação satisfatória das curvas, levando em conta as incertezas associadas. Além disso, observa-se que os resultados numéricos para o caso com $\bar{c} = 0$ são equivalentes ao modelo original, indicando que o componente de encruamento cinemático viscoso não possui papel importante neste caso em particular.

Adicionalmente, na [Figura 31](#), são apresentados os resultados do ensaio de fluência considerando diferentes taxas de tensão durante as etapas de carregamento e descarrega-

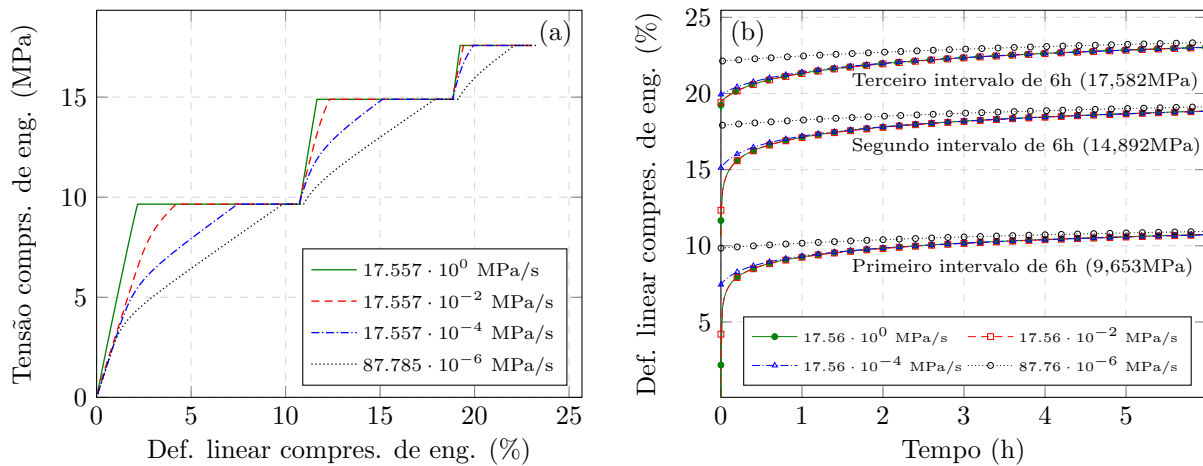
Figura 30 – (a) Tensão-deformação e (b) deformação ao longo do tempo, para o ensaio de fluência com intervalos de 6 h e taxa de tensão de 0,1755 MPa/s.



Fonte: Elaborado pelo autor

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



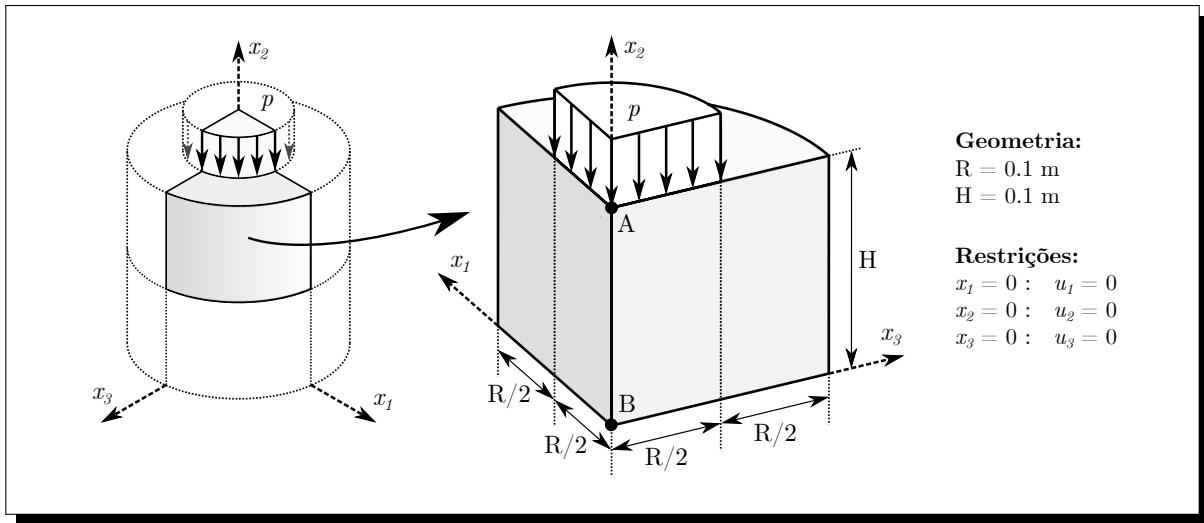
Fonte: Elaborado pelo autor

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 extremidades. Devido à simetria, apenas um oitavo da geometria é discretizada, com as devidas restrições aplicadas em cada plano de simetria gerado, resultando no problema mostrado na Figura 32. A seguir, este exemplo é simulado

com diferentes discretizações espaciais e temporais, e diferentes evoluções de carregamento.

Figura 32 – Dados para o exemplo do cilindro parcialmente comprimido



Fonte: Elaborado pelo autor

5.7.4.1 Ensaio de fluência: análise de dependência de malha

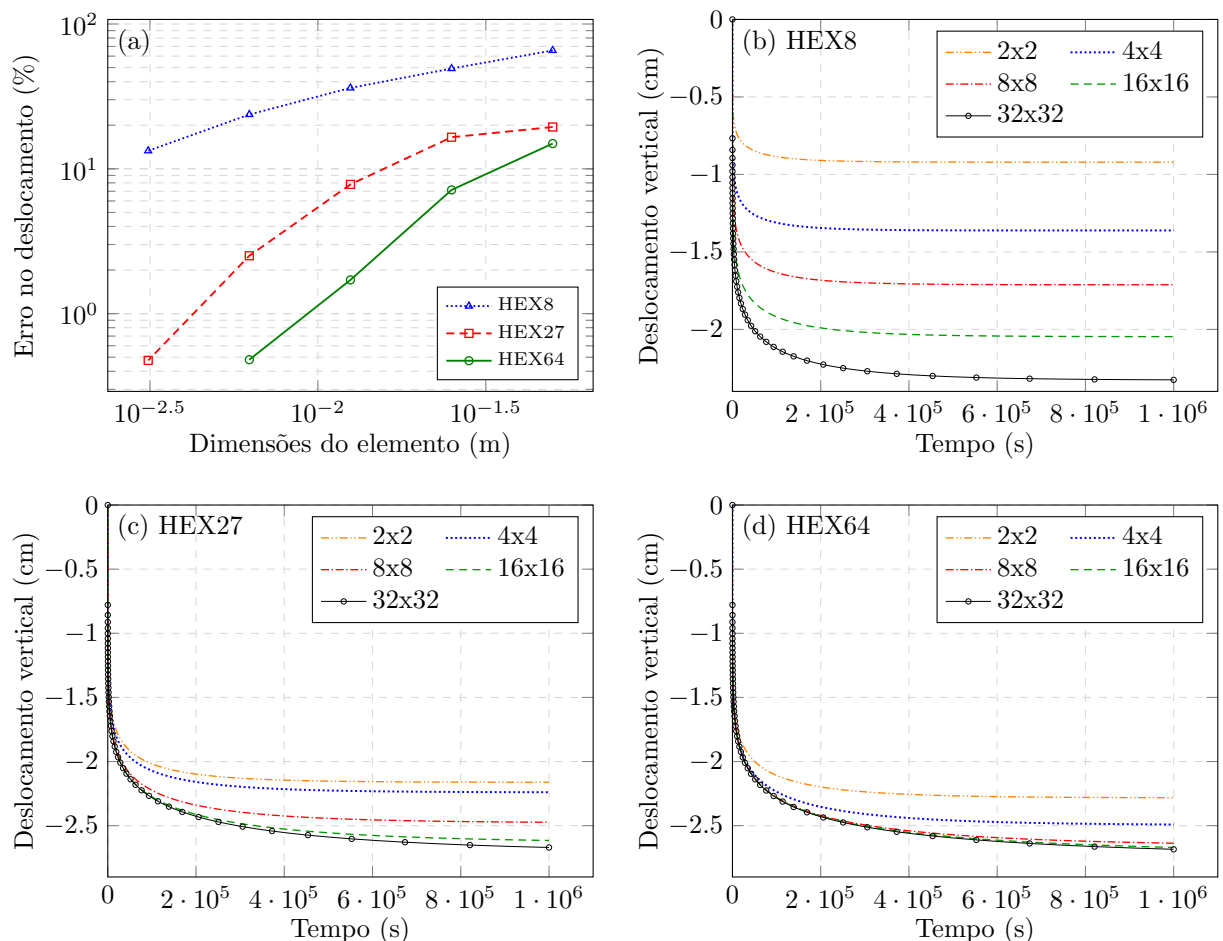
Nesta análise, considera-se que a força distribuída p , aplicada no cilindro, possui valor 21 MPa, fixo ao longo de um intervalo total de 10^6 s. Aqui, utiliza-se uma abordagem diferente para a discretização temporal: ao invés de intervalos de tempo fixos, os valores de Δt evoluem conforme uma progressão 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 $1,28356 \cdot 10^{-6}$ s, e razão da progressão geométrica de 1,025, resultando em um Δt final de $2,43915 \cdot 10^{-4}$ s.

Adota-se, para este problema, elementos finitos hexaédricos (HEX8, HEX27 e HEX64) para discretizar o domínio do sólido. Para verificar a dependência de malha, são empregadas 15 malhas diferentes, sendo 5 para cada tipo de elemento. Uma vez que o problema é radialmente simétrico, o refinamento é aplicado apenas na direção radial do cilindro, sendo utilizadas malhas com 2×2 , 4×4 , 8×8 , 16×16 e 32×32 elementos em cortes raio por altura. O número de divisões na direção circunferencial do cilindro é mantido fixo para cada tipo de elemento, com valor apenas suficiente para representar adequadamente a geometria. Considerando o desempenho 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 necessário um bom 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 relativo do deslocamento máximo em cada caso, tomado com referência a solução obtida com a 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.

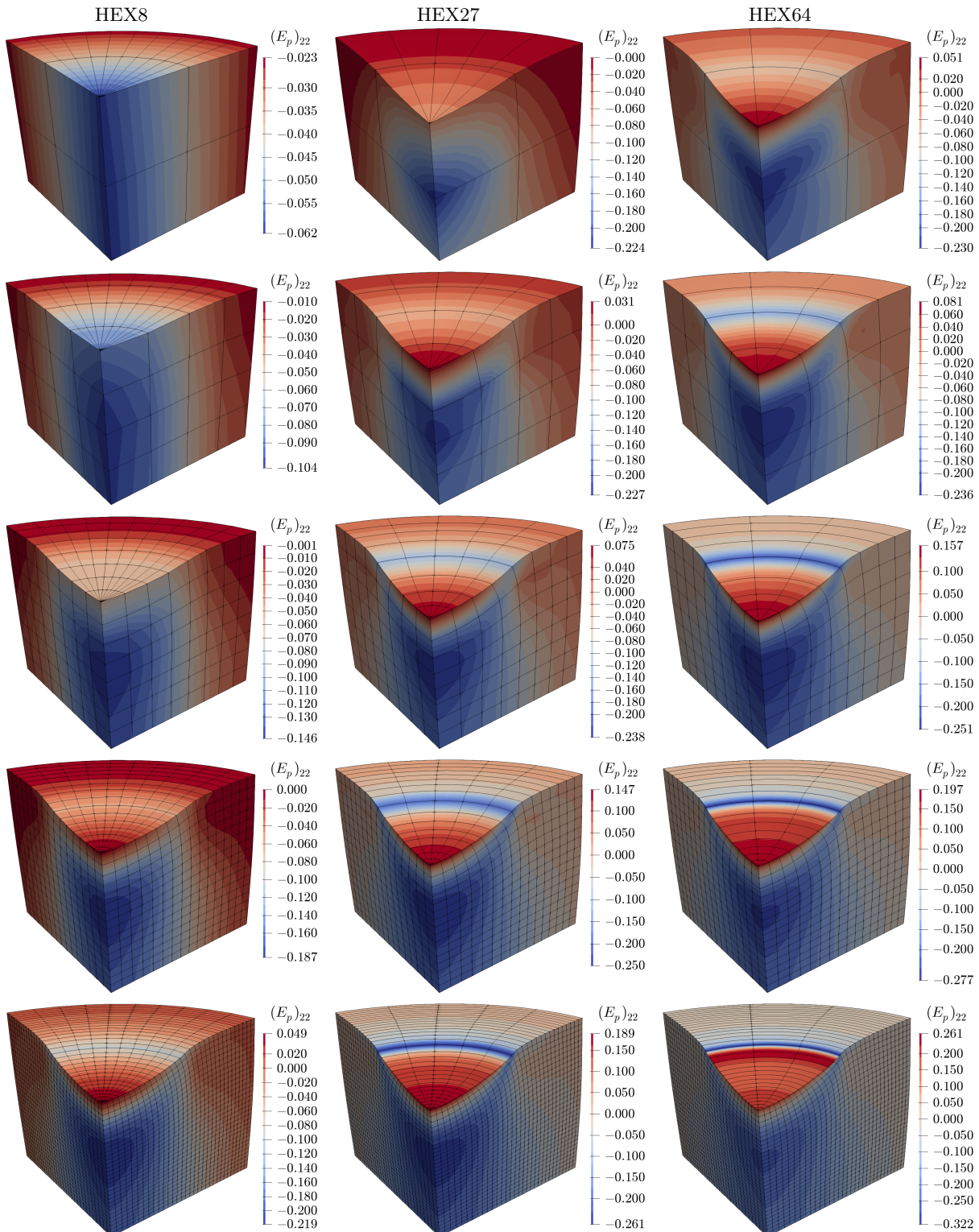
Figura 33 – Deslocamentos verticais no ponto A para o cilindro parcialmente comprimido submetido à fluência, considerando (a) erro do deslocamento com relação à malha HEX64/32x32, e diagramas de deslocamento ao longo do tempo para os casos com elementos (b) HEX8, (c) HEX27 e (d) HEX64



Fonte: Elaborado pelo autor

Os dados do problema relacionados ao desempenho 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 Figura 35(a). Observa-se que a malha mais refinada (HEX64/32x32) possui um tempo de execução aproximadamente 5.1 vezes maior do que

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



Fonte: Elaborado pelo autor

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 precisão tão alta não seja 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.

Tabela 2 – Dependência 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								

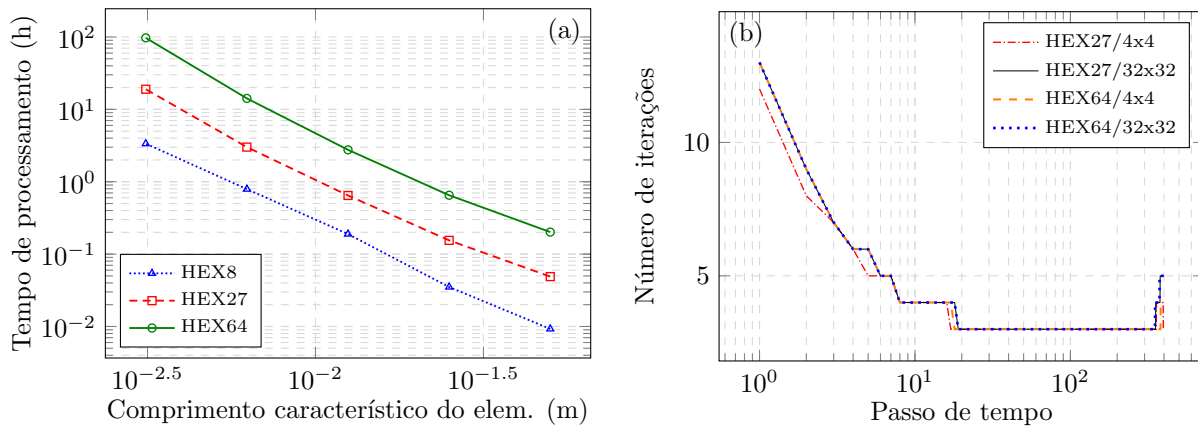
Fonte: Elaborado pelo autor

A [Figura 35\(b\)](#) apresenta o número de iterações globais do método de Newton-Raphson por passo de tempo para alguns casos selecionados, seguindo-se o critério de parada descrito na [subseção 2.3.4](#). Observa-se que, embora os intervalos de tempo sejam menores nos passos iniciais, o número de 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: análise de dependência do passo 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 dependência da discretização temporal. Para isso, toma-se uma malha fixa (HEX64/8x8), e 5 diferentes discretizações temporais, com 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

Figura 35 – Malha vs. custo computacional: (a) tempo de processamento para diferentes malhas e (b) número de iterações por passo de tempo



Fonte: Elaborado pelo autor

A), o número total de iterações e o tempo de processamento.

Tabela 3 – Análise de convergência para a discretização temporal do cilindro parcialmente comprimido sob fluência

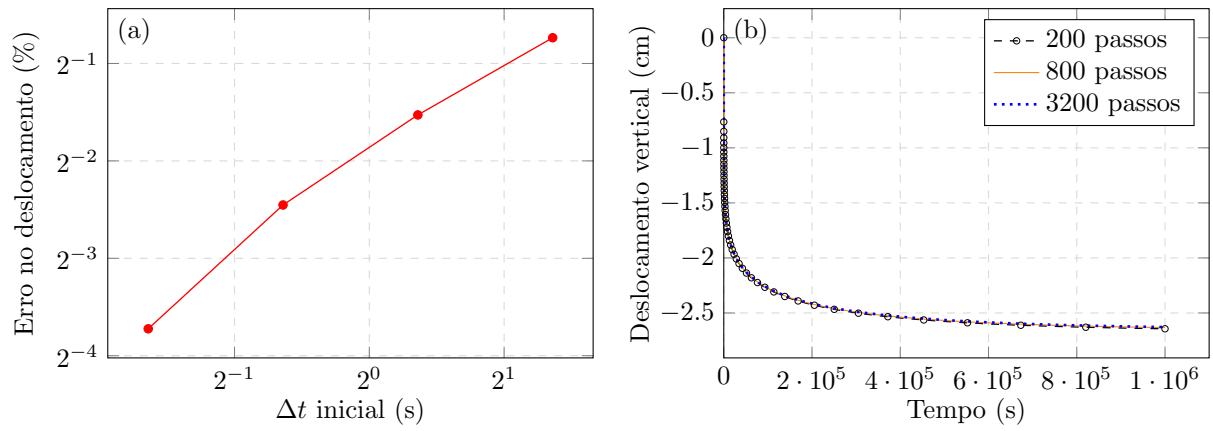
NPT	Δt inicial (s)	razão da PG	Δt final (s)	DESLY (cm)	IT-M	TP (s)	TP-EF (s)
200	$2.56711985 \cdot 10^0$	1.05069781	$4.82540019 \cdot 10^4$	-2.64364	4.6300	7274.8	7062.8
400	$1.28355992 \cdot 10^0$	1.02500000	$2.43914962 \cdot 10^4$	-2.63698	3.2075	9932.6	9719.4
800	$6.41779962 \cdot 10^{-1}$	1.01241411	$1.22625256 \cdot 10^4$	-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

Fonte: Elaborado pelo autor

Como esperado, os tempos de processamento total e efetivos são maiores para os casos 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. Esses resultados indicam que, para a técnica adotada e para este exemplo, a discretização temporal apresenta influência pequena. Os erros com relação ao caso mais refinado (3200 passos) podem ser vistos na [Figura 36\(a\)](#), e a evolução dos deslocamentos ao longo do tempo no ponto A é mostrada na [Figura 36\(b\)](#) para alguns passos de tempo selecionados, sendo notável a similaridade entre os casos analisados.

Figura 36 – Cilindro parcialmente comprimido sob fluência - Dependência da discretização temporal: (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



Fonte: Elaborado pelo autor

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 4.4](#) 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 a deformação térmica, e \mathbf{F}_m , definido na configuração intermediária térmica (Ω_θ), representa a deformação mecânica. Utilizando como base o modelo viscoelástico-viscoplástico, em particular as decomposições introduzidas na [seção 5.1](#), pode-se escrever $\mathbf{F}_m = \mathbf{F}_{ve} \mathbf{F}_p$, onde $\mathbf{F}_{ve} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_v$ representa a deformação viscoelástica, e $\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{pe} \mathbf{F}_{pi} = \mathbf{F}_{\tilde{p}e} \mathbf{F}_{\tilde{p}v}$ a deformação plástica.

Assim como na [seção 4.4](#), neste caso são consideradas 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 para o alongamento à direita de Cauchy-Green, gradiente da velocidade da mudança de configuração e taxa de deformação Euleriana:

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

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

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

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, pode-se obter as seguintes expressões:

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

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

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

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 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. (4.29), 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,

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

Para se propor um modelo termodinamicamente consistente, isto é, cujas equações respeitem a primeira e segunda lei da termodinâmica (Eq. (3.20) e na Ineq. (3.21)), é necessário primeiramente calcular a taxa da energia livre de Helmholtz. Com base nas Eqs. (6.10) e (6.11), e sabendo-se que λ_θ e ψ_θ dependem apenas da temperatura, segue-se que:

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

Utilizando a Eq. (6.6), pode-se escrever

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

Considerando ψ_e^∞ isotrópico, resulta que $\partial\psi_e^\infty/\partial\mathbf{E}_{ve}$ 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, fazendo uso da identidade tensorial $\mathbf{A} : (\mathbf{BCD}) = (\mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{D}^T) : \mathbf{C}$ em todos os termos, a Eq. (6.13) pode ser reescrita como:

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

onde $\text{tr}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} : \mathbf{I}$ representa o traço de um tensor. Considerando também que ψ_e , ψ_{pe}^{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:

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

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

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

Aplicando a Eq. (6.6) na Eq. (6.15) e realizando manipulações algébricas similares às anteriores, resulta, 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, escreve-se:

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

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

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

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

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

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

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

e a segunda como:

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

Seguindo novamente o postulado de Coleman e Noll (1963), as expressões acima devem ser válidas para quaisquer valores de $\dot{\mathbf{E}}$ e $\dot{\theta}$. Tomando os conjugados termodinâmicos desses termos como zero, segue-se que a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie e a entropia são dadas, respectivamente, pelas expressões:

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

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

onde \mathbf{S}_m equivale à tensão do modelo puramente mecânico, definida na Eq. (5.7), e η_m representa a parcela mecânica da entropia. 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, escreve-se a parcela mecânica da entropia como

$$\eta_m = -\lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (6.27)$$

e, conseqüentemente, a entropia como

$$\eta = -\frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} + \eta_m = -\frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m}{\partial\theta} + \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m\right) \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta}. \quad (6.28)$$

A entropia total de um sistema fechado não deve ser negativa, embora possa ser localmente negativa em alguns casos. Logo, a energia livre de Helmholtz deve satisfazer as condições $\partial\psi_\theta/\partial\theta \leq 0$ e $\partial\psi_m/\partial\theta \leq 0$, garantindo que os seus termos associados na Eq. (6.28) sejam maiores ou iguais a zero. No entanto, o último termo da Eq. (6.28) é negativo se $\mathbf{C} : \mathbf{S} < 3\lambda_\theta^3 \psi_m$, o que pode ocorrer, por exemplo, quando o material está sob tensão uniaxial compressiva. Embora isso indique uma inconsistência física, isso não implica necessariamente na negatividade da entropia total do sistema. Além disso, como o termo é multiplicado pelo coeficiente de expansão térmica ($\partial\lambda_\theta/\partial\theta$), que tipicamente apresenta uma magnitude menor em comparação aos outros componentes, ele é frequentemente desconsiderado em análises práticas.

Suponha que $\boldsymbol{\chi}$ 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, ψ pode ser expresso alternativamente apenas em função de θ , \mathbf{E} e $\boldsymbol{\chi}$, isto é, $\psi = \psi(\theta, \mathbf{E}, \boldsymbol{\chi})$. Nesse caso, é possível demonstrar que as Eqs. (6.25) e (6.28) são equivalentes a

$$\mathbf{S} = \left(\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{E}} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} \quad \text{e} \quad \eta = \left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}}. \quad (6.29)$$

O critério de escoamento e as 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), (5.18), (5.19), e (5.20). Aplicando-as, juntamente com as demais relações constitutivas, na Eq. (6.23) e na Ineq. (6.24), reescreve-se a primeira e a segunda leis da termodinâmica como

$$\theta\dot{\eta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad (6.30)$$

$$d_{\text{int}} = d_m - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \quad (6.31)$$

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

$$d_m = \lambda_\theta^3 \left(\dot{\gamma} \|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \frac{1}{\mu_v} \|\mathbf{M}_e^D\|^2 + \dot{\gamma} \frac{b}{c} \|\mathbf{M}_p^D\|^2 + \frac{1}{\mu_p^{\text{cin}}} \|\mathbf{M}_{\tilde{p}}^D\|^2 + \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma} \sigma_\kappa \right), \quad (6.32)$$

similar à dissipação calculada na Eq. (5.21) 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. (6.31) ($-\frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta$) 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 (6.30), é possível obter a seguinte relação:

$$\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} = \dot{\psi} + d_m + \dot{\theta}\eta, \quad (6.33)$$

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 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. A Eq. (6.33) pode ser reescrita puramente em termos de componentes mecânicos, através da seguinte expressão:

$$\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m + d_m + \dot{\theta}\eta_m. \quad (6.34)$$

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 para a solução do problema mecânico não deve levar em conta variações de temperatura ou de λ_θ . Dessa forma, a variação da tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie pode ser calculada como

$$\Delta \mathbf{S} = \lambda_\theta \Delta \mathbf{S}_m = \lambda_\theta \mathfrak{C}_m : \Delta \mathbf{E}_m \quad (6.35)$$

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. (6.35) pode ser reescrita como

$$\Delta \mathbf{S} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m : \Delta \mathbf{E}. \quad (6.36)$$

Logo, por associação com a Eq. (5.29), o operador tangente consistente do modelo termo-viscoelástico-viscoplástico pode ser expresso como

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m. \quad (6.37)$$

6.4 Equação da condução de calor

A fim de obter uma forma aplicável da equação da condução de calor (6.30), resta apenas desenvolver o termo $\dot{\eta}$. Para isso, pode-se escrever a entropia apenas em função de θ , \mathbf{E} , e das variáveis internas $\boldsymbol{\chi}$, isto é, $\eta = \eta(\theta, \mathbf{E}, \boldsymbol{\chi})$. Logo, segue-se que:

$$\dot{\eta} = \frac{1}{\theta} c_v^* \dot{\theta} + \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{T}_\chi : \dot{\boldsymbol{\chi}}, \quad (6.38)$$

onde

$$c_v^* = \theta \left(\frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}}, \quad \mathbf{T}_{\mathbf{E}} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}}. \quad (6.39)$$

Os tensores $\mathbf{T}_{\mathbf{E}}$ e $\mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}}$ são denominados operadores termomecânicos. Partindo da Eq. (6.28), é possível calculá-los como:

$$\mathbf{T}_{\mathbf{E}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} + \lambda_{\theta}^{-1} \left[\mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\theta, \boldsymbol{\chi}} - \mathbf{S} \right] \frac{\partial \lambda_{\theta}}{\partial \theta}, \quad \text{e} \quad (6.40)$$

$$\mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} = -\lambda_{\theta}^3 \left(\frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \theta \partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} + \left[\lambda_{\theta}^{-1} \mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} - 3\lambda_{\theta}^2 \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \boldsymbol{\chi}} \right)_{\theta, \mathbf{E}} \right] \frac{\partial \lambda_{\theta}}{\partial \theta}. \quad (6.41)$$

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

$$c_v^* = c_v + c_v^m, \quad (6.42)$$

onde c_v é a sua parcela puramente térmica, calculada como

$$c_v = -\theta \frac{\partial^2 \psi_{\theta}}{\partial \theta^2}, \quad (6.43)$$

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

$$\begin{aligned} c_v^m = & -\lambda_{\theta}^3 \theta \left(\frac{\partial^2 \psi_m}{\partial \theta^2} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}} + \theta \left[\lambda_{\theta}^{-1} \mathbf{C} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}} - 6\lambda_{\theta}^2 \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} \right)_{\mathbf{E}, \boldsymbol{\chi}} \right] \frac{\partial \lambda_{\theta}}{\partial \theta} \\ & + \theta \left(-\lambda_{\theta}^{-2} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 6\lambda_{\theta} \psi_m \right) \left(\frac{\partial \lambda_{\theta}}{\partial \theta} \right)^2 + \theta \left(\lambda_{\theta}^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_{\theta}^2 \psi_m \right) \frac{\partial^2 \lambda_{\theta}}{\partial \theta^2}. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Aplicando-se a Eq. (6.38) na Eq. (6.30), obtém-se a forma local da equação da condução de calor:

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

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

$$q_m = \mathbf{T}_{\mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{T}_{\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}}. \quad (6.46)$$

Como visto na Eq. (6.45), os termos de dissipação mecânica (d_m) e de acoplamento termomecânico ($-\theta q_m$) desempenham o mesmo papel que o calor interno fornecido (r): adicionar ou remover calor do sistema. Valores positivos no lado direito da Eq. (6.45) indicam uma tendência do sistema de aumentar a temperatura, enquanto valores negativos indicam uma tendência de diminuir a temperatura. A partir da Eq. (6.32), 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 (KAMLAH; HAUPT, 1997; BENZERGA et al.,

2005). Para contabilizar esse efeito, vários estudos propõem o uso de um multiplicador no termo de dissipação mecânica (LEE, 1969; ALLEN, 1991). Dessa forma, a Eq. (6.47) se torna:

$$c_v^* \dot{\theta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = r + \beta_{tq} d_m - \theta q_m, \quad (6.47)$$

onde o multiplicador β_{tq} , frequentemente denominado coeficiente de Taylor-Quinney (TAYLOR; QUINNEY, 1934; BENAARBIA et al., 2019), representa a fração de energia convertida em calor durante a deformação inelástica, geralmente estimada empiricamente em torno de 0.9 (LEE, 1969; LEE; CHEN, 2001).

Ao contrário da taxa de dissipação mecânica, o termo de acoplamento termomecânico ($-\theta q_m$) 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/viscoplástica. Esse fenômeno é discutido em (HSU, 2012), 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 (ALLEN, 1991).

De forma análoga ao caso termo-elástico, pode-se multiplicar a Eq. (6.45) por uma função ponderadora $\delta\theta$, integrar no volume inicial, e realizar manipulações algébricas similares à seção 4.5. Disso resulta a equação da condução de calor em sua forma fraca variacional:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_0} c_v^* \dot{\theta} \delta\theta dV_0 + \int_{\Omega_0} (\mathbf{K}_0 \cdot \nabla_0 \theta) \cdot (\nabla_0 \delta\theta) dV_0 + \int_{\Gamma_0} \bar{q}_0 \delta\theta dS_0 \\ - \int_{\Omega_0} (r + \beta_{tq} d_m - \theta q_m) \delta\theta dV_0 = 0, \end{aligned} \quad (6.48)$$

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, com base na técnica de Bubnov-Galerkin, para solução numérica da Eq. (6.48). 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 termomecânico, adota-se o método bloco-iterativo descrito na subseção 4.6.1.

6.5 Exemplos numéricos aplicados ao PTFE

Nesta seção, o material politetrafluoretileno (PTFE), previamente discutido na seção 5.6, é reanalisado sob uma perspectiva térmica, com foco no comportamento dissipativo dos seus componentes inelásticos, e nas variações de temperatura correspondentes. Os parâmetros mecânicos permanecem definidos conforme a Tabela 1, enquanto os parâmetros térmicos

adotados são os da [Tabela 4](#). Para o modelo de expansão térmica, considera-se a lei exponencial apresentada na [seção 4.4](#).

Tabela 4 – Parâmetros térmicos utilizados para o material politetrafluoretileno (PTFE)

c_v (MPa/K)	k (MW/(m·K))	α	θ_0 (K)	β_{tq}
3,3	$0,283 \cdot 10^{-6}$	$1,25 \cdot 10^{-4}$	294	0,9

Fonte: Elaborado pelo autor

6.5.1 Ensaios de carregamento monotônico

Retoma-se o exemplo de carregamento monotônico discutido na [subseção 5.7.1](#), utilizando as mesmas taxas de deformação. Desta vez, no entanto, é permitida a variação de temperatura no material, resultante dos termos de dissipação mecânica e do acoplamento termomecânico na equação da condução de calor. Assume-se uma temperatura inicial de 20,85 °C ou 294 K em todos os casos. Para simplificar a análise, supõe-se que as amostras analisadas são termicamente isoladas, de modo que as variações de temperatura não se dissipam para o ambiente.

Na [Figura 37\(a\)](#), são apresentados os gráficos de temperatura para todos os casos analisados. Esses gráficos exibem um comportamento notavelmente crescente, exceto no início da análise, quando o material encontra-se em regime viscoelástico e as variações de temperatura são menos expressivas. Embora as variações se tornem mais perceptíveis no regime viscoplástico, elas permanecem moderadas, com incrementos entre 1 K e 1,5 K em relação à temperatura inicial. São observados maiores incrementos de temperatura nos casos com taxas de deformação mais elevadas, refletindo uma maior taxa de dissipação nesses casos.

Na [Figura 37\(b\)](#), são exibidos os gráficos de tensão e deformação compressivas de engenharia para a análise térmica, comparados com os resultados isotérmicos da [subseção 5.7.1](#). As diferenças observadas são desprezíveis em todos os cenários, o que era esperado, uma vez que o baixo coeficiente de expansão térmica do PTFE, aliado às baixas variações de temperatura obtidas, provocam alongamentos térmicos muito próximos de 1, fazendo com que \mathbf{S} recaia aproximadamente em \mathbf{S}_m na Eq. (6.25).

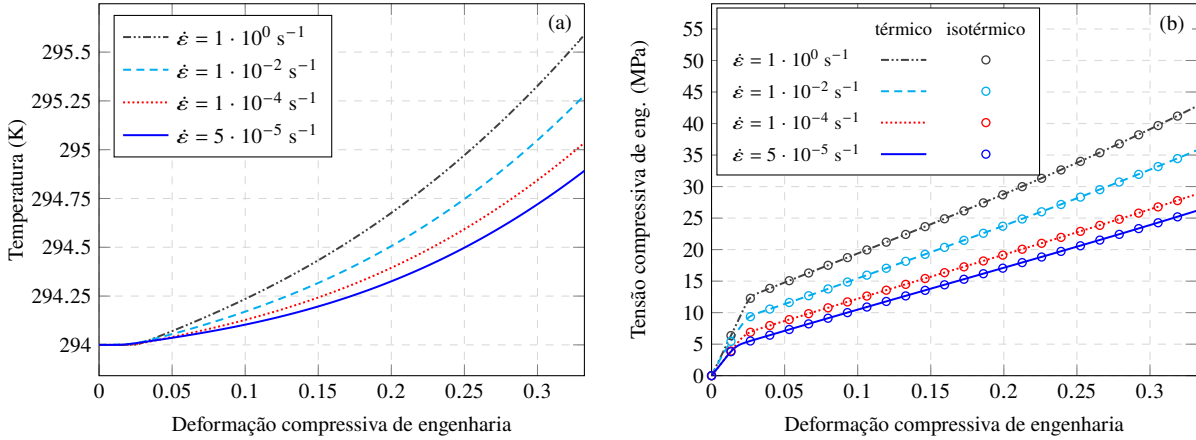
Para investigar o comportamento dissipativo do modelo, analisa-se também a relação entre a taxa da dissipação mecânica e a taxa de energia de Helmholtz enquanto componentes da taxa de trabalho interno, seguindo a decomposição da Eq. (6.33). Para este problema uniaxial, a taxa de trabalho interno pode ser simplificada para $S\dot{E}$, onde S é a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie uniaxial e \dot{E} é a taxa de deformação uniaxial de Green-Lagrange. Portanto, a Eq. (6.34) pode ser simplificada como:

$$S\dot{E} - \lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m - d_m - \dot{\theta} \eta_m = 0. \quad (6.49)$$

Usando relações discutidas no [Capítulo 2](#), pode-se mostrar que

$$S\dot{E} = (JF^{-1})\sigma\dot{\epsilon}, \quad (6.50)$$

Figura 37 – Ensaio de carregamento monotônico em PTFE considerando efeitos termomecânicos: (a) temperatura e (b) tensão-deformação



Fonte: Elaborado pelo autor

e a taxa de energia livre de Helmholtz mecânica pode ser calculada numericamente usando o método de Euler, ou seja, para cada passo de tempo s , assume-se:

$$\dot{\psi}_m^s = \frac{\psi_m^s - \psi_m^{s-1}}{\Delta t}, \quad (6.51)$$

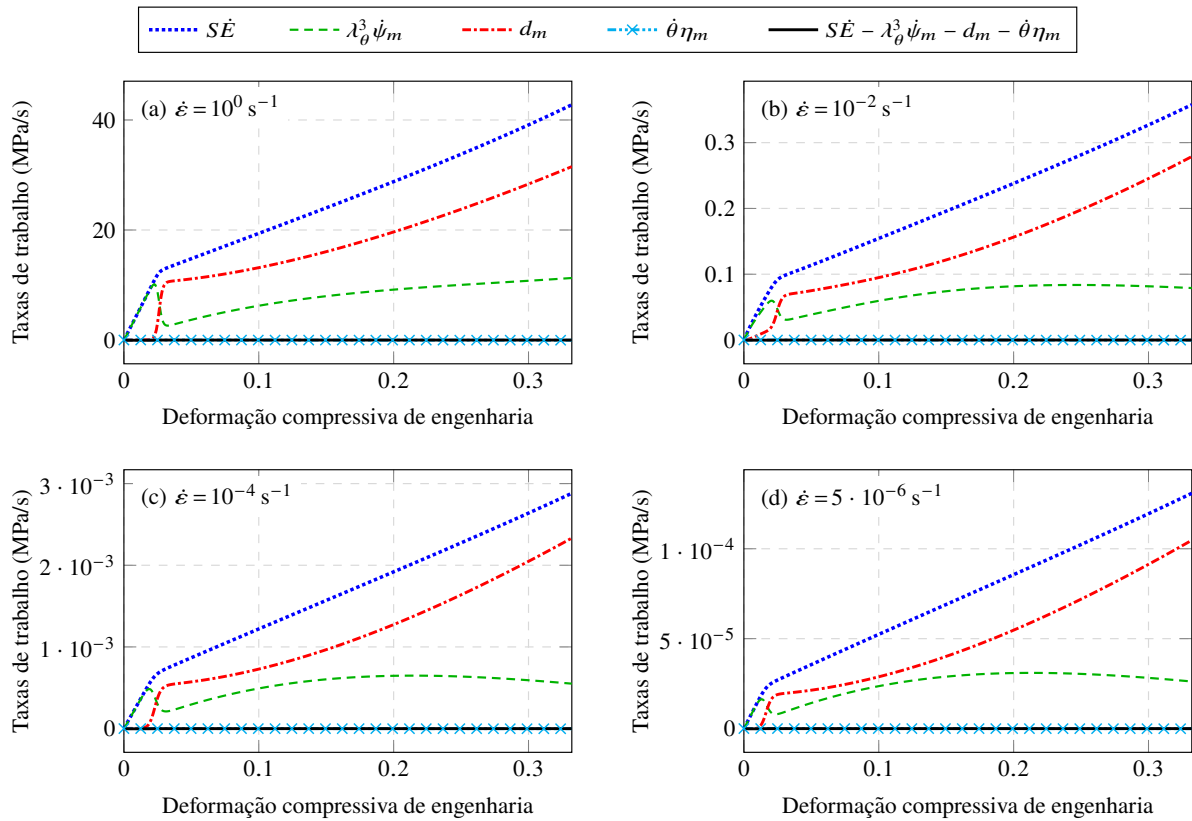
onde a energia livre de Helmholtz no passo atual (ψ^s) e no passo anterior (ψ^{s-1}) podem ser calculadas usando a Eq. (6.53). A taxa de dissipação mecânica e a parcela mecânica da entropia são obtidas diretamente pelas Eqs. (6.27) e (6.32), respectivamente, e a taxa de temperatura também pode ser calculada pelo método de Euler.

Na Figura 38, são apresentadas as evoluções da taxa de trabalho interno, da taxa de energia livre de Helmholtz mecânica, da taxa de dissipação mecânica, e do termo associado à entropia. Além disso, para verificar a condição especificada na Eq. (6.49), também é apresentado o gráfico do erro $S\dot{E} - \lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m - d_m - \eta_m \dot{\theta}$. Como pode ser visto, esse erro apresenta valores suficientemente próximos de zero para todos os casos analisados, indicando a consistência do modelo.

Essa figura fornece uma representação visual da proporção de trabalho interno dissipado ao longo do processo para cada caso de taxa de deformação. É notável a variação do perfil dissipativo na transição entre o regime viscoelástico e o viscoplástico, com uma queda significativa de $\dot{\psi}_m$. Durante o regime viscoelástico, o valor de d_m é muito pequeno quando comparado a $S\dot{E}$, sendo mais visível no caso intermediário de taxa em que $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$. Já no regime viscoplástico, a proporção entre d_m e $S\dot{E}$ torna-se significativa em todos os casos, indicando que a maior parte do trabalho é dissipada. Nota-se ainda que os termos associados à entropia ($\eta_m \dot{\theta}$) são desprezíveis em todos os casos.

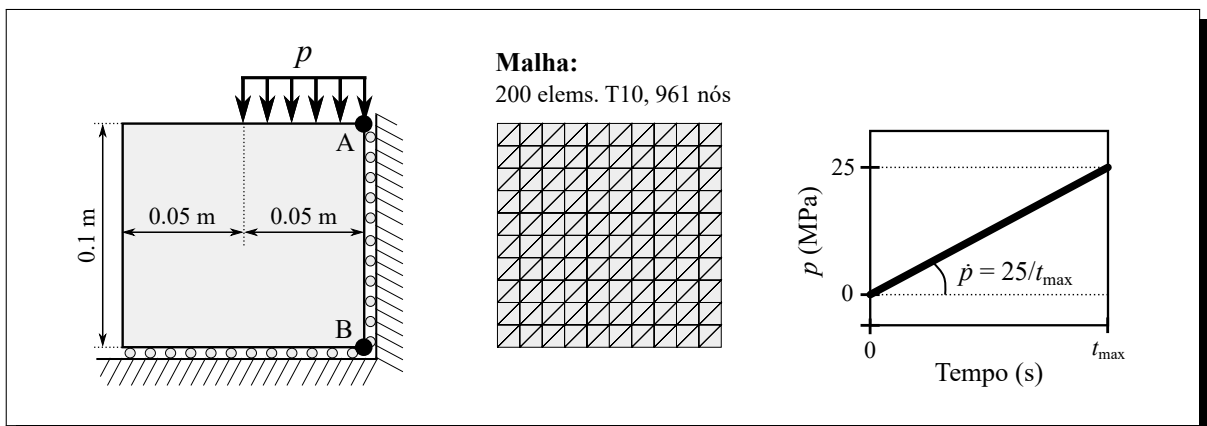
6.5.2 Cubo parcialmente carregado

Nesta subseção, analisa-se o problema bidimensional ilustrado na Figura 39, considerando o estado plano de deformação (EPD). A carga distribuída parcialmente aplicada (p)

Figura 38 – Taxas de trabalho para ensaios de carregamento monotônico em PTFE

Fonte: Elaborado pelo autor

varia linearmente de 0 a 25 MPa ao longo de um intervalo de tempo t_{\max} , resultando em $\dot{p} = 25/t_{\max}$. São analisados 5 casos diferentes de \dot{p} : 10^{-2} , 10^{-1} , 10^0 , 10^1 e 10^2 MPa/s.

Figura 39 – Geometria e condições de contorno para o cubo de PTFE parcialmente carregado

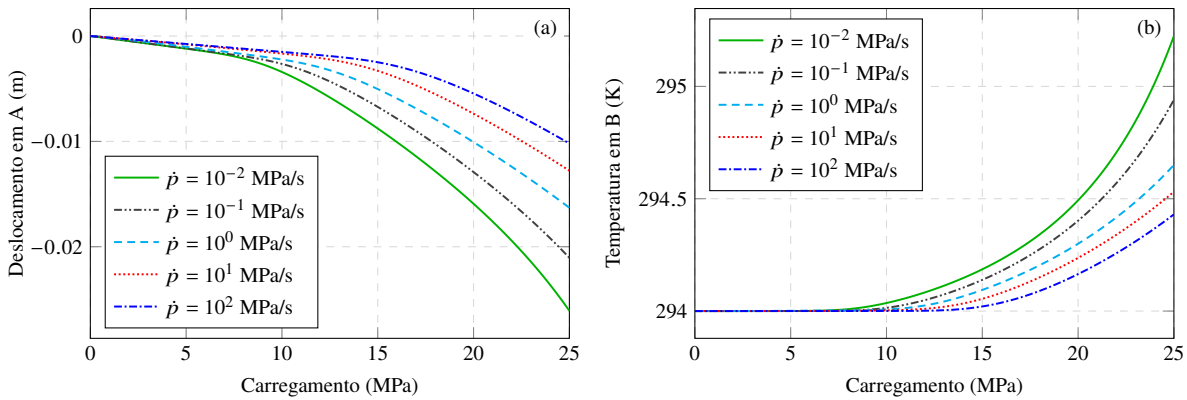
Fonte: Elaborado pelo autor

Considera-se novamente uma temperatura $\theta_0 = 294 \text{ K}$, aplicada como condição inicial no estado indeformado, uniforme em todo o domínio. Não são aplicadas condições de contorno térmicas, mas o campo de temperatura pode variar devido a efeitos termomecânicos.

Assume-se que o cubo está termicamente isolado, o que significa que as variações de temperatura não se dissipam para o ambiente.

Na [Figura 40](#), são apresentados os gráficos do deslocamento vertical no ponto A (canto superior direito) e da temperatura no ponto B (canto inferior direito). Como observado em exemplos anteriores, a taxa de aplicação das condições de contorno afeta significativamente o comportamento mecânico de materiais viscoelásticos-viscoplásticos, o que também se reflete na resposta térmica. Neste caso, o aumento da taxa de carregamento causa uma redução (em magnitude) nas deformações do material, diminuindo a amplitude dos deslocamentos e, conseqüentemente, da variação de temperatura. Esse comportamento contrasta com o do exemplo anterior, onde as variações de temperatura eram maiores com taxas de deformação mais elevadas. Isso ressalta as diferenças fundamentais entre problemas com deformação prescrita e com tensão ou carregamento prescritos.

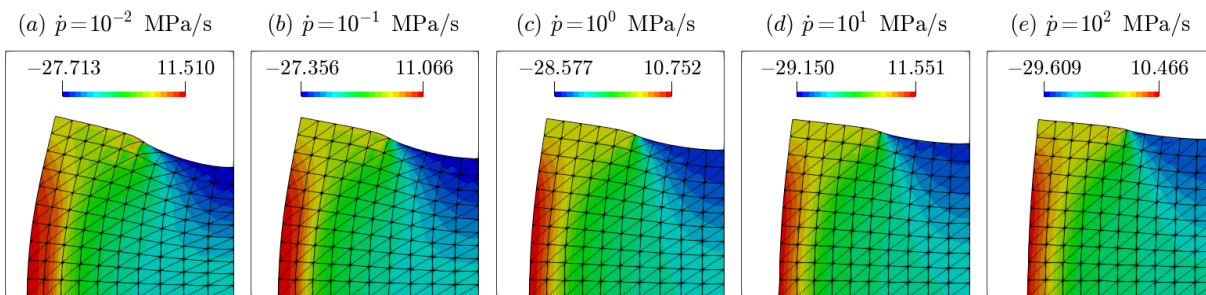
Figura 40 – Cubo parcialmente comprimido: (a) deslocamento vertical no ponto A e (b) temperatura no ponto B.



Fonte: Elaborado pelo autor

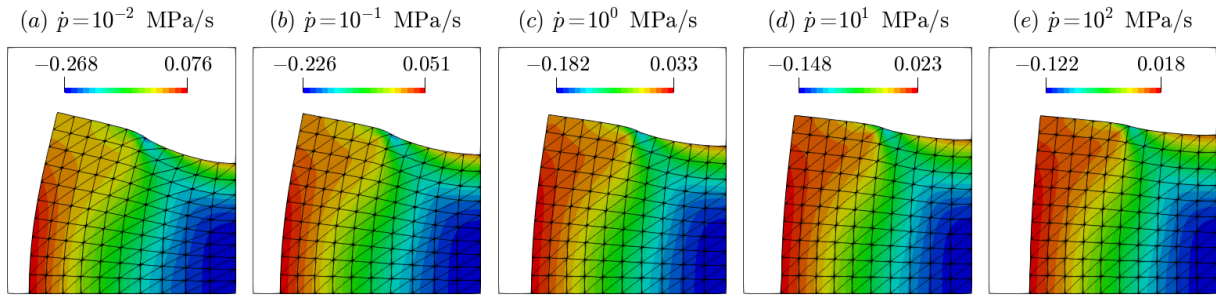
Nas [Figuras 41 a 43](#) são apresentadas as configurações deformadas finais para todos os casos de taxas de carregamento, com mapas de cores indicando σ_{22} , E_{22} e θ , respectivamente, onde o eixo 2 indica a direção vertical. Observa-se um maior aumento de temperatura ao redor do canto inferior direito, região onde as deformações são mais expressivas.

Figura 41 – Cubo parcialmente carregado: distribuição do componente de tensão normal de Cauchy vertical (σ_{22}) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento



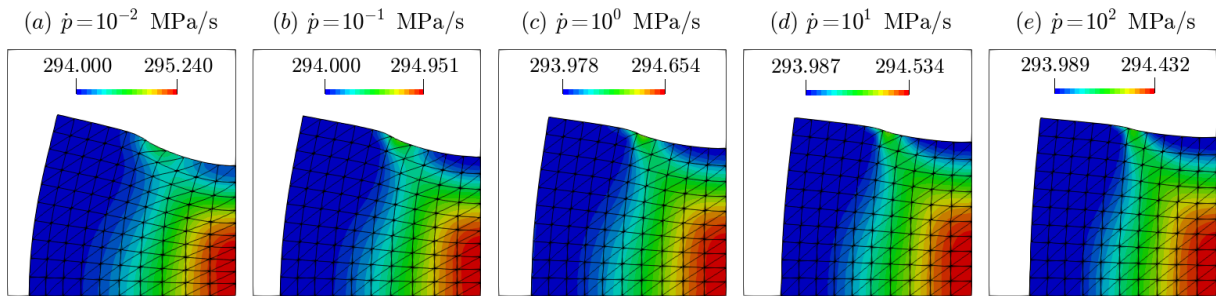
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 42 – Cubo parcialmente carregado: distribuição do componente vertical da deformação de Green-Lagrange (E_{22}) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 43 – Cubo parcialmente carregado: distribuição de temperatura (θ) sobre a configuração final para diferentes taxas de carregamento



Fonte: Elaborado pelo autor

Para analisar as taxas de trabalho em todo o domínio, a Eq. (6.34) é integrada sobre o volume inicial, resultando na seguinte relação:

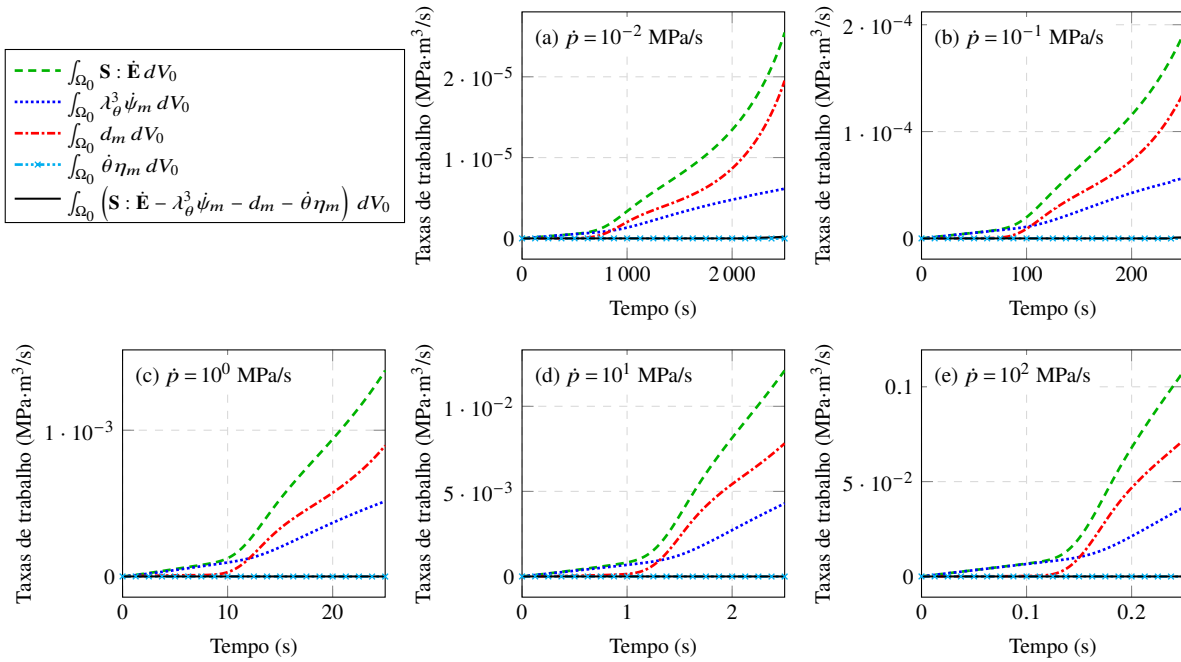
$$\int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} dV_0 - \int_{\Omega_0} \lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m dV_0 - \int_{\Omega_0} d_m dV_0 - \int_{\Omega_0} \eta_m \dot{\theta} dV_0 = 0. \quad (6.52)$$

Os componentes da Eq. (6.52) representam, respectivamente, a taxa total de trabalho interno, a taxa total de energia de Helmholtz mecânica, a taxa total de dissipação mecânica, e o termo relacionado à entropia. Na Figura 44, é apresentada a evolução temporal de cada componente da Eq. (6.52) para cada taxa de carregamento. O resultado da Eq. (6.52) também é apresentado nesses gráficos, mostrando valores próximos de zero em todas as instâncias, o que indica a consistência da implementação numérica.

Esta análise fornece uma compreensão geral de quanto do trabalho no domínio é convertido em esforço mecânico e quanto é dissipado. Observa-se que o termo relacionado à entropia é desprezível neste exemplo, e a proporção entre a taxa de trabalho interno e a taxa de dissipação mecânica é semelhante em todos os casos de \dot{p} , embora as curvas apresentem perfis distintos, e as ordens de magnitude dos gráficos variem significativamente entre os casos.

6.6 Modelo com viscosidade aprimorada

No modelo reológico da Figura 21, as componentes viscosas são representadas por uma associação em série de uma mola (parcela hiperelástica) e um pistão (parcela viscosa).

Figura 44 – Cubo parcialmente carregado: taxas de trabalho

Fonte: Elaborado pelo autor

Esse arranjo é comumente denominado modelo de Maxwell.

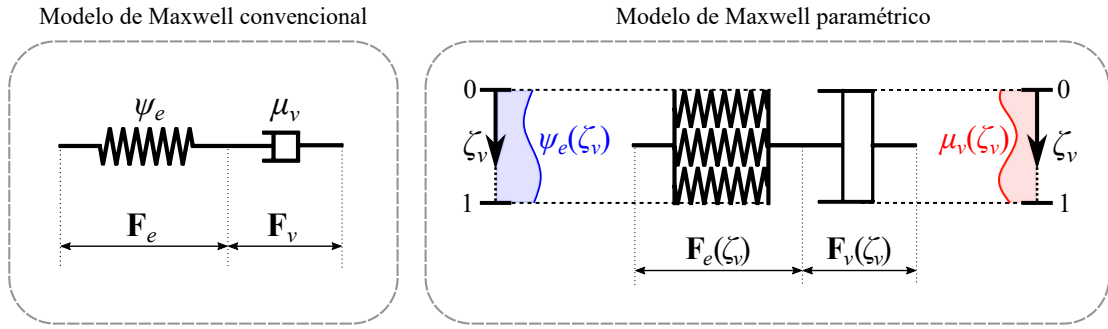
Alguns materiais podem apresentar um comportamento viscoso mais complexo, com perfis de relaxação que não podem ser capturados através de um modelo de Maxwell convencional. Para esses casos, utiliza-se comumente na literatura um modelo de Maxwell generalizado, onde vários elementos de Maxwell são associados em paralelo. Ao adotar diferentes constantes de rigidez e coeficientes de viscosidade para cada um desses elementos, é possível representar perfis de viscosidade mais variados e complexos, ajustando o modelo para refletir, de maneira mais precisa, a resposta do material.

Neste trabalho, é proposto um modelo de Maxwell alternativo, onde as constantes de rigidez e de viscosidade são definidas por funções paramétricas, variando ao longo de um domínio adimensional. Essa estratégia pode ser vista como uma versão contínua do modelo de Maxwell generalizado, permitindo capturar de forma mais suave os distintos perfis de relaxação. A representação reológica do modelo proposto pode ser vista na [Figura 45](#), comparada com o modelo de Maxwell convencional.

Aplicando o modelo paramétrico à componente viscoelástica da [Figura 21](#), escreve-se ψ_e e μ_v em função de um parâmetro ζ_v . As relações cinemáticas da [seção 6.1](#) permanecem válidas, com \mathbf{F}_e , \mathbf{F}_v e todas as medidas de deformação dependentes de \mathbf{F}_e e \mathbf{F}_v sendo agora consideradas como funções de ζ_v .

Analogamente, escreve-se o componente de encruamento cinemático viscoso como função de um parâmetro $\zeta_{\tilde{p}_v}$, e o componente de encruamento cinemático de Armstrong-Frederick como função de um parâmetro ζ_{p_i} .

Para padronizar a abordagem, assume-se que os parâmetros ζ_v , $\zeta_{\tilde{p}_v}$ e ζ_{p_i} variam entre

Figura 45 – Comparação entre os modelos reológicos viscosos convencional e paramétrico

Fonte: Elaborado pelo autor

0 e 1. Nesse contexto, a energia livre de Helmholtz pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} \psi_m = & \psi_e^\infty(\theta, \mathbf{E}_{ve}) + \int_0^1 \psi_e(\theta, \mathbf{E}_e(\zeta_v)) d\zeta_v + \int_0^1 \psi_{p_e}^{\text{cin}}(\theta, \mathbf{E}_{p_e}(\zeta_{p_i})) d\zeta_{p_i} \\ & + \int_0^1 \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}(\theta, \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}(\zeta_{\tilde{p}_v})) d\zeta_{\tilde{p}_v} + \psi_p^{\text{iso}}(\theta, \kappa). \end{aligned} \quad (6.53)$$

Seguindo o procedimento de Coleman-Noll com desenvolvimentos algébricos similares aos da [seção 6.2](#), são obtidas novamente as relações constitutivas:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \mathbf{S}_m \quad \text{e} \quad \eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \eta_m, \quad (6.54)$$

onde a parcela mecânica da entropia (η_m) permanece sendo definida através da Eq. (6.27), mas a tensão mecânica de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, neste caso, é dada por

$$\mathbf{S}_m = \mathbf{F}_p^{-1} \frac{\partial \psi_e^\infty}{\partial \mathbf{E}_{ve}} \mathbf{F}_p^{-T} + \int_0^1 \mathbf{F}_p^{-1} \mathbf{F}_v^{-1} \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}_e} \mathbf{F}_v^{-T} \mathbf{F}_p^{-T} d\zeta_v. \quad (6.55)$$

O critério de escoamento (5.12) e a lei de evolução plástica (5.14) seguem sendo definidos pelas mesmas expressões, mas, neste caso, a tensão relativa é dada por

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{M}_{ve} + \int_0^1 \mathbf{F}_v^T \mathbf{M}_e \mathbf{F}_v^{-T} d\zeta_v - \int_0^1 \mathbf{F}_{p_e} \frac{\partial \psi_{p_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{p_e}} \mathbf{F}_{p_e}^T d\zeta_{p_i} - \int_0^1 \mathbf{F}_{\tilde{p}_e} \frac{\partial \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}}}{\partial \mathbf{E}_{\tilde{p}_e}} \mathbf{F}_{\tilde{p}_e}^T d\zeta_{\tilde{p}_v}. \quad (6.56)$$

As leis de evolução viscosas e plásticas-inelásticas também são definidas pelas expressões originais (5.13), (5.18) e (5.19). No entanto, é importante destacar que elas agora são equações diferenciais parciais, que dependem não apenas do tempo, mas também dos seus respectivos parâmetros (ζ_v , ζ_{p_i} e $\zeta_{\tilde{p}_v}$).

Aplicando os desenvolvimentos da [seção 6.4](#), a equação da condução de calor é expressa ainda na forma da Eq. (6.47). Porém, neste caso, a taxa de dissipação mecânica é definida como:

$$\begin{aligned} d_m = & \lambda_\theta^3 \left(\dot{\gamma} \|\boldsymbol{\Sigma}^D\| + \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\gamma} \sigma_\kappa + \int_0^1 \frac{1}{\mu_v} \|\mathbf{M}_e^D\|^2 d\zeta_v \right. \\ & \left. + \int_0^1 \dot{\gamma} \frac{b}{c} \|\mathbf{M}_p^D\|^2 d\zeta_{p_i} + \int_0^1 \frac{1}{\mu_p^{\text{cin}}} \|\mathbf{M}_{\tilde{p}}^D\|^2 d\zeta_{\tilde{p}_v} \right), \end{aligned} \quad (6.57)$$

e o termo de acoplamento termomecânico pode ser expresso como:

$$q_m = \mathbf{T}_E : \dot{\mathbf{E}} + \int_0^1 \mathbf{T}_\chi : \dot{\boldsymbol{\chi}} d\zeta. \quad (6.58)$$

onde ζ denota, de forma geral, o parâmetro associado à variável interna $\boldsymbol{\chi}$.

Se as parcelas de energia e de viscosidade forem constantes em relação aos parâmetros, todas essas equações se reduzem às do modelo termo-viscoelástico-viscoplástico discutido nas Seções 6.1 a 6.4. Portanto, a formulação proposta pode ser vista como uma generalização desse modelo.

As integrais das Eqs. (6.53) e (6.55) a (6.58) são calculadas numericamente utilizando a quadratura de Gauss escalada para o domínio entre 0 e 1. Cada ponto de integração está associado a um conjunto diferente de variáveis internas, que devem ser calculadas utilizando-se suas respectivas leis de evolução.

6.7 Aplicação de modelo termo-viscoelástico: Adiprene-L100

O Adiprene-L100 é um material poliuretano conhecido por sua excelente resiliência, durabilidade e flexibilidade, tornando-o adequado para aplicações que exigem resistência superior a impactos e tolerância à abrasão. Para caracterizar seu comportamento mecânico, são utilizados os resultados experimentais de Khan e Lopez-Pamies (2002) e Khan, Lopez-Pamies e Kazmi (2006). Esses estudos, juntamente com Gray et al. (1997), mostram que o material exibe comportamento dependente da taxa de deformação e da temperatura, com deformações viscoplásticas significativamente menores em comparação com as viscoelásticas. Portanto, em um contexto prático, a resposta do material pode ser aproximadamente representada por um modelo termo-viscoelástico.

Utiliza-se nesta seção o modelo paramétrico proposto na seção 6.6. Para particularizá-lo ao caso termo-viscoelástico, assume-se que $\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{p_i} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{I}$, $\kappa = 0$, e $\psi_{p_e}^{\text{cin}} = \psi_{\tilde{p}_e}^{\text{cin}} = \psi_p^{\text{iso}} = 0$. Além disso, desconsideram-se as leis de evolução associadas à deformação plástica e aos modelos de encruamento.

O objetivo principal desta seção é definir os parâmetros do material para representar os resultados experimentais do Adiprene-L100 e validar o modelo termo-viscoelástico proposto. A subseção 6.7.1 foca na parcela mecânica do modelo, enquanto a subseção 6.7.2 considera o modelo termo-viscoelástico completo, incorporando a dependência dos parâmetros do material em relação à temperatura.

6.7.1 Problemas puramente mecânicos

Antes de considerar a parcela térmica, estuda-se exclusivamente a parcela mecânica do modelo constitutivo. Para isso, a variação de temperatura e todas as variáveis térmicas são desconsideradas. Nesse caso, são utilizados os resultados experimentais realizados sob condições constantes de temperatura ambiente de 20,85°C (294 K).

A referência experimental foca exclusivamente em problemas compressivos, onde se observa que as curvas tensão-deformação são notavelmente não lineares, com a rigidez

diminuindo à medida que a deformação aumenta. Esse comportamento é capturado pelo modelo neo-Hookeano aprimorado, descrito na [subseção 4.1.3](#). Considera-se essa lei hiperelástica no componente viscoelástico de longo prazo, definindo a sua parcela da energia de Helmholtz como:

$$\psi_e^\infty = \frac{\Lambda}{2} (\ln J_{ve})^2 + \frac{G_e^\infty}{a+1} \left[(\text{tr } \mathbf{E}_{ve} - \ln J_{ve} + \gamma_0)^{a+1} - (\gamma_0)^{a+1} \right]. \quad (6.59)$$

Na equação acima, Λ , G_e^∞ , γ_0 e a são parâmetros do material dependentes da temperatura. Adotando um valor negativo para a , obtém-se o comportamento desejado de diminuição da rigidez.

Já o componente elástico não-equilibrado da energia livre de Helmholtz é modelado como um material Neo-Hookeano convencional, sem parcela volumétrica. Ou seja:

$$\psi_e = G_e (\text{tr } \mathbf{E}_e - \ln J_e), \quad (6.60)$$

onde G_e é o módulo de elasticidade transversal não-equilibrado, definido em função da temperatura e do parâmetro ζ_v .

6.7.1.1 Correlações com modelos puramente hiperelásticos

Para calibrar o modelo viscoelástico, convém iniciar calibrando-se os modelos hiperelásticos associados. Para isso, são desconsideradas as deformações térmicas e viscosas, assumindo $\mathbf{F}_v = \mathbf{I}$ e $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{ve} = \mathbf{F}_e$. Portanto, ψ_e^∞ e ψ_e são escritos em termos de $\mathbf{C} = \mathbf{C}_{ve} = \mathbf{C}_e$, e ψ_m pode ser tratado como um modelo puramente hiperelástico. Além disso, G_e é tomado inicialmente como um parâmetro constante, em vez de paramétrico.

O componente ψ_e^∞ caracteriza a resposta do material em períodos de tempo infinitamente grandes. Portanto, para calibrar os parâmetros de ψ_e^∞ na Eq. (6.59), pode-se utilizar os resultados experimentais do ensaio de carregamento monotônico com a menor taxa de deformação disponível ($\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$), ou tensões após um longo período de relaxação em diferentes níveis de deformação. Para os resultados experimentais de [Khan e Lopez-Pamies \(2002\)](#), as duas opções são aproximadamente coincidentes, com diferenças maiores surgindo principalmente em níveis de deformação maiores. Nos casos divergentes, são seguidos os ensaios de relaxação, uma vez que este trabalho foca principalmente em representar com precisão as curvas de relaxação.

As curvas tensão-deformação produzidas por ψ_e^∞ são influenciadas principalmente pelos parâmetros G_e^∞ , γ_0 e a , com impacto comparativamente menor do parâmetro volumétrico Λ . Para calibrar com precisão este último, deve-se usar como referência os ensaios de deformação transversal.

A combinação de ψ_e^∞ e ψ_e caracteriza o comportamento do material em períodos de tempo infinitamente pequenos. Com isso em mente, os parâmetros de ψ_e são calibrados usando o ensaio de carregamento monotônico com a maior taxa de deformação disponível, $\dot{\varepsilon} = 1 \text{ s}^{-1}$. Opta-se por desconsiderar o caso com $\dot{\varepsilon} = 5000 \text{ s}^{-1}$, pois exhibe comportamentos oscilatórios não consistentes com os outros ensaios.

Dessa forma, são aplicados dois modelos hiperelásticos diferentes nesta seção: o primeiro, chamado Hiperelástico I, é dado por $\psi_m = \psi_e^\infty(\mathbf{C})$, sendo usado para representar os ensaios com maior duração. O segundo, chamado Hiperelástico II, é dado por $\psi_m = \psi_e^\infty(\mathbf{C}) + \psi_e(\mathbf{C})$, sendo usado para representar o ensaio com menor duração.

Os parâmetros calibrados para cada modelo são apresentados na [Tabela 5](#), e os resultados obtidos são mostrados na [Figura 46](#), comparados com seus respectivos equivalentes experimentais. Para a simulação numérica, aplica-se uma deformação axial de engenharia prescrita de $\varepsilon = 0$ a $\varepsilon = -0.25584$, variando linearmente ao longo de 100 passos de tempo. Note que a deformação axial de engenharia pode ser relacionada ao gradiente de deformação axial (F) através da expressão $F = 1 + \varepsilon$, e a deformação verdadeira axial pode ser calculada por $\epsilon = \ln(F^2)$.

A [Figura 46\(a\)](#) mostra a relação resultante entre tensão de Cauchy e deformação verdadeira (axiais e compressivas) para cada modelo. Como observado, um valor negativo de a resulta em uma diminuição da rigidez à medida que a deformação aumenta, consistente com as observações experimentais para este material. O Modelo Hiperelástico I exibe uma boa concordância média com os resultados de tensão de relaxação, mas, como discutido anteriormente, mostra pequenas divergências com o ensaio monotônico em valores de deformação mais elevados, começando em torno de $\epsilon = 0.3$. O Modelo Hiperelástico II também exibe uma concordância razoável com seu ensaio monotônico associado, embora enfrente algumas dificuldades em representar com precisão a excentricidade da curva em aproximadamente $\epsilon = 0.1$. Finalmente, na [Figura 46\(b\)](#), é exibida a relação entre deformações verdadeiras axiais e transversais (de compressão e de tração, respectivamente), que caracteriza o comportamento volumétrico do material. Como pode ser visto, os modelos I e II exibem uma forte concordância média com os resultados experimentais, demonstrando a consistência do parâmetro Λ aplicado.

Tabela 5 – Parâmetros calibrados dos modelos hiperelásticos

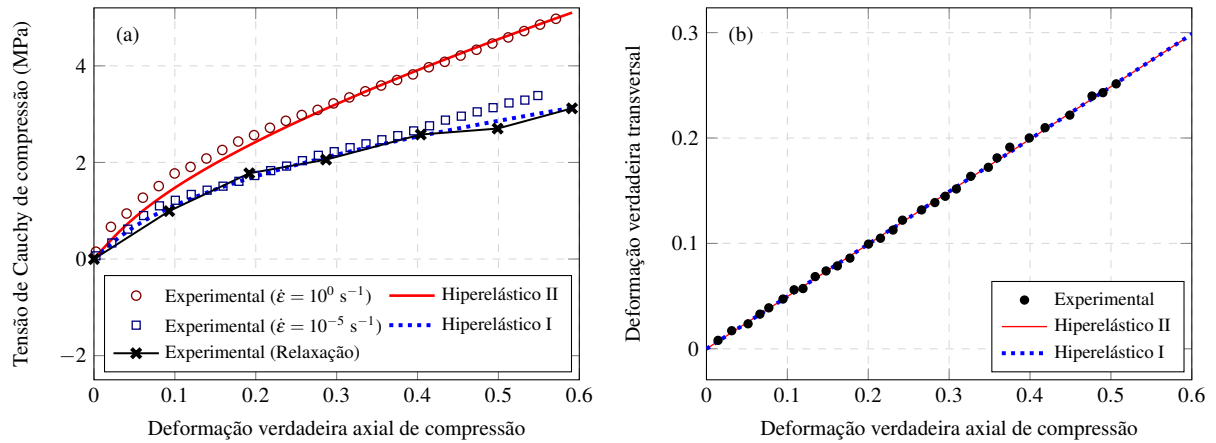
Modelo	Helmholtz (ψ_m)	Λ (MPa)	G_e^∞ (MPa)	γ_0	a	G_e (MPa)
Hiperelástico I	ψ_e^∞	1000	2.6	0.001	-0.2	-
Hiperelástico II	$\psi_e^\infty + \psi_e$	1000	2.6	0.001	-0.2	2.5

Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.1.2 Definição das funções paramétricas e do coeficiente de viscosidade

Para representar os ensaios monotônicos com taxas de deformação intermediárias, bem como as curvas de relaxação, é necessário aplicar o modelo viscoelástico, o que envolve definir as funções paramétricas e calibrar o parâmetro de viscosidade.

Define-se a viscosidade e a rigidez transversal como $\mu_v(\zeta_v) = \bar{\mu}_v \cdot f(\zeta_v)$ e $G_e(\zeta_v) = \bar{G}_e \cdot g(\zeta_v)$, respectivamente, onde $\bar{\mu}_v$ e \bar{G}_e são parâmetros constantes, e $f(\zeta_v)$ e $g(\zeta_v)$ são funções paramétricas auxiliares adimensionais. Para normalizar as análises, também são

Figura 46 – Correlações das curvas experimentais de tensão-deformação com modelos hiperelásticos

Fonte: Elaborado pelo autor

impostas as seguintes condições:

$$\int_0^1 f(\zeta_v) d\zeta_v = \int_0^1 g(\zeta_v) d\zeta_v = 1 \quad \Rightarrow \quad \int_0^1 \mu_v(\zeta_v) d\zeta_v = \bar{\mu}_v \quad \text{e} \quad \int_0^1 G_e(\zeta_v) d\zeta_v = \bar{G}_e. \quad (6.61)$$

Além disso, $f(\zeta_v)$ não deve retornar valores nulos (ou muito próximos de zero) ao longo do domínio, pois isso pode causar problemas numéricos durante o algoritmo de solução.

É importante destacar que outras escolhas de representações paramétricas são possíveis. A abordagem proposta visa apenas padronizar os modelos de viscosidade, de forma que eles possam ser caracterizados unicamente por dois parâmetros constantes ($\bar{\mu}_v$ e \bar{G}_e) e pelas funções paramétricas auxiliares.

Para testar as funções paramétricas e os coeficientes de viscosidade, são utilizadas como referência a curva de relaxação para a deformação verdadeira $\epsilon = -0.591$. Quanto à simulação numérica, aplica-se novamente uma deformação de engenharia prescrita variando monotonicamente de $\epsilon = 0$ até $\epsilon = -0.25584$. No entanto, neste caso a análise é seguida por uma etapa de relaxação, onde a deformação $\epsilon = -0.25584$ é mantida constante por 2 horas (7200 segundos).

Durante essa etapa de relaxação, a tensão parte de um valor máximo e tende a um valor mínimo – correspondendo aproximadamente ao modelo Hiperelástico I – à medida que o tempo avança. A curva de relaxação depende da viscosidade e das funções paramétricas. Para garantir que o valor máximo de tensão não seja influenciado pela viscosidade, aplica-se uma taxa de deformação muito grande (em magnitude) durante a etapa de carregamento: $\dot{\epsilon} = -10^{10} \text{ s}^{-1}$. Dessa forma, a tensão máxima também é fixa – correspondendo aproximadamente ao modelo Hiperelástico II – podendo-se focar apenas na curva de relaxação.

São empregados os mesmos parâmetros da [subseção 6.7.1.1](#) para ψ_e^∞ . Embora ψ_e seja agora representado parametricamente, aplica-se o mesmo valor base para a rigidez transversal, ou seja: $\bar{G}_e = 2.5 \text{ MPa}$. As funções paramétricas $f(\zeta_v)$ e $g(\zeta_v)$, bem como o

coeficiente $\bar{\mu}_v$, são variados para analisar suas influências na curva de relaxação.

Neste trabalho, são utilizados dois tipos de funções paramétricas: polinomiais e sigmóides. Nota-se que funções polinomiais de ordem zero ($f(\zeta_v) = g(\zeta_v) = 1$) retornam o modelo padrão discutido na seção 6.2. Entretanto, esse modelo não fornece um bom ajuste com a resposta do material. Observando a curva de relaxação experimental, propõe-se modelos que têm menor viscosidade para valores maiores de G_e (representando a decaída inicial significativa das tensões) e maior viscosidade para valores menores de G_e (representando a estabilização mais lenta das tensões à medida que o tempo aumenta). Para isso, $f(\zeta_v)$ e $g(\zeta_v)$ são escolhidos de forma que um aumenta quando o outro diminui, e vice-versa.

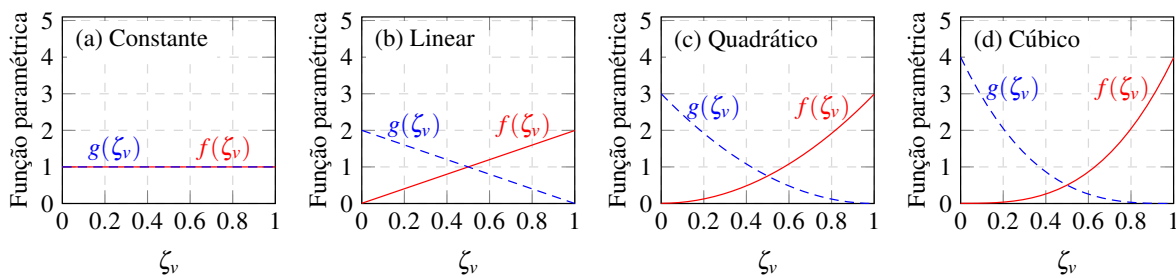
Para os casos polinomiais, são utilizadas funções constantes, lineares, quadráticas e cúbicas, com expressões dadas na Tabela 6 e ilustradas na Figura 47. Note que, à medida que ζ_v avança, $g(\zeta_v)$ diminui até chegar a zero, enquanto $f(\zeta_v)$ começa com um pequeno valor inicial (neste caso, 0,005) e depois aumenta. Esse valor foi adicionado para garantir que $f(\zeta_v)$ não retorne zero, como discutido anteriormente.

Tabela 6 – Funções paramétricas polinomiais

Modelo	$f(\zeta_v)$	$g(\zeta_v)$
Constante	1	1
Linear	$1,99\zeta_v + 0,005$	$2(1 - \zeta_v)$
Quadrático	$2,985\zeta_v^2 + 0,005$	$3(1 - \zeta_v)^2$
Cúbico	$3,98\zeta_v^3 + 0,005$	$4(1 - \zeta_v)^3$

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 47 – Funções paramétricas polinomiais



Fonte: Elaborado pelo autor

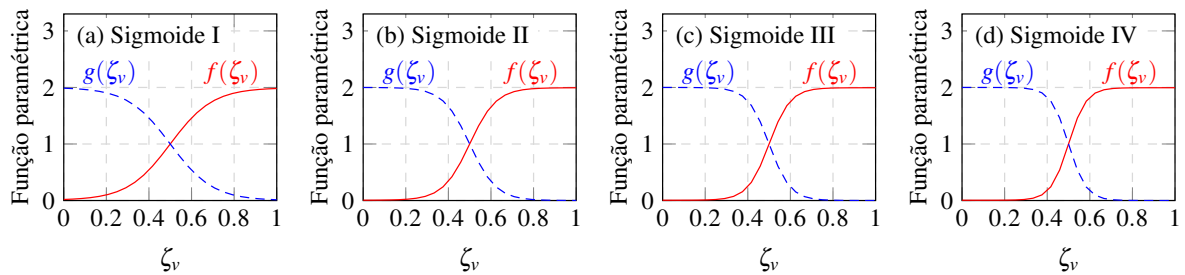
Para os casos sigmóides, são aplicadas funções tangentes hiperbólicas centradas em $\zeta_v = 0.5$, com expressões dadas na Tabela 7 e ilustradas na Figura 48. Quatro casos são considerados, com diferentes multiplicadores. Novamente, $f(\zeta_v)$ é definido com um valor inicial pequeno de aproximadamente 0,005, aumentando posteriormente, enquanto $g(\zeta_v)$ diminui para valores próximos de zero.

Inicialmente, adotam-se $n_p = 20$ pontos de Gauss para integrar numericamente o componente viscoelástico paramétrico. Para a discretização temporal, são aplicados 100 passos durante a etapa de deformação monotônica ($\Delta t = 2,5584 \cdot 10^{-13}$ s). Para a etapa de

Tabela 7 – Funções paramétricas sigmoides

Modelo	$f(\zeta_v)$	$g(\zeta_v)$
Sigmoide I	$0,995 \tanh(5\zeta_v - 2,5) + 1$	$\tanh(2,5 - 5\zeta_v) + 1$
Sigmoide II	$0,995 \tanh(8\zeta_v - 4) + 1$	$\tanh(4 - 8\zeta_v) + 1$
Sigmoide III	$0,995 \tanh(10\zeta_v - 5) + 1$	$\tanh(5 - 10\zeta_v) + 1$
Sigmoide IV	$0,995 \tanh(12\zeta_v - 6) + 1$	$\tanh(6 - 12\zeta_v) + 1$

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 48 – Funções paramétricas sigmoides

Fonte: Elaborado pelo autor

relaxação, dado seu padrão de evolução particular, adotam-se discretizações mais refinadas no início ($\Delta t = 0,11323$ s) sendo o refinamento gradualmente reduzido à medida que o tempo avança. Isso é alcançado usando uma progressão geométrica para Δt com uma razão comum de 1,0003, resultando em um total de 10.000 passos de tempo ao longo de 7.200 segundos. Essa discretização temporal leva em conta casos com viscosidade mais baixa, onde são necessárias discretizações mais refinadas, mas excede a quantidade necessária para a maioria dos casos analisados.

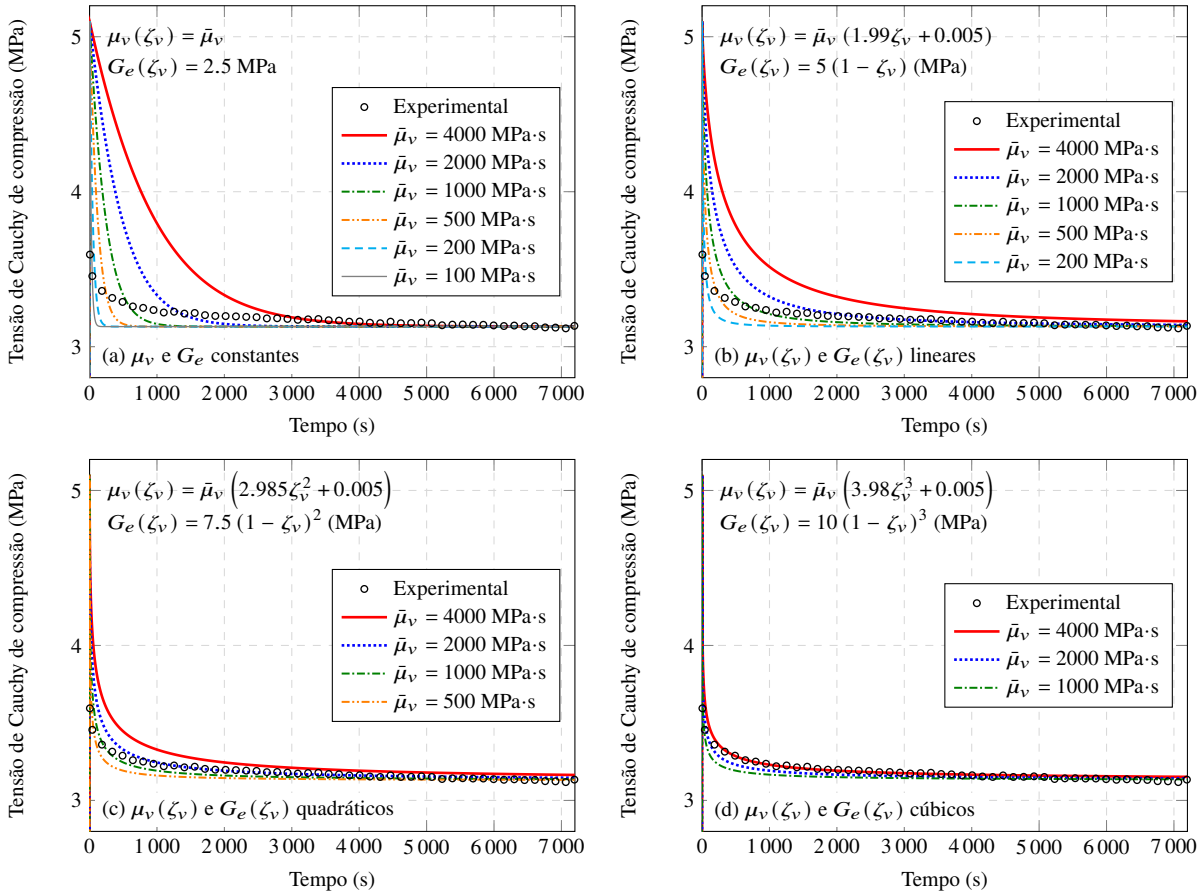
As curvas de relaxação são mostradas nas Figuras 49 e 50 para os casos com funções paramétricas polinomiais e sigmoides, respectivamente. Como discutido anteriormente, cada conjunto de funções paramétricas resulta em um padrão diferente na curva de relaxação, mostrando uma ampla gama de possibilidades e o potencial para ajustes a diferentes materiais. Para o presente material, observa-se um ajuste mais preciso usando as funções paramétricas cúbicas e sigmoide IV, ambas com $\bar{\mu}_v = 4000$ MPa.s. Em contraste, os casos polinomiais com ordens mais baixas não capturam adequadamente o comportamento da curva, mesmo com ajustes em $\bar{\mu}_v$. Essa deficiência é particularmente evidente no modelo viscoelástico padrão, representado na Figura 49(a), onde uma ampla gama de parâmetros de viscosidade é testada, mas nenhum reproduz o perfil desejado.

Os parâmetros calibrados do material para ambos os conjuntos de funções paramétricas considerados são resumidos na Tabela 8, sendo utilizados em seções subsequentes.

6.7.1.3 Análise de convergência para a integração numérica

Uma vez consolidados os modelos, parte-se para a otimização da implementação numérica, sendo testados diferentes números de pontos de integração de Gauss, entre

Figura 49 – Curvas de relaxação para $\epsilon = -59,1\%$, considerando funções paramétricas polinomiais e diferentes parâmetros de viscosidade



Fonte: Elaborado pelo autor

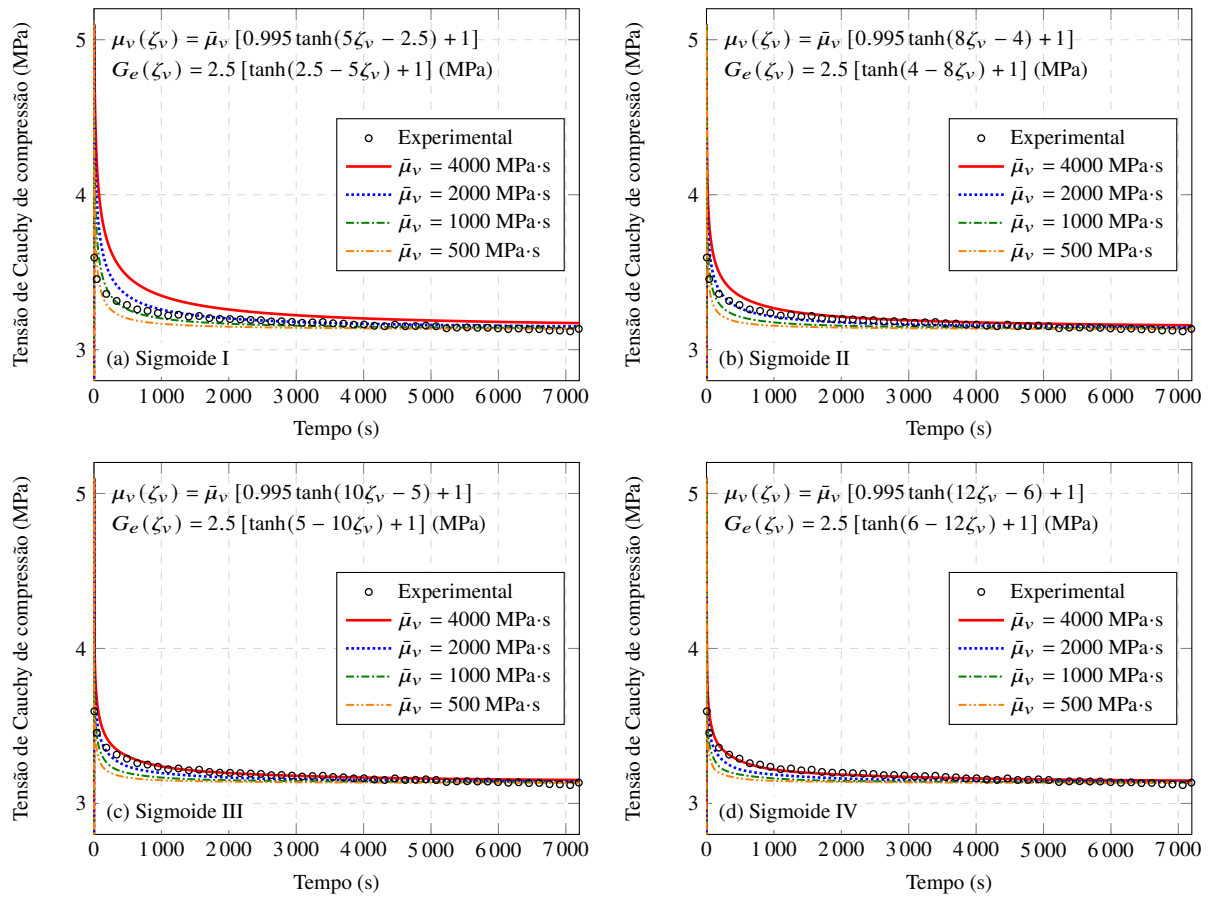
Tabela 8 – Parâmetros do modelo viscoelástico para o material Adiprene-L100

Funções paramétricas	Λ (MPa)	G_e^∞ (MPa)	γ_0	a	\bar{G}_e (MPa)	$\bar{\mu}_v$ (MPa·s)
Cúbica (ver Tabela 6)	1000	2.6	0.001	-0.2	2.5	4000
Sigmoide IV (ver Tabela 7)	1000	2.6	0.001	-0.2	2.5	4000

Fonte: Elaborado pelo autor

$n_p = 1$ e $n_p = 20$, para integrar a parcela viscoelástica paramétrica. É importante destacar que a integração numérica não é realizada diretamente sobre as funções paramétricas, mas sim sobre expressões não-lineares que dependem delas. Dessa forma, não é possível garantir que haja um valor de n_p a partir do qual a resposta é exata, mesmo nos casos onde as funções paramétricas são polinomiais.

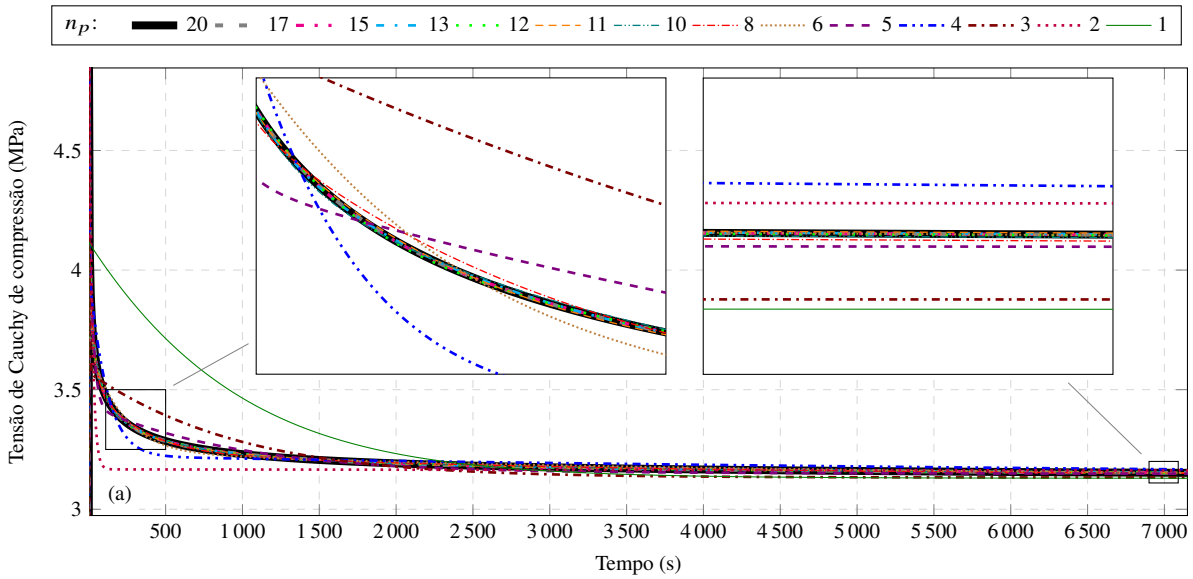
O problema de relaxação introduzido na subseção 6.7.1.2 é solucionado novamente, utilizando os modelos cúbico e sigmoide IV definidos na Tabela 8. No entanto, aplica-se agora $\dot{\epsilon} = 1 \text{ s}^{-1}$ para a etapa de deformação monotônica, com $\Delta t = 2,5584 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ (ou seja, 100 passos). Para a etapa de relaxação, aplicam-se 5000 passos, com Δt partindo de 0,62057 s e variando de acordo com uma progressão geométrica com razão comum de 1,0003.

Figura 50 – Curvas de relaxação para $\epsilon = -59,1\%$, considerando funções paramétricas sigmóides e diferentes parâmetros de viscosidade**Fonte:** Elaborado pelo autor

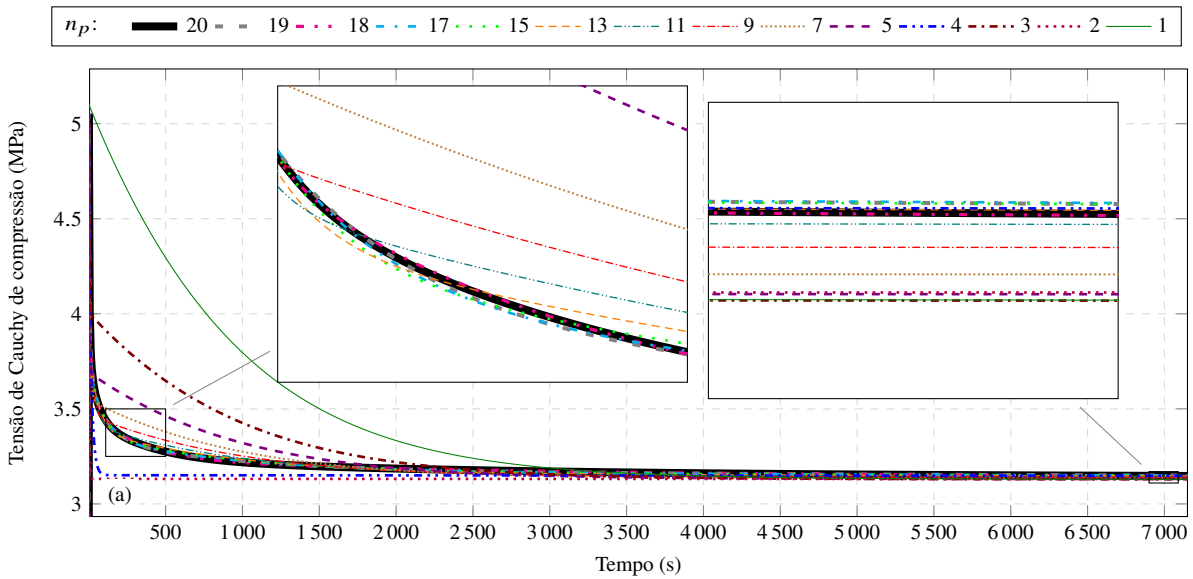
As Figuras 51 e 52 mostram as curvas de relaxação obtidas com diferentes números de pontos de integração para os modelos cúbico e sigmoide IV, respectivamente. Naturalmente, cada curva exibe um perfil distinto, representando modelos viscoelásticos generalizados com vários componentes (n_p). Em particular, $n_p = 1$ corresponde ao modelo padrão discutido na seção 6.2, e $n_p = 2$ resulta em uma curva com maior excentricidade.

De maneira geral, pode-se observar que as excentricidades das curvas oscilam em torno do caso $n_p = 20$ para cada aumento de n_p , revelando padrões distintos de evolução para casos pares e ímpares. A resposta tende a estabilizar à medida que n_p aumenta, com uma convergência notavelmente melhor no modelo cúbico quando comparado ao modelo sigmoide. Esse resultado é esperado, pois a função sigmoide leva a um modelo relativamente mais complexo, sendo menos precisamente representado pela quadratura gaussiana em comparação ao modelo com funções polinomiais.

Na Figura 53(a), apresenta-se a convergência dos erros absolutos mínimos (L_1) considerando duas estimativas de erro diferentes: (i) diferença entre a solução atual (com n_p pontos) e a solução para $n_p + 1$ pontos (erro relativo); e (ii) diferença entre a solução atual (com n_p pontos) e a solução para 20 pontos (erro de referência). Em cada caso, a norma

Figura 51 – Curvas de relaxação para diferentes números de pontos de integração - Modelo Cúbico

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 52 – Curvas de relaxação para diferentes números de pontos de integração - Modelo Sigmoide IV

Fonte: Elaborado pelo autor

do erro é calculada como

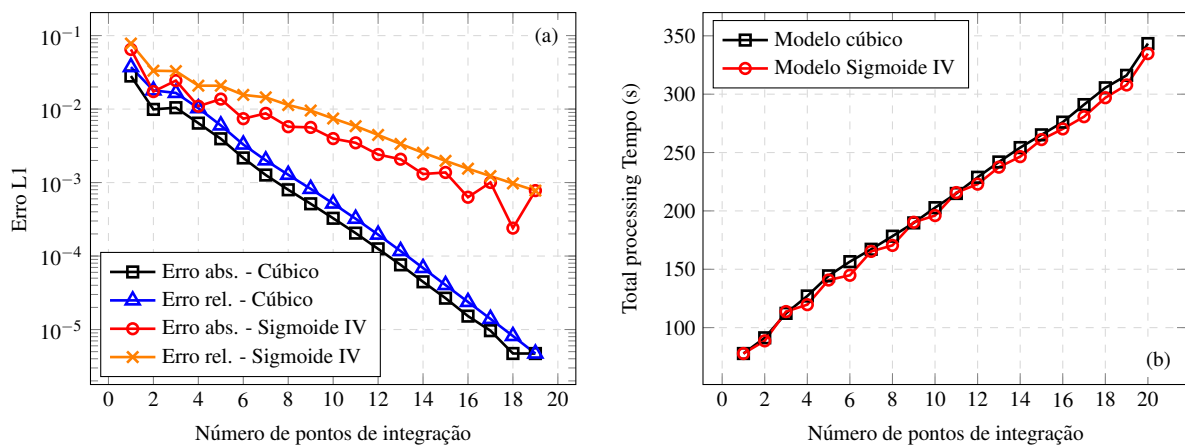
$$e = \frac{\int_0^{t_{\max}} |\sigma(t) - \sigma_{\text{ref}}(t)| dt}{\int_0^{t_{\max}} |\sigma_{\text{ref}}(t)| dt}, \quad (6.62)$$

onde t_{\max} é o tempo máximo de análise e $\sigma_{\text{ref}}(t)$ é a tensão axial de Cauchy de referência ao longo do tempo. Esse erro representa a área normalizada entre a curva correspondente e a referência. Considera-se uma transição linear entre cada valor discreto ao longo do tempo, simplificando o processo de cálculo da área.

A partir da Figura 53(a), pode-se confirmar que o modelo cúbico realmente exibe uma taxa de convergência mais alta quando comparado ao modelo sigmoide. Além disso, nota-se que os erros relativos são geralmente maiores do que os erros de referência. Esse comportamento pode ser atribuído às oscilações previamente observadas nas curvas: à medida que o número de pontos de integração n_p é aumentado, a solução numérica alterna entre superestimar e subestimar a curva de solução estabilizada (ou mais refinada). Isso leva a uma diferença geralmente maior entre os casos com n_p e $n_p + 1$ pontos do que entre os casos com n_p e 20 pontos. Esse comportamento oscilatório é particularmente evidente no erro de referência para o modelo sigmoide, onde é notada uma diferença de evolução para valores de n_p pares e ímpares.

Para auxiliar a seleção eficiente dos pontos de integração, a Figura 53(b) apresenta os tempos de processamento totais para cada valor de n_p . Observa-se que, para esse problema simples, os tempos de processamento aumentam quase linearmente com n_p , e são aproximadamente os mesmos para os casos com modelos cúbico e sigmoide IV.

Figura 53 – Dependência do número de pontos de quadratura: (a) convergência do erro L_1 e (b) tempo de processamento.



Fonte: Elaborado pelo autor

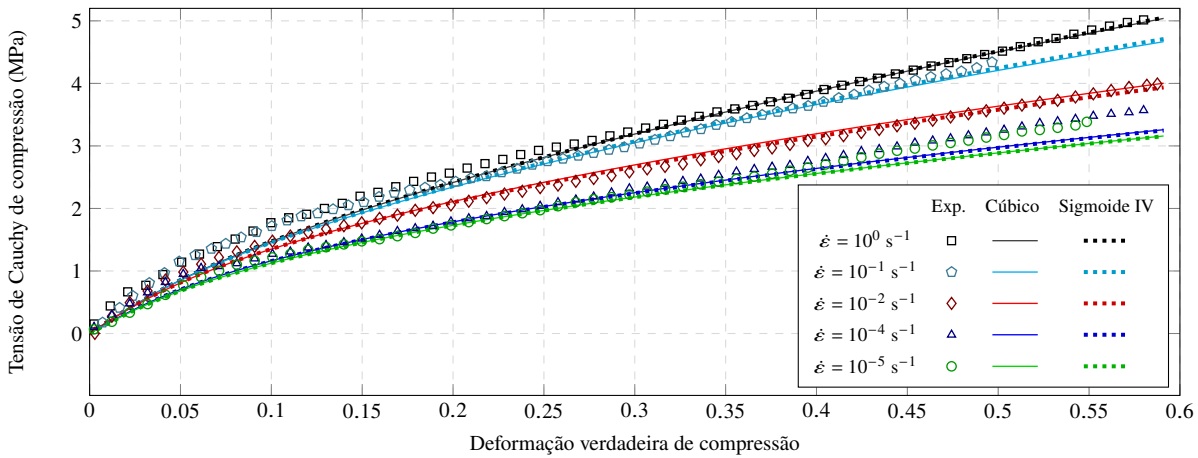
6.7.1.4 Validação com ensaios de deformação monotônica à temperatura ambiente

Para demonstrar a generalização dos parâmetros calibrados e das funções paramétricas detalhadas na Tabela 8, são realizadas simulações adicionais, e comparadas com os dados experimentais. A primeira análise considera ensaios de deformação monotônica uniaxial com 5 diferentes taxas de deformação de engenharia: -10^0 , -10^{-1} , -10^{-2} , -10^{-4} e -10^{-5} s^{-1} . Para cada caso, aplica-se uma deformação de engenharia prescrita de 0 a $-0,25584$, evoluindo monotonicamente ao longo de 2000 passos de tempo, com um passo de tempo fixo $\Delta t = 1,2792 \cdot 10^{-4} / \dot{\epsilon}$. O número selecionado de pontos de Gauss para o componente viscoelástico é $n_p = 20$.

As curvas tensão-deformação para cada caso são apresentadas na Figura 54, onde é possível notar uma correspondência satisfatória do modelo proposto com os dados

experimentais, mesmo para os casos com taxas de deformação intermediárias, que não foram consideradas durante o processo de calibração. Ambos os modelos aplicados (Cúbico e Sigmoide IV) não exibem diferenças relevantes nesta análise em particular. No entanto, nota-se que nos casos com taxas de deformação mais baixas (10^{-4} e 10^{-5} s $^{-1}$), o resultados numéricos começam a apresentar uma maior divergência em relação aos experimentais à medida em que a deformação aumenta. Como já discutido na subseção 6.7.1.1, essa divergência é atribuída à estratégia aplicada para a calibração, que prioriza as curvas de relaxação em relação aos ensaios monotônicos.

Figura 54 – Curvas tensão-deformação para ensaios monotônicos



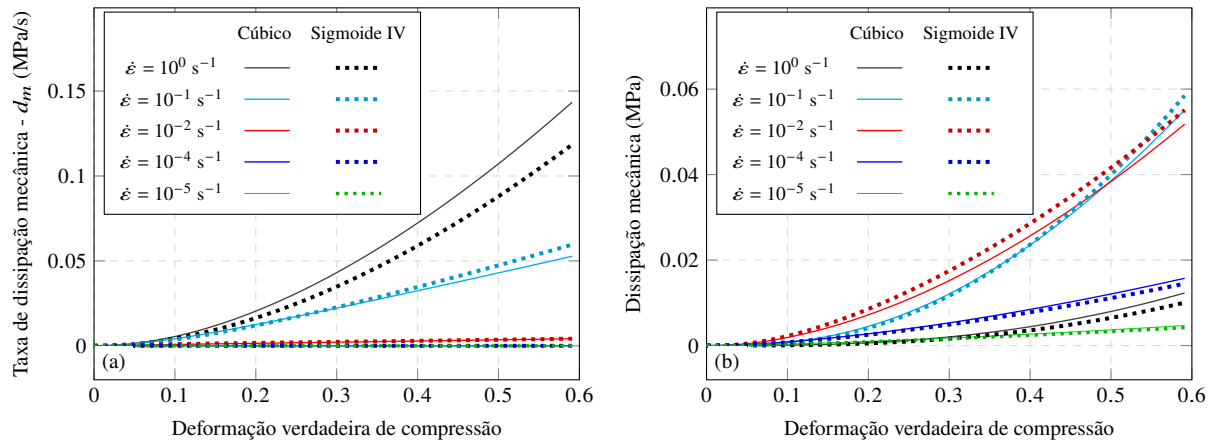
Fonte: Elaborado pelo autor

A Figura 55 mostra a evolução da taxa de dissipação mecânica (d_m) e da dissipação mecânica ao longo da deformação para cada um dos casos analisados. A primeira é calculada a partir da Eq. (6.57), enquanto a última corresponde à integral de d_m ao longo do tempo, calculada numericamente como a área abaixo da curva associada. Nesses gráficos, observam-se maiores discrepâncias entre os modelos Cúbico e Sigmoide IV. Como pode ser visto na Figura 55(a), d_m aumenta com a taxa de deformação, como esperado. No entanto, sua integral ao longo do tempo pode não aumentar, pois o intervalo de tempo diminui. De fato, a Figura 55(b) demonstra que os valores de dissipação mecânica são maiores para casos com níveis intermediários de taxa de deformação.

Seguindo uma análise similar à realizada na subseção 6.5.1, avalia-se a taxa da dissipação mecânica enquanto componente da taxa de trabalho interno, através da Eq. (6.49). Como são desconsiderados os efeitos térmicos por enquanto, o componente de entropia nessa equação é nulo, e $\lambda_\theta = 1$. Assim, segue-se que:

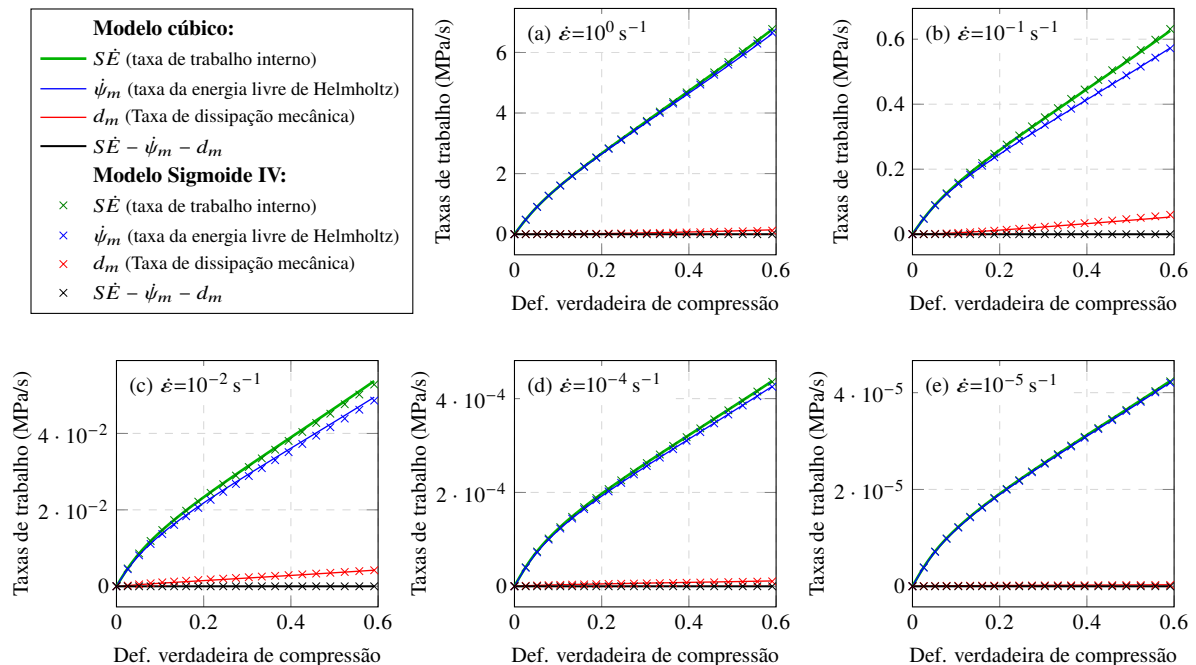
$$S\dot{E} - \dot{\psi}_m - d_m = 0. \quad (6.63)$$

A Figura 56 fornece uma representação visual da proporção de trabalho interno dissipado ao longo do processo em diferentes taxas de deformação. A taxa da energia livre de Helmholtz mecânica é calculada novamente pela Eq. (6.51), enquanto d_m é calculado

Figura 55 – (a) Taxa de dissipação mecânica e (b) dissipação mecânica para ensaios monotônicos

Fonte: Elaborado pelo autor

diretamente pela Eq. (6.57). Essa figura apresenta também o gráfico da Eq. (6.63), representando o erro numérico das taxas de trabalho. Como pode ser visto, ele exhibe valores suficientemente próximos de zero para todos os casos analisados, demonstrando consistência da implementação numérica.

Figura 56 – Taxas de trabalho para ensaios monotônicos a diferentes taxas de deformação

Fonte: Elaborado pelo autor

É importante notar que valores mais altos de d_m não correspondem necessariamente a maiores proporções de trabalho dissipado. Por exemplo, o caso com $\dot{\epsilon} = 10^0 \text{ s}^{-1}$ apresenta uma dissipação relativamente pequena em comparação com sua taxa de trabalho interno, apesar de possuir os maiores valores de d_m entre os casos analisados, como revela a

Figura 55(a). Enquanto isso, os casos com taxas de deformação intermediárias (10^{-1} e 10^{-2} s^{-1}) exibem notavelmente a maior proporção de dissipação em relação às suas taxas de trabalho interno.

6.7.1.5 Validação com curvas de relaxação adicionais

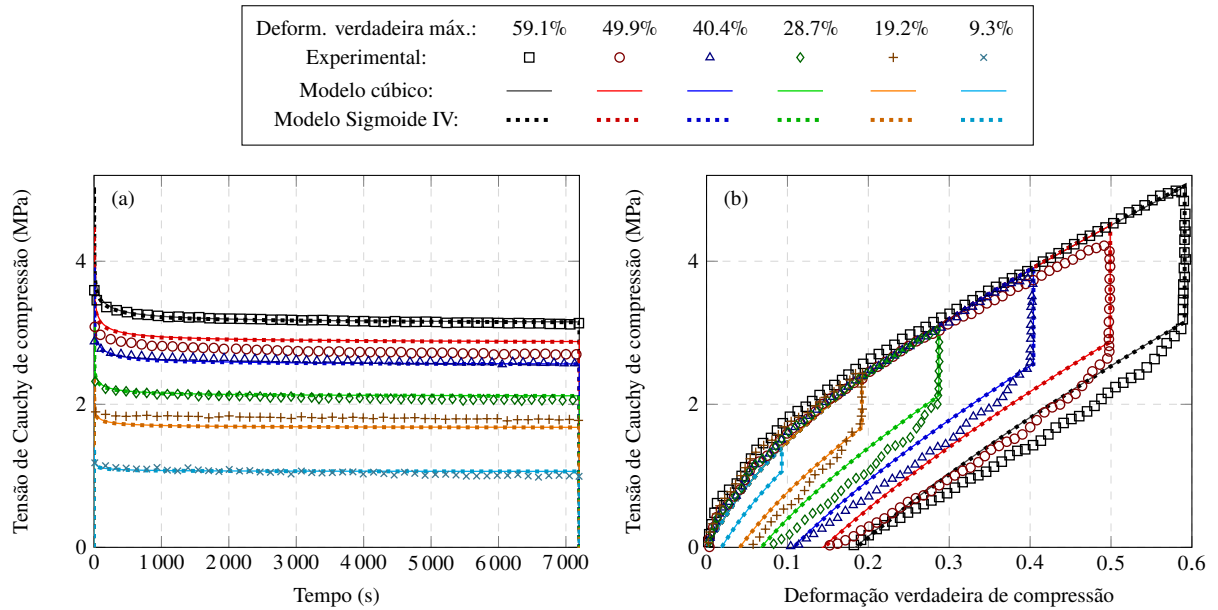
Neste exemplo, são simulados os ensaios de relaxação uniaxial compressiva em diferentes níveis de deformação, conduzidos experimentalmente por Khan e Lopez-Pamies (2002). Esses ensaios consistem em três etapas: primeiro, uma etapa de carregamento monotônico onde aplica-se uma taxa de deformação de engenharia de -1 s^{-1} ; em seguida, uma etapa de relaxação onde a deformação é mantida constante por 2 horas; e finalmente, uma etapa de descarregamento monotônico, com uma taxa de deformação de engenharia de 1 s^{-1} . São considerados seis casos, com deformações verdadeiras compressivas máximas de 59,1%, 49,9%, 40,4%, 28,7%, 19,2% e 9,3%, correspondendo, respectivamente, às deformações de engenharia compressivas de 25,58%, 22,08%, 18,29%, 13,37%, 9,15% e 4,54%.

Os seis casos são simulados numericamente por meio do modelo proposto com os parâmetros especificados na Tabela 8. A curva de relaxação com $\epsilon = 59.1\%$ é a mesma usada para calibração na subseção 6.7.1.2, e a etapa de carregamento monotônico é análoga ao problema discutido na subseção 6.7.1.4. Portanto, a validação nesta seção está centrada nas cinco curvas de relaxação restantes e na resposta tensão-deformação durante o descarregamento.

De forma similar à subseção 6.7.1.4, são aplicados 2000 passos de tempo para as etapas de carregamento e descarregamento, com um passo de tempo fixo $\Delta t = \epsilon_{\max} \cdot 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$, onde ϵ_{\max} é a deformação de engenharia máxima. Na etapa de relaxação, o tempo é discretizado em 5000 passos, com Δt seguindo uma progressão geométrica semelhante à da subseção 6.7.1.3. Novamente, são utilizados 20 pontos de Gauss para a integração numérica do componente viscoelástico.

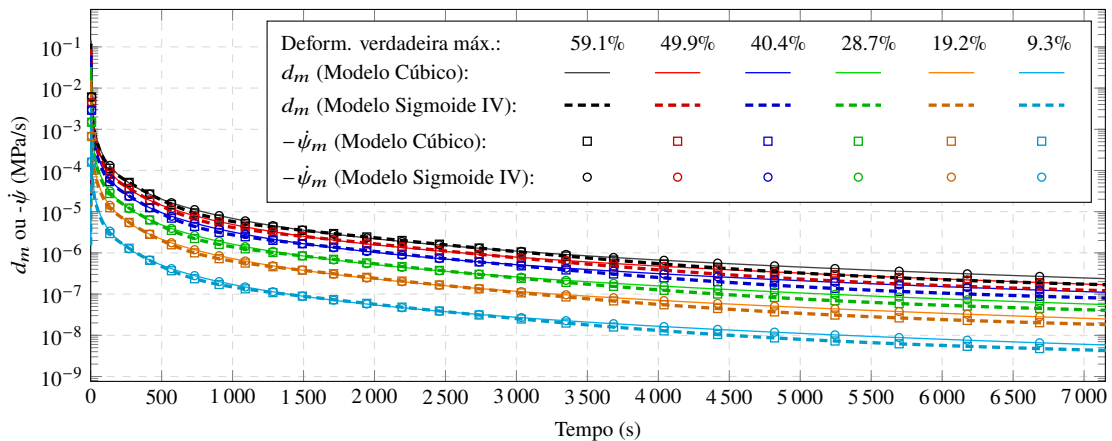
As curvas de relaxação e tensão-deformação para todos os seis casos são apresentadas na Figura 57, onde são comparadas com os dados experimentais correspondentes. Ambos os modelos cúbico e sigmoide IV exibem resultados praticamente idênticos. As curvas de relaxação mostram, em sua maioria, uma boa concordância com os resultados experimentais, excetuando-se os casos onde $\epsilon_{\max} = 49,9\%$ e $\epsilon_{\max} = 19,2\%$. Apesar desses desvios, levando-se em consideração ainda a impossibilidade de se representar em sua totalidade as condições e imperfeições envolvidas no material e nos ensaios experimentais, pode-se considerar que os resultados numéricos representam adequadamente os perfis de relaxação deste material. Quanto às curvas tensão-deformação, a etapa de carregamento também demonstra um bom alinhamento, embora haja algumas diferenças na etapa de descarregamento, que são mais pronunciadas para os casos com níveis de deformação mais elevados. Em resumo, as simulações numéricas podem ser consideradas consistentes e fornecem uma boa representação do comportamento do material.

Como no exemplo anterior, também são analisadas a energia e a dissipação da solução numérica. Durante a etapa de relaxação, a deformação permanece fixa, portanto, a taxa

Figura 57 – Ensaio de relaxação uniaxial compressiva em diferentes níveis de deformação: (a) Curvas de relaxação e (b) Tensão-Deformação

Fonte: Elaborado pelo autor

de trabalho interno ($S\dot{E}$) é nula, então Eq. (6.63) leva a $d_m = -\dot{\psi}_m$. Para verificar essa condição, são apresentados na Figura 58 os valores de d_m e $-\dot{\psi}_m$ na etapa de relaxação, calculados de acordo com Eqs. (6.51) e (6.57), respectivamente. Devido ao rápido decaimento dessas variáveis ao longo do tempo, é utilizada uma escala logarítmica para melhorar a visualização. A figura mostra pequenas divergências entre os modelos cúbico e sigmoide IV, com os valores de d_m e $-\dot{\psi}_m$ próximos em ambos os casos, indicando novamente a consistência da formulação apresentada.

Figura 58 – Resultados numéricos de dissipação mecânica e taxa de energia livre de Helmholtz ao longo do tempo para os ensaios de relaxação

Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.1.6 Validação com ensaio de salto na taxa de deformação

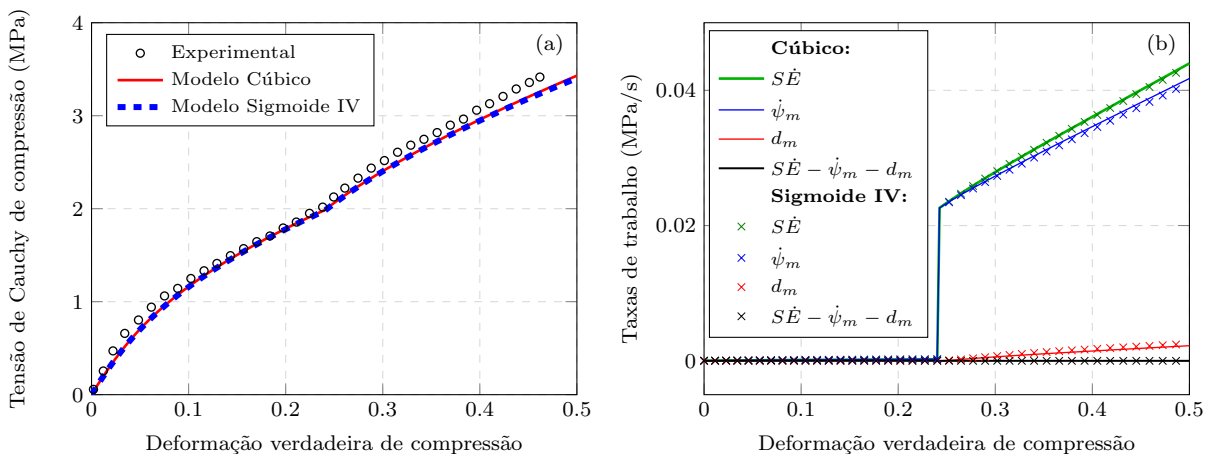
A seguir, o modelo é aplicado a um ensaio uniaxial compressivo com um salto na taxa de deformação, conduzido por [Khan, Lopez-Pamies e Kazmi \(2006\)](#). Esse experimento consiste em duas etapas: inicialmente, a amostra é submetida a um carregamento monotônico com uma taxa de deformação de engenharia constante de $\dot{\epsilon} = -10^{-4} \text{ s}^{-1}$ até uma deformação verdadeira de $\epsilon = -24\%$; em seguida, a taxa de deformação sofre uma mudança abrupta para $\dot{\epsilon} = -10^{-2} \text{ s}^{-1}$, a qual é mantida constante até que seja atingida uma deformação verdadeira de aproximadamente $\epsilon = -45\%$.

A simulação numérica é realizada com $n_p = 20$ pontos de integração de Gauss e um total de 2000 passos de tempo. Na primeira etapa, impõe-se uma deformação de engenharia prescrita de 0 a $-0,1130795$ ao longo de 1000 passos de tempo, com $\Delta t = 1,130795 \text{ s}$. Na segunda etapa, aplica-se uma deformação de engenharia variando de $-0,1130795$ a $-0,2211992$ ao longo de 1000 passos de tempo, com $\Delta t = 1,130795 \cdot 10^{-2} \text{ s}$.

Os gráficos tensão-deformação são apresentados na [Figura 59\(a\)](#) para ambos os modelos, cúbico e sigmoide IV, sendo comparados com os dados experimentais. Os resultados numéricos são consistentes e demonstram uma correspondência satisfatória com os experimentos, com pequenas divergências observadas principalmente durante a segunda etapa.

Além disso, apresenta-se na [Figura 59\(b\)](#) uma análise da taxa de trabalho do modelo numérico, onde é possível observar a proporção da taxa de dissipação mecânica em comparação com a taxa de trabalho interno. Naturalmente, o material sofre uma mudança súbita na taxa de trabalho interno e na taxa de Helmholtz no instante do salto, alterando drasticamente as ordens de magnitude. No entanto, a taxa de dissipação aumenta continuamente apesar do salto. Novamente o erro $S\dot{E} - \dot{\psi}_m - d_m$ ao longo do tempo se revela desprezível.

Figura 59 – Carregamento monotônico com salto na taxa de deformação: (a) tensão vs. deformação e (b) taxas de trabalho vs. deformação.



Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.2 Problemas termomecânicos

A partir desta subseção, passam a ser considerados os aspectos térmicos do Adiprene-L100, incluindo as variações de temperatura e a dependência dos parâmetros do material em função da temperatura.

6.7.2.1 Ensaios de deformação monotônica em diferentes temperaturas

Para estender o modelo constitutivo a problemas com diferentes condições térmicas, é essencial levar em conta a variação dos parâmetros do material em relação à temperatura. Para que isso possa ser determinado, utilizam-se ensaios monotônicos com uma taxa de deformação de engenharia de $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$, realizados por Khan, Lopez-Pamies e Kazmi (2006) em cinco diferentes temperaturas: 199, 266, 294, 358 e 405 K. O caso com 294 K (temperatura ambiente) já foi calibrado em exemplos anteriores e será utilizado como base para os demais casos.

Os ensaios são realizados em ambientes com temperatura controlada. Contudo, na prática, as temperaturas nas amostras podem mudar temporariamente devido ao acoplamento termomecânico, antes de se dispersarem para o ambiente. Uma modelagem precisa deve levar em conta esses efeitos para calibrar os parâmetros do material. Entretanto, na ausência de dados experimentais específicos sobre a troca de calor, assume-se que a temperatura da amostra se equilibra rapidamente com as condições ambientais. Em outras palavras, para fins de calibração (subseção 6.7.2.1.1), simplesmente considera-se que a temperatura permanece constante em cada caso.

Posteriormente, na subseção 6.7.2.1.2, os ensaios são tratados como processos adiabáticos, onde as amostras são consideradas termicamente isoladas, de forma que as variações de temperatura não se dispersem no ambiente. Essa abordagem nos permite prever numericamente a evolução da temperatura do material devido à dissipação mecânica e ao acoplamento termomecânico, caracterizando mais detalhadamente o modelo constitutivo adotado.

Tanto nos casos de temperatura constante quanto nos adiabáticos, os ensaios monotônicos são resolvidos numericamente com uma deformação de engenharia prescrita variando de 0 a $-0,25584$ ao longo de um total de 1600 passos de tempo ($\Delta t = 1,6 \cdot 10^{-3} \text{ s}$). A partir deste ponto, aplica-se apenas o modelo cúbico da Tabela 8, com $n_p = 20$.

6.7.2.1.1 Temperaturas constantes - calibração

Na ausência de ensaios abrangendo múltiplos casos de taxa de deformação para todas as temperaturas, prossegue-se com suposições específicas para calibrar o modelo. Primeiramente, os parâmetros Λ , γ_0 e a são tratados como independentes da temperatura, sendo adotados os valores especificados na Tabela 8. Além disso, a dependência da temperatura em relação aos parâmetros restantes é abordada por meio de funções multiplicadoras. A viscosidade (μ_v) é escalada por uma função $p(\theta)$, e os parâmetros de rigidez transversal

(G_e^∞ e G_e) são escalados por uma função comum $q(\theta)$. Ou seja:

$$\mu_v(\zeta_v, \theta) = \bar{\mu}_v \cdot f(\zeta_v) \cdot p(\theta), \quad (6.64)$$

$$G_e^\infty(\theta) = \bar{G}_e^\infty \cdot q(\theta), \quad e \quad (6.65)$$

$$G_e(\zeta_v, \theta) = \bar{G}_e \cdot g(\zeta_v) \cdot q(\theta), \quad (6.66)$$

onde, para garantir que $\bar{\mu}_v$, \bar{G}_e^∞ , e \bar{G}_e mantenham os mesmos valores dispostos na [Tabela 8](#), as funções $p(\theta)$ e $q(\theta)$ devem ser selecionadas de forma que $p(294 \text{ K}) = q(294 \text{ K}) = 1$.

Para cada uma das diferentes temperaturas restantes, valores escalares distintos para $p(\theta)$ e $q(\theta)$ podem ser obtidos calibrando-se as curvas. Esse processo resulta em cinco pontos, apresentados na [Tabela 9](#), que podem ser utilizados para interpolar as funções.

Tabela 9 – Pontos de interpolação para $p(\theta)$ e $q(\theta)$

θ (K):	199	266	294	358	405
$p(\theta)$:	5	1,5	1	0,65	0,6
$q(\theta)$:	3,45	1,2	1	0,83	0,7

Fonte: Elaborado pelo autor

Os valores de tensão são altamente sensíveis a $q(\theta)$. Portanto, opta-se por definir $q(\theta)$ por meio de uma função polinomial de quarta ordem, que interpola todos os cinco valores. Para $p(\theta)$, onde o mesmo nível de precisão não é necessário, é empregado um modelo de regressão não linear com uma função logística de quatro parâmetros (4PL). Essa função realiza apenas uma interpolação aproximada, mas apresenta a vantagem de ser sempre crescente ou sempre decrescente, dependendo dos parâmetros adotados. Além disso, a 4PL possui intervalos de valores bem controlados, o que permite uma extrapolação mais segura, diminuindo o risco de gerar previsões não realistas ou inconsistentes com o comportamento esperado do material. As expressões obtidas para $p(\theta)$ e $q(\theta)$ são:

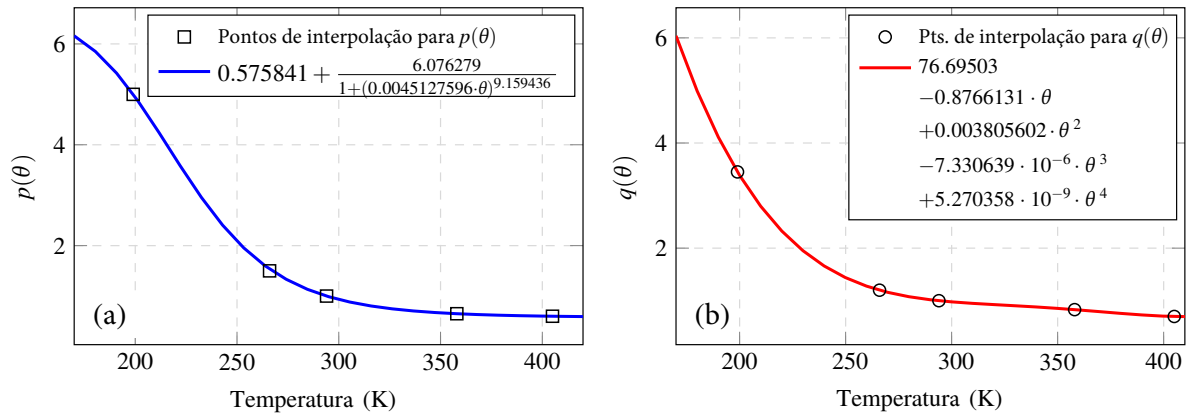
$$p(\theta) = 0,575841 + \frac{6,076279}{1 + (0,0045127596 \cdot \theta)^{9,159436}} \quad e \quad (6.67)$$

$$q(\theta) = 76,69503 - 0,8766131 \cdot \theta + 0,003805602 \cdot \theta^2 - 7,330639 \cdot 10^{-6} \cdot \theta^3 + 5,270358 \cdot 10^{-9} \cdot \theta^4, \quad (6.68)$$

ilustradas nas [Figura 60\(a\)](#) e [Figura 60\(b\)](#), respectivamente.

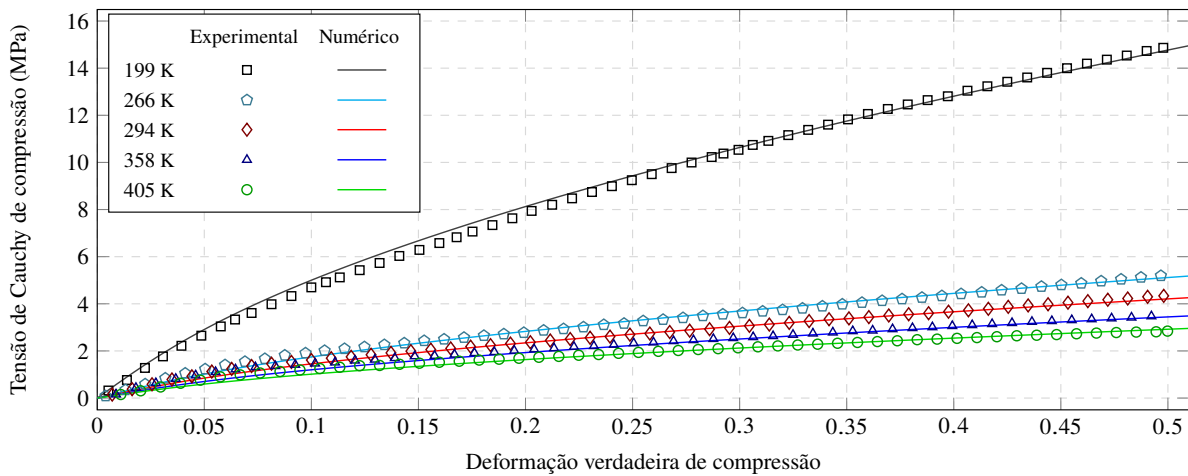
As funções calibradas são consistentes dentro dessa faixa de temperatura. No entanto, deve-se ter cautela ao aplicá-las fora deste intervalo. Particularmente, para $\theta > 409,553 \text{ K}$, a função escolhida para $q(\theta)$ resulta em $q'(\theta) > 0$, o que pode levar a uma entropia negativa, introduzindo inconsistências físicas no modelo. Para tratar esse problema, pode-se considerar o uso de funções definidas por partes que sejam localmente consistentes. No entanto, neste trabalho, são considerados apenas problemas em que a temperatura está entre 199 K e 405 K.

Uma vez que os ensaios são realizados a temperaturas constantes, não há expansão térmica ao longo das análises. Portanto, o parâmetro α não afeta os resultados de tensão.

Figura 60 – Funções selecionadas para $p(\theta)$ e $q(\theta)$ 

Fonte: Elaborado pelo autor

Os gráficos de tensão-deformação obtidos para cada valor de temperatura são mostrados na Figura 61, exibindo uma boa concordância com os respectivos dados experimentais.

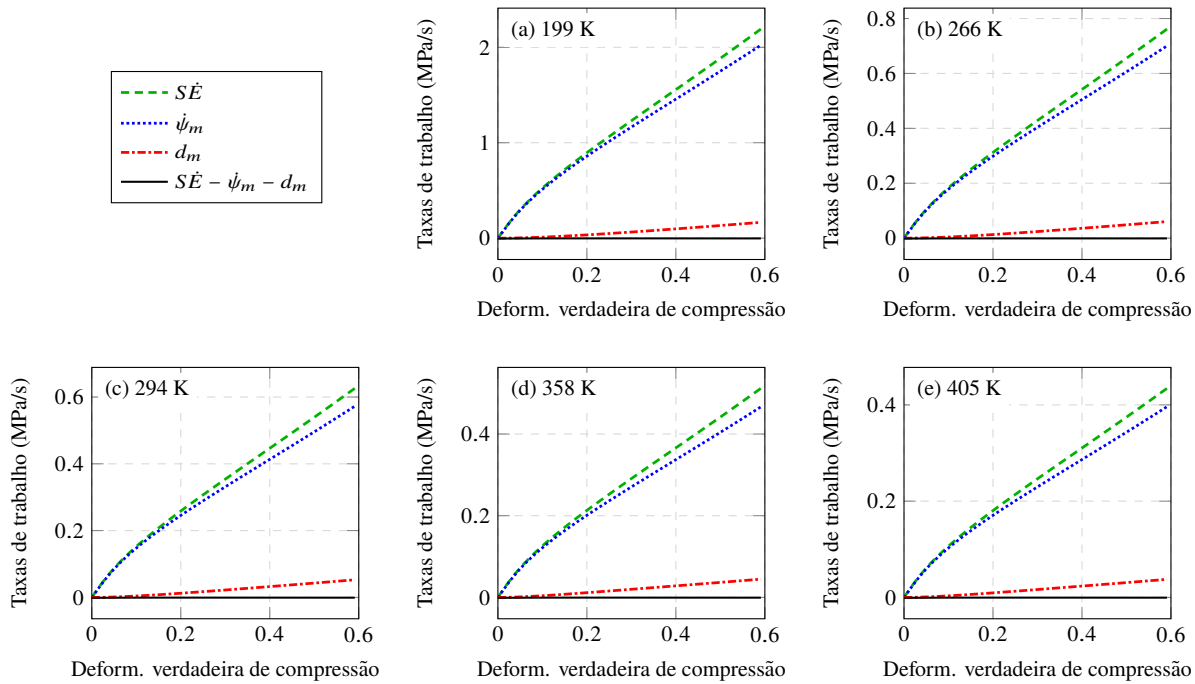
Figura 61 – Curvas de tensão-deformação para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes casos de temperatura prescrita

Fonte: Elaborado pelo autor

Assim como nos exemplos anteriores, apresenta-se uma análise das taxas de trabalho na Figura 62. Essa figura ilustra a taxa de trabalho interno ($S\dot{E}$), a taxa de energia livre de Helmholtz ($\dot{\psi}$) e a taxa de dissipação mecânica (d_m) para cada valor de temperatura, juntamente com o erro $S\dot{E} - \dot{\psi} - d_m$. Observa-se uma proporção consistente entre as taxas de dissipação e de trabalho interno em todos os casos, embora suas magnitudes sejam diferentes.

Ao contrário dos resultados de tensão e taxas de trabalho, os valores de entropia são diretamente influenciados pelo coeficiente de expansão térmica, mesmo na ausência de variações de temperatura. Para verificar essa influência, realiza-se a mesma simulação, agora com $\alpha = 0$ e $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. A Figura 63 mostra a evolução da entropia mecânica

Figura 62 – Análise das taxas de trabalho para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes casos de temperatura prescrita



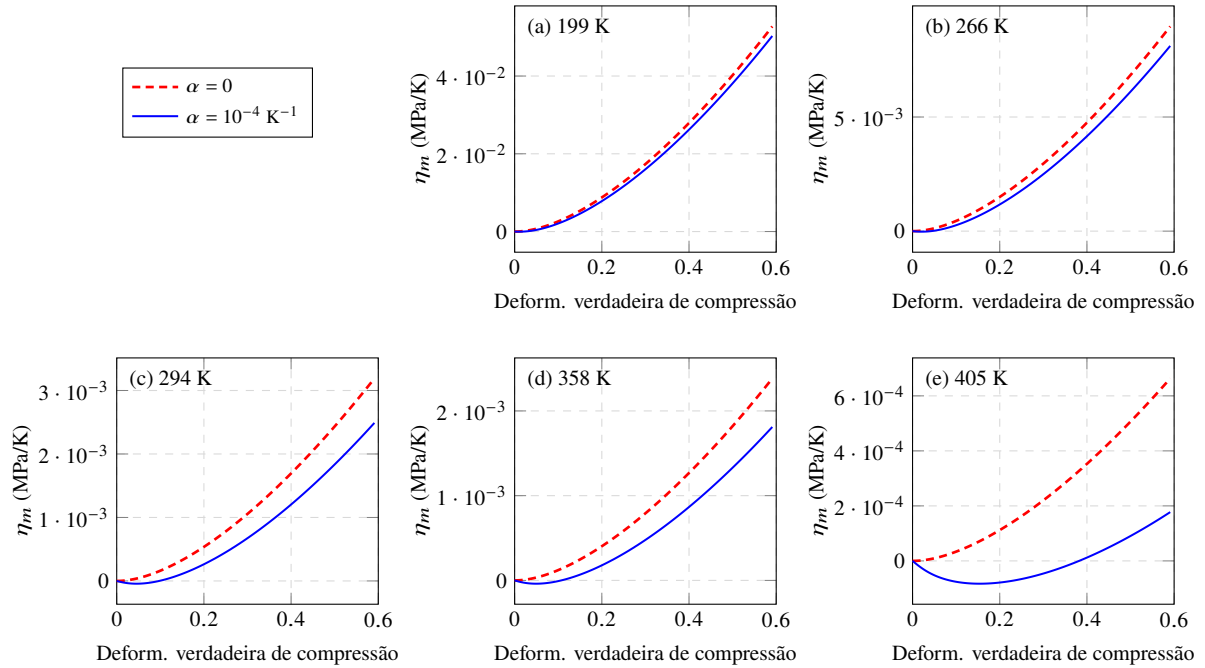
Fonte: Elaborado pelo autor

para ambos os casos sob as 5 diferentes temperaturas consideradas. Como comentado anteriormente na [seção 6.2](#), a entropia mecânica possui dois componentes, onde aquele diretamente associado a α geralmente tem uma magnitude menor e pode ser negativo em problemas de compressão. Essas observações são confirmadas pelos resultados na [Figura 63](#). De fato, a entropia mecânica assume valores negativos para o caso com α diferente de zero, embora esses valores sejam pequenos em magnitude. A diferença entre os resultados para $\alpha = 0$ e $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ torna-se mais significativa à medida que a temperatura aumenta. Isso pode ser atribuído a uma diminuição no componente $-\lambda_\theta^3 \partial \psi_m / \partial \theta$, levando a uma ordem de magnitude geral menor para a entropia mecânica nas temperaturas consideradas. Por exemplo, nota-se que, quando $\alpha = 0$, o caso com $\theta = 405 \text{ K}$ possui valores aproximadamente 100 vezes menores do que o caso com $\theta = 199 \text{ K}$.

Uma vez que cada caso é analisado em temperaturas constantes ($\dot{\theta} = 0$), é possível expressar a Eq. (4.25) simplesmente como $\dot{\eta} = q_m$, ou seja, a taxa de entropia é igual ao termo de acoplamento termomecânico. Essa condição pode ser verificada na [Figura 64](#), que mostra os valores de $\dot{\eta}$, q_m , e $\dot{\eta} - q_m$ ao longo do processo de deformação. A taxa de entropia é calculada numericamente por meio do método de Euler, semelhante à Eq. (6.51), enquanto q_m é calculado diretamente de acordo com Eq. (6.58), onde $\dot{\mathbf{E}}$ e as taxas das variáveis internas também são calculados com o método de Euler.

Os resultados indicam uma forte concordância entre $\dot{\eta}$ e q_m para os casos com $\alpha = 0$. Para os casos com $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, o erro aumenta de acordo com a temperatura, tornando-se bem perceptível para $\theta = 405 \text{ K}$. Nota-se que a taxa de entropia inicia-se com valores

Figura 63 – Curvas de entropia para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ sob cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica



Fonte: Elaborado pelo autor

negativos para o caso com $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. No entanto, esses valores negativos são geralmente muito pequenos em magnitude, e tendem a aumentar com o tempo, eventualmente tornando-se positivos em todos os casos. Os valores positivos de $\dot{\eta}$ e q_m mostram que o calor interno devido ao termo de acoplamento termomecânico ($-\theta q_m$) é negativo, indicando uma tendência a diminuir as temperaturas, caso a mesma não fosse imposta constante em todo o material.

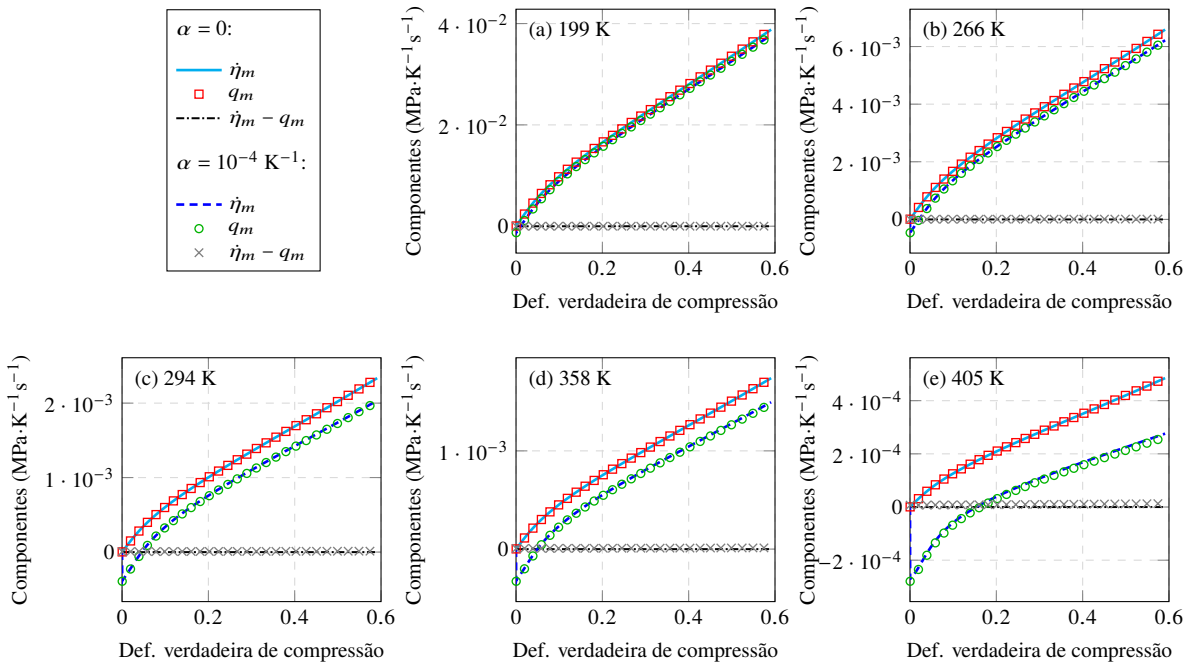
O erro normalizado entre $\dot{\eta}$ e q_m pode ser descrito por meio de:

$$e = \frac{\int_0^{t_{\max}} |\dot{\eta} - q_m| dt}{\int_0^{t_{\max}} |\dot{\eta}| dt}, \quad (6.69)$$

onde t_{\max} é o instante do fim da análise. As integrais na Eq. (6.69) são calculadas numericamente assumindo uma transição linear entre cada passo de tempo. A Figura 65 mostra a convergência para esse erro em relação a Δt , considerando 6 discretizações temporais diferentes: 100, 200, 400, 800, 1600 e 3200 passos de tempo. Todos os casos apresentam taxa de convergência de primeira ordem, o que é esperado ao usar o método de Euler. Para os casos com $\alpha = 0$, mostrados na Figura 65(a), observa-se que o erro é independente da temperatura, enquanto para os casos com $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, mostrados na Figura 65(b), o erro aumenta com temperaturas prescritas mais altas, o que é consistente com a observação visual da Figura 64.

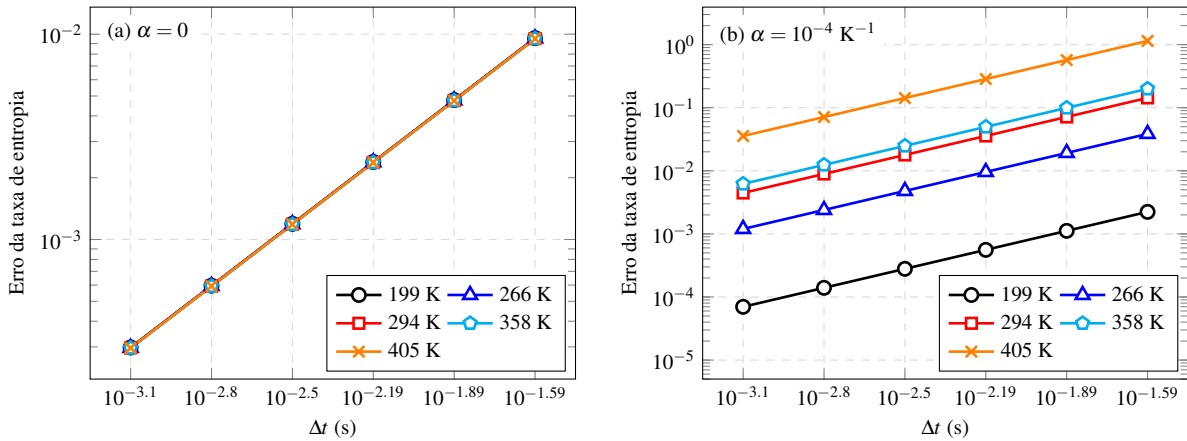
É importante notar que apenas os resultados de tensão são validados experimentalmente neste trabalho. As outras variáveis internas analisadas, como entropia e taxas de trabalho,

Figura 64 – Taxa de entropia e termo de acoplamento termomecânico para ensaios monotônicos com $|\dot{\epsilon}| = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ sob cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 65 – Análise de convergência do erro da taxa de entropia para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes casos de temperatura prescrita e dois diferentes coeficientes de expansão térmica



Fonte: Elaborado pelo autor

são resultantes exclusivamente do modelo numérico, e devem ser consideradas apenas como referências teóricas.

6.7.2.1.2 Ensaios adiabáticos

Neste cenário, apenas as temperaturas iniciais (θ_0) são prescritas, sendo que a temperatura pode variar devido aos efeitos do termo de acoplamento termomecânico e da taxa

de dissipação mecânica. Para simplificar a análise e evitar a complexidade de modelar a troca de calor com o ambiente externo, assume-se que as amostras são termicamente isoladas. Os resultados obtidos são novamente comparados com os dados experimentais em temperatura controlada, a fim de evidenciar o impacto dessa consideração.

Neste exemplo em particular, as variações de temperatura são consideradas constantes ao longo do volume, ou seja, $\nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0$. Além disso, o calor interno (r) é nulo. Portanto, a equação da condução de calor (6.47) simplifica-se para:

$$c_v^* \dot{\theta} = \beta_{tq} d_m - \theta q_m. \quad (6.70)$$

Aplicando o método de Euler, a derivada temporal da temperatura é aproximada por $\dot{\theta} \approx (\theta - \theta^{\text{ant}})/\Delta t$, onde θ^{ant} é a temperatura no passo de tempo anterior. Com essas considerações, a Eq. (6.70) torna-se uma equação linear para θ , que pode ser resolvida em cada iteração do problema térmico por:

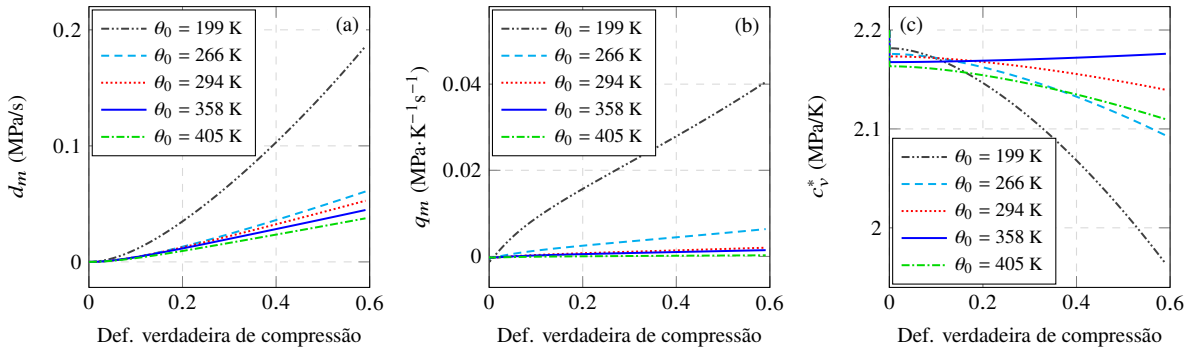
$$\theta = \frac{c_v^* \theta^{\text{ant}} + \beta_{tq} d_m \Delta t}{c_v^* + q_m \Delta t}. \quad (6.71)$$

Conforme visto na Eq. (6.42), a variável c_v^* é um complemento do calor específico volumétrico do material (c_v). Embora esse parâmetro geralmente varie com a temperatura, ele é assumido constante para este exemplo numérico. Na ausência de dados experimentais para o calor específico do Adiprene-L100, adota-se um valor de $2100 \text{ JK}^{-1}\text{kg}^{-1}$, consistente com outros elastômeros de Uretano (LIKOZAR; KRAJNC, 2008). Ademais, a densidade do Adiprene-L100 é 1060 kg/m^3 (MENG; ZHANG, 2015). Utilizando esses valores, podemos estimar o calor específico volumétrico como $c_v = 2100 \cdot 1060 \approx 2.2 \cdot 10^6 \text{ JK}^{-1}/\text{m}^3$, ou 2.2 MPa/K . Os coeficientes de Taylor-Quinney e de expansão térmica são tomados como $\beta_{tq} = 0.9$ e $\alpha = 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, respectivamente. Os parâmetros restantes são exatamente os mesmos da seção anterior.

A Figura 66 mostra os valores de d_m , q_m e c_v^* ao longo do tempo para uma taxa de deformação $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$. Para a taxa de dissipação mecânica (Figura 66(a)), bem como para q_m (Figura 66(b)), o comportamento é consistente com o exemplo anterior. No entanto, o calor específico volumétrico efetivo, apresentado na Figura 66(c), apresenta uma resposta mais intrincada, com padrões de evolução variando entre os casos de θ_0 , notando-se que o caso com $\theta_0 = 358 \text{ K}$ é o único que mostra um aumento do calor específico. Esse comportamento distinto ocorre porque a função selecionada para $q(\theta)$ reverte ligeiramente sua concavidade em torno desta temperatura, alterando o sinal do componente $\partial^2 \psi_m / \partial \theta^2$ na Eq. (6.44).

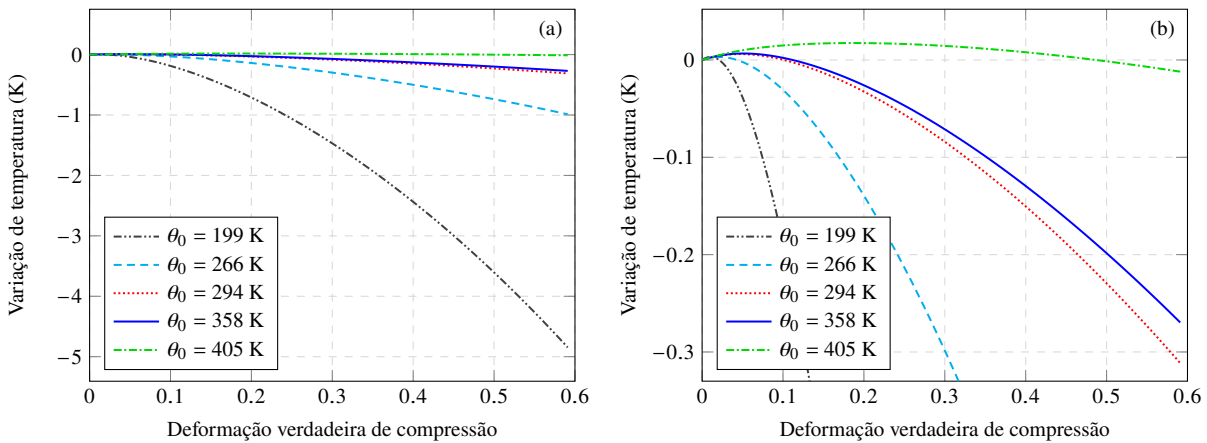
A partir dessas variáveis, é possível calcular a evolução da temperatura usando a Eq. (6.71). Essas variações estão ilustradas na Figura 67(a) para cada caso, com uma visão ampliada fornecida na Figura 67(b). Nesta última, observa-se que a temperatura sofre um ligeiro aumento inicial antes de diminuir gradualmente ao longo do tempo. A variação de temperatura é mais significativa para os casos com temperaturas iniciais mais baixas, tornando-se quase desprezível à medida que a temperatura inicial aumenta.

Figura 66 – Evolução ao longo do tempo de (a) dissipação mecânica, (b) termo de acoplamento termomecânico e (c) capacidade térmica volumétrica efetiva, para ensaios monotônicos com $\dot{\varepsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 67 – Variação da temperatura ao longo do tempo para ensaios monotônicos com $\dot{\varepsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas

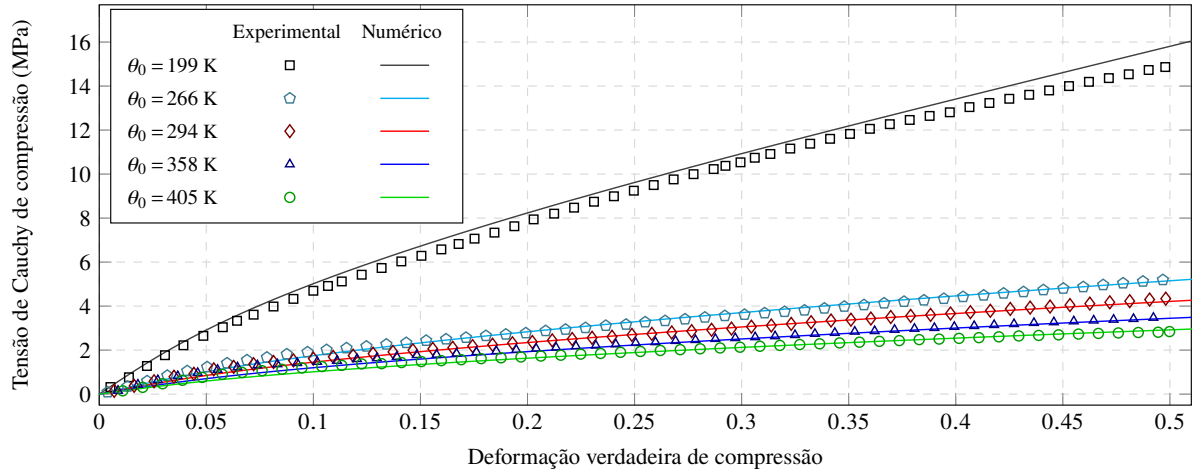


Fonte: Elaborado pelo autor

A Figura 68 apresenta os gráficos de tensão-deformação para cada caso. Comparando esses resultados com os do exemplo anterior (Figura 61), observa-se uma menor conformidade entre as curvas numéricas e experimentais no caso com $\theta_0 = 199 \text{ K}$, onde a variação de temperatura é mais alta. Essa discrepância é esperada, já que o modelo foi calibrado considerando temperaturas constantes em cada caso, e a resposta constitutiva é mais sensível a variações de temperatura nos casos com temperaturas absolutas mais baixas. De fato, para os casos restantes, onde as temperaturas absolutas são mais altas e as variações de temperatura são menores, a diferença não foi suficiente para afetar significativamente os resultados.

Ao contrário dos exemplos anteriores, onde não há variações de temperatura, neste caso o termo $\dot{\theta}\eta_m$ da Eq. (6.34) não pode ser negligenciado como um componente da taxa de trabalho interno. Tomando a Eq. (6.49) como referência, a análise das taxas de trabalho para este exemplo é ilustrada na Figura 69, considerando a evolução temporal de todos os componentes relevantes: taxa de trabalho interno ($S\dot{E}$), taxa de energia de

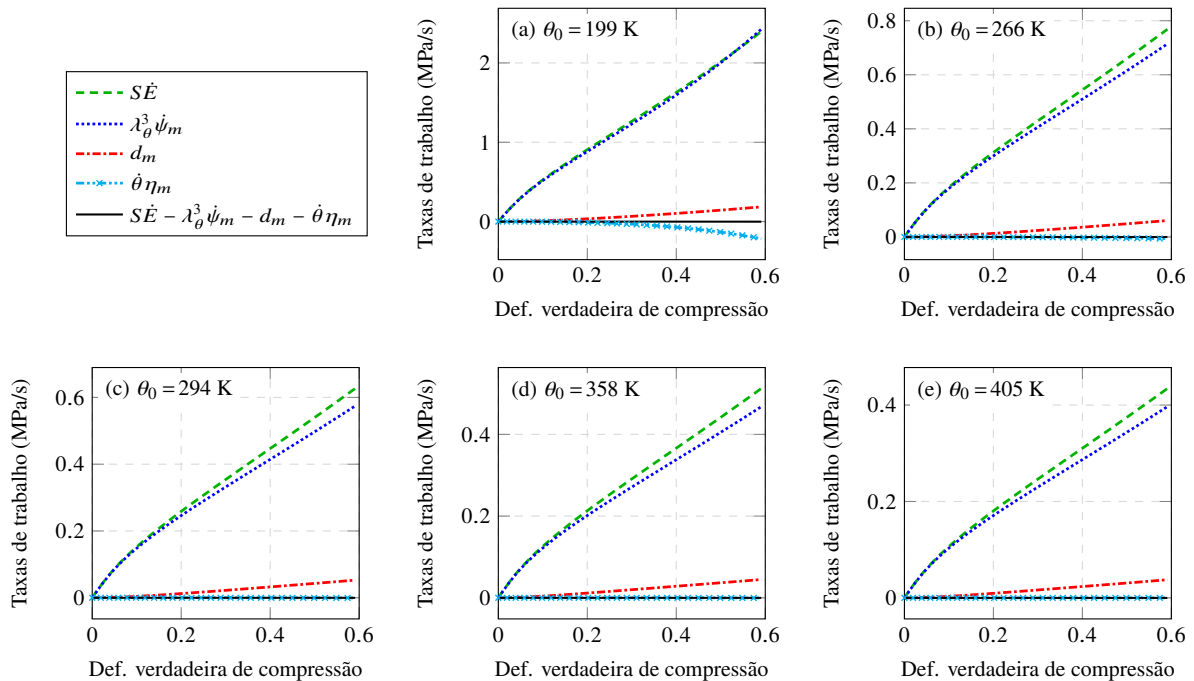
Figura 68 – Curvas tensão-deformação para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas



Fonte: Elaborado pelo autor

Helmholtz mecânica ($\lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m$), taxa de dissipação mecânica (d_m) e termo relacionado à entropia mecânica ($\dot{\theta} \eta_m$). Novamente, as taxas são calculadas pelo método de Euler. O erro numérico $S\dot{E} - \lambda_\theta^3 \dot{\psi}_m - d_m - \dot{\theta} \eta_m$ é suficientemente próximo de zero em todas as instâncias. O termo relacionado à entropia também é muito próximo de zero, exceto no caso com $\theta_0 = 199 \text{ K}$. Consequentemente, os resultados são semelhantes aos do exemplo anterior, exibindo uma proporção consistente entre dissipação e taxa de trabalho interno.

Figura 69 – Análises das taxas de trabalho para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas



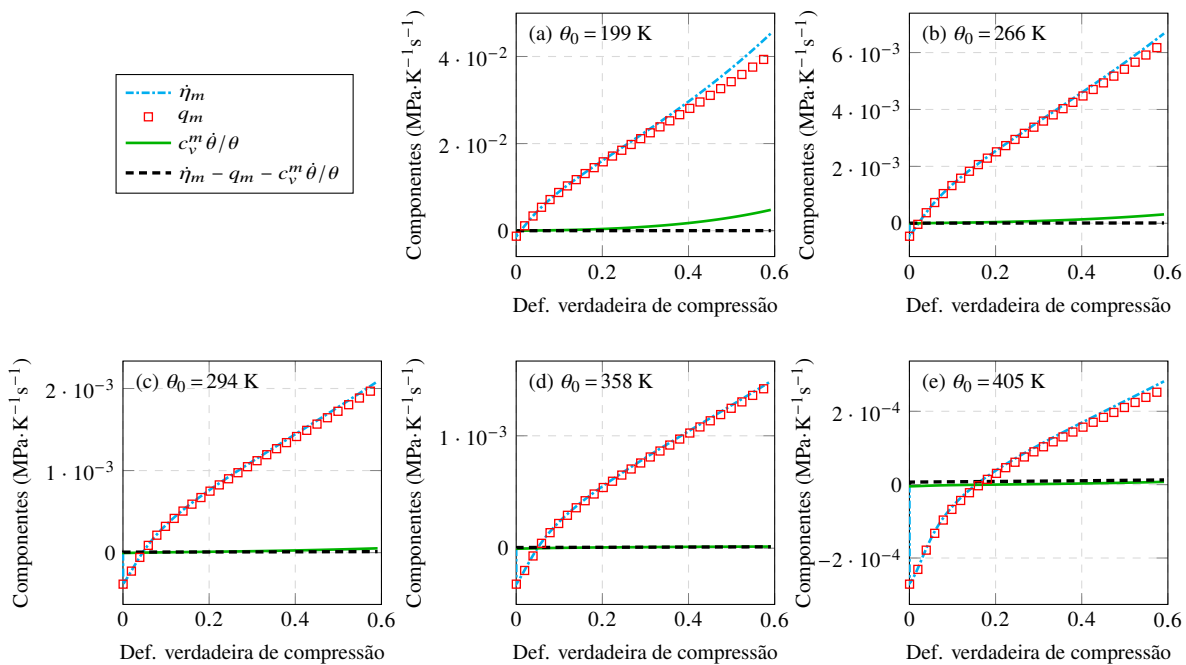
Fonte: Elaborado pelo autor

Para a análise da taxa de entropia, um termo que foi negligenciado em exemplos anteriores deve ser considerado: o componente $c_v^* \dot{\theta}/\theta$ da Eq. (4.25). Essa equação também pode ser reescrita puramente em termos de componentes mecânicos, isto é:

$$\dot{\eta}_m = \frac{1}{\theta} c_v^m \dot{\theta} + q_m. \quad (6.72)$$

A Figura 70 mostra a evolução de cada componente da Eq. (6.72), juntamente com o erro numérico $\dot{\eta}_m - c_v^m \dot{\theta}/\theta - q_m$, que permanece suficientemente próximo de zero em todos os casos. À medida em que se eleva a temperatura inicial θ_0 , o termo $c_v^m \dot{\theta}/\theta$ torna-se desprezível, levando a resultados que se assemelham aos apresentados na Figura 64.

Figura 70 – Componentes da taxa de entropia mecânica para ensaios monotônicos com $\dot{\epsilon} = -10^{-1} \text{ s}^{-1}$ em cinco diferentes temperaturas iniciais e amostras termicamente isoladas

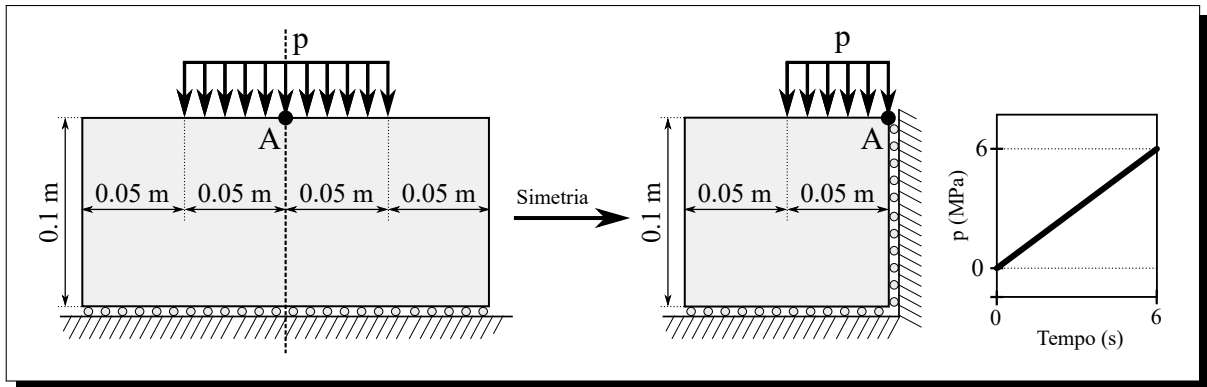


Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.2.2 Cubo parcialmente carregado

Nesta subseção, analisa-se o problema bidimensional ilustrado na Figura 71, considerando o estado plano de deformação (EPD). A carga parcialmente aplicada (p) varia linearmente de 0 a 6 MPa ao longo de um período de 6 segundos (ou seja, $\dot{p} = 1 \text{ MPa/s}$). Devido à simetria, apenas metade do domínio é discretizada, conforme indicado na figura.

Utilizam-se todos os parâmetros calibrados em seções anteriores para o material Adiprene-L100, sendo adicionada apenas a condutividade térmica, tomada como um valor constante $k = 0,132 \text{ W/(m·K)} = 0,132 \text{ N/(s·K)}$. Considera-se uma temperatura inicial θ_0 uniforme em todo o domínio. Assim como na subseção 6.5.2, assume-se que o cubo está termicamente isolado.

Figura 71 – Geometria e condições de contorno para o cubo de Adiprene-L100 parcialmente carregado

Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.2.3 Convergência

Para garantir uma modelagem numérica consistente, são inicialmente realizadas análises de dependência da malha de elementos finitos, da discretização temporal e do número de pontos de integração para o modelo viscoelástico (n_p). Para essas análises, é utilizada uma temperatura inicial $\theta_0 = 405$ K.

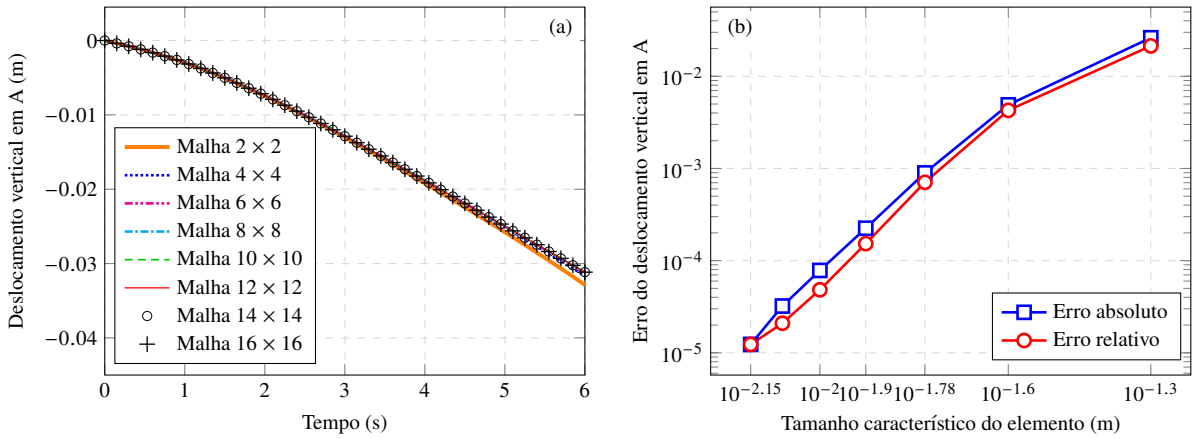
São empregados elementos finitos triangulares com 10 nós e ordem cúbica (T10). As malhas selecionadas são regulares estruturadas, com um número fixo de subdivisões de elementos nas direções da largura e altura do domínio tal que, para uma determinada subdivisão de malha $N \times N$, o número total de elementos finitos é $2N^2$, e o número total de nós é $(3N + 1)^2$. Nesta análise, são consideradas 8 malhas diferentes, começando com uma subdivisão de 2×2 e progredindo por todos os números pares até 16×16 . O número de pontos de integração do modelo viscoelástico é fixado em $n_p = 6$, e o número de passos de tempo em 1600.

As Figuras 72 e 73 apresentam os resultados da análise de convergência da malha para o deslocamento vertical no ponto A, indicado na Figura 71, e a temperatura média ao longo do domínio, respectivamente. Os erros em cada caso são calculados de forma análoga à Eq. (6.62), onde, para o erro absoluto, é tomada como referência fixa a malha mais refinada (neste caso, 16×16), e para o erro relativo, é tomada como referência a próxima malha mais refinada entre as consideradas.

A temperatura média demonstra alta sensibilidade à discretização da malha, com gráficos visivelmente distintos na Figura 73(a), contrastando com o comportamento dos gráficos de deslocamento vertical representados na Figura 72(a). Essa diferença é refletida numericamente nos gráficos de convergência apresentados na Figura 72(b) e na Figura 73(b), onde os erros em deslocamento variam de 10^{-2} a 10^{-5} , enquanto os erros em temperatura variam de 10^{-1} a 10^{-3} . Para ilustrar melhor a sensibilidade da temperatura ao refinamento da malha, é fornecida na Figura 74 uma representação visual dos campos de temperatura, com mapas de cores, nas configurações deformadas finais para algumas

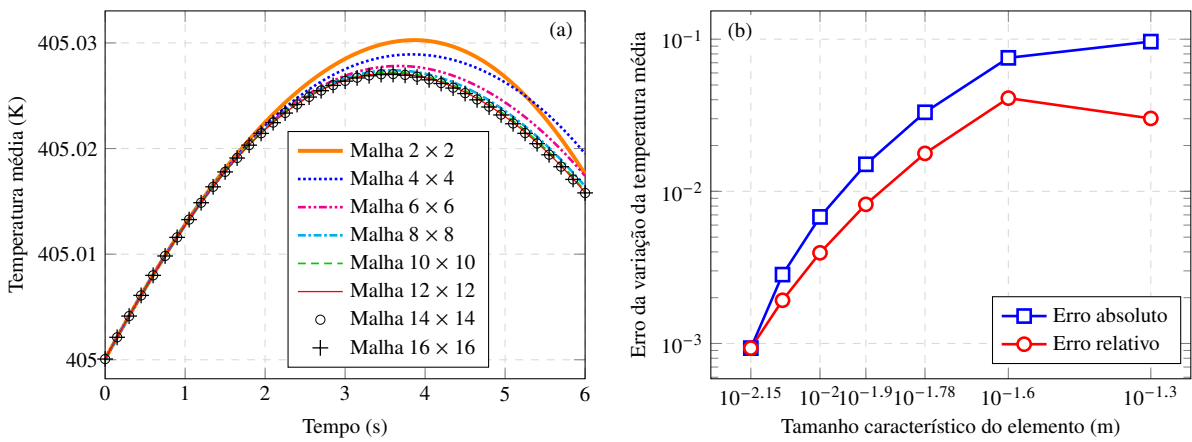
das malhas adotadas.

Figura 72 – Análise de convergência de malha para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo de cubo parcialmente carregado



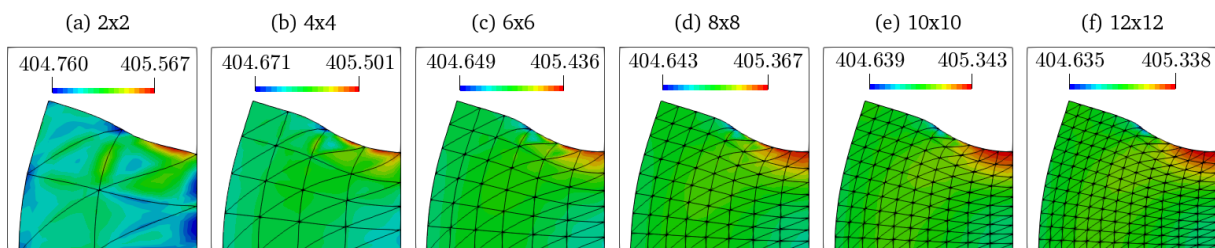
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 73 – Análise de convergência de malha para a temperatura média no exemplo de cubo parcialmente carregado



Fonte: Elaborado pelo autor

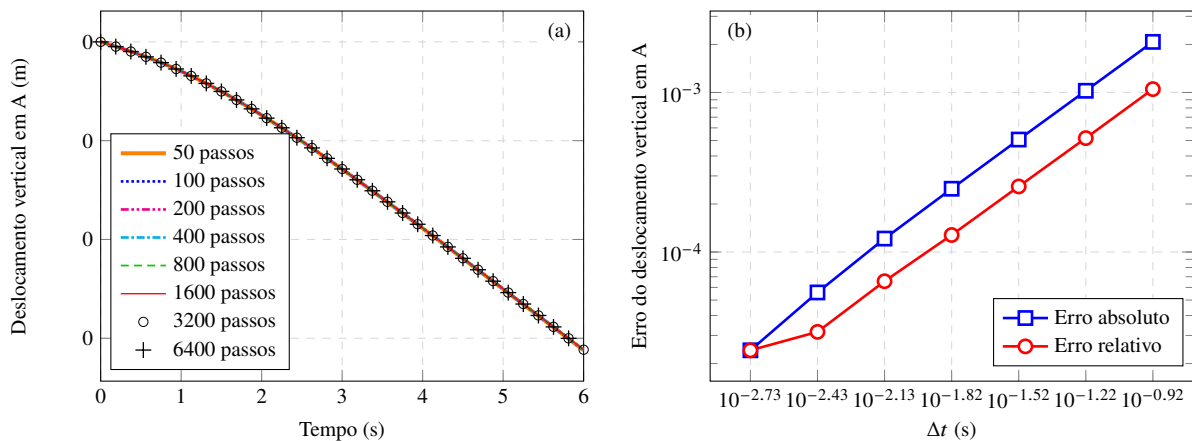
Figura 74 – Configurações deformadas finais para o exemplo de cubo parcialmente carregado com diferentes malhas, com mapas de cores ilustrando as temperaturas (θ)



Fonte: Elaborado pelo autor

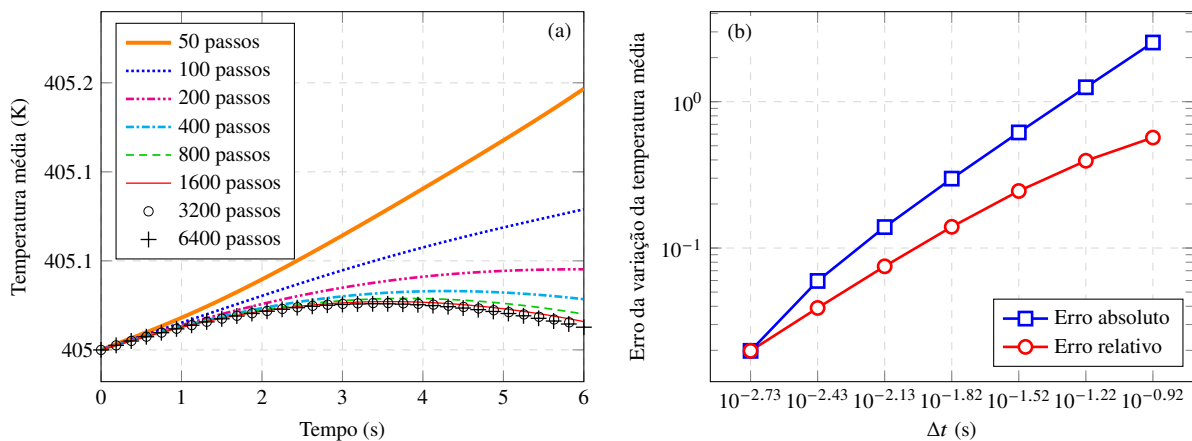
Para estudar a convergência temporal, são consideradas 8 diferentes discretizações temporais com 50, 100, 200, 400, 800, 1600, 3200 e 6400 passos de tempo. Nesta análise, a discretização da malha é fixada em 10×10 subdivisões, e utiliza-se $n_p = 6$ para a integração numérica dos termos viscosos na lei constitutiva. Os resultados de deslocamento vertical no ponto A e a temperatura média no domínio são apresentados nas Figuras 75 e 76, respectivamente.

Figura 75 – Análise de convergência temporal para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo de cubo parcialmente carregado



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 76 – Análise de convergência temporal para a temperatura média no exemplo de cubo parcialmente carregado

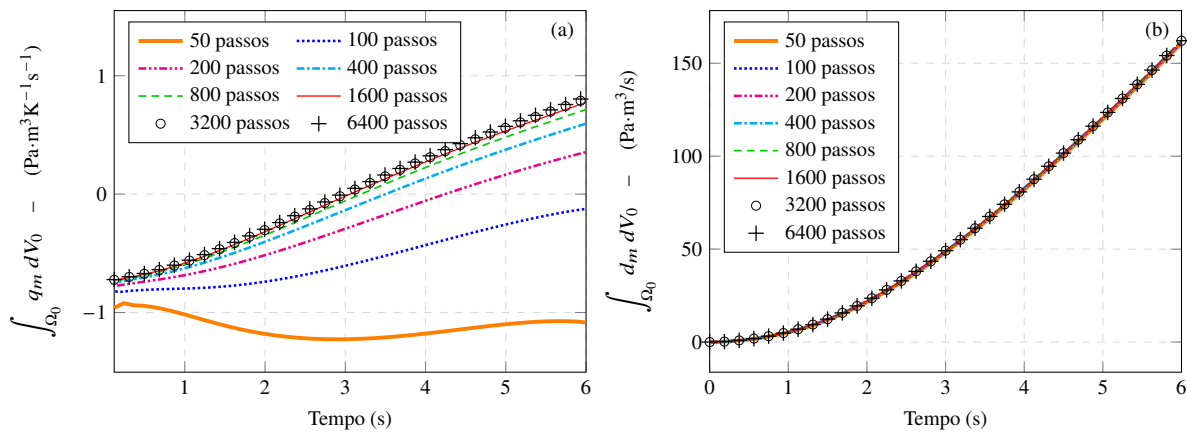


Fonte: Elaborado pelo autor

Similarmente às análises de convergência de malha, os resultados do deslocamento vertical no ponto A apresentam pouca variação, enquanto a temperatura demonstra alta sensibilidade ao refinamento. A sensibilidade neste caso é ainda maior do que na convergência de malha, com erros variando de 10^0 a pouco mais de 10^{-2} . Isso ocorre principalmente devido às variações no termo de acoplamento termomecânico (q_m), em vez da dissipação mecânica (d_m). Isso pode ser visualmente confirmado na Figura 77, onde são

apresentados os resultados para ambas as variáveis integradas no domínio. A dissipação mecânica apresenta pouca variação com mudanças na discretização temporal, enquanto o termo de acoplamento termomecânico mostra grande sensibilidade a essas mudanças, destacando sua influência dominante no erro de temperatura. Embora esses erros possam ser significativos para discretizações temporais menos refinadas, eles tendem a se tornar suficientemente pequenos à medida que Δt diminui.

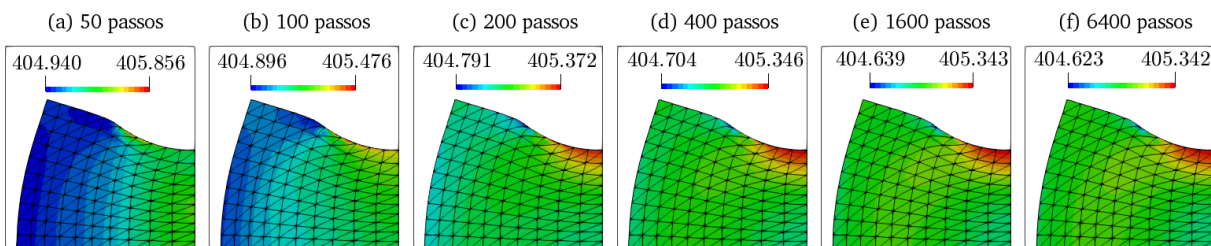
Figura 77 – Análise de convergência temporal para o (a) termo de acoplamento termomecânico total e (b) dissipação mecânica total



Fonte: Elaborado pelo autor

A Figura 78 apresenta o campo de temperatura sobre a configuração deformada final para alguns dos casos de discretização temporal. Observa-se que não apenas os valores são diferentes, mas toda a distribuição de temperatura apresenta variações dependendo do número de passos de tempo, especialmente nos dois casos com a discretização menos refinada (50 e 100 passos).

Figura 78 – Configurações deformadas finais para o exemplo do cubo parcialmente carregado com diferentes discretizações temporais, com mapas de cores ilustrando as temperaturas (θ)

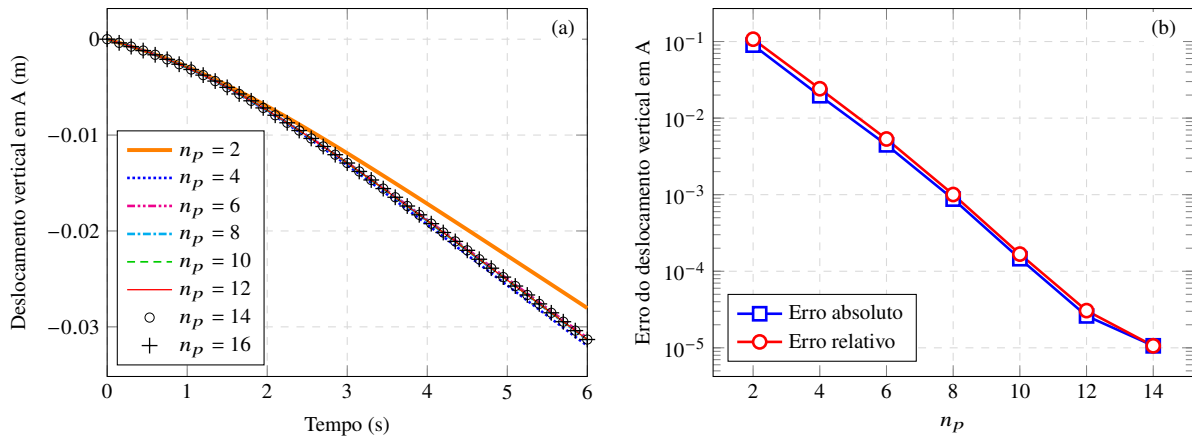


Fonte: Elaborado pelo autor

Por fim, analisa-se a influência do número de pontos de integração do modelo viscoelástico (n_p) nos resultados. Consideram-se oito casos diferentes, começando com $n_p = 2$ e aumentando por todos os números pares até $n_p = 16$. A discretização da malha é fixada em 10×10 subdivisões e o tempo é discretizado em 1600 passos. As Figuras 79 e 80 mostram a convergência para o deslocamento vertical no ponto A e a temperatura média ao longo do domínio, respectivamente.

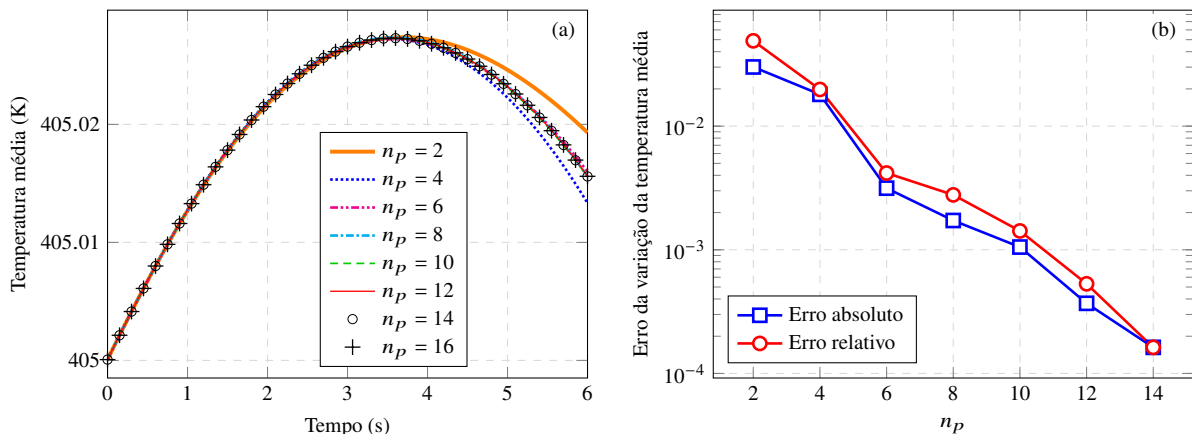
Ao contrário das análises anteriores, neste caso são observados comportamentos de convergência semelhantes tanto para o deslocamento quanto para a temperatura. Os resultados demonstram uma convergência mais rápida em comparação com as análises anteriores e menores erros associados. Graficamente, variações significativas são observadas apenas para os dois primeiros casos de n_p (2 e 4). Numericamente, a magnitude do erro varia de 10^{-1} a 10^{-5} para o deslocamento e de aproximadamente 10^{-1} a 10^{-4} para a temperatura.

Figura 79 – Análise de convergência dos pontos de integração para o deslocamento vertical no ponto A no exemplo do cubo parcialmente carregado



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 80 – Análise de convergência dos pontos de integração para a temperatura média no exemplo do cubo parcialmente carregado

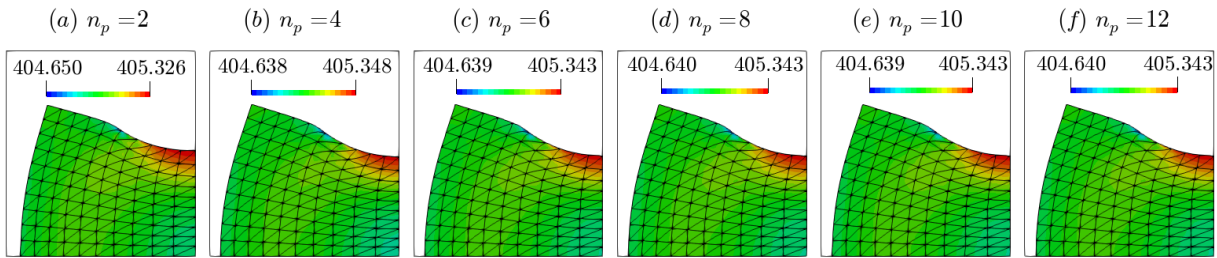


Fonte: Elaborado pelo autor

Os campos de temperatura para alguns casos selecionados de n_p são apresentados na Figura 81. Ao contrário das análises anteriores, a distribuição de temperatura é visualmente consistente em todos os casos, com algumas diferenças observadas nos valores extremos.

Para concluir o estudo acerca da dependência de malha, passos de tempo e integração numérica, apresentam-se os tempos de processamento computacional para cada caso

Figura 81 – Configurações deformadas finais para o exemplo do cubo parcialmente carregado com diferentes valores de n_p , coloridas pela temperatura (θ)

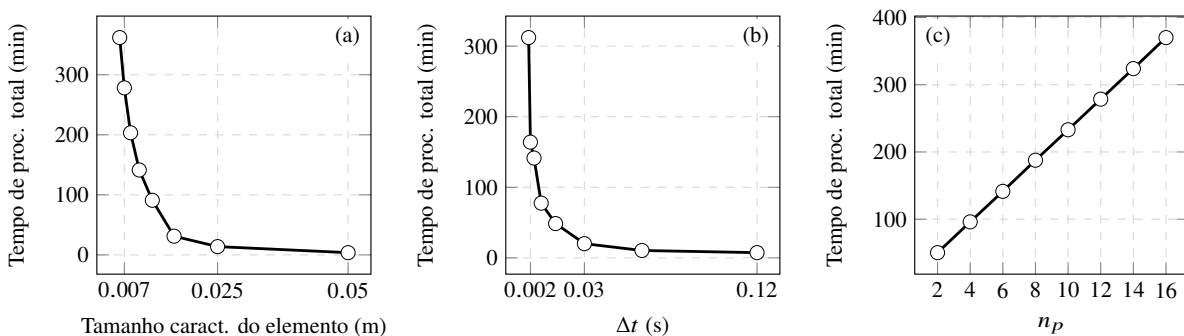


Fonte: Elaborado pelo autor

na [Figura 82](#). Para a dependência de malha e do passo de tempo, o esforço computacional aumenta quase exponencialmente com o refinamento das variáveis de controle (comprimento característico do elemento e Δt , respectivamente), enquanto que para a análise de convergência de n_p , a relação é linear, semelhante aos resultados obtidos na [subseção 6.7.1.3](#).

De modo geral, os tempos de processamento demonstram uma evolução consistente entre todos os casos. No entanto, observa-se um comportamento irregular entre os casos com 800 e 1600 passos na análise de convergência temporal. Apesar do número de passos ser dobrado, o aumento no tempo de processamento é significativamente menor do que o esperado, rompendo a tendência exponencial prevista. Isso ocorre porque o refinamento temporal nesse caso reduziu o número de iterações não lineares em cada passo, contribuindo para a diminuição do tempo total de processamento.

Figura 82 – Tempos de processamento computacional para as análises de convergência de malha, tempo e n_p no exemplo do cubo parcialmente carregado



Fonte: Elaborado pelo autor

6.7.2.3.1 Análises com diferentes temperaturas iniciais

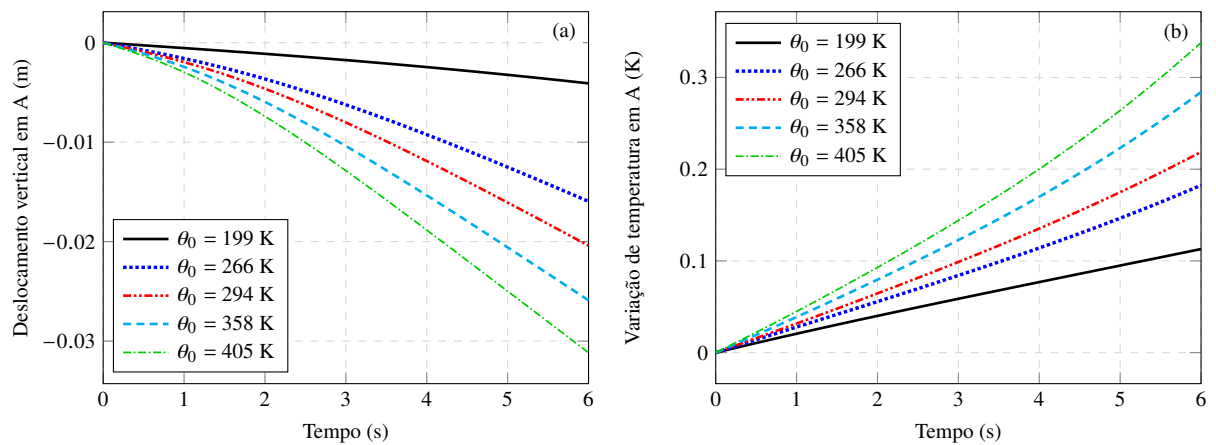
Nesta análise, são consideradas diferentes temperaturas iniciais para a simulação do cubo parcialmente comprimido. Similarmente à [subseção 6.7.2.1](#), cinco valores distintos de θ_0 são aplicados: 199, 266, 294, 358 e 405 K. Com base nas análises de convergência anteriores e visando o equilíbrio ideal entre erro numérico e esforço computacional, foram

selecionados os seguintes parâmetros de análise: subdivisões de malha 10×10 , 1600 passos de tempo ($\Delta t = 3,75 \cdot 10^{-3}$ s), e $n_p = 6$.

Na [Figura 83](#), são apresentados o deslocamento vertical e a variação de temperatura no ponto A. Observa-se que a temperatura inicial tem uma influência significativa na rigidez do material, com o deslocamento vertical aumentando consistentemente em magnitude à medida que θ_0 aumenta. As variações de temperatura também são mais acentuadas com o aumento de θ_0 , em contraste com o exemplo da [subseção 6.7.2.1.2](#), onde a variação de temperatura é maior para $\theta_0 = 199$ K.

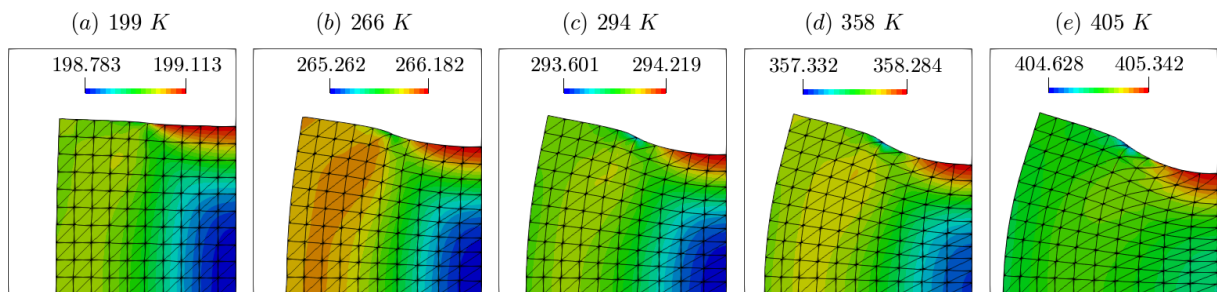
Para representar visualmente os resultados e fornecer uma visão mais completa do comportamento ao longo do domínio, são exibidas nas [Figuras 84 e 85](#) as configurações finais deformadas para cada caso de θ_0 , com mapas de cores ilustrando o campo de temperatura e o componente vertical da tensão de Cauchy (σ_{yy}), respectivamente.

Figura 83 – Resultados do deslocamento vertical e variação de temperatura para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais



Fonte: Elaborado pelo autor

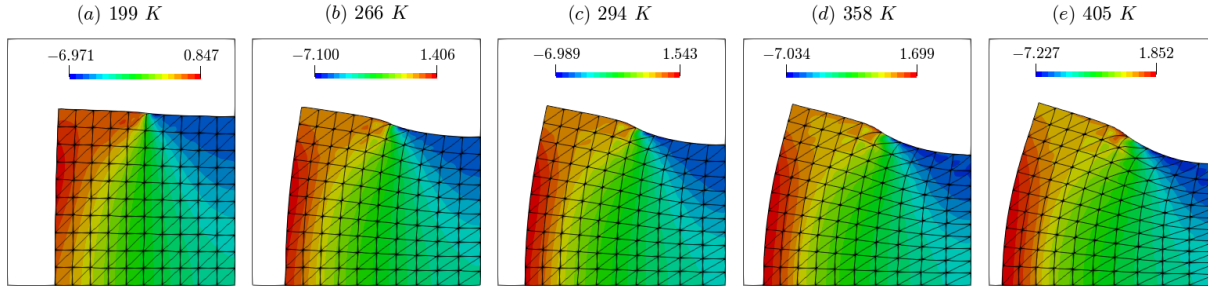
Figura 84 – Configurações finais do exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais, com mapas de cores ilustrando a temperatura (θ)



Fonte: Elaborado pelo autor

Assim como na [subseção 6.5.2](#), é realizada uma análise das taxas de trabalho integradas sobre o domínio. Na [Figura 86](#), são apresentados os gráficos da Eq. (6.52) e de todos os seus componentes ao longo do tempo, para cada caso de θ_0 . Novamente são obtidos

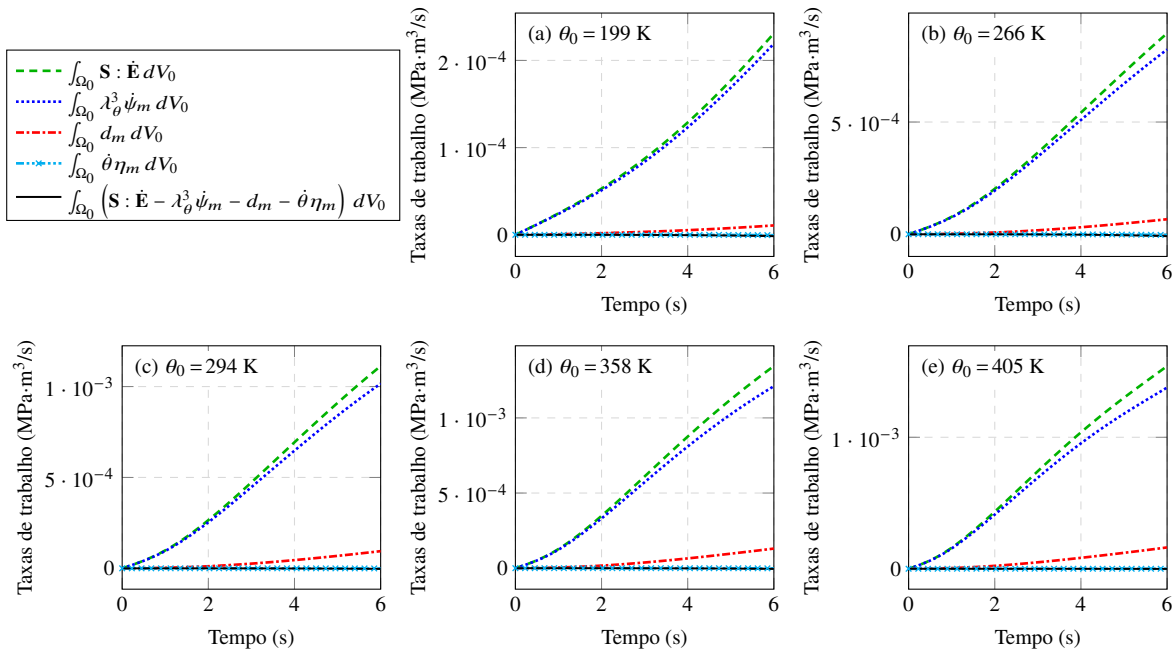
Figura 85 – Configurações finais do exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais, com mapas de cores ilustrando o componente vertical da tensão de Cauchy (σ_{yy})



Fonte: Elaborado pelo autor

resultados consistentes, com a soma dos componentes próxima de zero em todos os casos. Observa-se que o termo relacionado à entropia é desprezível neste exemplo, e a proporção entre a taxa de trabalho interno e a taxa de dissipação é similar para todos os valores de θ_0 , apenas com pequenos aumentos na porcentagem de dissipação à medida que θ_0 aumenta.

Figura 86 – Análises das taxas de trabalho total para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais



Fonte: Elaborado pelo autor

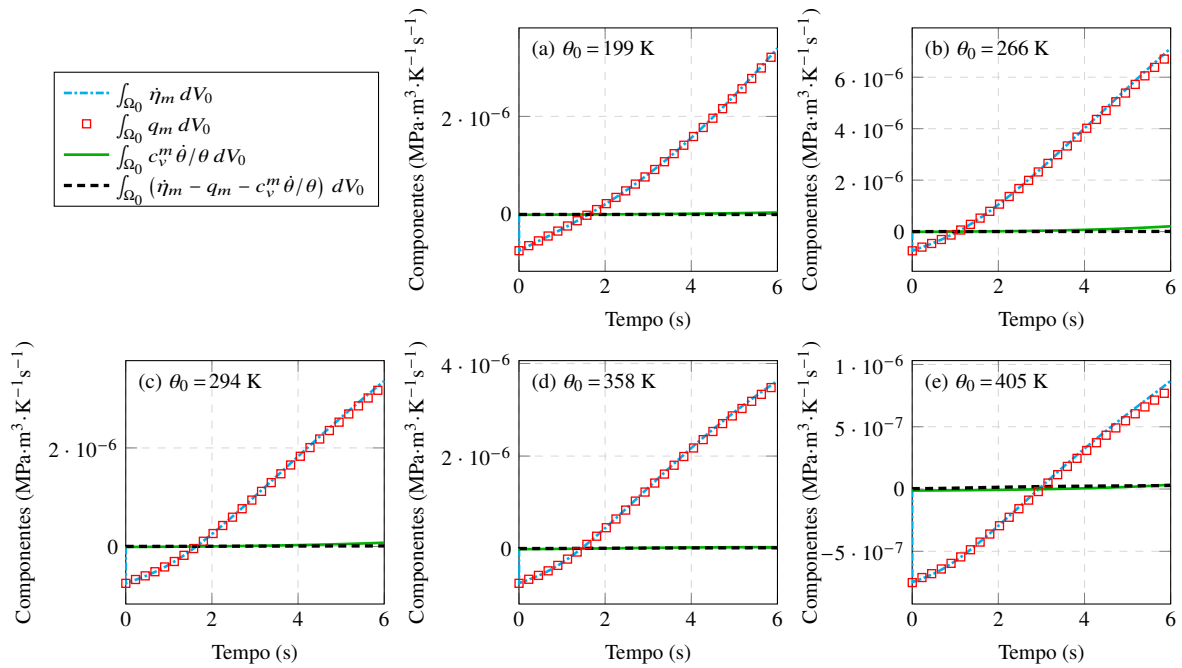
Para analisar a taxa de entropia em todo o domínio, a Eq. (6.72) é integrada sobre o volume inicial, resultando em:

$$\int_{\Omega_0} \dot{\eta}_m dV_0 - \int_{\Omega_0} \frac{1}{\theta} c_v^m \dot{\theta} dV_0 - \int_{\Omega_0} q_m dV_0 = 0. \quad (6.73)$$

A Figura 87 mostra a evolução da Eq. (6.73) e de cada um de seus componentes ao longo do tempo. Mais uma vez, o erro total é desprezível em todas as instâncias. Além disso, o segundo termo da Eq. (6.73) também apresenta valores próximos de zero, levando a uma

relação quase direta entre o primeiro (taxa total de entropia mecânica) e o terceiro (termo de acoplamento termomecânico total). Seu comportamento é semelhante aos exemplos anteriores, partindo de valores pequenos e negativos e gradualmente aumentando ao longo do tempo até valores positivos.

Figura 87 – Análises da taxa total de entropia para o exemplo do cubo parcialmente carregado em diferentes temperaturas iniciais



Fonte: Elaborado pelo autor

Capítulo 7

Modelo numérico de contato

O modelo de contato descrito neste capítulo é uma extensão do modelo aplicado em [Carvalho \(2019\)](#), 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, o que requer o emprego de uma estratégia nó-a-superfície. Além disso, algumas modificações gerais são feitas ao modelo original de forma a aprimorar 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 não influencia significativamente os problemas sem atrito, pois nesses casos o ponto de contato após o deslizamento independe do ponto original. No entanto, é importante para os casos com atrito, onde o ponto original de contato, denominado ponto de aderência, possui relevância fundamental ao problema.
- 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 modelo de [Carvalho \(2019\)](#), permite-se que os pontos de contato deslizem apenas transversalmente ao ponto original, o que pode levar a inconsistências em elementos de alta ordem (especialmente elementos com certo grau de curvatura), onde o nó projétil pode deslocar-se para fora do domínio dos elementos alvo. Para contornar esse problema, os pontos de contato nesse modelo são atualizados ao final de cada convergência global, e o sistema é calculado novamente com os novos pontos, gerando mais iterações e comprometendo a convergência. Já no presente modelo, pelo fato de as coordenadas adimensionais serem atualizadas a cada iteração, o ponto de contato pode deslizar apenas dentro do próprio domínio do elemento, evitando as inconsistências mencionadas previamente e reduzindo a necessidade de reiniciar 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, que elevam a ordem do sistema global.

7.1 Discretização pelo método 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:

$$\mathbf{y}_S(\boldsymbol{\xi}) = \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi})\mathbf{y}_\alpha, \quad (7.1)$$

onde o índice α indica a soma sobre todos os nós do elemento alvo, e φ_α denota a função de forma desse elemento relativa ao nó α , que depende, neste caso, das coordenadas adimensionais $\boldsymbol{\xi}$. Derivando \mathbf{y}_S com relação a cada componente de $\boldsymbol{\xi}$, obtém-se os vetores tangentes, isto é:

$$\mathbf{t}^i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \xi_i} \mathbf{y}_\alpha, \quad (7.2)$$

onde i indica a direção associada ao vetor tangente. Para o caso 2D, onde os elementos de contato são curvas unidimensionais, cada ponto possui apenas um vetor tangente, logo $i = 1$. Já no caso 3D, onde os elementos de contato são superfícies bidimensionais, cada ponto possui dois vetores tangentes, que definem um plano tangente, logo i pode valer 1 ou 2. Cada vetor tangente está associado a um vetor tangente unitário, ou normalizado, definido como:

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

O vetor normal \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 tangentes, 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 Eq. (7.5) será automaticamente unitário. Já o vetor normal 3D calculado pela Eq. (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, convencionou-se neste trabalho que os vetores normais estão orientados 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. Para fins de simplificação, são adotadas 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, é possível 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 α nos passos atual e anterior, respectivamente. Assim, para um ponto qualquer \mathbf{y}_S^{int} do domínio do elemento alvo, definido pela coordenada adimensional $\boldsymbol{\xi}$, segue-se que

$$\mathbf{y}_S^{int}(\omega, \boldsymbol{\xi}) = \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \left[\omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1} \right], \quad (7.9)$$

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 escrita como $\mathbf{r}(\omega, \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{y}_N^{int}(\omega) - \mathbf{y}_S^{int}(\omega, \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{0}$. Aplicando-se as Eqs. (7.7) e (7.9) nessa expressão, resulta:

$$\mathbf{r}(\omega, \boldsymbol{\xi}) = \omega \mathbf{y}_N + (1 - \omega) \mathbf{y}_N^{s-1} - \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \left[\omega \mathbf{y}_\alpha + (1 - \omega) \mathbf{y}_\alpha^{s-1} \right] = \mathbf{0}. \quad (7.10)$$

A Eq. (7.10) representa um sistema não-linear de equações para ω e $\boldsymbol{\xi}$, cuja ordem é o número de dimensões do problema. Esse sistema é resolvido neste trabalho pelo método de Newton-Raphson.

Esse processo é realizado para cada combinação de nó projétil e elemento alvo. Caso ocorra a convergência, verificam-se os valores de ω e $\boldsymbol{\xi}$ 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 $\boldsymbol{\xi}$ precisam pertencer ao domínio do elemento finito. Caso essas condições sejam atendidas, ativa-se o contato entre o nó projétil e o elemento alvo, e o valor de $\boldsymbol{\xi}$ 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, introduzidos como parâmetros adicionais ao sistema, associados às forças normais de contato. Além disso, conforme discutido previamente, as coordenadas adimensionais $\boldsymbol{\xi}$ 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 pela introdução de um parâmetro multiplicador de Lagrange λ_n^α para cada nó projétil α em situação de contato, adicionando-se à Eq. (2.16) (energia mecânica total) a parcela

$$\Pi_{\text{cont}}^\alpha = \lambda_n^\alpha g_n^\alpha = \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \bar{\mathbf{n}}. \quad (7.11)$$

O multiplicador de Lagrange, λ_n^α , assume 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 ($\boldsymbol{\xi}$) 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 $\boldsymbol{\xi}$. Com o intuito de aplicar o princípio da estacionaridade da energia, calcula-se a variação da Eq. (7.11) pela expressão

$$\delta \Pi_{\text{cont}}^\alpha = \delta \lambda_n^\alpha g_n^\alpha + \lambda_n^\alpha \bar{\mathbf{n}} \cdot \delta \mathbf{y}_N^\alpha + \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta \mathbf{y}_S^\beta + \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \delta \boldsymbol{\xi}, \quad (7.12)$$

onde o índice β é somado em todos os nós do elemento alvo. Os termos da Eq. (7.12) que multiplicam as variações $\delta \mathbf{y}_N^\alpha$ e $\delta \mathbf{y}_S^\beta$ podem ser adicionados à Eq. (2.44), sendo denominadas forças de contato, denotadas por $\mathbf{f}_{\text{cont}}^\alpha$ e $\mathbf{f}_{\text{cont}}^\beta$, respectivamente. Já os termos que multiplicam $\delta \lambda_n^\alpha$ e $\delta \boldsymbol{\xi}$ são iguados a zero e introduzidos como equações adicionais do sistema.

Levando-se 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

$$\frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -\varphi_\beta \bar{\mathbf{n}} + (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}. \quad (7.13)$$

Logo, as forças de contato aplicadas no nó projétil e nos nós do elemento alvo podem ser expressas, respectivamente, como

$$\mathbf{f}_{\text{cont}}^\alpha = \lambda_n^\alpha \bar{\mathbf{n}}, \quad \text{e} \quad (7.14)$$

$$\mathbf{f}_{\text{cont}}^\beta = \lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -\lambda_n^\alpha \varphi_\beta \bar{\mathbf{n}} + \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}. \quad (7.15)$$

O termo que multiplica $\delta \lambda_n^\alpha$ na Eq. (7.12) introduz a condição de não-penetração ao sistema, expressa como:

$$g_n^\alpha = (\mathbf{y}_\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0. \quad (7.16)$$

Por fim, para o cálculo do termo que multiplica $\delta \boldsymbol{\xi}$, leva-se em conta que a derivada parcial de g_n^α com relação a $\boldsymbol{\xi}$ é dada pela expressão:

$$\frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \xi_i} = \cancel{\mathbf{t}^i \cdot \bar{\mathbf{n}}} + (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \xi_i} = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \xi_i}. \quad (7.17)$$

Para os casos particulares 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. (7.12) associada

à $\delta\boldsymbol{\xi}$ se anula. Por esse motivo, modelos clássicos de contato com elementos lineares desconsideram a variação de $\boldsymbol{\xi}$ em sua formulação, e mesmo modelos aplicados a elementos de alta ordem comumente utilizam diferentes abordagens para tratar desse problema. Em [Carvalho \(2019\)](#), 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 $\boldsymbol{\xi}$ como um dos parâmetros do sistema, atualizando-o a cada iteração do processo de Newton-Raphson. Dessa forma, o termo da Eq. (7.12) que multiplica a variação $\delta\boldsymbol{\xi}$ é introduzido como uma equação adicional do sistema, denominada condição de deslizamento, expressa como:

$$\lambda_n^\alpha \frac{\partial g_n^\alpha}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \mathbf{0}. \quad (7.18)$$

As Eqs. (7.14) a (7.16) e (7.18) 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 ($\boldsymbol{\xi}$) 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 projétil ativo 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:

$$r_t = \|\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha\| - \bar{\mu}|\lambda_n^\alpha| \leq 0, \quad \text{e} \quad (7.19)$$

$$r_t \mathbf{g}_t^\alpha = \mathbf{0}, \quad (7.20)$$

onde $\bar{\mu}$ 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,

$$\mathbf{g}_t^\alpha = \mathbf{g}^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \bar{\mathbf{n}} \quad (7.21)$$

onde $\mathbf{g}^\alpha = \mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_{\text{ader}}$, e \mathbf{y}_{ader} denota a posição original de ocorrência do contato, denominada posição de aderência (*stick*). A Eq. (7.20) é chamada condição de Kuhn-Tucker. A partir dela, é possível inferir as seguintes informações:

1. Se r_t é menor que 0, ou seja, se a magnitude da força transversal for menor que $\bar{\mu}|\lambda_n^\alpha|$, não deve haver deslizamento tangencial ($\mathbf{g}_t = \mathbf{0}$);
2. Se houver deslizamento tangencial ($\mathbf{g}_t \neq \mathbf{0}$), então r_t precisa ser nulo, ou seja, a força transversal deve ter magnitude igual a $\bar{\mu}|\lambda_n^\alpha|$.

Essas condições são chamadas, respectivamente, condições de aderência e de deslizamento, sendo tratadas 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 r_t . Se $r_t \leq 0$, 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, além da condição de impenetrabilidade, impõe-se uma condição de não-deslizamento, também utilizando o 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. (7.11), a parcela

$$\Pi_{\text{ader}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \mathbf{g}_t^\alpha \quad (7.22)$$

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. (7.21), e levando em conta que $\bar{\mathbf{t}}^i \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0$ para todo vetor tangente i , segue que a Eq. (7.22) pode ser reescrita simplesmente como

$$\Pi_{\text{ader}}^\alpha = [(\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i] \cdot [\mathbf{g}^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \bar{\mathbf{n}}] = (\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i \cdot \mathbf{g}^\alpha = (\lambda_t^\alpha)^i (g_t^\alpha)^i, \quad (7.23)$$

onde o índice i é somado sobre todos os vetores tangentes 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 $\boldsymbol{\xi}$ deve ser mantida fixa, e portanto, sua variação não é considerada. Dessa forma, a variação da parcela de energia da Eq. (7.23) pode ser escrita como:

$$\delta \Pi_{\text{ader}}^\alpha = \delta (\lambda_t^\alpha)^i (g_t^\alpha)^i + (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial (g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} \cdot \delta \mathbf{y}_N^\alpha + (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial (g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta \mathbf{y}_S^\beta. \quad (7.24)$$

Os termos da Eq. (7.24) que multiplicam $\delta \mathbf{y}_\alpha$ e $\delta \mathbf{y}_\beta$ são adicionados à equação de equilíbrio global com a denominação de forças tangenciais de aderência, expressas respectivamente como

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\alpha = (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial (g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} = (\lambda_t^\alpha)^i \bar{\mathbf{t}}^i, \quad \text{e} \quad (7.25)$$

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\beta = (\lambda_t^\alpha)^i \frac{\partial (g_t^\alpha)^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -(\lambda_t^\alpha)^i \varphi_\beta \bar{\mathbf{t}}^i + (\lambda_t^\alpha)^i \mathbf{g}^\alpha \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}^i}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}. \quad (7.26)$$

O termo que multiplica $(\lambda_t^\alpha)^i$ introduz novas equações a serem adicionada ao sistema global, denominadas condições de não-deslizamento, dadas, para cada índice i de vetor tangente, pela expressão

$$(g_t^\alpha)^i = (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_{\text{ader}}) \cdot \bar{\mathbf{t}}^i = 0, \quad (7.27)$$

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. (7.14) e (7.15)

(forças de contato normal) continuam sendo adicionadas à equação de equilíbrio global, e a Eq. (7.16) (condição de não-penetração) também é considerada no sistema. No entanto, pelo fato de não haver variação de $\boldsymbol{\xi}$ no caso com aderência, a Eq. (7.18) (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 representado por meio de parâmetro incógnita do nó α e torna-se uma força prescrita não-conservativa aplicada nesse nó. Conforme discutido anteriormente, pela lei de Coulomb, a magnitude de $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha$ deve ser igual ao módulo de $\bar{\mu}\lambda_n^\alpha$. Além disso, a direção da força é tomada contrária à direção do deslizamento. Assim, pode-se escrever

$$\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha = -\bar{\mu}|\lambda_n^\alpha| \frac{\mathbf{g}_t^\alpha}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|} \quad \text{ou} \quad (\lambda_t^\alpha)^i = -\bar{\mu}|\lambda_n^\alpha| \frac{(g_t^\alpha)^i}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|}, \quad (7.28)$$

para cada índice i de vetor tangente. Aplica-se ainda o fato de λ_n^α ser negativo, conforme discutido previamente. Assim, $|\lambda_n^\alpha| = -\lambda_n^\alpha$, e a Eq. (7.28) pode ser reescrita simplesmente como

$$\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha = \bar{\mu}\lambda_n^\alpha \frac{\mathbf{g}_t^\alpha}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|} \quad \text{ou} \quad (\lambda_t^\alpha)^i = \bar{\mu}\lambda_n^\alpha \frac{(g_t^\alpha)^i}{\|\mathbf{g}_t^\alpha\|}. \quad (7.29)$$

No caso de atrito com deslizamento, 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 $\boldsymbol{\xi}$, pode-se escrever

$$\delta\Pi_{\text{desliz}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \delta\mathbf{g}_t^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \mathbf{g}_t^\alpha}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} \cdot \delta\mathbf{y}_N^\alpha + \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \mathbf{g}_t^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} \cdot \delta\mathbf{y}_S^\beta + \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \mathbf{g}_t^\alpha}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \delta\boldsymbol{\xi}, \quad (7.30)$$

onde o índice β indica soma sobre todos os nós do elemento alvo. De forma análoga aos casos anteriores, os termos da Eq. (7.30) que multiplicam 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

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\alpha = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \mathbf{g}_t^\alpha}{\partial \mathbf{y}_N^\alpha} = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha - (\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \bar{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha, \quad \text{e} \quad (7.31)$$

$$\mathbf{f}_{\text{tang}}^\beta = \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \mathbf{g}_t^\alpha}{\partial \mathbf{y}_S^\beta} = -\varphi_\alpha \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{y}_S^\beta}, \quad (7.32)$$

onde utiliza-se o fato que $\boldsymbol{\lambda}_t$ é uma força tangente, isto é, $\boldsymbol{\lambda}_t^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}} = 0$. Já a parcela da Eq. (7.30) que multiplica $\delta\boldsymbol{\xi}$ é adicionada à Eq. (7.18) e igualada a zero, resultando na seguinte condição de deslizamento:

$$[\lambda_n^\alpha (\mathbf{y}_N^\alpha - \mathbf{y}_S) - (\mathbf{g}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{n}}) \boldsymbol{\lambda}_t^\alpha] \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \mathbf{0}. \quad (7.33)$$

Novamente, observa-se que as forças normais de contato, dispostas nas Eqs. (7.14) e (7.15), continuam sendo adicionadas à equação de equilíbrio global, e a condição de não-penetração, Eq. (7.16), também é considerada sem modificações. Nota-se que a linearização

das equações para os casos de atrito com deslizamento resulta em uma matriz tangente não-simétrica, ao contrário dos problemas estruturais apresentados até então neste trabalho, exigindo atenção diferenciada para a solução numérica eficiente do sistema.

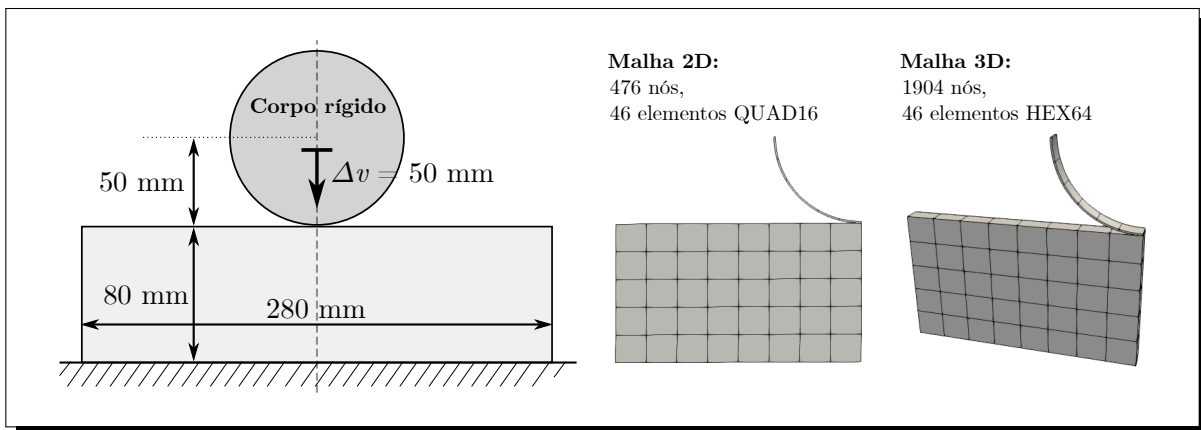
7.4 Exemplos numéricos

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 [Carvalho \(2019\)](#), porém agora com a consideração de atrito.

7.4.1 Contato entre cilindro e bloco hiperelástico

Este exemplo, proposto originalmente por [Feng, Peyraut e Laped \(2003\)](#), 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 88](#). 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).

Figura 88 – Dados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico



Fonte: Elaborado pelo autor

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 bidimensional, considera-se estado plano de deformação (EPD). No caso tridimensional, as interfaces do sólido são restritas no eixo z . A espessura é tomada unitária, mas o eixo z é escalado nas visualizações 3D para melhorar a percepção visual do problema.

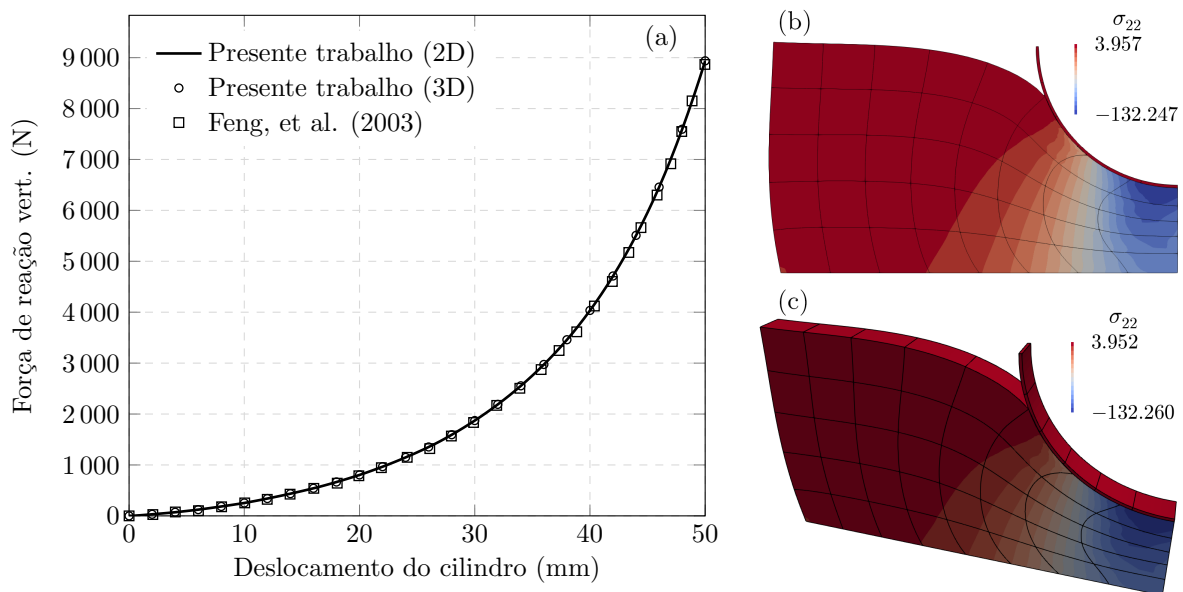
Com relação ao contato, as interfaces do cilindro são discretizadas como segmentos alvos, enquanto as interfaces do bloco são discretizadas como nós projéteis. O coeficiente

de atrito é $\bar{\mu} = 0,4$, e o número de passos de tempo adotado é 100.

Para permitir a concordância com o trabalho de [Feng, Peyraut e Laped \(2003\)](#), utiliza-se, neste exemplo em particular, a lei hiperelástica de Blatz-Ko apresentada na [subseção 4.1.4](#), com $G = 10 \text{ N/mm}^2$.

Na [Figura 89](#), são apresentados os resultados obtidos para os dois casos analisados. Na [Figura 89\(a\)](#), 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 2 para considerar a parte simétrica não discretizada do domínio. Nas [Figuras 89\(b\)](#) e [89\(c\)](#) 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 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.

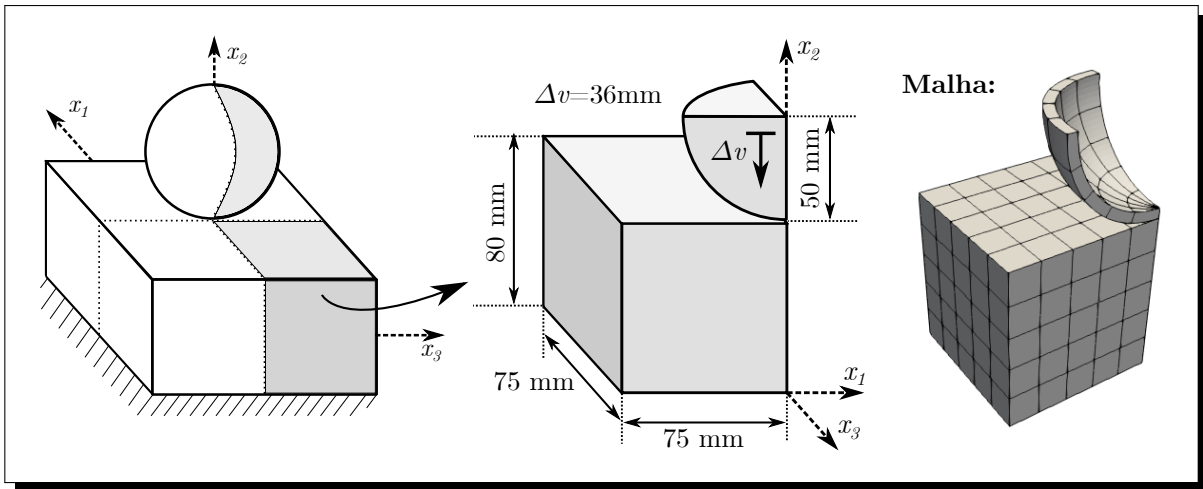
Figura 89 – Resultados do exemplo de contato entre cilindro e bloco hiperelástico, com (a) gráfico de força de reação vertical e configuração deformada final com componentes σ_{22} de tensão de Cauchy em mapa de cores, para os casos (b) 2D e (c) 3D



Fonte: Elaborado pelo autor

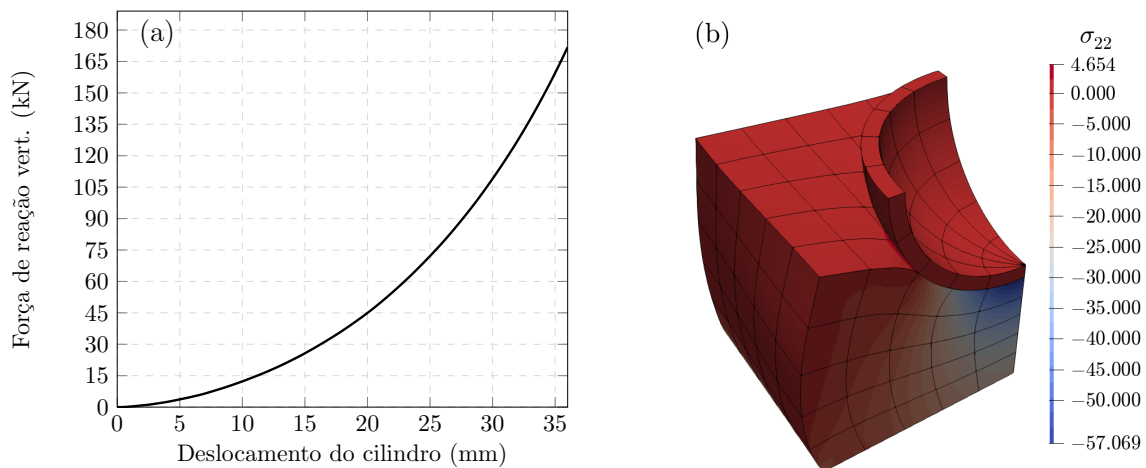
7.4.2 Contato entre esfera e bloco hiperelástico

Nesta seção, propõe-se uma versão generalização tridimensional do exemplo anterior, considerando o contato entre uma superfície rígida esférica e um bloco, com geometria disposta na [Figura 90](#). Devido à simetria, apenas 1/4 do exemplo é discretizado, sendo, nos planos de simetria cortados, permitidos apenas deslocamentos nos respectivos planos. A discretização espacial consiste em uma malha com 150 elementos hexaédricos de ordem 3 (HEX64) e 5120 nós. 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 $\bar{\mu} = 0,4$.

Figura 90 – Dados do exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico

Fonte: Elaborado pelo autor

A força de reação vertical do bloco ao longo do processo de deslocamento imposto é apresentado na [Figura 91\(a\)](#), 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. Na [Figura 91\(b\)](#), apresenta-se a configuração deformada final do problema, sendo indicadas as componentes σ_{22} da tensão de Cauchy em mapa de cores.

Figura 91 – (a) Força de reação vertical e (b) configuração deformada final para exemplo de contato entre esfera e bloco hiperelástico

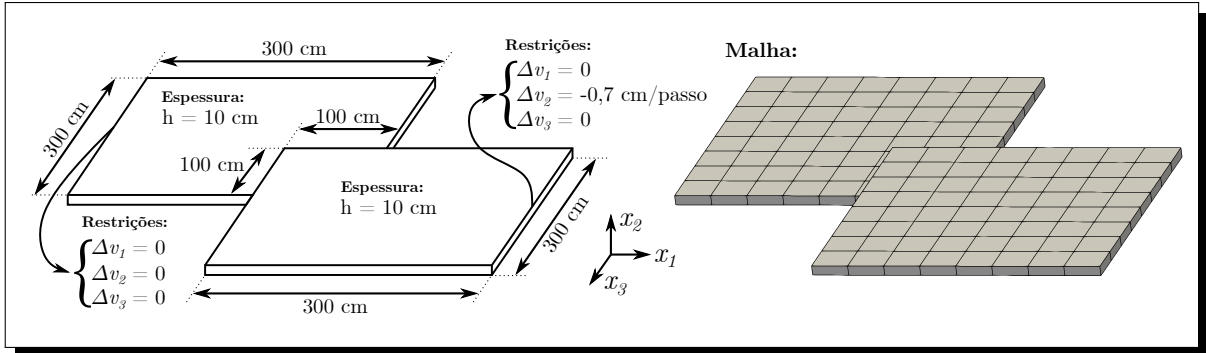
Fonte: Elaborado pelo autor

7.4.3 Contato entre lajes em balanço

Neste exemplo, estuda-se o contato sem atrito entre duas lajes em balanço, com a geometria, condições de contorno e discretização adotada dispostas na [Figura 92](#). Aplica-se deslocamento vertical no apoio engaste da laje da direita, evoluindo monotonicamente de 0 a -140 cm em um total de 200 passos, sendo considerado que o deslocamento é aplicado

de forma quase-estática, desprezando-se as parcelas dinâmicas do problema. Cada laje é discretizada em 64 elementos hexaédricos de ordem 3 (HEX64). O material adotado neste caso é neo-Hookeano, com $E = 1000 \text{ kN/cm}^2$ e $\nu = 0,3$.

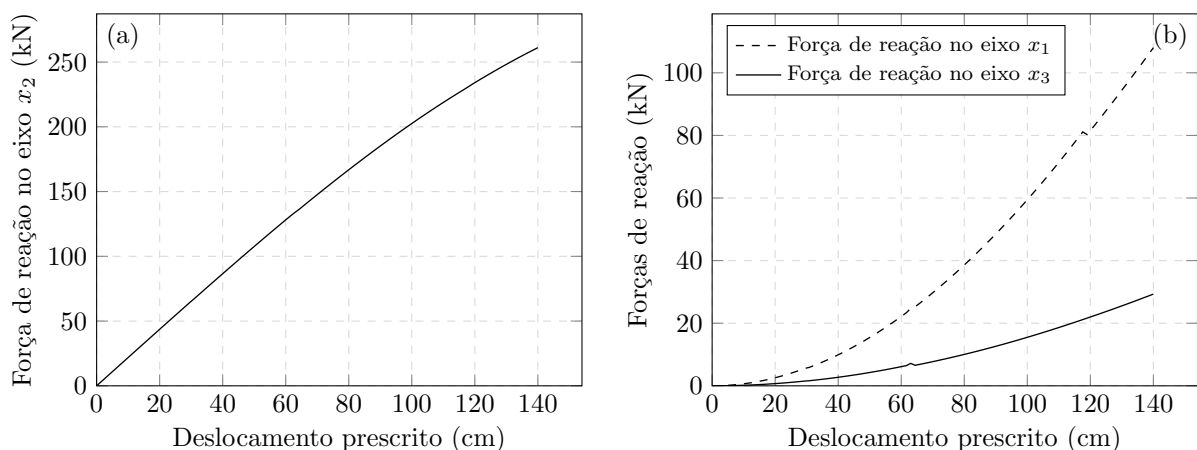
Figura 92 – Dados do exemplo de contato entre lajes



Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 93](#) 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 pontos com pequenas oscilações bruscas. Isso é esperado no presente algoritmo, uma vez que a ativação e desativação de nós de contato entre passos de tempo é um processo naturalmente descontínuo, mas essas oscilações podem ser reduzidas com o refinamento da malha.

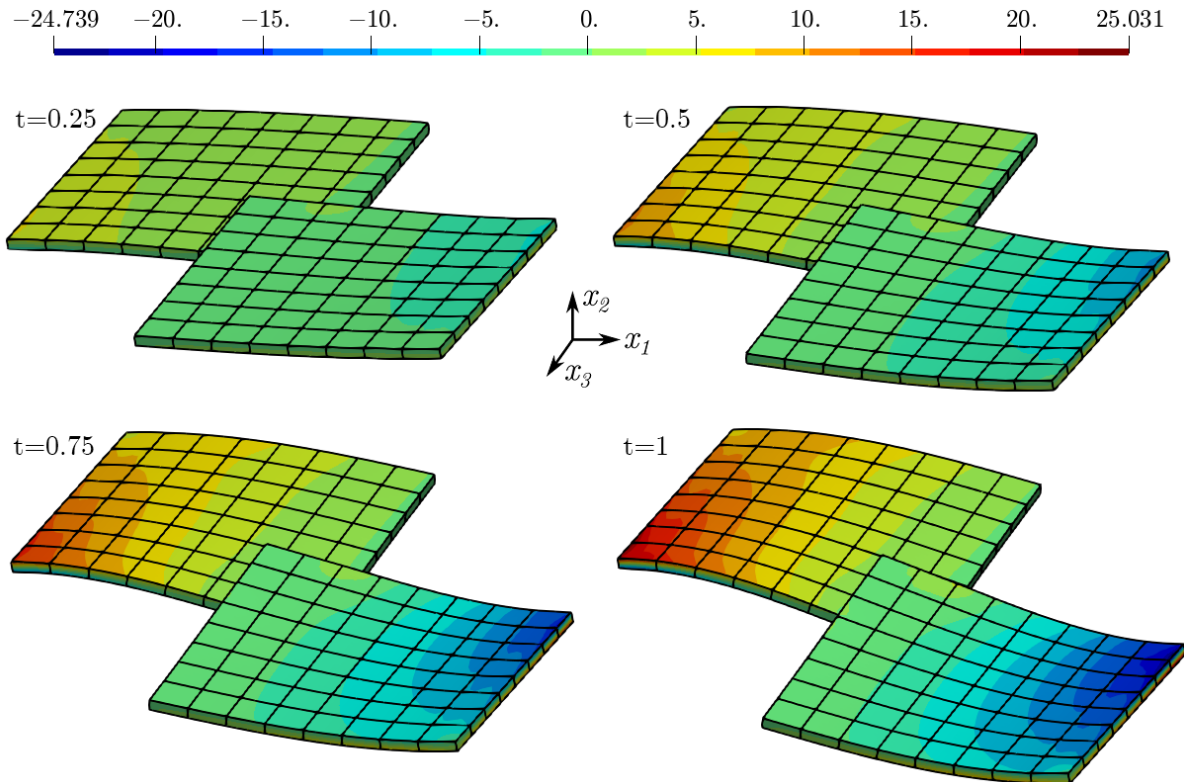
Figura 93 – Reações de apoio nas direções (a) x_2 , (b) x_1 e x_3 para o exemplo de contato entre lajes



Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 94](#) são apresentadas a distribuição do componente σ_{11} de tensão de Cauchy sobre as configurações deformadas para os instantes $t = 1/4$, $t = 1/2$, $t = 3/4$, e $t = 1$ (configuração final).

Figura 94 – 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



Fonte: Elaborado pelo autor

7.4.4 Dobramento simples de chapa metálica

Este exemplo, proposto originalmente em [Carvalho \(2019\)](#) e [Carvalho, Coda e Sanches \(2020\)](#), é estudado novamente utilizando o algoritmo de contato descrito neste capítulo. Trata-se da simulação do processo de dobramento de uma chapa metálica retangular, que assume formato de L após ser forçada por dois anteparos rígidos. Assume-se que as peças sejam suficientemente lubrificadas de forma que o atrito possa ser desprezado. Os dados do exemplo estão dispostos na [Figura 95](#), sendo utilizada a simetria do problema.

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 obtidos do trabalho de [Heeres, Suiker e Borst \(2002\)](#), e apresentados na [Tabela 10](#).

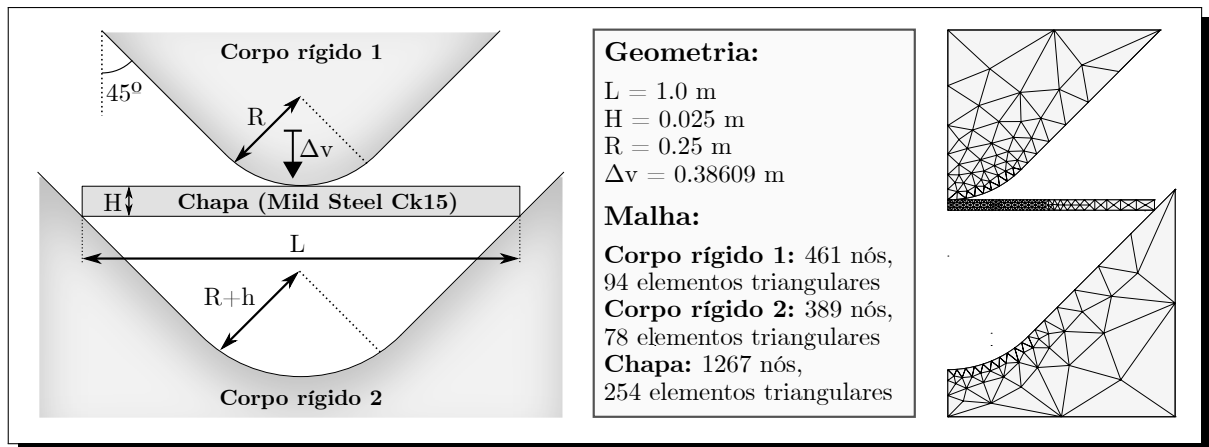
Tabela 10 – Parâmetros do material *Mild Steel Ck15*, retirados de [Heeres, Suiker e Borst \(2002\)](#)

Λ_e (MPa)	G_e (MPa)	σ_Y (MPa)	c (MPa)	b
173 333	80 000	300	1 900	8,5

Fonte: Elaborado pelo autor

O processo de dobramento é simulado em 3000 passos de deslocamento aplicado ao bloco

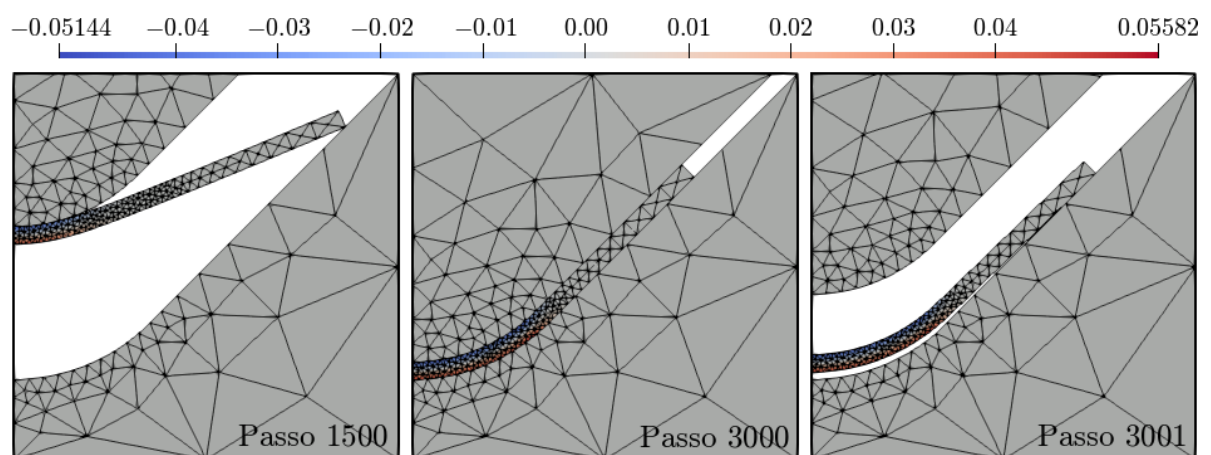
Figura 95 – Dados do exemplo de dobramento simples de chapa metálica



Fonte: Elaborado pelo autor

superior. Em seguida, aplica-se mais um passo de retirada desse bloco, para que possa ser observado o recuo (*springback*) manifestado na chapa metálica. As configurações deformadas em alguns passos da análise são mostradas na [Figura 96](#), incluindo a configuração final após a retirada da peça. Foi obtido um ângulo final da chapa metálica de aproximadamente $92,12^\circ$, ou seja, após o *springback*, houve uma variação de $0,88^\circ$ com relação ao ângulo imposto de 90° . Esses resultados são idênticos aos de [Carvalho \(2019\)](#) e [Carvalho, Coda e Sanches \(2020\)](#), demonstrando a consistência dos modelos de contato aplicados, mesmo utilizando algoritmos distintos.

Figura 96 – 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



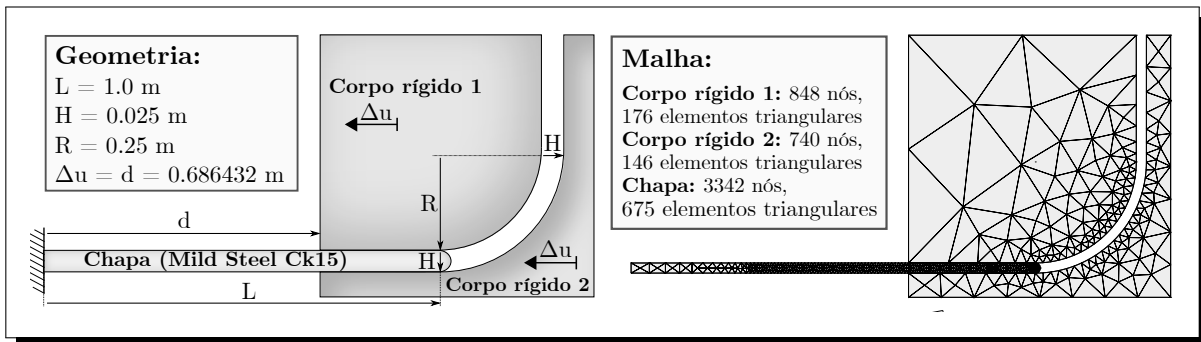
Fonte: [Carvalho \(2019\)](#)

7.4.5 Dobramento direcionado (*draw bending*) de barra metálica

Neste exemplo é realizada uma simulação numérica do processo de dobramento direcionado, apresentado como alternativa ao dobramento simples (exemplo anterior) para a

obtenção de uma peça em mesmo formato. Este estudo é conduzido por [Carvalho \(2019\)](#) para o caso sem atrito, e, neste trabalho, estende-se para o caso com atrito, considerando os coeficientes $\bar{\mu} = 0,05$ e $\bar{\mu} = 0,1$. Os dados de geometria e condição de contorno são apresentados na [Figura 97](#). Novamente, considera-se o material *Mild Steel Ck15* para a chapa, cujos parâmetros são dados na [Tabela 10](#). 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*.

Figura 97 – Dados do exemplo de dobramento direcionado (*draw bending*) de barra metálica

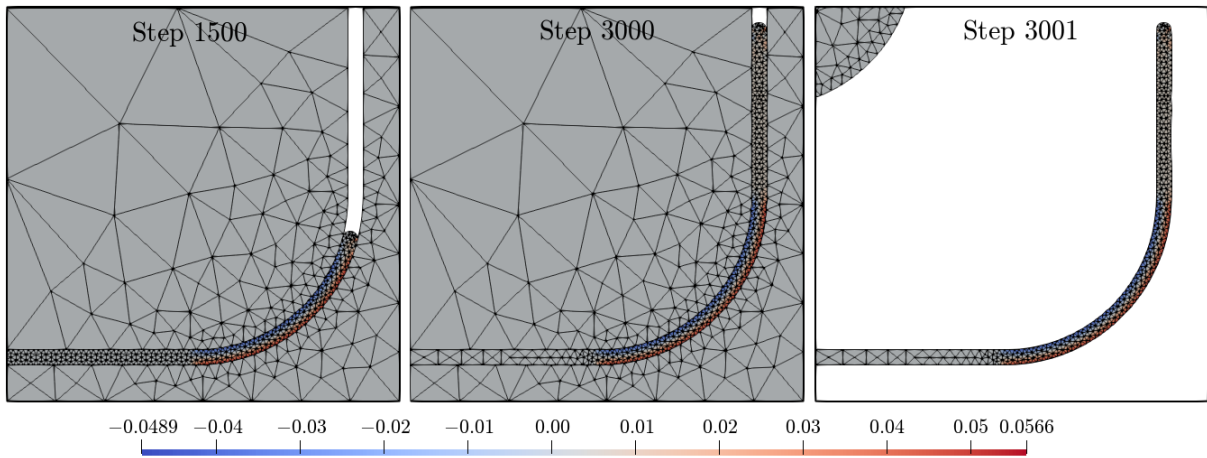


Fonte: Elaborado pelo autor

A principal diferença do dobramento direcionado em relação ao dobramento simples é o fato de que algumas regiões da peça são sujeitas a um ciclo dobramento/desdobramento, ativando o efeito de *Bauschinger*. As consequências desse efeito podem ser vistas na [Figura 98](#), onde apresentam-se as configurações deformadas e o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas para o caso sem atrito, com eixo 1 indicando a direção horizontal da chapa indeformada. 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.

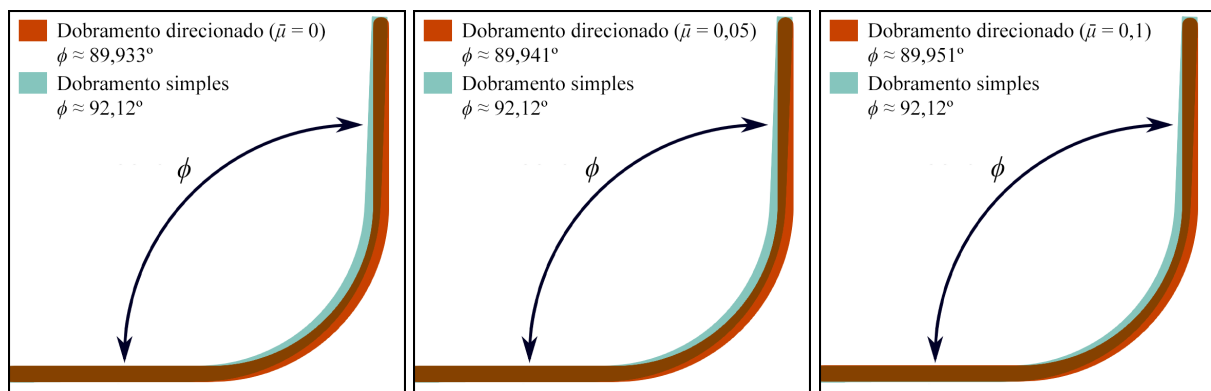
Como consequência, o exemplo de dobramento direcionado apresenta diferenças na sua configuração deformada final com relação ao dobramento simples. Uma comparação entre os dois casos é realizada na [Figura 99](#) para todos os casos de atrito considerados. Observa-se que o ângulo aproximado da configuração final da chapa é menor que 90° no dobramento direcionado, demonstrando um comportamento de *springback* oposto ao exemplo anterior. Esse 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 100](#), 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 98 – Configurações deformadas do exemplo de dobramento direcionado para o caso sem atrito, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores



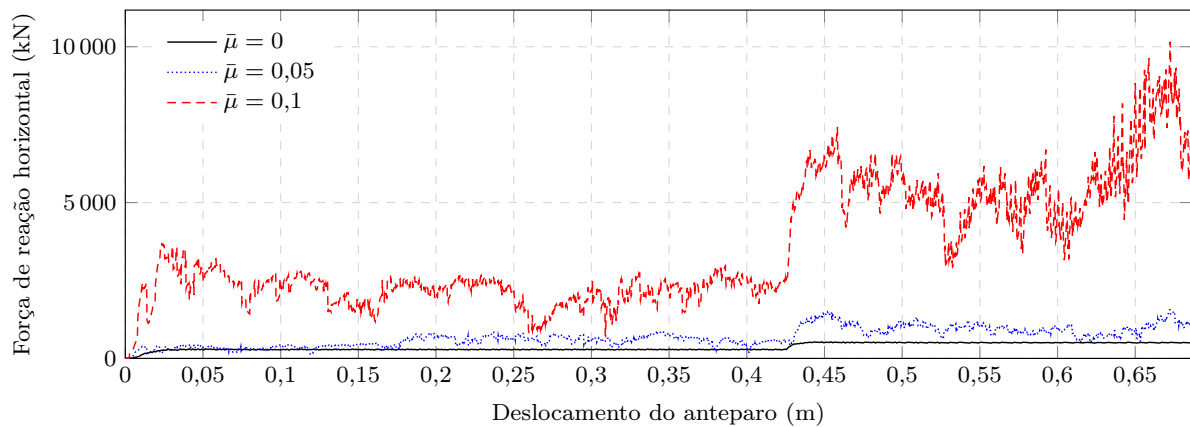
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 99 – Configurações deformadas finais do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito, comparadas com o exemplo de dobramento simples



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 100 – Gráficos de força de reação horizontal do exemplo de dobramento direcionado para os três casos de atrito

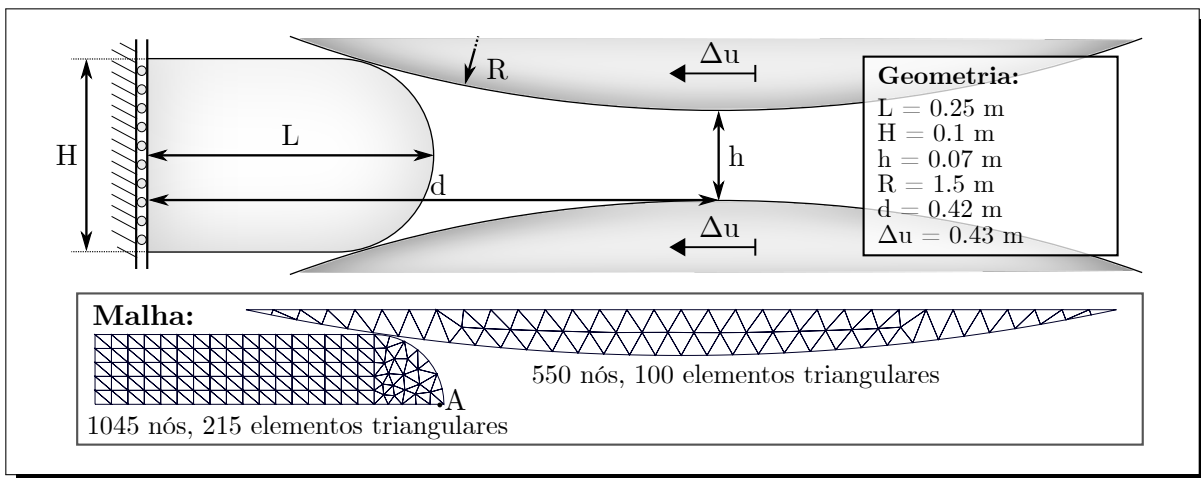


Fonte: Elaborado pelo autor

7.4.6 Extrusão

Este estudo também é originalmente conduzido por [Carvalho \(2019\)](#) para o caso sem atrito, sendo estendido neste trabalho para o caso com atrito, considerando os coeficientes $\bar{\mu} = 0,05$ e $\bar{\mu} = 0,1$. Trata-se de uma chapa metálica com material *Mild Steel Ck15* ([Tabela 10](#)), 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 101](#).

Figura 101 – Dados do exemplo de extrusão

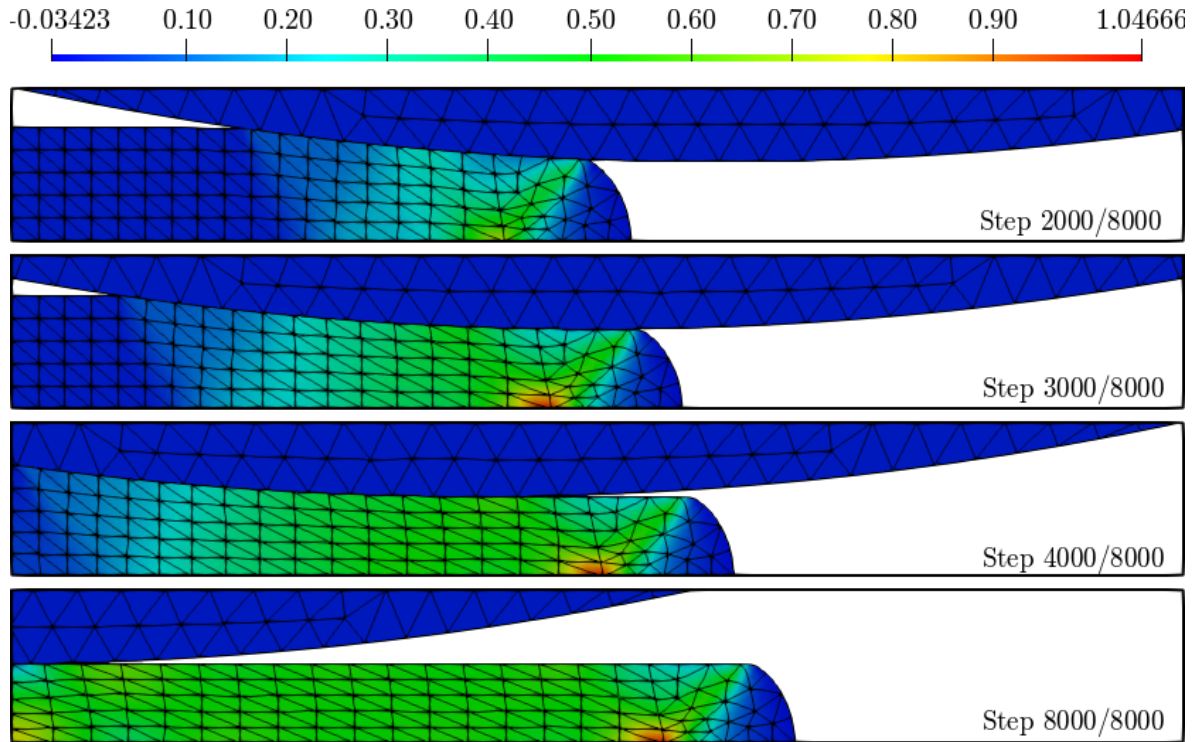


Fonte: Elaborado pelo autor

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 102](#) e para o caso com coeficiente de atrito $\bar{\mu} = 0,1$ na [Figura 103](#). 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.

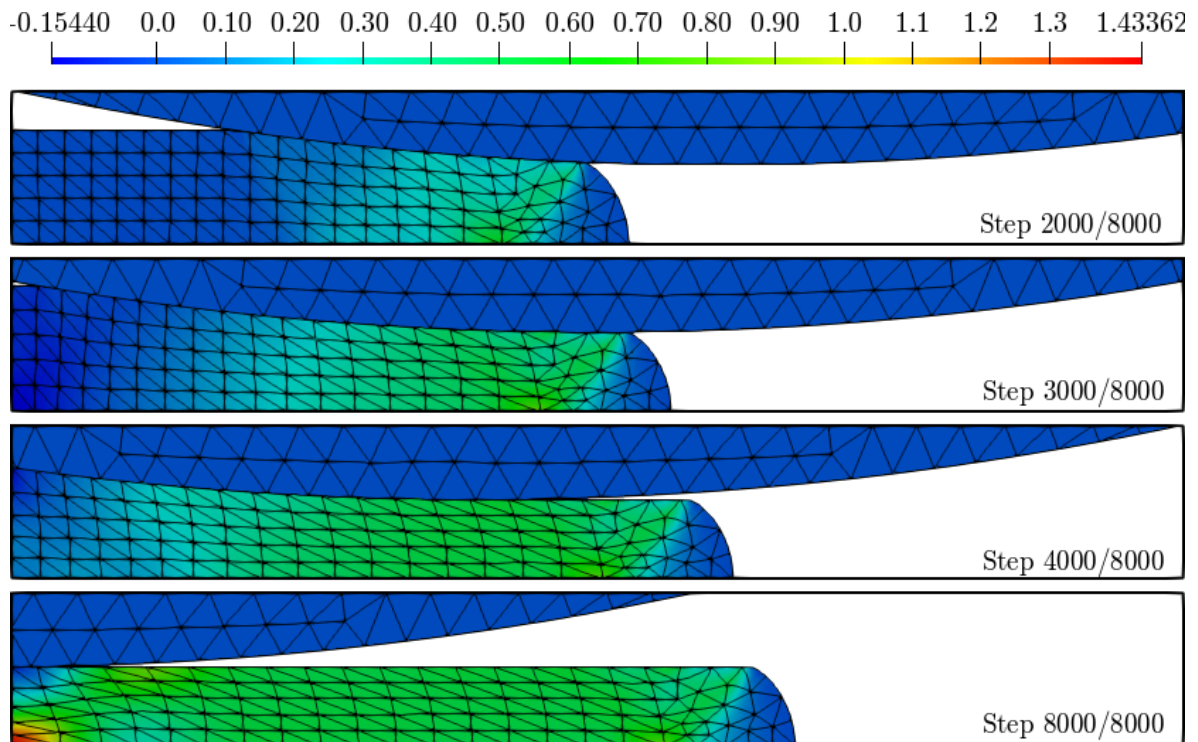
Na [Figura 104](#) apresentam-se, por fim, os gráficos de reação horizontal total da chapa e deslocamento no ponto A ao longo do processo. O primeiro, mostrado na [Figura 104\(a\)](#), é calculado a partir da soma das forças internas horizontais de todos os nós do apoio na extremidade esquerda, multiplicada 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 104\(b\)](#), apresenta diferenças notáveis apenas no meio do processo, resultando no fim em valores praticamente equivalentes para os três casos.

Figura 102 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão sem atrito, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores

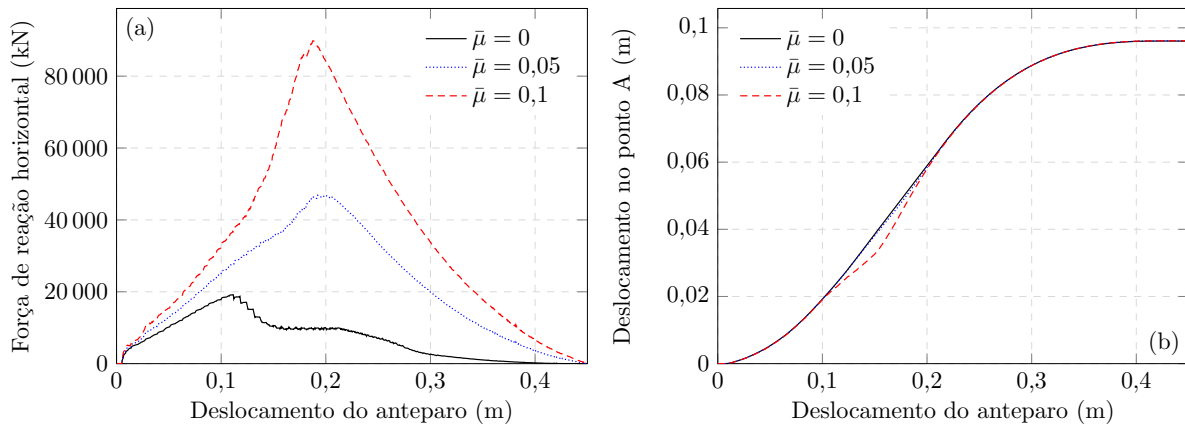


Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 103 – Configurações deformadas do exemplo de extrusão com $\bar{\mu} = 0,1$, apresentando o componente $(E_p)_{11}$ das deformações plásticas em mapa de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 104 – Extrusão: (a) força de reação horizontal e (b) deslocamento no ponto A

Fonte: Elaborado pelo autor

Capítulo 8

Sólidos e fluidos incompressíveis

Os capítulos anteriores possuem o foco 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 4.1](#), 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, não é viável chegar ao caso totalmente incompressível, isto é, com deformações volumétricas nulas, apenas com o emprego desses modelos.

Neste capítulo, é apresentada uma formulação para tratar modelos totalmente incompressíveis, baseada nos trabalhos de [Avancini e Sanches \(2020\)](#), [Avancini \(2024\)](#), [Avancini et al. \(2024\)](#), que adota uma abordagem mista baseada em posição e pressão para a modelagem de fluidos em descrição Lagrangiana. Neste trabalho, além dessa formulação ser aplicada a sólidos – tomando como base os modelos constitutivos discutidos anteriormente –, ela também é utilizada 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, são considerados exclusivamente problemas isotérmicos, ou seja, sem levar em conta os efeitos da expansão térmica ou demais termos relacionados ao acoplamento termomecânico. Esses aspectos são discutidos 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 de velocidade ([BAZILEVS; TAKIZAWA; TEZDUYAR, 2013](#)). Porém, em abordagens Lagrangianas, especialmente as que não utilizam velocidade como parâmetro nodal, 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 representada como:

$$J - 1 = 0 \quad \text{ou} \quad \ln(J) = 0. \quad (8.1)$$

A última forma da Eq. (8.1) é considerada de forma relaxada no modelo Neo-Hookeano apresentado na [subseção 4.1.2](#), sendo imposta de maneira aproximada por um processo equivalente ao método das penalidades, em função do parâmetro Λ , conforme discutido anteriormente.

Para que a condição de incompressibilidade seja imposta de maneira precisa, substitui-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 realizado em [Avancini e Sanches \(2020\)](#). Ambas as formas produzem resultados equivalentes, apresentando apenas leves diferenças no desenvolvimento algébrico.

Com a adição do novo parâmetro p , a variação da energia de deformação, originalmente apresentada na Eq. (2.21), 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 o componente de \mathbf{S} associado 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 2.3](#) são igualmente válidos para a presente formulação. Porém, considerações adicionais devem ser feitas em decorrência da inclusão do parâmetro p . Analogamente às posições, o campo de pressão é obtido pela interpolação dos valores nodais, isto é,

$$p = \varphi_{\alpha}^p p_{\alpha}, \quad (8.5)$$

onde φ_α^p é a função de forma para pressão associada ao nó α , p_α é a pressão no nó α , e os índices α indicam soma sobre todos os nós do elemento finito.

Utilizando o método de Bubnov-Galerkin, assume-se também que $\delta p = \varphi_\alpha^p \delta p_\alpha$. Na sequência, assume-se que a mesma aproximação é empregada tanto para o campo de posição como para o campo de pressão, ou seja, $\varphi_\alpha^p = \varphi_\alpha$ para todo nó α . No entanto, isso viola as condições de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi (LBB) e implica na necessidade de técnicas adicionais para garantir solução estável do campo de pressão, como é discutido posteriormente na [subseção 8.1.2](#).

Aplicando a Eq. (8.3) na Eq. (2.17) (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:

$$g_\alpha^p = - \int_{\Omega_0} \varphi_\alpha \ln(J) dV_0 = 0. \quad (8.6)$$

As equações de incompressibilidade (8.6) devem ser solucionadas em conjunto com as equações de equilíbrio (2.44) em um sistema não-linear cujas variáveis são as posições nodais (\mathbf{y}_α) e as pressões nodais (p_α). Assim como na [subseção 2.3.4](#), a solução 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:

$$\frac{\partial g_\alpha^p}{\partial \mathbf{y}_\beta} = - \int_{\Omega_0} \varphi_\alpha \mathbf{C}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\beta} dV_0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial g_\alpha^p}{\partial p_\beta} = 0, \quad (8.7)$$

onde $\partial \mathbf{E} / \partial \mathbf{y}_\beta$ é dado na Eq. (2.55). A linearização das equações de equilíbrio com relação às posições nodais é a mesma apresentada na [subseção 2.3.4](#). No entanto, é necessário ainda lineariza-las com relação às pressões nodais. Uma vez que essas não influenciam nas forças externas e inerciais, basta calcular a derivada das forças internas, dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_\alpha^{\text{int}}}{\partial p_\beta} = \int_{\Omega_0} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial p_\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} dV_0 = - \int_{\Omega_0} \varphi_\beta \mathbf{C}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} dV_0. \quad (8.8)$$

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. Também observa-se a formação de um bloco nulo sobre a diagonal da matriz tangente, uma vez que $\partial g_\alpha^p / \partial p_\beta = 0$, caracterizando um problema de ponto de sela.

8.1.2 Formulação estabilizada

A inclusão de multiplicadores de Lagrange pode produzir um sistema indefinido e 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 Babuska (1972/73) e Brezzi (1974) 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 Taylor e Hood (1973), Brezzi e Falk (1991) e Zienkiewicz

e Wu (1991), que exploram métodos onde diferentes funções de interpolação são adotadas para os campos de pressão e de deslocamento ou velocidade.

Neste trabalho, é utilizada a técnica PSPG (*Pressure Stabilizing Petrov-Galerkin*), mais especificamente a versão Lagrangiana apresentada em Avancini e Sanches (2020), adaptada a partir da formulação Euleriana desenvolvida por Tezduyar (1991) e Tezduyar et al. (1992). 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 o resíduo equação da conservação da quantidade de movimento Lagrangiana, ponderado por um escalar τ_{pspg} dividido pela massa específica, resultando na equação de resíduos ponderados:

$$\mathcal{S}_{\text{pspg}}^\alpha = \int_{\Omega_0} \frac{\tau_{\text{pspg}}}{\rho_0} (\nabla \varphi_\alpha) \cdot [\rho_0 \ddot{\mathbf{y}} - \nabla_0 \cdot (\mathbf{FS}) - \mathbf{b}] dV_0. \quad (8.10)$$

Após determinadas manipulações algébricas, é possível ainda desenvolvê-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 introduzindo para garantir bom condicionamento ao sistema, sendo calculado conforme Avancini e Sanches (2020), pela seguinte expressão:

$$\tau_{\text{pspg}} = \left(\frac{1}{\tau_1^2} + \frac{1}{\tau_2^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (8.12)$$

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

$$\tau_1 = \alpha_{\text{pspg}} \beta \Delta t^2 \quad \text{e} \quad \tau_2 = \frac{\beta \rho h_{\text{rgn}}^2 \Delta t}{4\gamma\mu}, \quad (8.13)$$

onde 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 nodais. Dessa forma, a linearização da mesma com relação às pressões resulta diferente de zero, preenchendo o bloco nulo sobre a diagonal da matriz tangente e garantindo a estabilidade do sistema. Caso o leitor tenha interesse em verificar as equações linearizadas escritas de maneira explícita, o trabalho de Avancini e Sanches (2020) pode ser consultado.

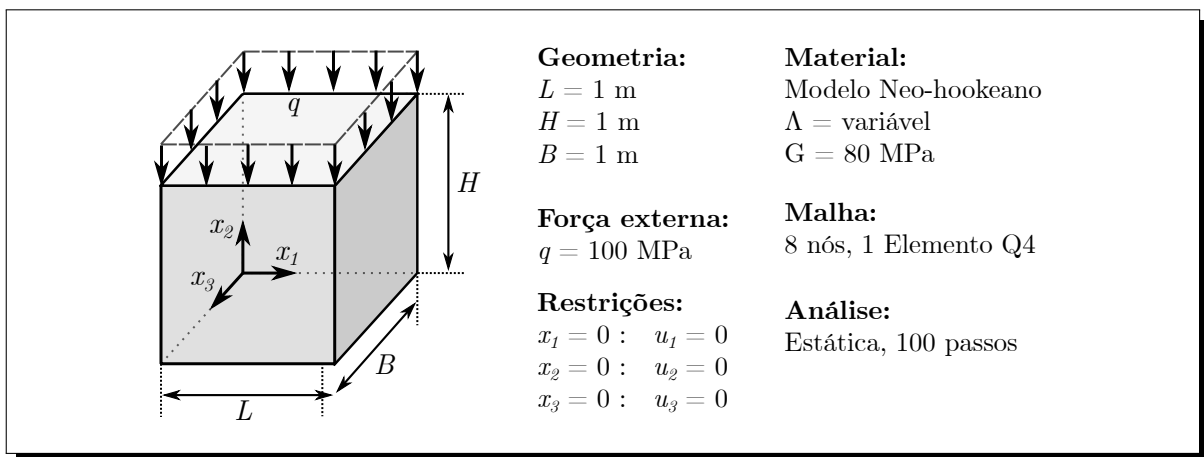
8.2 Sólidos incompressíveis

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 parcelas volumétricas.

8.2.1 Exemplo numérico: cubo hiperelástico com tensão uniaxial

A fim de testar a formulação implementada, simula-se um problema tridimensional simples de tensão uniaxial. Considera-se um cubo sujeito a uma força distribuída compressiva de 100 MPa, aplicada incrementalmente ao longo de 100 passos em uma análise estática, conforme os dados dispostos na [Figura 105](#). Para efeito de comparação, o exemplo é analisado com os modelos incompressível e compressível, sendo utilizado em ambos o modelo constitutivo Neo-Hookeano apresentado na [subseção 4.1.2](#). 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. Dadas as características do problema e da malha empregada, é possível obter resultados estáveis para este problema sem considerar a técnica de estabilização da pressão.

Figura 105 – Dados para o exemplo do cubo hiperelástico com tensão uniaxial

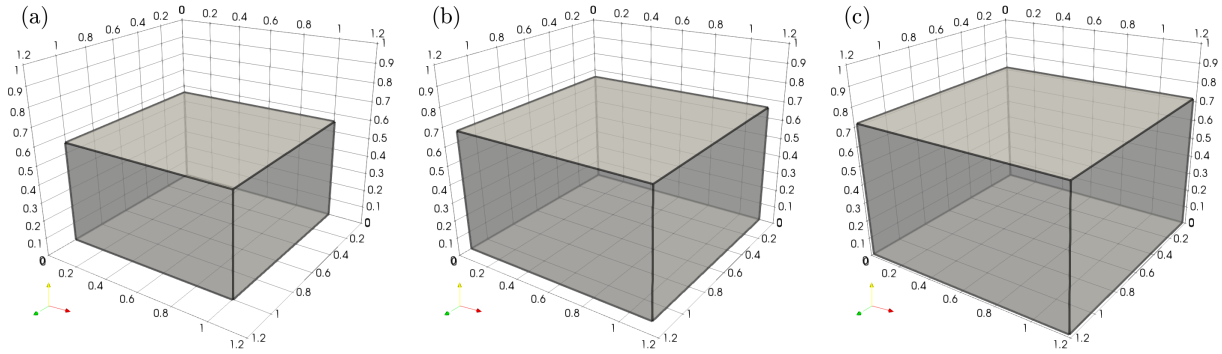


Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 106](#) 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.

Na [Figura 107](#) são mostrados os gráficos de deslocamento horizontal e vertical por força aplicada, na [Figura 108\(a\)](#) são mostrados os gráficos de tensão de Cauchy uniaxial, e na [Figura 108\(b\)](#) são mostrados os gráficos de pressão por força aplicada. Para o modelo compressível, considera-se como pressão a parcela volumétrica da tensão, isto é, $p = \Lambda \ln(J)$.

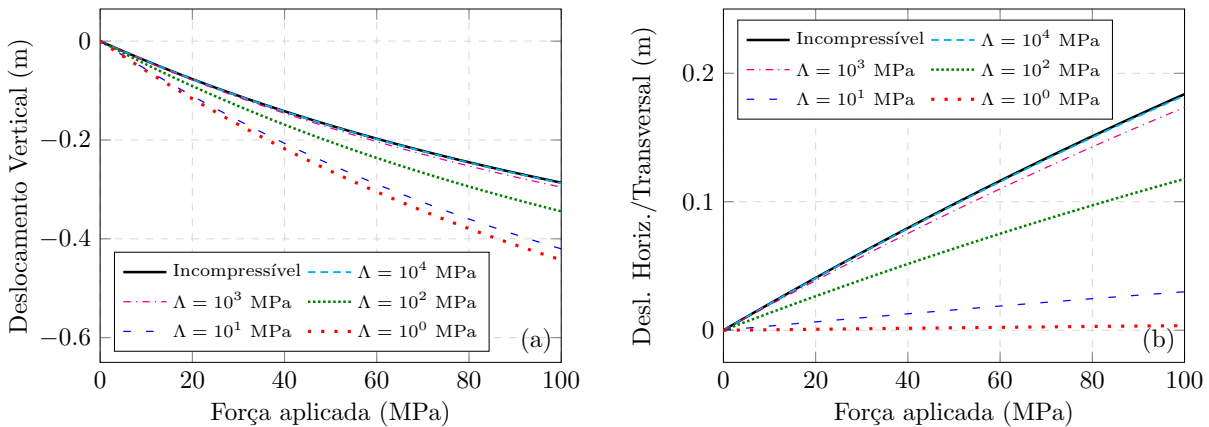
Figura 106 – Configurações deformadas finais para os casos com (a) $\Lambda = 10^0$ MPa, (b) $\Lambda = 10^2$ MPa e (c) modelo incompressível



Fonte: Elaborado pelo autor

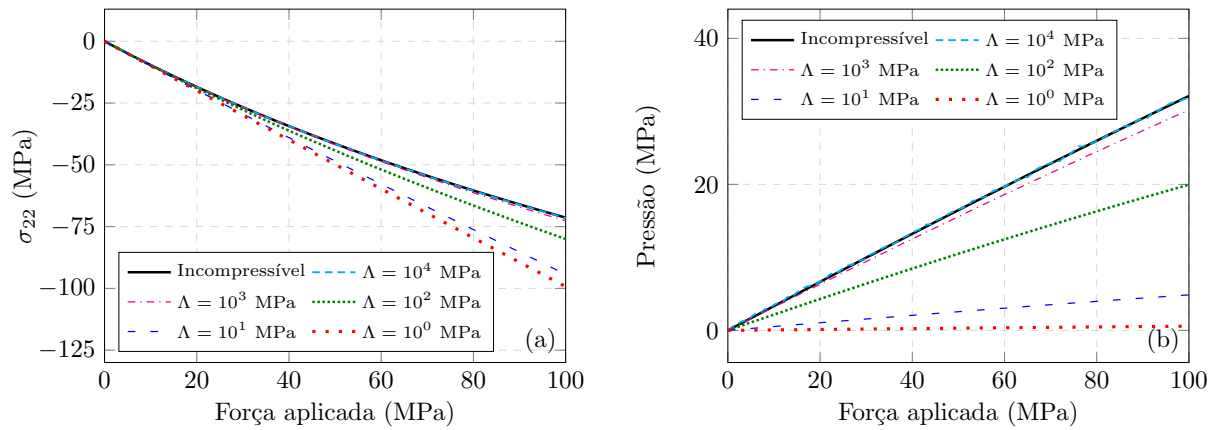
É possível observar nesses gráficos que o modelo compressível apresenta uma tendência ao modelo incompressível à medida que o valor de Λ aumenta, conforme comentado no início deste capítulo. Particularmente para o presente problema, verifica-se que o modelo compressível com $\Lambda = 10^4$ MPa já se mostra suficiente para simular o caso incompressível com um certo grau de precisão.

Figura 107 – (a) deslocamento vertical por força aplicada e (b) deslocamento horizontal/transversal por força aplicada

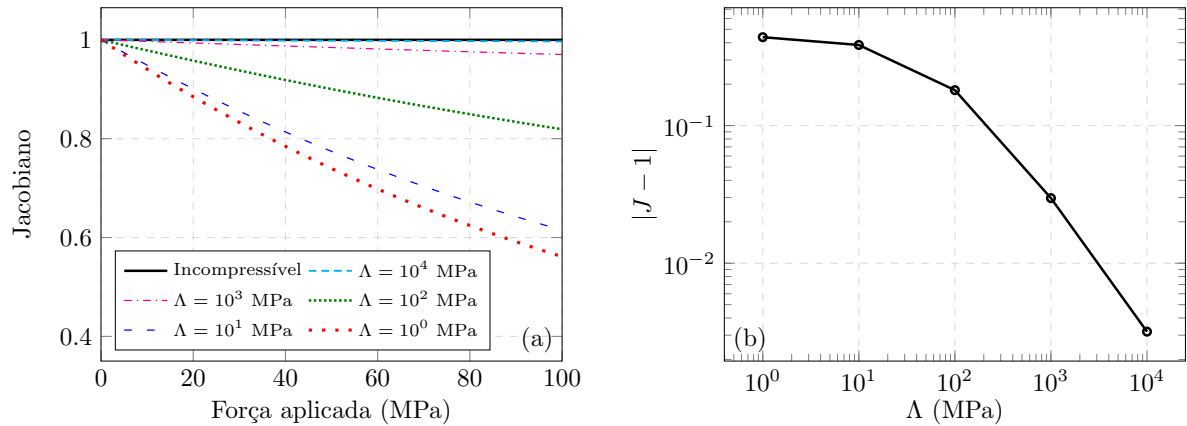


Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 109](#) apresenta-se a um estudo da variação do Jacobiano ao longo do processo de carregamento para todos os casos analisados. A partir da [Figura 109\(a\)](#) pode-se observar, como esperado, que o modelo incompressível resulta em um Jacobiano constante unitário, e modelos compressíveis se distanciam mais desse valor à medida que Λ diminui. Na [Figura 109\(b\)](#) é apresentado um gráfico de convergência para o Jacobiano dos modelos compressíveis em função de Λ , considerando sua diferença em relação ao caso incompressível.

Figura 108 – (a) tensão de Cauchy uniaxial por força aplicada e (b) pressão por força aplicada

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 109 – (a) Jacobiano por força aplicada e (b) $|J - 1|$ por Λ para os modelos compressíveis

Fonte: Elaborado pelo autor

8.3 Fluidos Newtonianos incompressíveis

Ao contrário de sólidos, fluidos Newtonianos não apresentam resistência ao cisalhamento e podem deformar-se indefinidamente, facilmente levando a grandes distorções e mudanças topológicas do seu domínio, incluindo, por exemplo, separação e junção de subdomínios. Por esse motivo, formulações Lagrangianas como a apresentada neste capítulo não são capazes de simular grande parte dos problemas de escoamento, sendo limitadas aos casos onde não hajam mudanças topológicas nem distorções elevadas que possam colapsar a malha adotada.

O modelo Newtoniano, comumente utilizado no contexto Euleriano, relaciona a tensão de Cauchy com a taxa de deformação Euleriana, sendo necessárias determinadas manipulações algébricas para escreve-lo em uma referência Lagrangiana. Para isso, 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 Euleriana.

Levando em conta a relação entre taxa de deformação Euleriana 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. (2.23), é possível representar a Eq. (8.15) na forma

$$\frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S}' \mathbf{F}^T = 2\mu \left(\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1} \right) \Rightarrow \mathbf{S}' = 2\mu J \mathbf{C}^{-1} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{C}^{-1}, \quad (8.16)$$

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

$$\mathcal{D}_{ijkl} = 2\mu J \left(C_{ik}^{-1} C_{jl}^{-1} \right). \quad (8.18)$$

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. (2.33).

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. (2.53), deve ser reescrita como

$$\frac{\partial \mathbf{f}_\alpha^{\text{int}}}{\partial \mathbf{y}_\beta} = \int_{\Omega_0} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha \otimes \mathbf{y}_\beta} + \mathfrak{C} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} + \mathcal{D} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}}{\partial \mathbf{y}_\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{y}_\alpha} \right) dV_0, \quad (8.19)$$

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. (2.36), 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. (2.55) e (2.57), 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. (2.47):

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{y}}_\beta}{\partial \mathbf{y}_\beta} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t}. \quad (8.22)$$

8.3.1 Tensão superficial

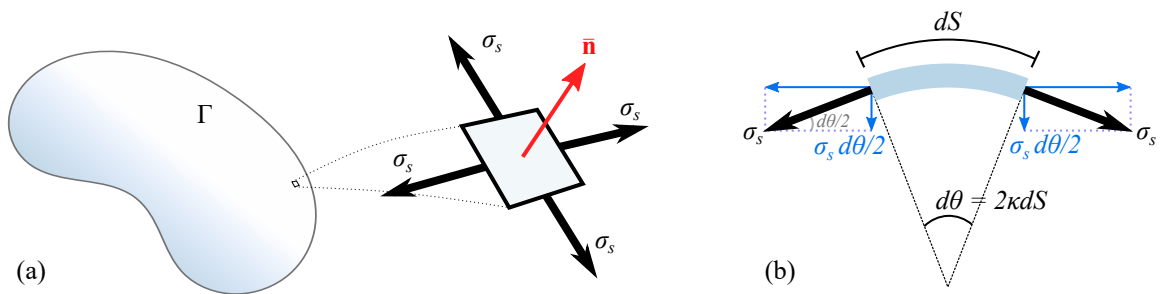
A tensão superficial é um fenômeno físico que ocorre na interface entre um fluido (particularmente um líquido) e o meio externo. Esse fenômeno ocorre pois as moléculas da superfície não estão rodeadas por outras moléculas em todas as direções, como ocorre no interior do líquido. Conseqüentemente, elas 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 (GENNES; BROCHARD-WYART; QUERE, 2003).

Nesta seção, será utilizada como base a formulação descrita em Saksono (2002) e Saksono e Peric (2006). Como ilustrado na Figura 110, 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 Figura 110(b) para o caso bidimensional. Assumindo uma tensão superficial σ_s , é possível demonstrar que o 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 110 – Representação visual do fenômeno da tensão superficial



Fonte: Elaborado pelo autor

Utilizando a abordagem energética descrita na seção 2.2, incorpora-se essa tensão normal no problema mecânico como um 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 subseção 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 Saksono e Peric (2006). 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 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.

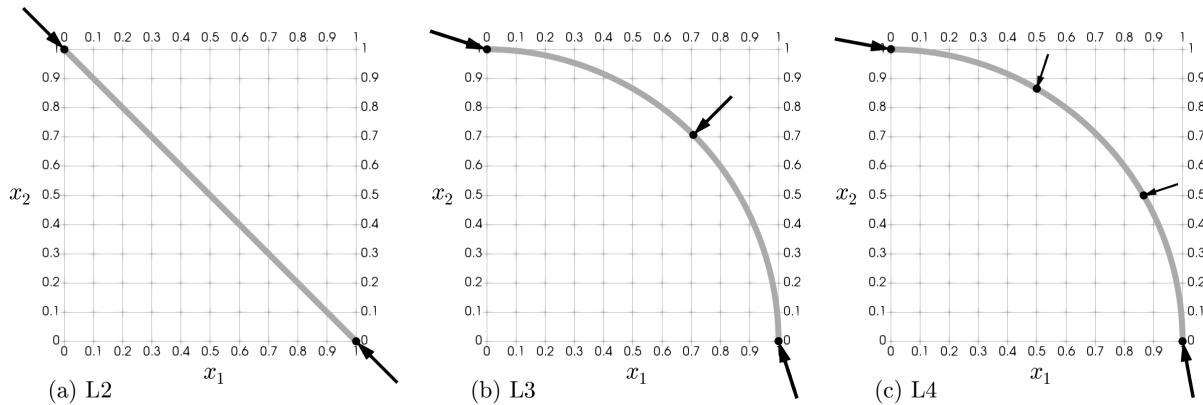
Tomando-se um elemento com tensão superficial unitária, calcula-se, para cada um de seus nós, a força resultante através da primeira integral da Eq. (8.26). A segunda integral é desprezada neste contexto pois assume-se que o elemento não intersecta o contorno de Γ . As coordenadas dos nós e as forças nodais resultantes, utilizando 20 pontos de integração, são apresentadas na Tabela 11 para cada tipo de elemento de curva considerado, sendo representadas visualmente na Figura 111.

Tabela 11 – 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)	$(\frac{\sqrt{2}}{2}; \frac{\sqrt{2}}{2})$	(-0.66160; -0.66160)	$(\frac{1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2})$	(-0.19446; -0.58824)
		$(1; 0)$	(-0.313389; 0.974986)	$(\frac{\sqrt{3}}{2}; \frac{1}{2})$	(-0.58824; -0.19446)
				$(1; 0)$	(-0.179398; 0.9621)

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 111 – Representação visual de elementos de curva utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial



Fonte: Elaborado pelo autor

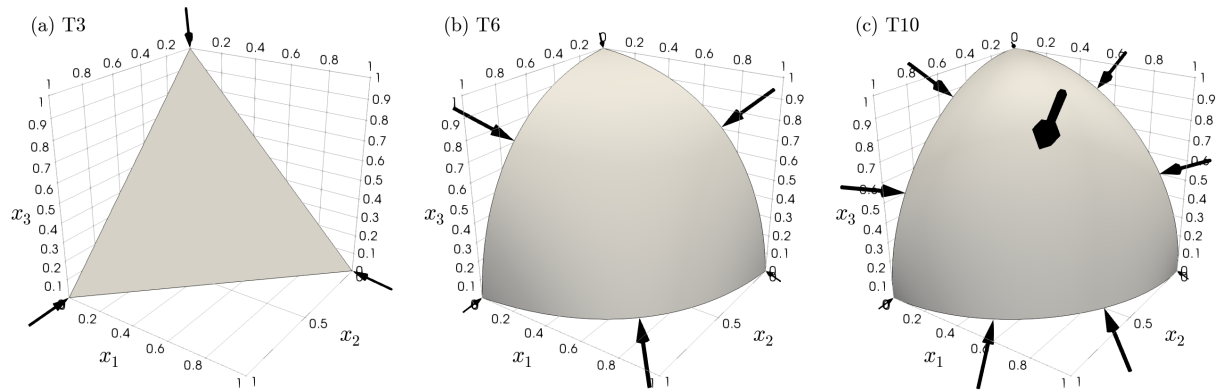
Para problemas tridimensionais, onde Γ é bidimensional, consideram-se os elementos triangulares T3, T6 e T10, com aproximações linear, quadrática, e cúbica, respectivamente. A integração numérica neste caso é feita utilizando a quadratura de [Dunavant \(1985\)](#), que possui um número máximo de 79 pontos 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 12](#), com representação visual de cada caso apresentada na [Figura 112](#).

Tabela 12 – Coordenadas e forças resultantes em nós de elementos triangulares sujeitos a tensão superficial, utilizando 79 pontos de integração da quadratura de Dunavant

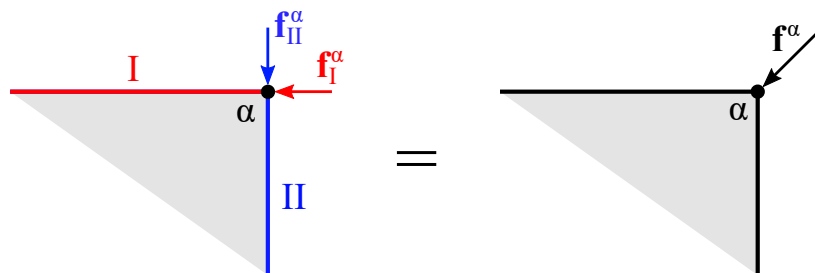
(a) T3		(c) T10	
Coordenadas	Força nodal resultante	Coordenadas	Força nodal resultante
(0; 0; 1)	(0.288675; 0.288675; -0.57735)	(0; 0; 1)	(0,175642; 0,175642; -0,0113901)
(0; 1; 0)	(0.288675; -0.57735; 0.288675)	(0; $\frac{1}{2}$; $\frac{\sqrt{3}}{2}$)	(0.589651; 0,00375044; -0,253053)
(1; 0; 0)	(-0.57735; 0.288675; 0.288675)	(0; $\frac{\sqrt{3}}{2}$; $\frac{1}{2}$)	(0.572785; -0,299737; -0,0255342)
(b) T6		(0; 1; 0)	(0,157543; -0,0733659; 0,153388)
Coordenadas	Força nodal resultante	($\frac{1}{2}$; 0; $\frac{\sqrt{3}}{2}$)	(0,00375044; 0.589651; -0,253053)
(0; 0; 1)	(0,299576; 0,299576; -0,169459)	($\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}$; $\frac{\sqrt{2}}{2}$)	(-0,691797; -0,691797; -0,83786)
(0; $\frac{\sqrt{2}}{2}$; $\frac{\sqrt{2}}{2}$)	(0,687796; -0,558743; -0,558743)	($\frac{1}{2}$; $\frac{\sqrt{3}}{2}$; 0)	(-0,0757699; -0,358703; 0.549825)
(0; 1; 0)	(0,299574; -0,169459; 0,299576)	($\frac{\sqrt{3}}{2}$; 0; $\frac{1}{2}$)	(-0,299737; 0.572785; -0,0255342)
($\frac{\sqrt{2}}{2}$; 0; $\frac{\sqrt{2}}{2}$)	(-0,558743; 0,687796; -0,558743)	($\frac{\sqrt{3}}{2}$; $\frac{1}{2}$; 0)	(-0,358703; -0,0757699; 0.549825)
($\frac{\sqrt{2}}{2}$; $\frac{\sqrt{2}}{2}$; 0)	(-0,558744; -0,558744; 0,687795)	(1; 0; 0)	(-0,0733659; 0,157543; 0,153388)
(1; 0; 0)	(-0,169459; 0,299574; 0,299576)		

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 112 – Representação visual de elementos triangulares utilizados em análise de pontos de integração para tensão superficial

Fonte: Elaborado pelo autor

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 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 [Figura 113](#). Nesse caso, a soma das forças resultantes no nó em cada elemento produzirá uma força inclinada a 45° (bissetriz).

Figura 113 – Representação de força resultante de tensão superficial em nó de canto

Fonte: Elaborado pelo autor

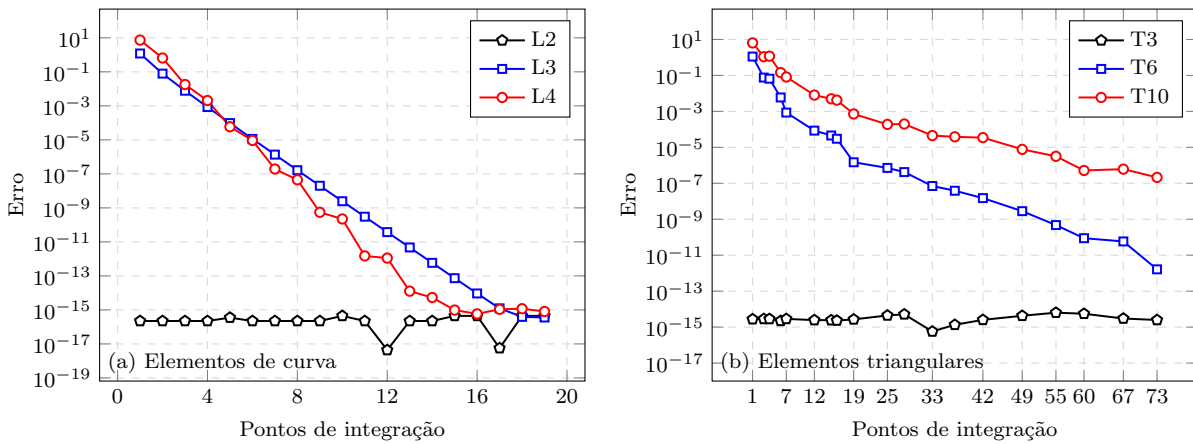
Esse comportamento causa uma tendência a suavizar os cantos do domínio. Por esse motivo, líquidos que não estão sujeitos a outras forças além da tensão superficial tendem a assumir um formato esférico. Em geral, a tensão superficial atua de forma a minimizar a área da superfície para um determinado volume.

Seguindo para a análise de pontos de integração, são calculadas as forças resultantes em cada um dos elementos finitos previamente apresentados, utilizando números menores de pontos de integração. Para os elementos de curva, empregam-se de 1 a 19 pontos da quadratura de Gauss, comparando-os com a referência de 20 pontos ([Tabela 11](#)). Nos

elementos triangulares, utilizam-se de 1 a 73 pontos da quadratura de Dunavant (1985), comparando-os com a referência de 79 pontos (Tabela 12).

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 Figura 114 mostra os gráficos dos erros em função do número de pontos de integração para cada tipo de elemento.

Figura 114 – Análise de convergência de pontos de integração para tensão superficial em (a) elementos de curva e (b) elementos triangulares



Fonte: Elaborado pelo autor

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 Figura 114 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 Figura 114 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 13.

Tabela 13 – 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

Fonte: Elaborado pelo autor

Vale ressaltar que esta análise considera elementos sujeitos a um alto grau de variação geométrica ao longo de seu domínio (Figuras 111 e 112), o que não é comum em problemas

com malhas suficientemente refinadas. Em situações usuais, os erros obtidos com os pontos de integração da Tabela 13 podem ser muito inferiores ao critério de 10^{-3} estabelecido.

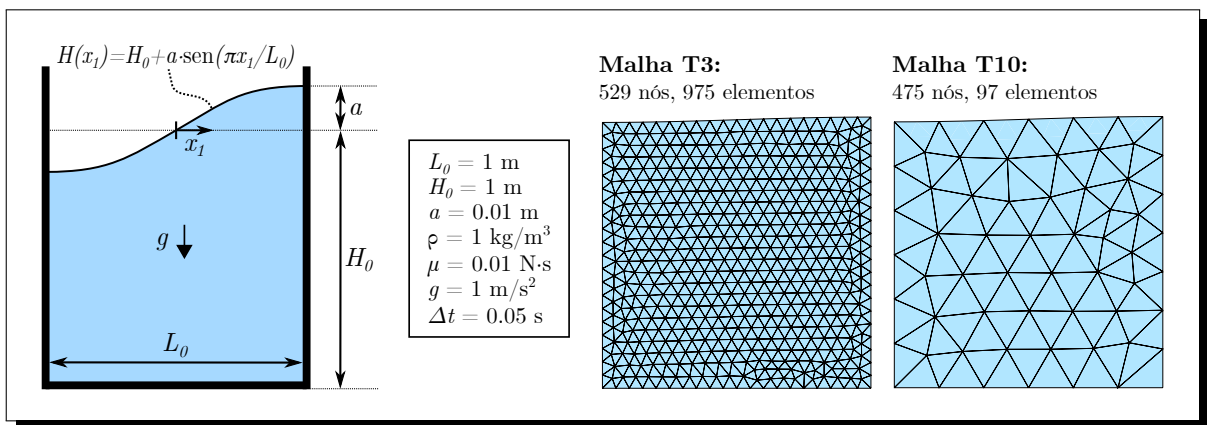
8.3.2 Exemplos numéricos de escoamentos de fluidos

A seguir, são apresentados exemplos numéricos com o objetivo de verificar o modelo implementado de fluido Newtoniano incompressível.

8.3.2.1 *Sloshing* de pequena amplitude

Este exemplo consiste em um tanque de água cujas condições iniciais são representadas na Figura 115, sendo adotada condição de deslizamento nas paredes. Duas malhas são consideradas: a primeira formada por elementos T3, e a segunda por elementos T10. Faz-se necessária a estabilização PSPG para regularizar os campos de pressão encontrados, sendo o parâmetro α_{pspg} da Eq. (8.13) tomado igual a 1.

Figura 115 – Geometria e dados do exemplo: *Sloshing* de pequena amplitude



Fonte: Elaborado pelo autor

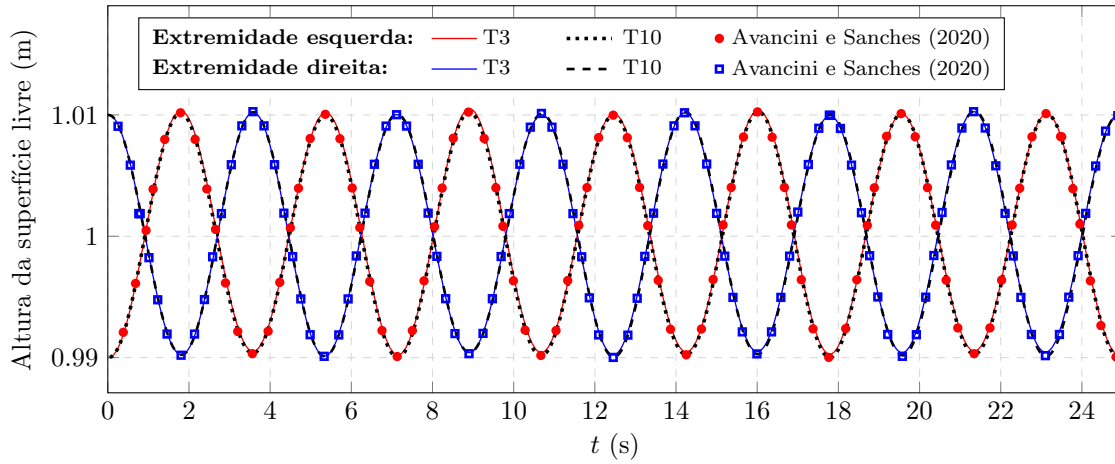
Por ser um exemplo com baixos níveis de deformação, sua simulação foi possível com a formulação apresentada do Método dos Elementos Finitos, mostrando resultados consistentes com a literatura. Na Figura 116 são apresentados os valores das alturas da superfície livre ao longo do tempo nas extremidades 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 Avancini e Sanches (2020).

Nas Figuras 117 e 118 são apresentadas as distribuições de pressão sobre as configurações deformadas para ambas as malhas em diferentes instantes, onde é possível observar visualmente o comportamento oscilatório demonstrado na Figura 116.

8.3.2.2 Colapso de barragem sob superfície lisa

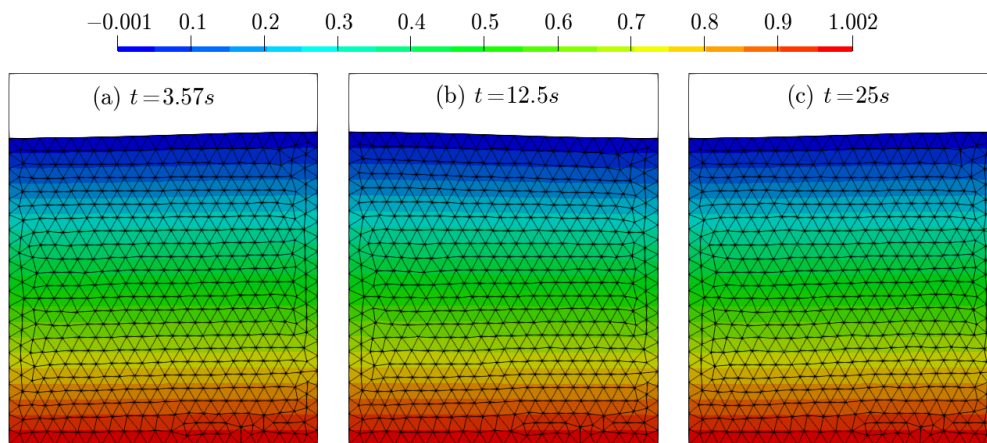
Neste exemplo, simula-se o colapso de uma coluna de água sob seu peso próprio, considerando os dados dispostos na Figura 119. Novamente, são consideradas malhas T3 e T10, e são adotadas condições de deslizamento na parede esquerda e inferior, sendo o

Figura 116 – *Sloshing*: altura da superfície livre nas extremidades esquerda e direita do recipiente com relação ao tempo



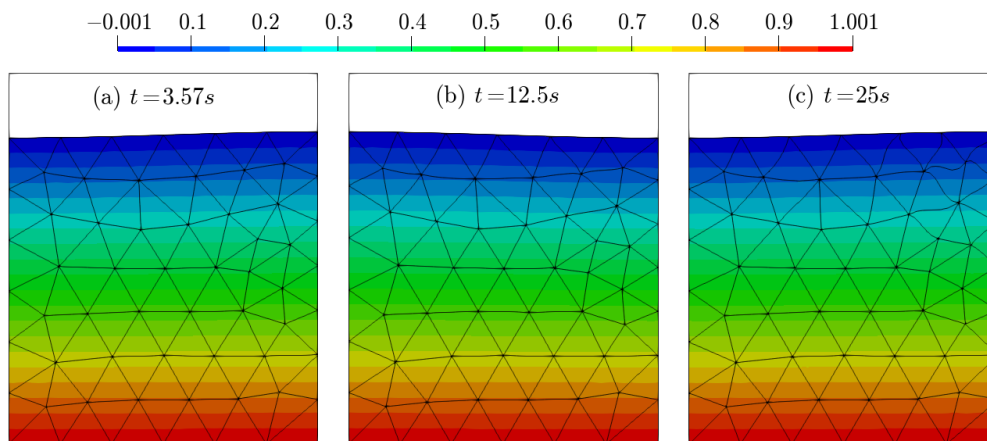
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 117 – *Sloshing*: configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

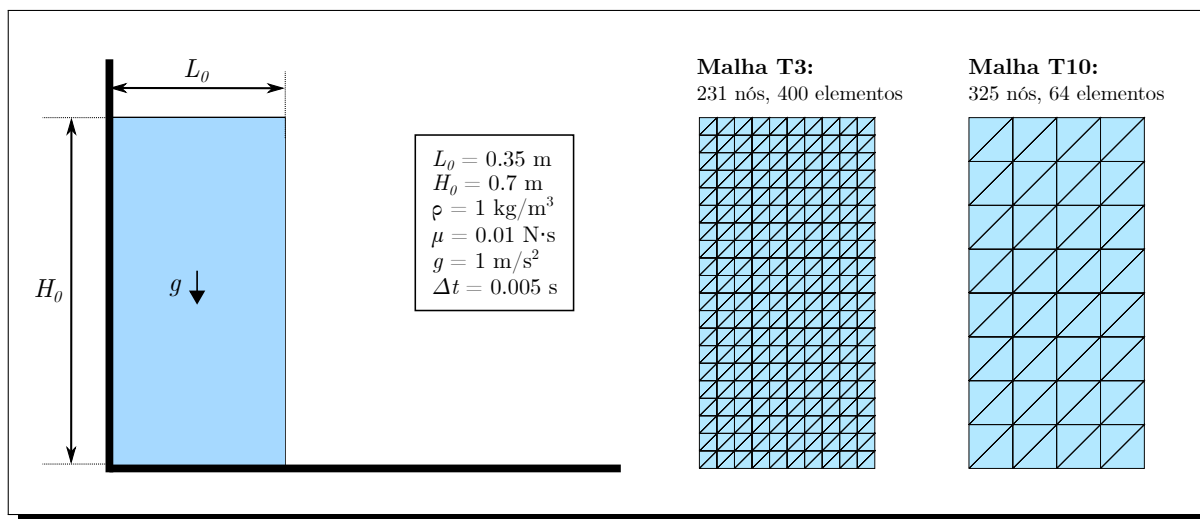
Figura 118 – *Sloshing*: configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

topo superfície livre e a lateral direita considerada superfície livre imediatamente após a remoção da barragem no instante inicial da análise. A estabilização PSPG é considerada com parâmetro $\alpha_{\text{pspg}} = 1$. Além disso, a fim de dissipar as altas frequências, são adotados os parâmetros de Hu (1997) para o integrador Newmark- β , ou seja: $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$.

Figura 119 – Geometria e dados do exemplo: colapso de barragem sob superfície lisa

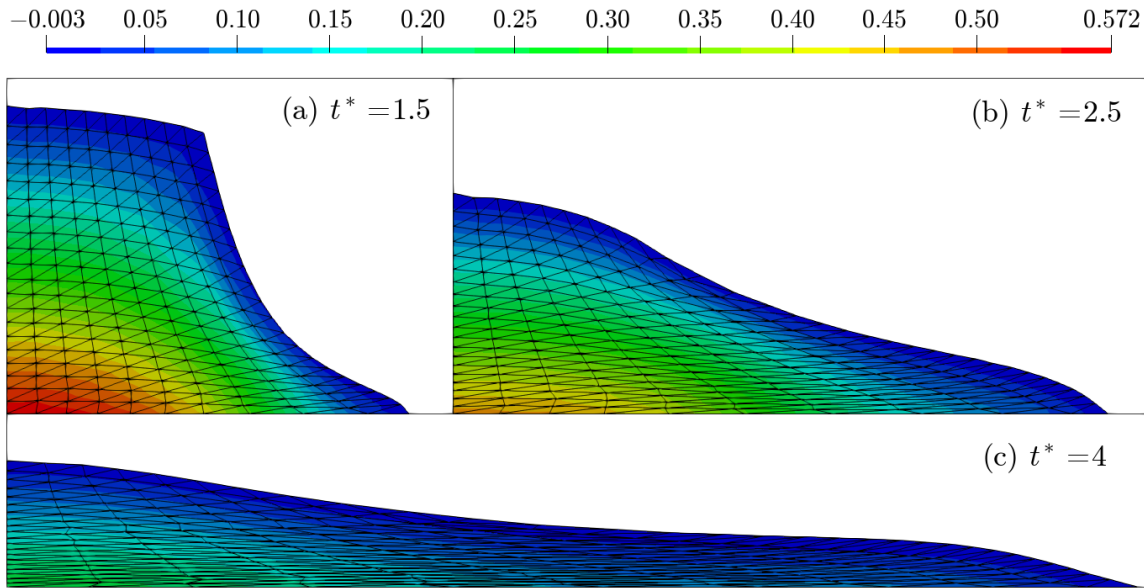


Fonte: Elaborado pelo autor

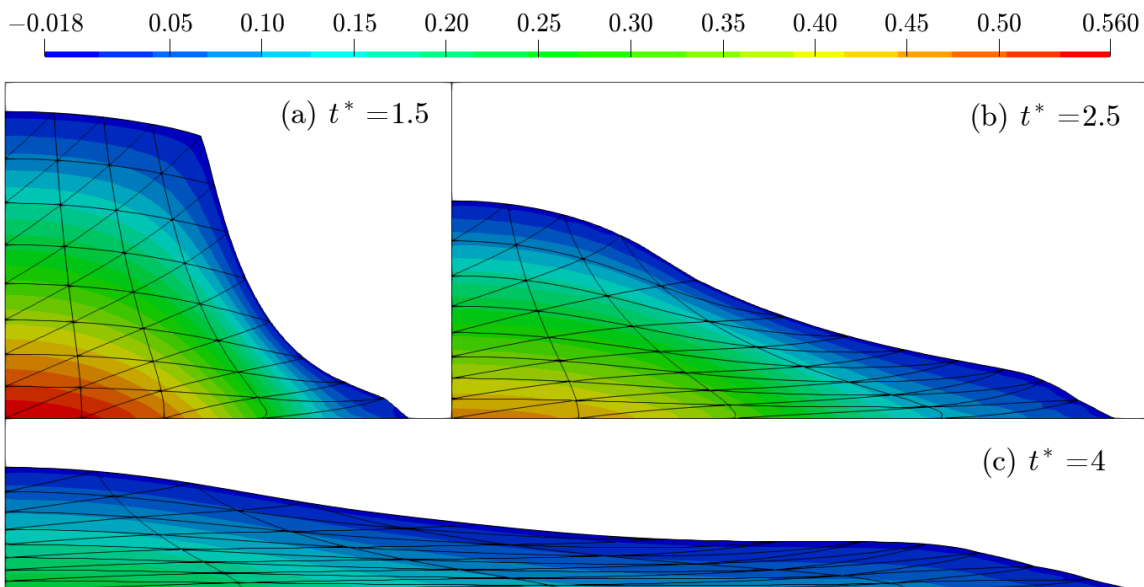
Apesar de ser um problema com grandes deformações, e que pode evoluir indefinidamente à medida que o tempo avança, é possível simulá-lo de forma adequada com a formulação do Método dos Elementos Finitos adotada, uma vez que não são identificadas mudanças excessivas na estrutura da malha, como formação de vórtices e tentativas de separação de domínios.

Nas Figuras 120 e 121 é apresentada a distribuição de pressão sobre a configuração deformada em diferentes instantes para ambas as malhas consideradas, sendo o tempo considerado adimensionalizado de acordo com: $t^* = t\sqrt{2g/L_0}$. Embora o comportamento geral do problema seja similar para ambos os casos, é possível observar que, nas presentes condições, o caso com elementos T10 apresenta resultados levemente mais regulares, sem oscilações geométricas da malha como as observadas na Figura 120.

Na Figura 122 são apresentados os resultados de variação do comprimento e de pressão no canto inferior esquerdo ao longo do tempo. Na Figura 122(a), 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 gráfico é comparado com os resultados numéricos de Nithiarasu (2005) e com os experimentais de Martin et al. (1952), mostrando uma excelente concordância. Já a pressão no canto inferior esquerdo, apresentada na Figura 122(b), é comparada com os resultados numéricos de Avancini e Sanches (2020), mostrando também concordância satisfatória.

Figura 120 – Barragem: configurações deformadas para a malha T3, com pressão (Pa) em mapa de cores

Fonte: Elaborado pelo autor

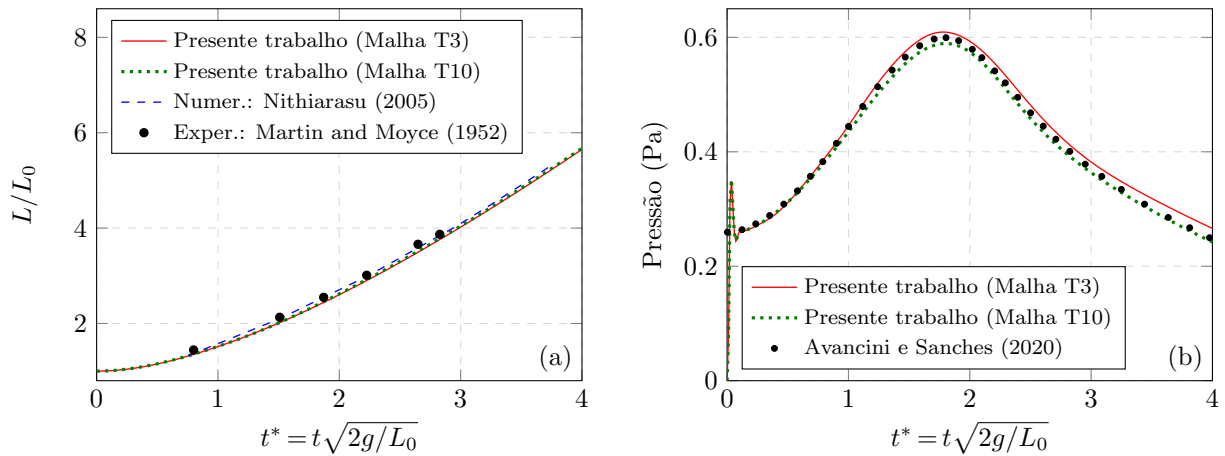
Figura 121 – Barragem: configurações deformadas para a malha T10, com pressão (Pa) em mapa de cores

Fonte: Elaborado pelo autor

8.3.2.3 Fluido sob tensão superficial: caso 2D

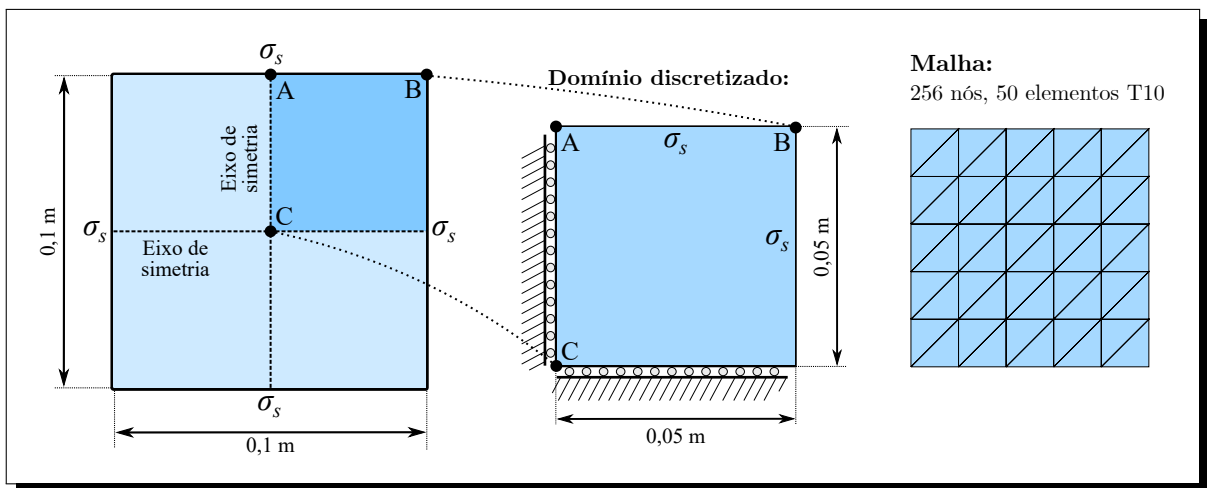
Neste exemplo, analisa-se o efeito da tensão superficial sobre uma porção de fluido Newtoniano incompressível com domínio inicial quadrilateral conforme a [Figura 123](#). Devido à simetria do problema, apenas um quadrante do domínio é discretizado, aplicando-se as devidas condições de contorno nas interfaces 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 122 – Barragem: (a) Variação do comprimento do domínio e (b) Pressão medida no ponto inferior esquerdo, ao longo do tempo adimensional



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 123 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 2D



Fonte: Elaborado pelo autor

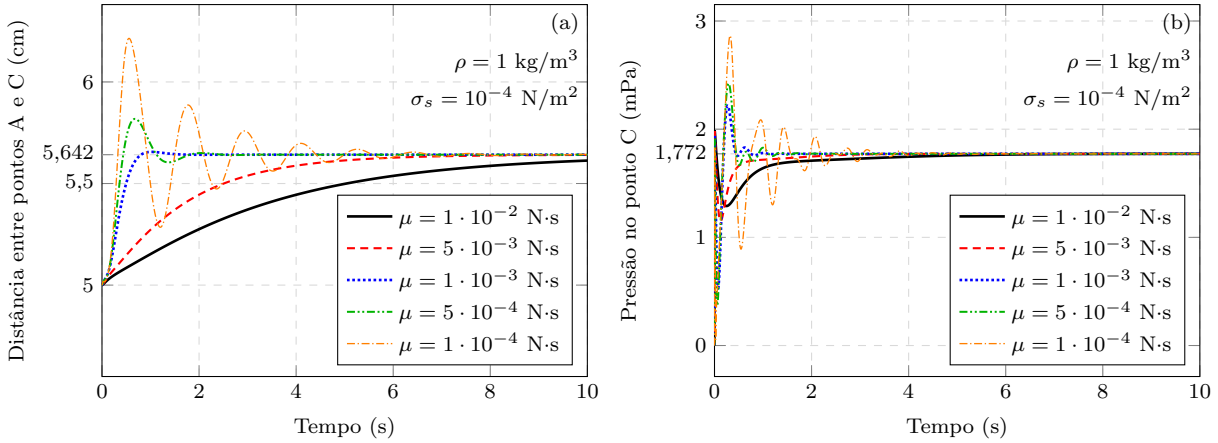
Para a discretização espacial, emprega-se uma malha regular composta por 50 elementos finitos do tipo T10. Para a discretização temporal, consideram-se 4000 passos de tempo com $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-3}$ s, e utiliza-se o integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$. Além 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 ou ρ), e a tensão superficial (σ_s).

Inicialmente, fixam-se os parâmetros $\rho = 1\text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4}\text{ N/m}^2$, e são considerados 5 diferentes valores para o parâmetro de viscosidade: $1 \cdot 10^{-2}$, $5 \cdot 10^{-3}$, $1 \cdot 10^{-3}$, $5 \cdot 10^{-4}$ e $1 \cdot 10^{-4}\text{ N}\cdot\text{s}$. A Figura 124 mostra, para cada um desses casos, a evolução da distância

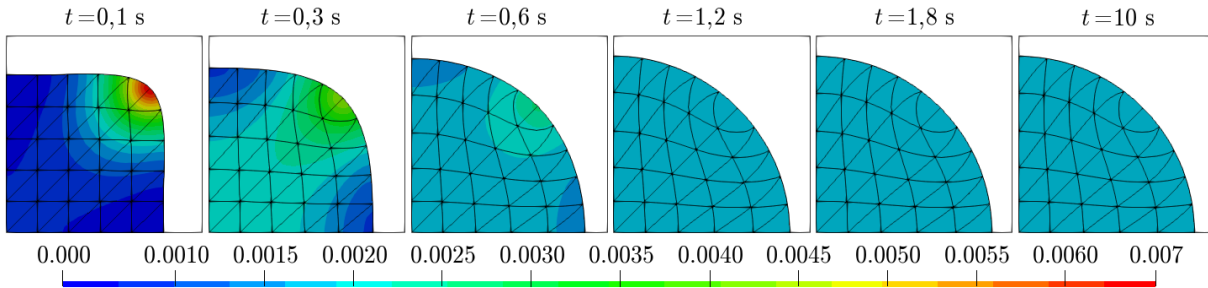
entre os pontos A e C (indicados na [Figura 123](#)) e a pressão no ponto C. Além disso, as [Figuras 125 a 127](#) mostram as configurações deformadas em determinados instantes para os três casos distintos de viscosidade, com campo de pressão ilustrado em mapa de cores.

Figura 124 – (a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, considerando diferentes valores de viscosidade



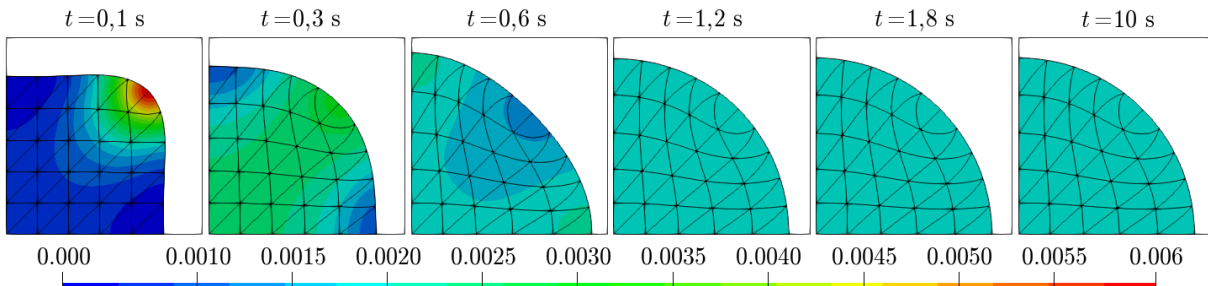
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 125 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 10^{-3}$ N·s, $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$



Fonte: Elaborado pelo autor

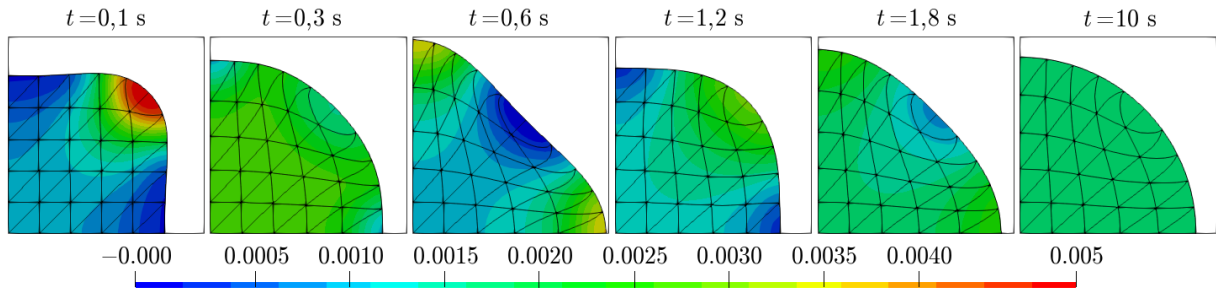
Figura 126 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 5 \cdot 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$



Fonte: Elaborado pelo autor

Conforme discutido na [subseção 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

Figura 127 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m³ e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m²



Fonte: Elaborado pelo autor

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 Figuras 124 a 127, 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 ($A = 0,05^2 = 2,5 \cdot 10^{-3}$ m²) é mantida fixa durante o processo. Assim, é possível calcular de forma analítica o raio do círculo resultante como $R = \sqrt{4A/\pi} \approx 0,0564$ m. É possível observar na Figura 124(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.

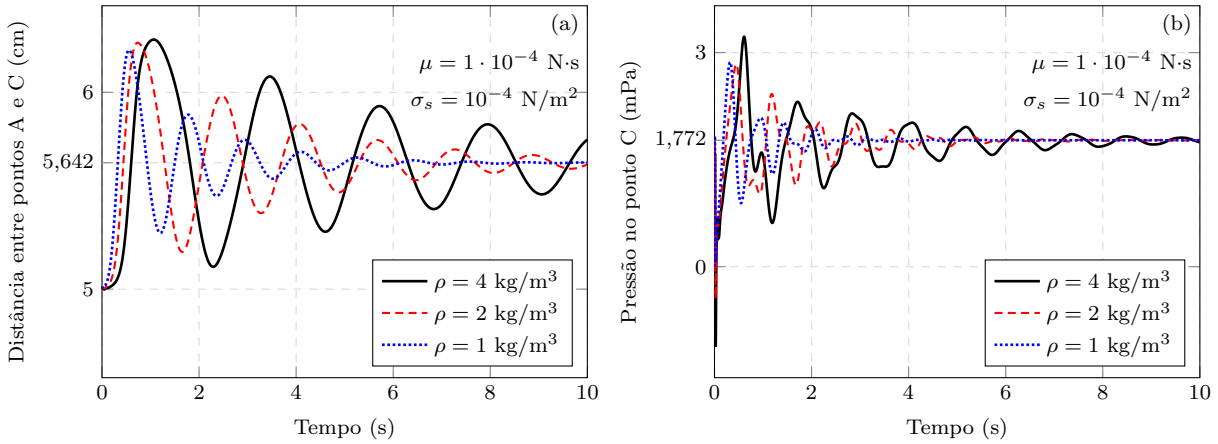
Sabendo que a curvatura média de um cilindro é $\kappa = 1/(2R)$, também é possível calcular a pressão resultante no domínio de forma analítica como $p = 2\sigma_s\kappa = \sigma_s/R$. Com $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m², obtém-se $p \approx 0,001772$ Pa. Novamente, constata-se que as pressões na Figura 124(b) tendem para esse valor, reforçando a consistência do modelo.

Seguindo para uma segunda análise, é avaliada a influência da massa específica sobre o problema. Neste caso, fixam-se os parâmetros μ e σ_s , e varia-se ρ_0 em três casos: 4, 2 e 1 kg/m³. Os gráficos resultantes dessa análise para $\mu = 10^{-4}$ N·s e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m² são apresentados na Figura 128, e para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s e $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m² são apresentados na Figura 129.

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 Figura 128, por exemplo, o menor tempo de estabilização foi obtido para $\rho = 1$ kg/m³, 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.

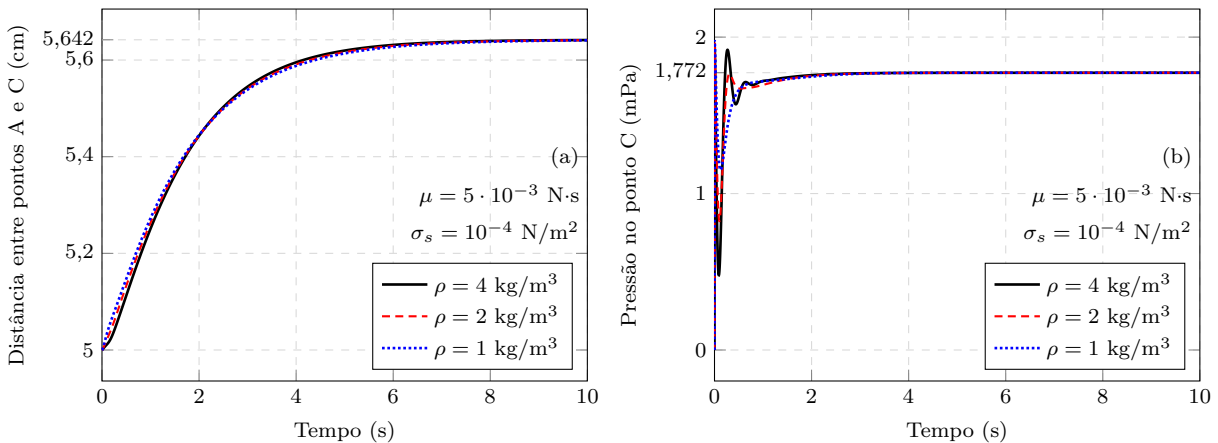
Já no caso da Figura 129, onde a viscosidade é mais alta e a oscilação menos significativa,

Figura 128 – (a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m², e diferentes valores de massa específica



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 129 – (a) Distância entre pontos A e C, e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\sigma_s = 10^{-4}$ N/m², e diferentes valores de massa específica



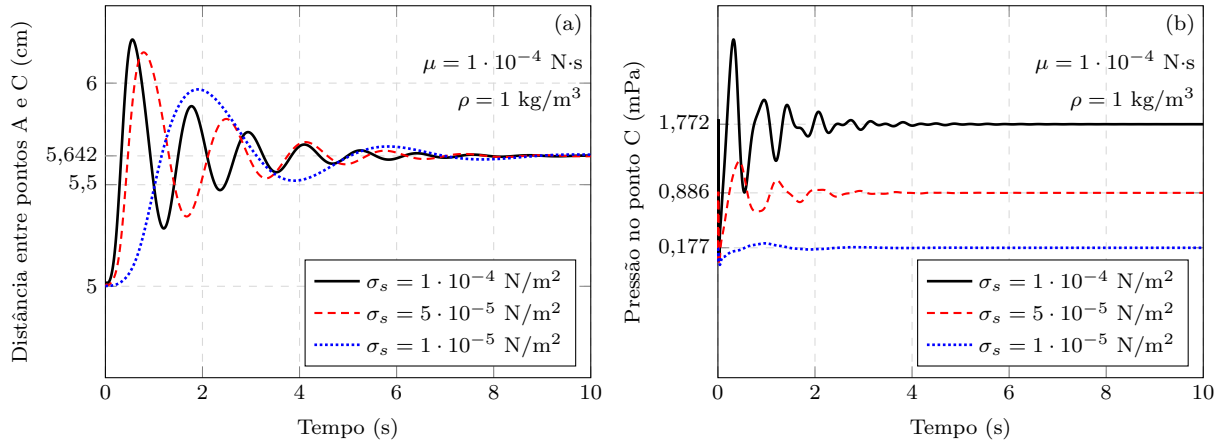
Fonte: Elaborado pelo autor

a variação da massa específica tem pouca influência nos resultados. Particularmente na [Figura 129\(a\)](#), os gráficos demonstram comportamentos quase idênticos durante toda a análise. Na [Figura 129\(b\)](#) também pode ser observada uma rápida convergência dos resultados, embora haja algumas divergências no início da análise.

Por fim, é analisada a influência da tensão superficial sobre o problema. Neste caso, fixam-se os parâmetros μ e ρ_0 , e varia-se 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 [Figura 130](#), e para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s e $\rho = 1$ kg/m³ são apresentados na [Figura 131](#).

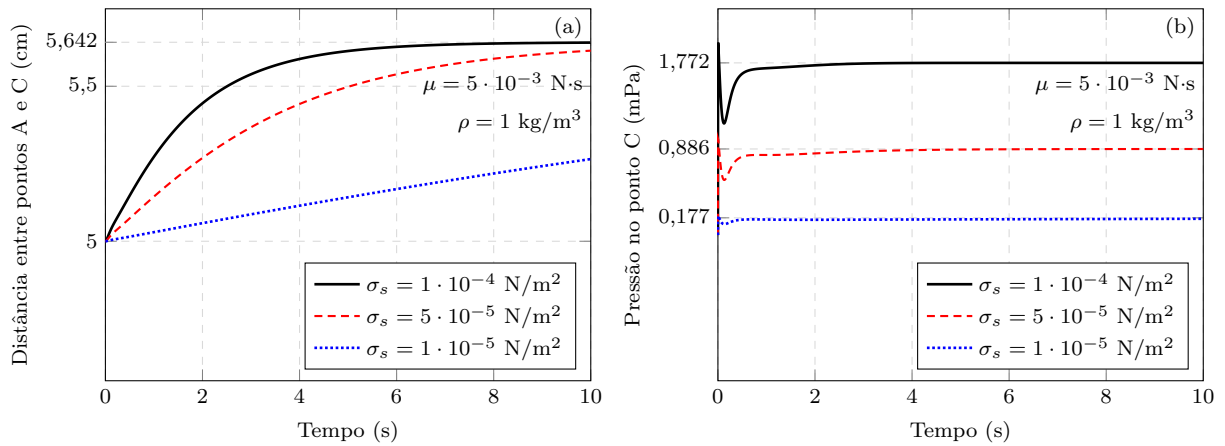
Embora o raio do círculo resultante não varie em função de σ_s , nota-se que o valor estabilizado da pressão varia, uma vez que, conforme deduzido anteriormente, sua expressão analítica é $p = \sigma_s/R$. Para os casos considerados de σ_s , essa expressão resulta nos valores $1,772 \cdot 10^{-3}$, $0,886 \cdot 10^{-3}$ e $0,177 \cdot 10^{-3}$ Pa, produzindo gráficos de pressão com alinhamentos

Figura 130 – (a) Distância entre pontos A e C e (b) Pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 10^{-4}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m³, e diferentes valores de tensão superficial



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 131 – (a) Distância entre pontos A e C e (b) pressão medida no ponto C ao longo do tempo, para $\mu = 5 \cdot 10^{-3}$ N·s, $\rho = 1$ kg/m³, e diferentes valores de tensão superficial



Fonte: Elaborado pelo autor

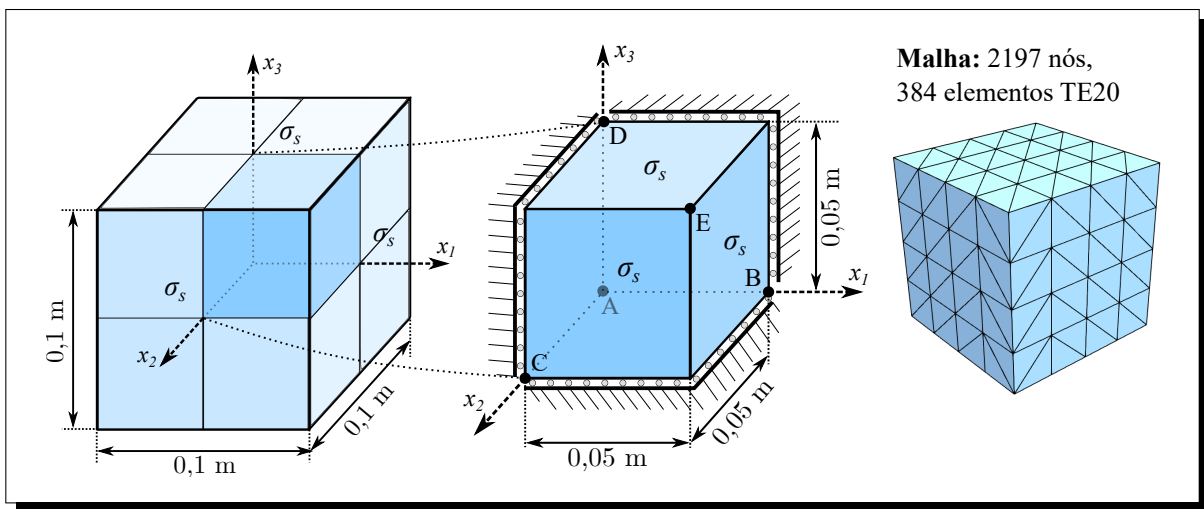
distintos, como pode ser visto nas Figs. 130(b) e 131(b).

Avaliando mais profundamente a influência de σ_s sobre os resultados, são percebidos 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 [Figura 132](#). Utilizando novamente a simetria do problema, apenas um octante do domínio é discretizado, aplicando as condições de contorno apropriadas nas interfaces com os eixos de simetria. Neste caso, fixa-se a tensão superficial no contorno externo em $\sigma_s = 10^{-4} \text{ N/m}^2$, constante ao longo do tempo, e os parâmetros do material em $\mu = 10^{-4} \text{ N}\cdot\text{s}$ e $\rho_0 = \rho = 1 \text{ kg/m}^3$.

Figura 132 – Geometria e condições de contorno para exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D



Fonte: Elaborado pelo autor

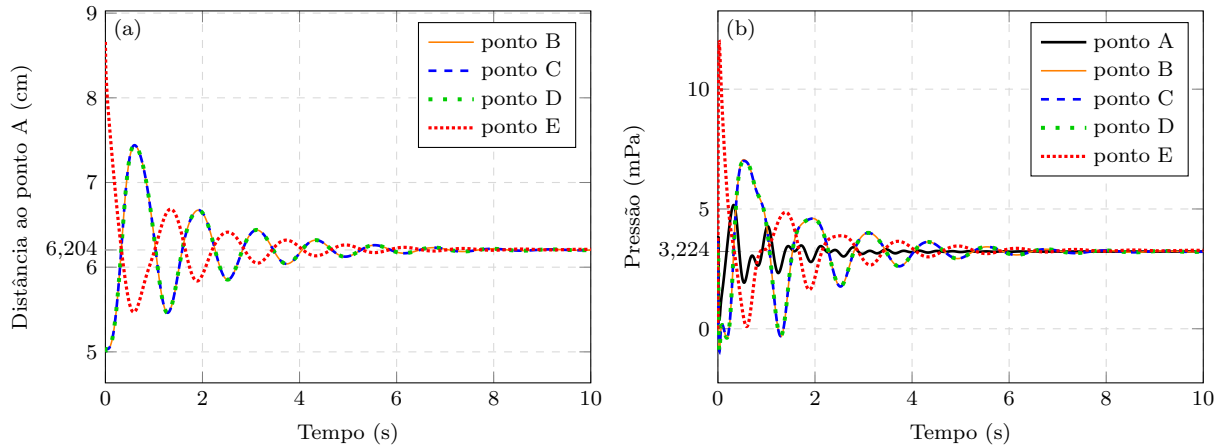
Utiliza-se uma malha regular composta por 384 elementos finitos tetraédricos de terceira ordem (TE20). Os demais parâmetros da análise são similares aos do exemplo anterior: 4000 passos de tempo com $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$; integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$; e estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1000$.

Na [Figura 133\(a\)](#), é avaliada a distância entre diversos pontos do contorno externo (indicados na [Figura 132](#)) e o centro do domínio (ponto A). Na [Figura 133\(b\)](#), são apresentados os gráficos de pressão ao longo do tempo para os mesmos pontos. Por fim, na [Figura 134](#), são ilustradas as configurações deformadas do domínio discretizado em determinados instantes da análise, com campo de pressão em mapa de cores.

Observa-se novamente um comportamento oscilatório com estabilização gradual. 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, é possível 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,

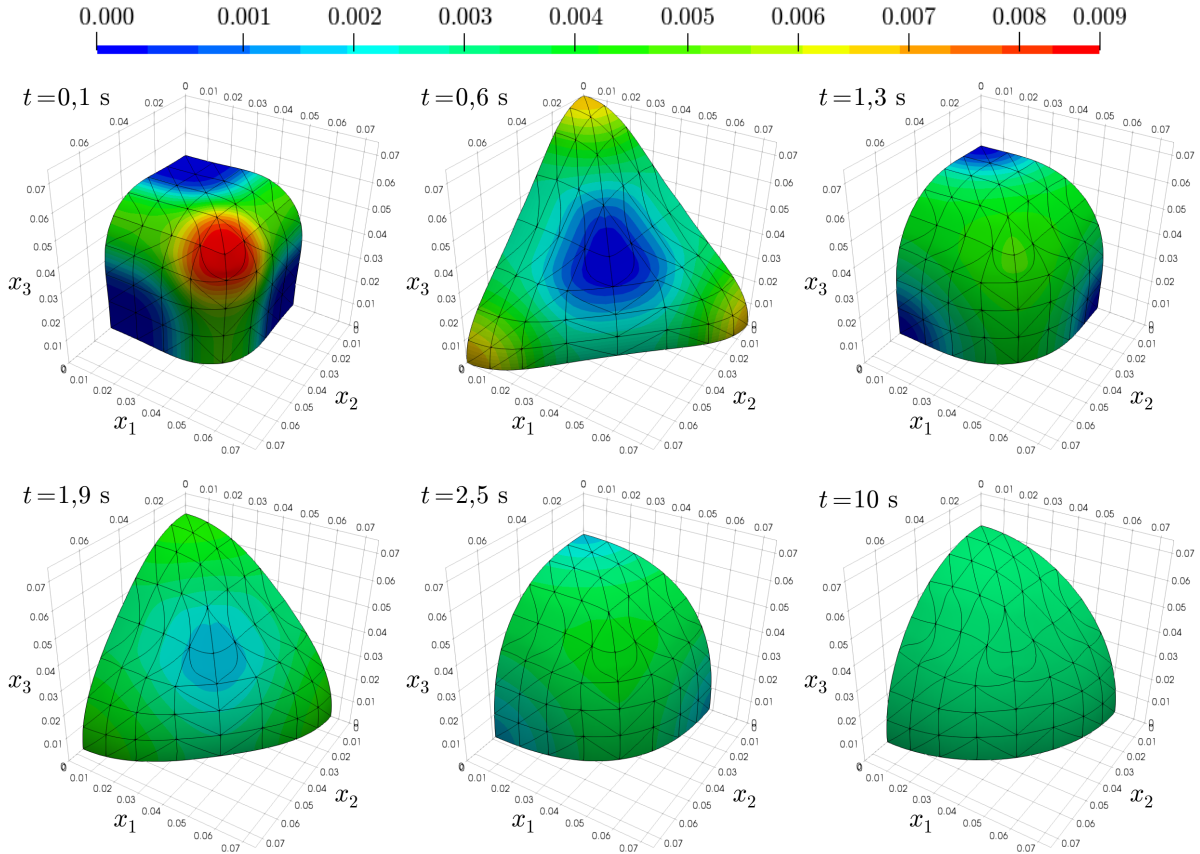
na Figura 133, as pressões tendem a esse valor, e os gráficos das distâncias medidas tendem ao raio previamente calculado, demonstrando a consistência dos resultados obtidos.

Figura 133 – (a) Distância ao ponto A e (b) pressão ao longo o tempo, para diversos pontos do contorno sob tensão superficial em 3D



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 134 – Configurações deformadas com pressão (Pa) em mapa de cores para o exemplo de fluido sob tensão superficial em 3D



Fonte: Elaborado pelo autor

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, é apresentado um modelo numérico para a mudança de fase do estado sólido para o líquido (fusão), e do líquido para o sólido (solidificação). Inicialmente, foca-se 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 [Rolph e Bathe \(1982\)](#), [Celentano, Oñate e Oller \(1994\)](#), [Celentano e Perez \(1996\)](#) e [Bobach et al. \(2021\)](#).

Por fim, considera-se o problema termomecânico da mudança de fase, onde o material pode deformar-se durante o processo. Nesta etapa, são utilizados como referência os trabalhos de [Celentano, Oller e Oñate \(1996\)](#), [Cervera, Saracibar e Chiumenti \(1999\)](#), [Frémond \(2012\)](#) e [Franci et al. \(2017\)](#), 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, enquanto durante a solidificação, o material libera energia. A medida de energia que controla esses processos é denominada entalpia. Define-se a entalpia específica por unidade de volume na configuração inicial como ([HOLZAPFEL, 2000](#)):

$$h = \psi + \theta\eta - \mathbf{S} : \mathbf{C}, \quad (9.1)$$

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, \mathbf{S} a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, e \mathbf{C} o alongamento à direita de Cauchy-Green.

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). Além disso, como os efeitos mecânicos são desprezados nesse contexto, a taxa de $\mathbf{S} : \mathbf{C}$ é nula. Logo, a taxa de entalpia pode ser calculada como:

$$\dot{h} = \frac{d}{dt} \left(\psi - \theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) = \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \dot{\theta} - \dot{\theta} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \dot{\theta} = -\theta \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \dot{\theta} = \theta \dot{\eta}. \quad (9.2)$$

Aplicando a Eq. (9.2) na Eq. (3.28), reescreve-se a equação da condução de calor puramente térmica na forma

$$\dot{h} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \quad (9.3)$$

Em casos onde não ocorra mudança de fase, a Eq. (9.3) deve coincidir com a Eq. (3.35). Logo, teria-se $\dot{h} = c_v \dot{\theta}$, 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.

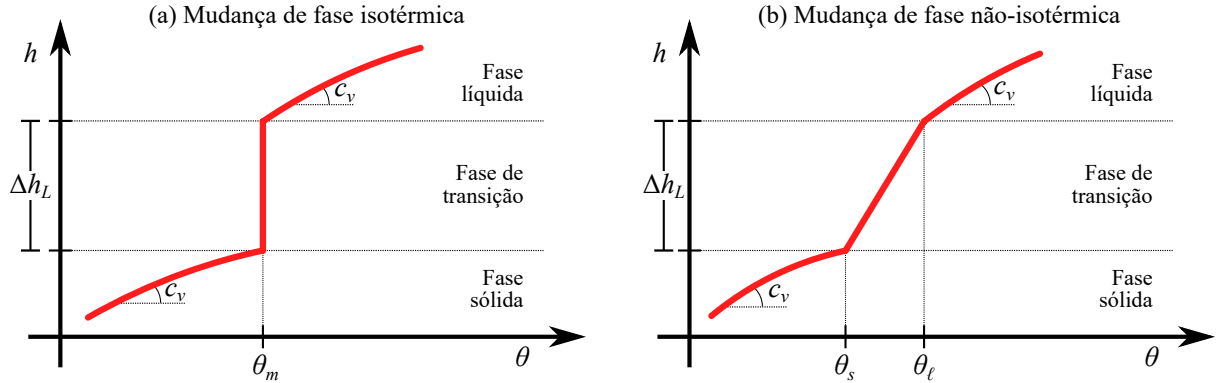
As temperaturas nas quais ocorrem as transições de fase também podem ser consideradas parâmetros fixos do material nessas condições. A mudança de fase isotérmica é caracterizada por uma única temperatura de fusão ou solidificação, denotada por θ_m . Quando a temperatura do material é inferior a θ_m , 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 Figura 135 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 135 – Relações características entre entalpia e temperatura



Fonte: Elaborado pelo autor

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. (9.3), tratando-a como a variável principal do sistema, ao invés da temperatura (NEDJAR, 2002). Essa estratégia é eficaz, pois a temperatura pode sempre ser unicamente determinada pela entalpia, enquanto a recíproca não é válida.

Neste trabalho, considera-se apenas a mudança de fase não-isotérmica. Em casos onde for necessário modelar materiais com mudança de fase isotérmica, adota-se a abordagem aproximada descrita no item (a).

9.1.1 Modelo de mudança de fase não-isotérmica

Com base na Figura 135(b), supõe-se 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, a energia livre de Helmholtz pode ser decomposta na seguinte forma:

$$\psi(\theta) = \psi_\theta(\theta) + \psi_L(\theta), \quad (9.4)$$

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

$$\psi_L(\theta) = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} \left(\theta - \theta_s - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_s} \right) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L \left(1 - \theta \frac{\ln(\theta_\ell/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} \right) & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.5)$$

Essa energia é expressa utilizando como referência a temperatura limite do sólido (θ_s). Destaca-se, 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, define-se a parcela da entropia associada ao calor latente por meio da expressão

$$\eta_L(\theta) = -\frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \Delta h_L \frac{\ln(\theta/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L \frac{\ln(\theta_\ell/\theta_s)}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.6)$$

Assim, a parcela de entalpia associada ao calor latente é calculada como

$$h_L(\theta) = \psi_L + \theta \eta_L = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \Delta h_L \frac{\theta - \theta_s}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ \Delta h_L & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.7)$$

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, o comportamento ilustrado na Figura 135(b) é obtido.

Utilizando as expressões anteriores, calcula-se a taxa de entalpia total neste caso como

$$\dot{h} = -\theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \dot{\theta} = -\theta \left(\frac{\partial^2 \psi_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \psi_L}{\partial \theta^2} \right) \dot{\theta} = (c_v + c_v^L) \dot{\theta}, \quad (9.8)$$

onde c_v^L é o calor específico volumétrico latente, definido pela expressão

$$c_v^L = -\theta \frac{\partial^2 \psi_L}{\partial \theta^2} = \theta \frac{\partial \eta_L}{\partial \theta} = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell, \end{cases} \quad (9.9)$$

e c_v é o calor específico volumétrico do material, já apresentado nos capítulos anteriores, sendo definido neste contexto como

$$c_v = -\theta \frac{\partial^2 \psi_\theta}{\partial \theta^2}. \quad (9.10)$$

Vale destacar que, para representar fielmente o comportamento da [Figura 135\(b\)](#), o valor de c_v deveria ser nulo durante a fase de transição, uma vez que o valor de c_v^L na Eq. (9.9) 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, adota-se essa última abordagem.

Aplicando a Eq. (9.8) na Eq. (9.3), obtém-se, enfim, a equação da condução de calor local Lagrangiana considerando a mudança de fase não-isotérmica:

$$(c_v + c_v^L) \dot{\theta} - r + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \quad (9.11)$$

Observa-se que 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. (9.11), e aplicando os mesmos procedimentos detalhados no [Capítulo 3](#), pode-se construir um sistema de equações para resolver globalmente o problema térmico utilizando o método dos elementos finitos. Esse sistema segue 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, considera-se um determinado passo de tempo em que um ponto do material passa da fase sólida para a fase de transição. Na primeira tentativa, utiliza-se o calor específico volumétrico da fase sólida (c_v), e a temperatura calculada resulta 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, pode-se 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 dela. Uma vez que cada uma dessas componentes está associada a um calor específico diferente, pode-se calcular um calor específico volumétrico efetivo (c_v^{ef}) tal que:

$$(c_v^{\text{ef}})\Delta\theta = \underbrace{(c_v)(\Delta\theta - \Delta\theta_L)}_{\text{Fase líquida ou sólida}} + \underbrace{\left(c_v + \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s}\right)\Delta\theta_L}_{\text{Fase de transição}}. \quad (9.12)$$

Rearranjando a Eq. (9.12), a seguinte expressão para c_v^{ef} é obtida:

$$c_v^{\text{ef}} = c_v + \left(\frac{\Delta\theta_L}{\Delta\theta}\right) \cdot \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s}. \quad (9.13)$$

Isto é, a parcela de calor latente é ponderada pela fração da variação de temperatura que efetivamente ocorre dentro da fase de transição ($\Delta\theta_L/\Delta\theta$). A expressão que reflete essa fração 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, tem-se $\Delta\theta_L = \theta - \theta_s$. 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. (9.13) 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

Tabela 14 – Coeficiente de ponderação para a parcela latente do calor específico

Varição de fase entre os passos de tempo	$\Delta\theta_L/\Delta\theta$
Sólido \rightarrow Transição	$(\theta - \theta_s)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Transição \rightarrow Sólido	$(\theta_s - \theta_{\text{ant}})/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Transição \rightarrow Líquido	$(\theta_\ell - \theta_{\text{ant}})/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Líquido \rightarrow Transição	$(\theta - \theta_\ell)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Sólido \rightarrow Líquido	$(\theta_\ell - \theta_s)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Líquido \rightarrow Sólido	$(\theta_s - \theta_\ell)/(\theta - \theta_{\text{ant}})$
Sólido \rightarrow Sólido	0
Líquido \rightarrow Líquido	0
Transição \rightarrow Transição	1

Fonte: Elaborado pelo autor

dada na Eq. (9.9). Na Tabela 14, são apresentadas as expressões de $\Delta\theta_L/\Delta\theta$ para cada possibilidade de variação de fase entre os passos de tempo.

Portanto, a matriz $[\mathbf{C}]$ da Eq. (3.63) é dada por

$$[\mathbf{C}]_{ij} = \int_{\Omega_0} c_v^{\text{ef}} \varphi^i \varphi^j dV_0 = \int_{\Omega_0} \left(c_v + \frac{\Delta\theta_L}{\Delta\theta} \cdot \frac{\Delta h_L}{\theta_\ell - \theta_s} \right) \varphi^i \varphi^j dV_0, \quad (9.14)$$

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.

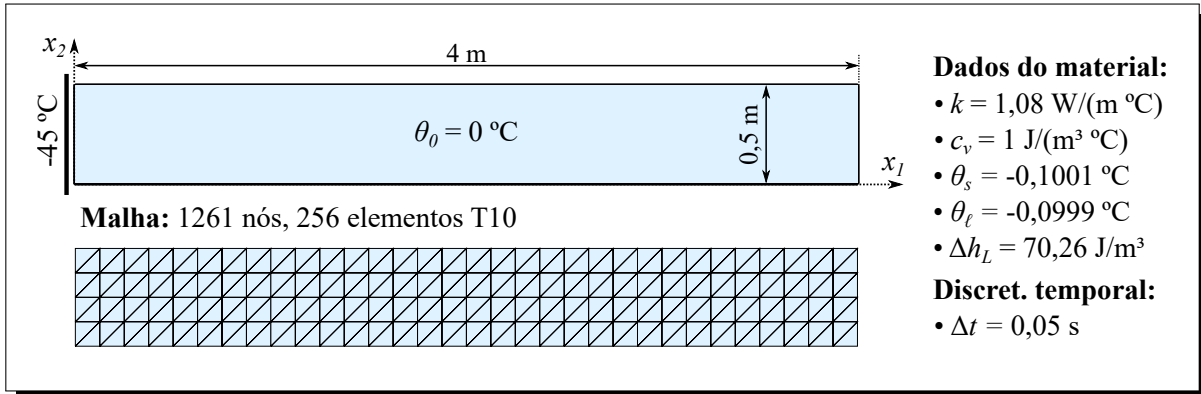
Outra alternativa para contornar o problema de convergência discutido previamente é a aplicação de técnicas de regularização, que suavizam o gráfico de entalpia por temperatura, eliminando as descontinuidades de c_v^L . Essa abordagem pode ser vista, por exemplo, em Bobach et al. (2021). No entanto, 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 Figura 136. Inicialmente, a chapa encontra-se na fase líquida, com temperatura de 0 °C. Devido a uma temperatura prescrita constante de -45 °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 136 – Dados do exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo



Fonte: Elaborado pelo autor

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 [Rolph e Bathe \(1982\)](#) e [Celentano, Oñate e Oller \(1994\)](#). Originalmente, a mudança de fase é considerada isotérmica, com temperatura de solidificação de $\theta_m = -0,1 \text{ } ^\circ\text{C}$. Neste trabalho, o modelo é adaptado 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 $\theta_\ell = -0,0999 \text{ } ^\circ\text{C}$.

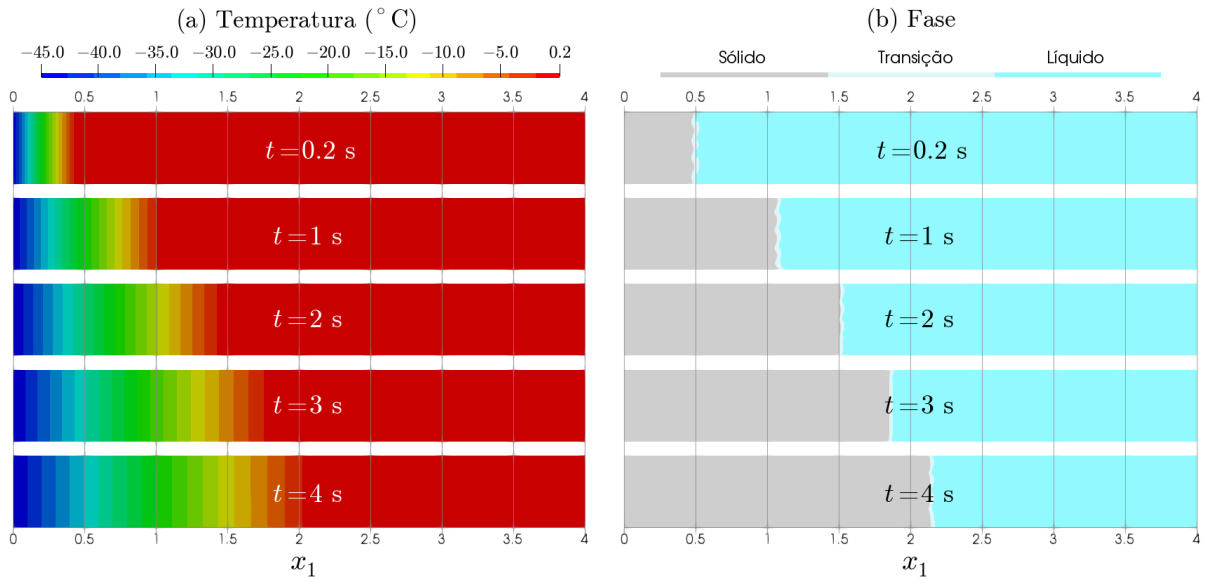
Na [Figura 137](#) são apresentados os mapas de temperatura e de fase para determinados instantes da análise, ilustrando a evolução do processo de solidificação no domínio. Na [Figura 138\(a\)](#) é mostrada a evolução da temperatura em um ponto localizado a 1 m da extremidade esquerda. Na [Figura 138\(b\)](#), 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 [Celentano, Oñate e Oller \(1994\)](#), notando-se boa concordância.

9.2 Formulação termomecânica

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 as fases. Neste contexto, propõe-se uma formulação Lagrangiana unificada, combinando os desenvolvimentos previamente apresentados ao longo deste trabalho.

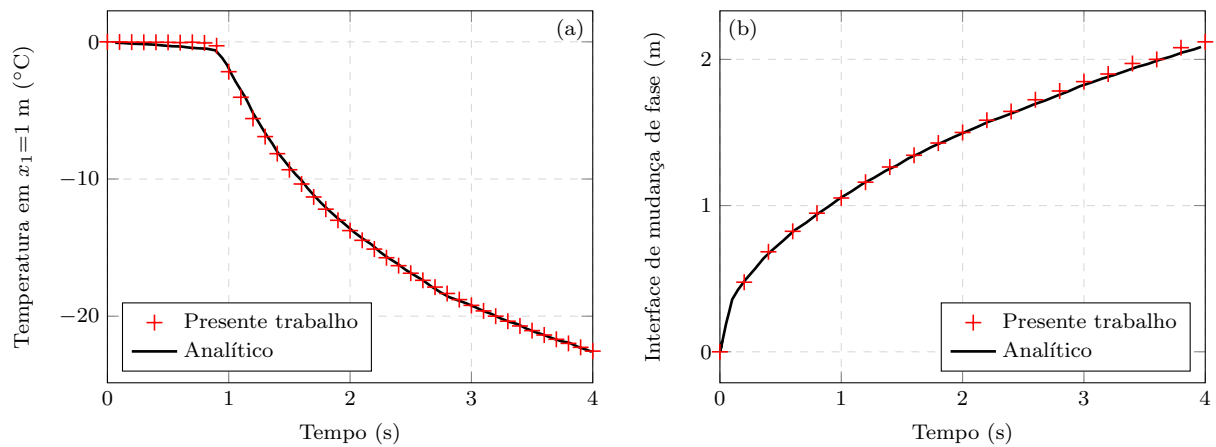
Para a fase sólida, consideram-se os modelos constitutivos discutidos nos Capítulos 4 a 6. Para a fase líquida, utiliza-se o modelo de fluido Newtoniano apresentado na [seção 8.3](#). Para a fase de transição, pode-se tratar o material como uma combinação dos modelos de sólido e de líquido ([HILLS; LOPER; ROBERTS, 1983](#)).

Figura 137 – Mapa de cores de temperatura e fase ao longo do tempo para o exemplo de solidificação de chapa ao longo de um eixo



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 138 – (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



Fonte: Elaborado pelo autor

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, pode-se escrever a parcela mecânica do gradiente da função mudança de configuração como

$$\mathbf{F}_m = \mathbf{F}_s \mathbf{F}_\ell, \quad (9.15)$$

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. (9.15) 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), podem-se definir componentes sólidos e líquidos 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 (\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 4.4 e 6.1, pode-se expressar o gradiente da função mudança de configuração total como

$$\mathbf{F} = \lambda_\theta \mathbf{F}_m = \lambda_\theta \mathbf{F}_s \mathbf{F}_\ell, \quad (9.16)$$

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:

$$\mathbf{C}_m = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{C}, \quad (9.17)$$

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_\ell^{-T} \mathbf{C}_m \mathbf{F}_\ell^{-1} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_\ell^{-T} \mathbf{C} \mathbf{F}_\ell^{-1}, \quad (9.18)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_m = \lambda_\theta^{-2} \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m = \lambda_\theta^{-2} \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^{-3} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}, \quad \text{e} \quad (9.19)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_s = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{F}_\ell^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}_\ell^{-1} - \text{sim}(\mathbf{C}_s \mathbf{L}_\ell) - \lambda_\theta^{-1} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_s. \quad (9.20)$$

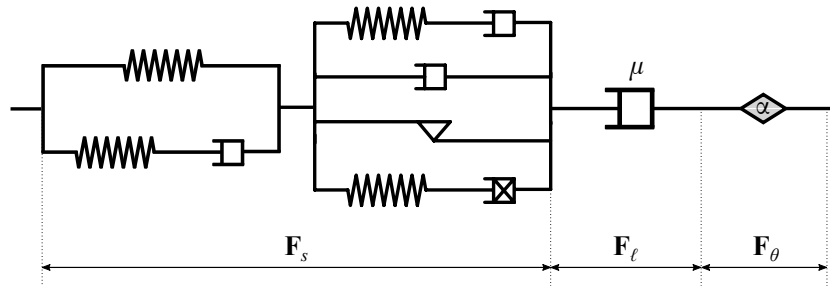
9.2.2 Base termodinâmica

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, assume-se 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 [Figura 139](#).

Figura 139 – Modelo reológico para a fase de transição, considerando um sólido viscoelástico-viscoplástico



Fonte: Elaborado pelo autor

Generalizando o conceito discutido na [seção 4.4](#), escreve-se a energia livre de Helmholtz do modelo como:

$$\psi = \psi_\theta + \psi_L + \lambda_\theta^3 \psi_m, \quad (9.21)$$

onde ψ_θ e ψ_L são as parcelas térmicas discutidas na [subseção 9.1.1](#), e ψ_m representa a parcela mecânica, que pode ser adicionalmente decomposta da seguinte maneira:

$$\psi_m = \psi_m^{\text{vol}} + \psi_m^{\text{iso}} \quad (9.22)$$

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](#), define-se:

$$\psi_m^{\text{vol}} = -p \ln(J_m), \quad (9.23)$$

onde $J_m = \det \mathbf{F}_m$ é o Jacobiano mecânico. Embora essa definição seja utilizada 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, deve 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, tem-se $\psi_m^{\text{iso}} = \psi_s^{\text{iso}}$, onde ψ_s^{iso} é a energia livre de Helmholtz mecânica isocórica do modelo sólido. Para a fase de transição, assume-se que ψ_s^{iso} é uma porcentagem da energia mecânica, ou seja, $\psi_m^{\text{iso}} = \omega_s \psi_m^{\text{iso}}$, 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, pode-se estabelecer a seguinte definição:

$$\psi_m^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) = \begin{cases} \psi_s^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \omega_s^{-1}(\theta) \psi_s^{\text{iso}}(\theta, \mathbf{E}_s, \boldsymbol{\chi}) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell, \end{cases} \quad (9.24)$$

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, calcula-se a taxa da energia livre de Helmholtz por meio da seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} \dot{\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \dot{\theta} + \lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} : \dot{\mathbf{E}}_m + \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \right) \\ & + \lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} : \dot{\mathbf{E}}_s + \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \end{aligned} \quad (9.25)$$

Aplicando as relações cinemáticas dadas nas Eqs. (9.19) e (9.20), e manipulando algebricamente, segue que:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & \left(\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \lambda_\theta \left(\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}}, \end{aligned} \quad (9.26)$$

onde \mathbf{M}_m é o tensor de Mandel mecânico, definido na configuração intermediária térmica, expresso como

$$\mathbf{M}_m = \mathbf{C}_m \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_m}, \quad (9.27)$$

que resulta em

$$\text{tr} \mathbf{M}_m = \mathbf{C}_m : \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{E}_m} = \mathbf{C}_m : \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \mathbf{C}_s : \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s}. \quad (9.28)$$

Aplicando a Eq. (9.26) na primeira lei da termodinâmica, Eq. (3.20), resulta

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \\ & - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0. \end{aligned} \quad (9.29)$$

E aplicando na segunda lei da termodinâmica, Ineq. (3.21), resulta

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \\ & - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (9.30)$$

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 ($\theta \leq \theta_s$), tem-se $\psi_m^{\text{iso}} = \psi_s^{\text{iso}}$, e a variação de deformação líquida é nula, ou seja, $\mathbf{L}_\ell = \mathbf{0}$. Assim, a Eq. (9.29) resulta em

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \end{aligned} \quad (9.31)$$

e a Ineq. (9.30) resulta em

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\ & + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Seguindo o procedimento de Coleman e Noll (1963), 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:

$$\eta = - \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \lambda_\theta^2 (\text{tr} \mathbf{M}_m - 3\psi_m) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.33)$$

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad \text{e} \quad (9.34)$$

$$\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} = 0, \quad (9.35)$$

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. (9.34) recai exatamente na tensão dos modelos sólidos discutidos em capítulos anteriores.

Relacionando as Eqs. (9.28) e (9.34), verifica-se que $\text{tr } \mathbf{M}_m = \lambda_\theta^{-3} \mathbf{C} : \mathbf{S}$. Logo, a equação da entropia é reescrita como

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} + \left(\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m \right) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.36)$$

que é análoga à Eq. (6.28), 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. (9.34) a (9.36) na Eq. (9.31) e na Ineq. (9.32), a primeira e segunda leis da termodinâmica podem ser reescritas por expressões análogas às já apresentadas em capítulos anteriores:

$$\theta \dot{\eta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad e \quad (9.37)$$

$$d_{\text{int}} = d_m - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0, \quad (9.38)$$

onde a taxa de dissipação mecânica (d_m) na fase sólida provém apenas das variáveis internas, sendo definida de forma genérica como

$$d_m = -\lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \quad (9.39)$$

Para sólidos hiperelásticos, a equação acima é nula. Para sólidos com modelo viscoelástico-viscoplástico, esta é equivalente à forma já apresentada na Eq. (6.32).

A implementação numérica do modelo segue uma abordagem totalmente similar ao caso puramente sólido. Para garantir a convergência quadrática da solução não-linear, calcula-se o operador tangente consistente (\mathfrak{C}) através da derivada da Eq. (9.34) com relação a \mathbf{E} . Considerando que \mathbf{F}_ℓ é constante na fase sólida, e utilizando a relação cinemática (9.17), escreve-se:

$$\mathfrak{C} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}^{\text{vol}} + \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{C}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{E}_m} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad (9.40)$$

onde $\mathfrak{C}^{\text{vol}}$ e $\mathfrak{C}_s^{\text{iso}}$ são definidos, respectivamente, como

$$\mathfrak{C}^{\text{vol}} = \frac{\partial^2 \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m \otimes \partial \mathbf{E}_m} \quad e \quad \mathfrak{C}_s^{\text{iso}} = \frac{\partial^2 \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s \otimes \partial \mathbf{E}_s}, \quad (9.41)$$

e $\partial \mathbf{E}_s / \partial \mathbf{E}_m$ pode ser calculado com base na Eq. (9.18):

$$\frac{\partial (E_s)_{ij}}{\partial (E_m)_{kl}} = \frac{\partial (C_s)_{ij}}{\partial (C_m)_{kl}} = (F_\ell)_{ki}^{-1} (F_\ell)_{lj}^{-1}. \quad (9.42)$$

Para o modelo incompressível apresentado na Eq. (9.23), as parcelas volumétricas da tensão e do operador tangente consistente resultam, respectivamente, em

$$\frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} = -p \mathbf{C}_m^{-1} \quad e \quad \mathfrak{C}^{\text{vol}} = -2p \frac{\partial \mathbf{C}_m^{-1}}{\partial \mathbf{C}_m}. \quad (9.43)$$

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, segue:

$$\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_m - \mathbf{I}).$$
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, segue:

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_s^T \mathbf{F}_s \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_s = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_s - \mathbf{I}).$$
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. (9.34) e o operador tangente consistente \mathfrak{C} por meio da Eq. (9.40).

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. (9.29) resulta em

$$\begin{aligned} & - \left(\eta + \frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi_L}{\partial\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}} \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} \right) \dot{\theta} \\ & - \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} + \mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0, \end{aligned} \quad (9.44)$$

e a Ineq. (9.30) resulta em

$$\begin{aligned} d_{\text{int}} = & - \left(\eta + \frac{\partial\psi_\theta}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi_L}{\partial\theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}} \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial\lambda_\theta}{\partial\theta} \right) \dot{\theta} \\ & - \lambda_\theta^3 \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} + \mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0, \end{aligned} \quad (9.45)$$

onde \mathbf{S}' é a parcela isocórica da tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, definida como

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial\psi_m^{\text{vol}}}{\partial\mathbf{E}_m}. \quad (9.46)$$

Pelo procedimento de Coleman-Noll, a condição $\mathbf{S}' = \mathbf{0}$ seria capaz de atender às leis da termodinâmica. No entanto, essa solução trivial não representa o comportamento viscoso do fluido. Para garantir o caráter dissipativo do sistema, adota-se um modelo que permita valores positivos de $\mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}}$, ainda respeitando as leis da termodinâmica.

Dado que $\dot{\mathbf{E}}_s = \mathbf{0}$, pode-se reescrever a Eq. (9.20) como

$$\dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^2 \mathbf{F}_\ell^T \text{sim}(\mathbf{C}_s \mathbf{L}_\ell) \mathbf{F}_\ell + \lambda_\theta \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m. \quad (9.47)$$

Utilizando a relação acima, e realizando determinadas manipulações algébricas, obtém-se:

$$\mathbf{S}' : \dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^2 (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \mathbf{L}_\ell + \lambda_\theta \dot{\lambda}_\theta \mathbf{C}_m : \mathbf{S}'. \quad (9.48)$$

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

$$\lambda_\theta^2 (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \mathbf{L}_\ell = \lambda_\theta^2 (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \text{sim}(\mathbf{L}_\ell) = \lambda_\theta^2 (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \mathbf{D}_\ell. \quad (9.49)$$

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, divide-se por $J_\theta J_\ell = \lambda_\theta^3 J_\ell$, o que resulta em $\lambda_\theta^{-1} J_\ell^{-1} (\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T) : \mathbf{D}_\ell$. 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, adota-se uma relação linear entre esses termos. Em particular, para um fluido Newtoniano:

$$2\mu \mathbf{D}_\ell = \lambda_\theta^{-1} J_\ell^{-1} \mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T, \quad (9.50)$$

onde μ é o parâmetro de viscosidade do líquido. Nota-se que, ao formular o modelo com base na configuração intermediária líquida, garante-se que a resposta seja independente da configuração inicial, mantendo a consistência da formulação.

Sabendo que $\dot{\mathbf{E}}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{D}_\ell \mathbf{F}_\ell$, pode-se rearranjar a Eq. (9.50) na seguinte lei constitutiva:

$$\mathbf{S}' = 2\mu \lambda_\theta J_\ell \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}, \quad (9.51)$$

o que resulta em

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + 2\mu \lambda_\theta J_\ell \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}. \quad (9.52)$$

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, tem-se $\mathbf{C}_m = \mathbf{C}_\ell = \mathbf{C}$, $\dot{\mathbf{E}}_\ell = \dot{\mathbf{E}}$, $J_\ell = J$ e $\lambda_\theta = 1$, fazendo com que a Eq. (9.51) recaia na Eq. (8.16).

O último termo da Eq. (9.48) contribui para o conjugado termodinâmico de $\dot{\theta}$ nas Eqs. (9.44) e (9.45). Igualando esse conjugado a zero, e manipulando algebricamente, obtém-se a seguinte equação para a entropia:

$$\eta = -\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \theta} + (\lambda_\theta^{-1} \mathbf{C} : \mathbf{S} - 3\lambda_\theta^2 \psi_m^{\text{vol}}) \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta}, \quad (9.53)$$

que é similar à Eq. (9.36) da fase sólida, considerando $\psi_m = \psi_m^{\text{vol}}$. A condição de incompressibilidade, dada na Eq. (9.35), mantém-se válida no presente contexto.

Aplicando essas relações constitutivas na Eq. (9.44) e na Eq. (9.45), obtém-se novamente as expressões dadas na Eq. (9.37) e na Ineq. (9.38) para as leis da termodinâmica, sendo a taxa de dissipação mecânica, neste caso, definida como

$$d_m = \lambda_\theta^2 \left(\mathbf{C}_s \mathbf{F}_\ell \mathbf{S}' \mathbf{F}_\ell^T \right) : \mathbf{D}_\ell = 2\mu\lambda_\theta^3 J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\|. \quad (9.54)$$

Das relações cinemáticas (9.17) e (9.19), resulta $\partial \mathbf{E}_m / \partial \mathbf{E} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{II}$, $\partial \dot{\mathbf{E}}_m / \partial \dot{\mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-2} \mathbf{II}$ e $\partial \dot{\mathbf{E}}_m / \partial \dot{\mathbf{E}} = -2\lambda_\theta^{-3} \dot{\lambda}_\theta \mathbf{II}$. Utilizando essas relações, pode-se calcular o operador tangente consistente e o operador de viscosidade do modelo na fase líquida, respectivamente, como

$$\mathfrak{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}_m} : \frac{\partial \mathbf{E}_m}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_m} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_m}{\partial \dot{\mathbf{E}}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{C}_m - 2\lambda_\theta^{-2} \dot{\lambda}_\theta \mathcal{D}_m \quad (9.55)$$

$$\mathcal{D} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_m} : \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_m}{\partial \dot{\mathbf{E}}} = \lambda_\theta^{-1} \mathcal{D}_m \quad (9.56)$$

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. (9.55) 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, segue:
 $\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \rightarrow \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \rightarrow \mathbf{E}_m = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_m - \mathbf{I})$.
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, segue $J_\ell = \det \mathbf{F}_\ell$, e:
 $\mathbf{C}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{F}_\ell \rightarrow \mathbf{E}_\ell = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_\ell - \mathbf{I})$.
4. A partir de $\dot{\theta}$, calcula-se $\dot{\lambda}_\theta = (\partial \lambda_\theta / \partial \theta) \dot{\theta}$. Disto, segue:
 $\dot{\mathbf{F}}_m = \lambda_\theta^{-1} \left(\dot{\mathbf{F}} - \dot{\lambda}_\theta \mathbf{F}_m \right) \rightarrow \dot{\mathbf{F}}_\ell = \mathbf{F}_s^{-1} \dot{\mathbf{F}}_m \rightarrow \dot{\mathbf{E}}_\ell = \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{F}}_\ell^T \mathbf{F}_\ell + \mathbf{F}_\ell^T \dot{\mathbf{F}}_\ell \right)$.
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. (9.52), o operador tangente consistente \mathfrak{C} por meio da Eq. (9.55), e o operador de viscosidade \mathcal{D} pela Eq. (9.56).

9.2.5 Modelo constitutivo da fase de transição

Na fase de transição ($\theta_s < \theta < \theta_\ell$), tem-se $\psi_m^{\text{iso}} = \omega_s^{-1} \psi_s^{\text{iso}}$. Dessa forma, a Eq. (9.29) pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
& - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\
& + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \omega_s^{-1} \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell \\
& - \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \chi} : \dot{\chi} - \theta \dot{\eta} + r - \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = 0,
\end{aligned} \tag{9.57}$$

e a Ineq. (3.21) como

$$\begin{aligned}
d_{\text{int}} & = - \left(\eta + \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi_L}{\partial \theta} + 3\lambda_\theta^2 \psi_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} + \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \lambda_\theta^2 \text{tr} \mathbf{M}_m \frac{\partial \lambda_\theta}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial p} \dot{p} \\
& + \left(\mathbf{S} - \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} - \omega_s^{-1} \lambda_\theta \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} \right) : \dot{\mathbf{E}} + \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \left(\mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \right) : \mathbf{L}_\ell \\
& - \omega_s^{-1} \lambda_\theta^3 \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \chi} : \dot{\chi} - \frac{1}{T} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla_0 \theta \geq 0.
\end{aligned} \tag{9.58}$$

Aplicando-se o procedimento de Coleman-Noll de forma similar ao caso sólido, obtém-se novamente as Eqs. (9.33) ou (9.36) para a entropia, e a Eq. (9.35) para a condição de incompressibilidade. Já a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie, neste caso, é dada por:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + \lambda_\theta \omega_s^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T}. \tag{9.59}$$

Adicionalmente, para as deformações líquidas, define-se uma lei de evolução que atenda a segunda lei da termodinâmica. Analisando as Eq. (9.57) e Ineq. (9.58), observa-se que o conjugado termodinâmico de \mathbf{L}_ℓ , neste caso, é o tensor de Mandel sólido, definido na configuração intermediária líquida. Similarmente à subseção 9.2.4, adota-se 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. Logo:

$$2\mu \mathbf{L}_\ell = \frac{\omega_\ell}{\omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \quad \Rightarrow \quad \dot{\mathbf{F}}_\ell = \frac{\omega_\ell}{2\mu \omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell, \tag{9.60}$$

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. (9.60), e considerando a simetria do tensor de Mandel, escreve-se

$$\dot{\mathbf{E}}_\ell = \frac{\omega_\ell}{2\mu \omega_s J_\ell} \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell. \tag{9.61}$$

Isolando $\partial \psi_s^{\text{iso}} / \partial \mathbf{E}_s$ na Eq. (9.61), e substituindo na Eq. (9.59), obtém-se uma forma alternativa para a tensão de Piola-Kirchhoff de segunda espécie:

$$\mathbf{S} = \lambda_\theta \frac{\partial \psi_m^{\text{vol}}}{\partial \mathbf{E}_m} + 2\mu \lambda_\theta J_\ell \omega_\ell^{-1} \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}. \tag{9.62}$$

Essa forma é análoga à Eq. (9.52) da fase líquida, com a diferença de 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. (9.59). 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 .

Considera-se 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), (5.18), (5.19), e (5.20) são substituídas, respectivamente, por:

$$\mathbf{L}_v = \frac{\omega_s}{\mu_v} \mathbf{M}_e^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_v = \frac{\omega_s}{\mu_v} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v, \quad (9.63)$$

$$\mathbf{L}_p = \omega_s \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_p = \omega_s \dot{\gamma} \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p, \quad (9.64)$$

$$\mathbf{L}_{p_i} = \omega_s \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{p_i} = \omega_s \dot{\gamma} \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i}, \quad (9.65)$$

$$\mathbf{L}_{\bar{p}_v} = \frac{\omega_s}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\bar{p}}^D \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{F}}_{\bar{p}_v} = \frac{\omega_s}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\bar{p}}^D \mathbf{F}_{\bar{p}_v}, \quad (9.66)$$

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{2}{3}} \omega_s \dot{\gamma}. \quad (9.67)$$

Considerando as relações constitutivas apresentadas, a Eq. (9.57) e a Ineq. (9.58) resultam, novamente, nas formas da Eq. (9.37) e da Ineq. (9.38), sendo a taxa de dissipação mecânica, neste caso, definida como:

$$d_m = 2\mu\lambda_\theta^3 \omega_\ell^{-1} J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\| - \lambda_\theta^3 \omega_s^{-1} \left(\frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right). \quad (9.68)$$

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. (9.24) e da taxa de deformação líquida na Eq. (9.60), $\omega_s(\theta)$ e $\omega_\ell(\theta)$ devem ser contínuos para temperaturas no intervalo entre θ_s e θ_ℓ , e devem atender às 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, pode-se 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:

$$f_s = \begin{cases} 1 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\theta_\ell - \theta}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 0 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad \text{e} \quad f_\ell = \begin{cases} 0 & , \text{ para } \theta \leq \theta_s \\ \frac{\theta - \theta_s}{\theta_\ell - \theta_s} & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell \\ 1 & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.69)$$

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, o modelo pode ser refinado incorporando algumas condições adicionais para ω_s e ω_ℓ .

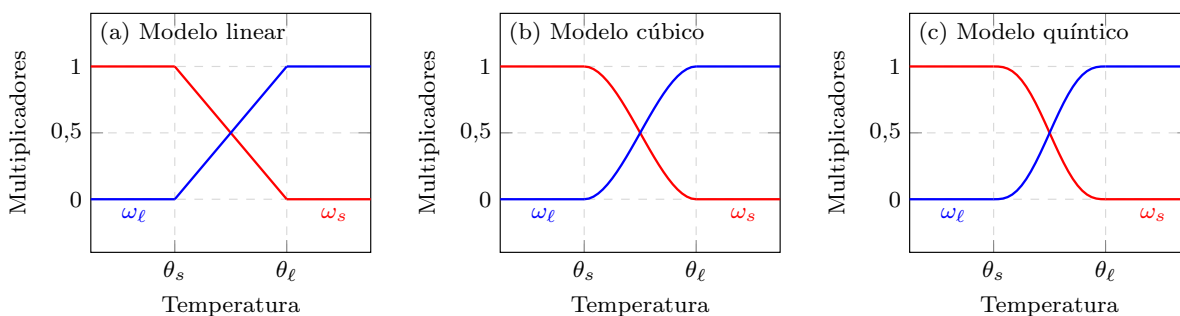
Para garantir a continuidade das derivadas primeiras, são impostas as condições $\omega'_s(\theta_s) = \omega'_s(\theta_\ell) = \omega'_\ell(\theta_s) = \omega'_\ell(\theta_\ell) = 0$; e para garantir também a continuidade das derivadas segundas, são impostas as condições $\omega''_s(\theta_s) = \omega''_s(\theta_\ell) = \omega''_\ell(\theta_s) = \omega''_\ell(\theta_\ell) = 0$. No primeiro caso, utilizam-se funções polinomiais de terceira ordem, enquanto no segundo são utilizadas 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 15](#). Na [Figura 140](#), apresentam-se os gráficos de ω_s e ω_ℓ para cada um dos modelos considerados.

Tabela 15 – 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	$6f_s^5 - 15f_s^4 + 10f_s^3$	$6f_\ell^5 - 15f_\ell^4 + 10f_\ell^3$

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 140 – Gráficos dos modelos adotados para os multiplicadores sólido e líquido



Fonte: Elaborado pelo autor

Neste trabalho, são consideradas 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. (9.60). Para a integração temporal dessa lei de evolução, utiliza-se o método implícito de Euler, que resulta em

$$\mathbf{R}_\ell = \mathbf{F}_\ell - \mathbf{F}_\ell^{\text{ant}} - \Delta t \frac{\omega_\ell}{2\mu\omega_s J_\ell} \mathbf{C}_s \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell = \mathbf{0}, \quad (9.70)$$

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. (9.70) 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, os resíduos seguem expressões análogas às apresentadas na seção 5.4, adicionando-se apenas o multiplicador sólido. Ou seja:

$$\mathbf{R}_v = \mathbf{F}_v - \mathbf{F}_v^{\text{ant}} - \frac{\Delta t \omega_s}{\mu_v} \mathbf{M}_e^D \mathbf{F}_v = \mathbf{0}, \quad (9.71)$$

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{F}_p - \mathbf{F}_p^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \mathbf{N}_p \mathbf{F}_p = \mathbf{0}, \quad (9.72)$$

$$\mathbf{R}_{p_i} = \mathbf{F}_{p_i} - \mathbf{F}_{p_i}^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \frac{b}{c} \mathbf{M}_p^D \mathbf{F}_{p_i} = \mathbf{0}, \quad (9.73)$$

$$\mathbf{R}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} - \mathbf{F}_{\tilde{p}_v}^{\text{ant}} - \frac{\Delta t \omega_s}{\mu_p^{\text{cin}}} \mathbf{M}_{\tilde{p}}^D \mathbf{F}_{\tilde{p}_v} = \mathbf{0}, \quad \text{e} \quad (9.74)$$

$$R_\kappa = \kappa - \kappa^{\text{ant}} - \Delta \gamma \omega_s \sqrt{\frac{2}{3}} = 0. \quad (9.75)$$

A condição de consistência segue ainda as expressões dadas pelas equações (5.27) ou (5.28), a depender do tipo de plasticidade (independente de taxa ou viscosa).

Uma vez conhecidas as deformações líquida e sólida, calcula-se a tensão pelas equações (9.59) ou (9.62). Em teoria, ambas são equivalentes para temperaturas entre θ_s e θ_ℓ , sendo a Eq. (9.59) indeterminada para $\theta \geq \theta_\ell$ (pois $\omega_s = 0$), e a Eq. (9.62) 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. (9.59) tende a causar instabilidades numéricas quando ω_s é muito pequeno (ou seja, temperaturas muito próximas de θ_ℓ), enquanto a Eq. (9.62) tende a causar instabilidades quando ω_ℓ é muito pequeno (ou seja, temperaturas muito próximas de θ_s).

Para contornar esse problema, são estabelecidos subintervalos específicos de utilização para cada equação. Opta-se por dividir o intervalo de temperaturas exatamente na metade, através da seguinte estratégia: para $f_\ell \leq 0,5$ (ou $f_s \geq 0,5$), utiliza-se a Eq. (9.59); para $f_\ell > 0,5$ (ou $f_s < 0,5$), é utilizada a Eq. (9.62). Essa estratégia evita divisão por números muito pequenos, minimizando as chances de instabilidades numéricas.

Para o cálculo do operador tangente consistente, deve-se 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 , é possível escrever a variação:

$$\Delta \mathbf{S} \approx \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \Delta \mathbf{F}_\ell. \quad (9.76)$$

Como o resíduo \mathbf{R}_ℓ é nulo para todo passo de tempo, a seguinte aproximação é válida:

$$\Delta \mathbf{R}_\ell \approx \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \Delta \mathbf{F}_\ell \approx \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \Delta \mathbf{F}_\ell \approx - \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} : \Delta \mathbf{E}. \quad (9.77)$$

Aplicando a Eq. (9.77) na Eq. (9.76), resulta

$$\Delta \mathbf{S} \approx \left[\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}} \right] : \Delta \mathbf{E}. \quad (9.78)$$

Logo, por associação com a Eq. (5.29), o operador tangente consistente do modelo pode ser definido como

$$\mathfrak{c} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_\ell}{\partial \mathbf{E}}, \quad (9.79)$$

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. (9.59), segue-se que:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{c}^{\text{vol}} + \lambda_\theta^{-1} \omega_s^{-1} \mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{c}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{E}_m} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T}, \quad \text{e} \quad (9.80)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} = \lambda_\theta \omega_s^{-1} \left[\mathbf{F}_\ell^{-1} \left(\mathfrak{c}_s^{\text{iso}} : \frac{\partial \mathbf{E}_s}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right) \mathbf{F}_\ell^{-T} + \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^{-1}}{\partial \mathbf{F}_\ell} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \mathbf{F}_\ell^{-T} + \mathbf{F}_\ell^{-1} \frac{\partial \psi_s^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{E}_s} \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^{-T}}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right], \quad (9.81)$$

onde $\mathfrak{c}^{\text{vol}}$, $\mathfrak{c}_s^{\text{iso}}$ e $\partial \mathbf{E}_s/\partial \mathbf{E}_m$ são dados nas Eqs. (9.41) e (9.42), 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 (9.18).

Por outro lado, caso \mathbf{S} seja calculado pela Eq. (9.62), segue-se que:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \lambda_\theta^{-1} \mathfrak{c}^{\text{vol}} + 4\mu \lambda_\theta^{-1} J_\ell \omega_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_m^{-1}}{\partial \mathbf{C}_m} \dot{\mathbf{E}}_\ell \mathbf{C}_\ell^{-1}, \quad \text{e} \quad (9.82)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{F}_\ell} = 2\mu \lambda_\theta J_\ell \omega_\ell^{-1} \left(\mathbf{C}_m^{-1} \frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \mathbf{C}_\ell^{-1} + \mathbf{C}_m^{-1} \dot{\mathbf{E}}_\ell \frac{\partial \mathbf{C}_\ell^{-1}}{\partial \mathbf{C}_\ell} : \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \right), \quad (9.83)$$

onde, para fins de simplificação, a derivada de J_ℓ é desprezada, 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

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{E}}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} \approx \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{E}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell} = \frac{1}{2\Delta t} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial \mathbf{F}_\ell}, \quad (9.84)$$

e, como $\mathbf{C}_\ell = \mathbf{F}_\ell^T \mathbf{F}_\ell$, calcula-se $\partial \mathbf{C}_\ell/\partial \mathbf{F}_\ell$ em notação indicial como

$$\frac{\partial (C_\ell)_{ij}}{\partial (F_\ell)_{kl}} = \delta_{il} (F_\ell)_{kj} + (F_\ell)_{ki} \delta_{jl}. \quad (9.85)$$

No Quadro 3, apresenta-se 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, segue:

$$\mathbf{F}_m = \lambda_\theta^{-1} \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \mathbf{C}_m = \mathbf{F}_m^T \mathbf{F}_m \quad \rightarrow \quad \mathbf{E}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_m - \mathbf{I}).$$
3. Resolve-se a lei de evolução líquida (9.70) 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. (9.59) para o cálculo de \mathbf{S} , e as Eqs. (9.80) e (9.81) 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. (9.62) 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 $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{F}_\ell$.
6. Calcula-se $\boldsymbol{\mathfrak{C}}$ pela Eq. (9.79), utilizando as derivadas obtidas no passo anterior.

9.2.6 Equação da condução de calor

Conforme visto nas subseções 9.2.3 a 9.2.5, pode-se expressar a primeira lei da termodinâmica, de forma geral, como:

$$\theta\dot{\eta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = d_m + r, \quad (9.86)$$

onde a taxa de dissipação mecânica é definida como

$$d_m = \begin{cases} -\lambda_\theta^3 \left(\frac{\partial\psi_s^{\text{iso}}}{\partial\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right) & , \text{ para } \theta \leq \theta_s, \\ 2\mu\lambda_\theta^3\omega_\ell^{-1} J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\| - \lambda_\theta^3\omega_s^{-1} \left(\frac{\partial\psi_s^{\text{iso}}}{\partial\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}} \right) & , \text{ para } \theta_s < \theta < \theta_\ell, \\ 2\mu\lambda_\theta^3 J_\ell \|\mathbf{D}_\ell\| & , \text{ para } \theta \geq \theta_\ell. \end{cases} \quad (9.87)$$

A taxa de entropia pode ser desenvolvida de forma análoga à apresentada na seção 6.4. Dessa forma, a Eq. (9.86) resulta novamente na forma da Eq. (6.47), diferenciando-se

apenas pela adição do calor específico volumétrico latente. Ou seja, a equação da condução de calor é expressa, neste contexto, como:

$$\left(c_v^* + c_v^L\right) \dot{\theta} + \nabla_0 \cdot \mathbf{q}_0 = r + \beta_{tq} d_m - \theta q_m, \quad (9.88)$$

onde, novamente, o coeficiente β_{tq} é introduzido para levar em conta o efeito do trabalho frio. O calor específico volumétrico efetivo (c_v^*) e o termo de acoplamento termomecânico (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, despreza-se o efeito da dissipação mecânica e dos termo de acoplamento termomecânico na Eq. (9.88). Além disso, para simplificar os exemplos propostos e dar maior foco ao comportamento constitutivo, desconsidera-se a parcela mecânica do calor específico volumétrico, de modo que $c_v^* = c_v$, onde c_v é um parâmetro fixo do material.

Com essas considerações, a equação da condução de calor resulta na forma puramente térmica apresentada na Eq. (9.11), devendo ser utilizadas as mesmas estratégias de implementação numérica discutidas na [subseção 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 termomecânico, segue sendo utilizado o método bloco-iterativo descrito na [subseção 4.6.1](#).

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 o foco é 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, busca-se analisar o comportamento constitutivo de um ponto comprimido uniaxialmente ao mesmo tempo que sofre mudança da fase líquida para a sólida. Considera-se 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, aplica-se uma temperatura prescrita variando linearmente entre 50°C e 0°C . Três diferentes valores de t_{\max} são considerados: 25, 5 e 1 s, resultando em taxas distintas de deformação e de temperatura. Em todos os casos, aplica-se uma discretização temporal com 400 passos de tempo.

Para a fase líquida, é adotado o modelo de fluido Newtoniano incompressível, e para a fase sólida, um material hiperelástico neo-Hookeano, também mecanicamente incompressível. Os demais parâmetros para esse problema são dispostos na [Tabela 16](#). Observa-se que, por ser um material incompressível, o parâmetro Λ do modelo neo-Hookeano não se aplica. Além disso, desconsidera-se a expansão/contração térmica neste caso.

Tabela 16 – Parâmetros do material utilizado nas análises de problemas locais com mudança de fase

μ (MPa·s)	G (MPa)	θ_s (°C)	θ_ℓ (°C)
0,1	1	15	30

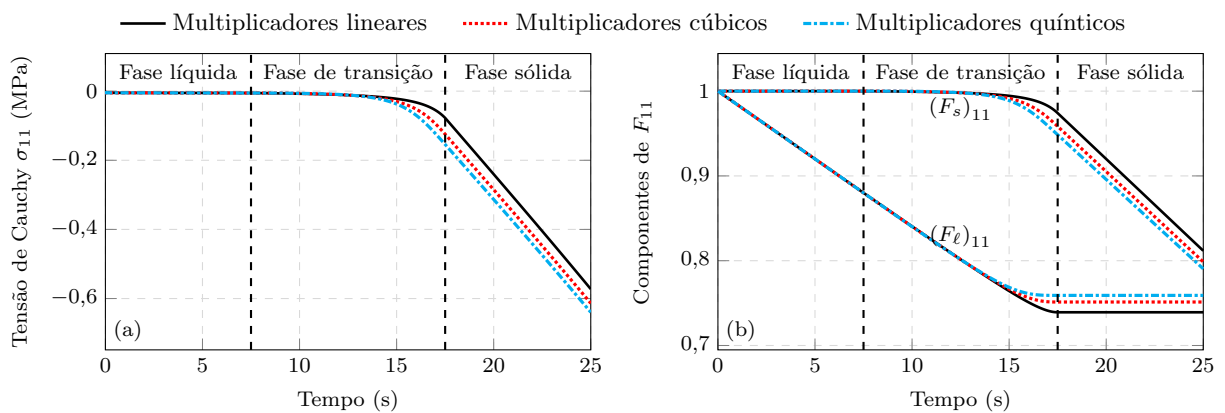
Fonte: Elaborado pelo autor

Os resultados para os três casos de t_{\max} são apresentados nas Figuras [141](#) a [143](#). Em cada caso, são apresentados os gráficos de tensão de Cauchy uniaxial (σ_{11}), e as componentes sólida e líquida 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 15](#) para a fase de transição.

No caso com $t_{\max} = 25$ s ([Figura 141](#)), 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 141 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,016$ s⁻¹ e $\dot{\theta} = -2$ °C/s

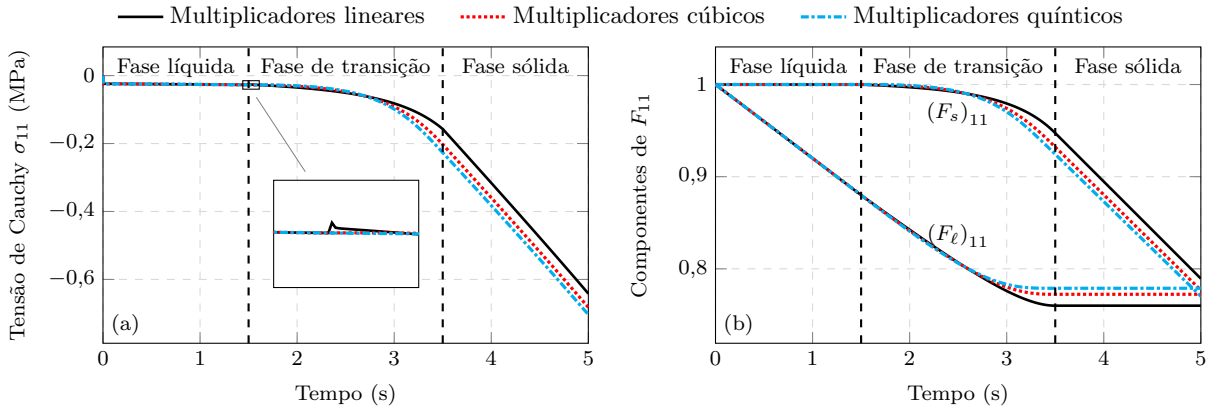


Fonte: Elaborado pelo autor

No caso com $t_{\max} = 5$ s ([Figura 142](#)), 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 quárticos, a transição das tensões se mostra suave mesmo no gráfico ampliado.

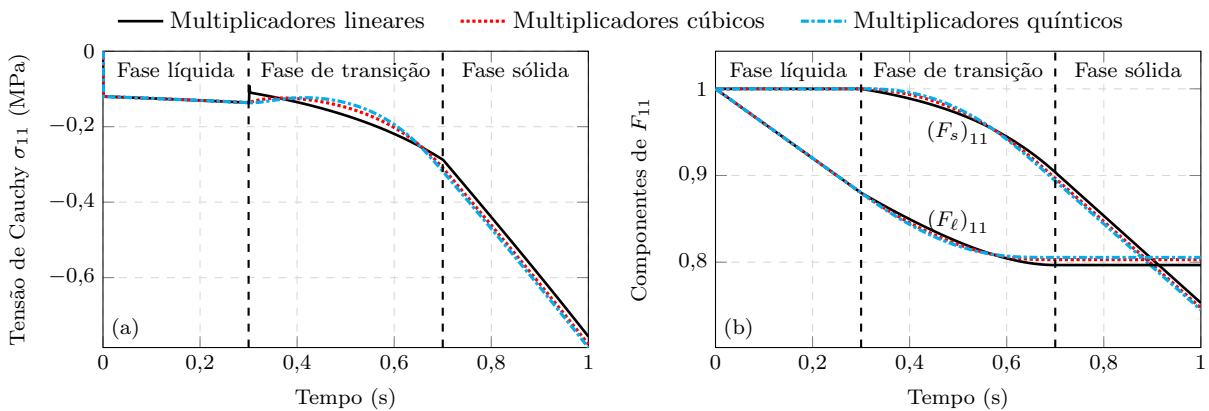
Figura 142 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -10 \text{ °C/s}$



Fonte: Elaborado pelo autor

Por fim, no caso com $t_{\max} = 1 \text{ s}$ (Figura 143), a descontinuidade das tensões para o modelo com multiplicadores lineares se torna mais expressiva, mostrando irregularidades no início da fase de transição. Além disso, observa-se 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 quártico permanece contínuo e suave ao longo de todas as transições.

Figura 143 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = -50 \text{ °C/s}$



Fonte: Elaborado pelo autor

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.

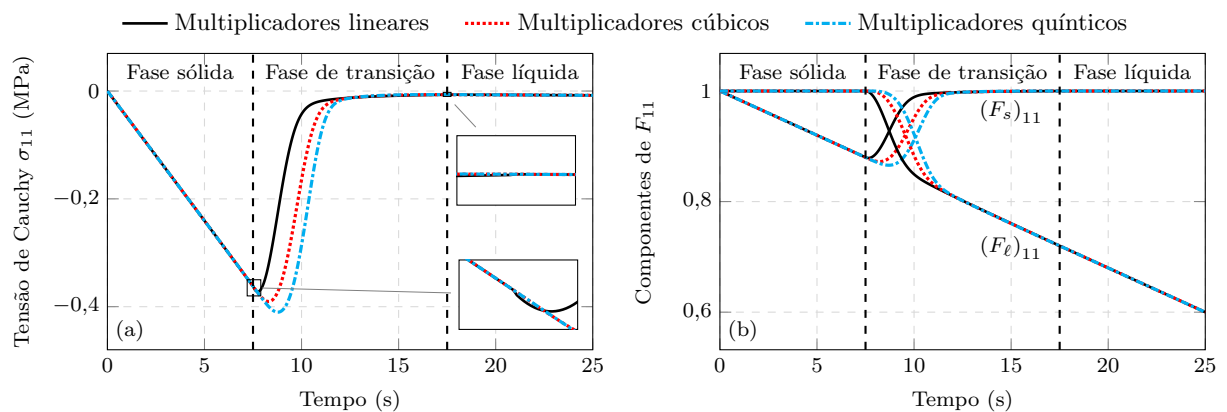
Vale observar que quebras de continuidade ou de suavidade não necessariamente indicam uma falha no modelo, mas sim uma característica intrínseca do mesmo. Ao aplicá-lo em um contexto prático, é importante verificar o comportamento do material analisado e utilizar o modelo que melhor se adequa a ele, seja contínuo ou não. Neste trabalho, são caracterizadas apenas algumas opções de multiplicadores, mas as possibilidades de ajustes são infinitas.

9.2.7.2 Problema local de deformação monotônica com fusão

Este exemplo é similar ao anterior, porém, com mudança da fase sólida para a líquida. Mantêm-se as deformações prescritas, os parâmetros do material (Tabela 16), os tempos máximos de análise, e a discretização temporal, porém, neste caso, as temperaturas variam linearmente de 0°C para 50°C ao longo do tempo.

Os resultados para os três valores de t_{\max} são apresentados nas Figuras 144 a 146. Dado que as tensões na fase sólida são maiores em comparação com a fase líquida, e aumentam progressivamente com as deformações, a alteração no perfil de transição em relação ao exemplo anterior é esperada. 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 quárticos.

Figura 144 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,016 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 2^\circ\text{C/s}$

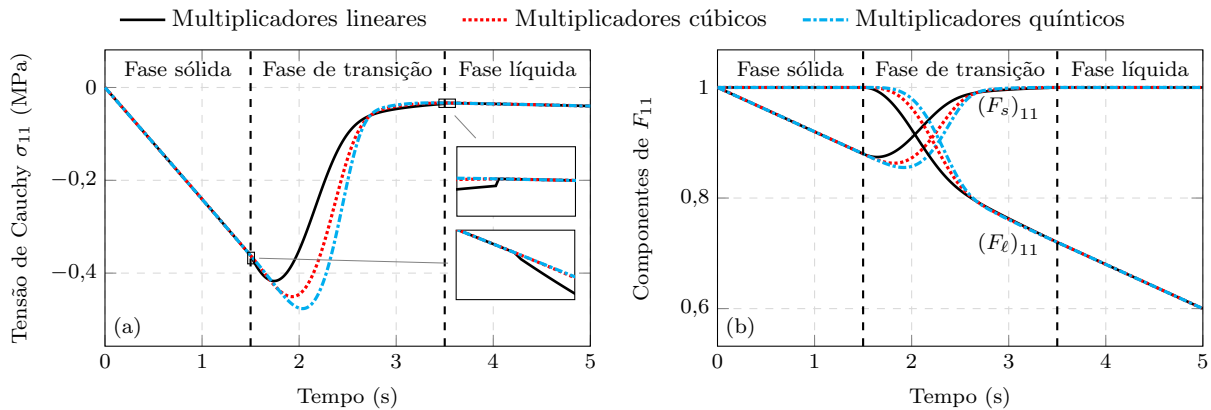


Fonte: Elaborado pelo autor

Nos gráficos de $(F_s)_{11}$ e $(F_\ell)_{11}$, observa-se 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.

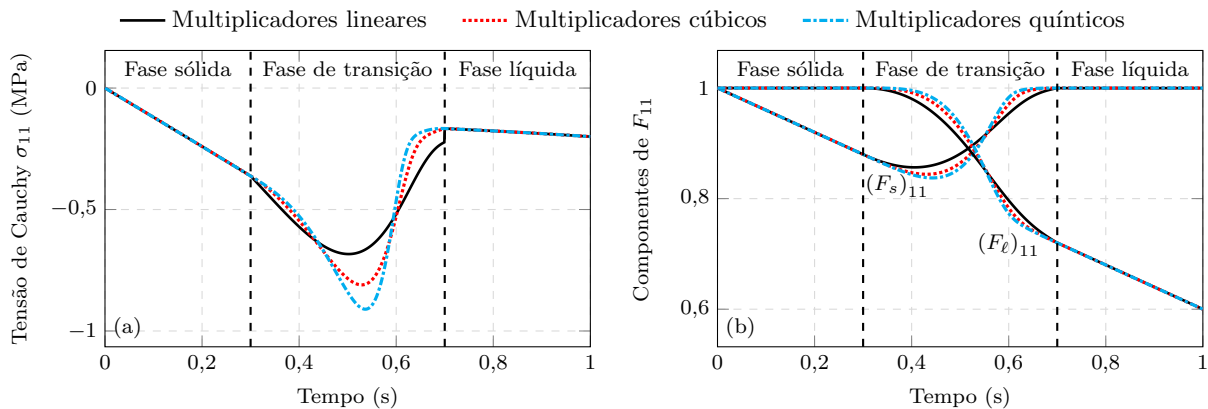
As descontinuidades e quebras de suavidade são análogas às observadas no exemplo anterior, ocorrendo nas mesmas transições de fases para os mesmos casos, com diferença apenas quando $t_{\max} = 25 \text{ s}$ (Figura 144), onde a mudança de inclinação da curva de

Figura 145 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,08 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 10 \text{ }^\circ\text{C/s}$



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 146 – (a) Tensão de Cauchy uniaxial e (b) componentes sólida e líquida de F_{11} ao longo do tempo, para os casos com $\dot{\epsilon}_{11} = -0,4 \text{ s}^{-1}$ e $\dot{\theta} = 50 \text{ }^\circ\text{C/s}$



Fonte: Elaborado pelo autor

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 $t_{\max} = 1 \text{ s}$.

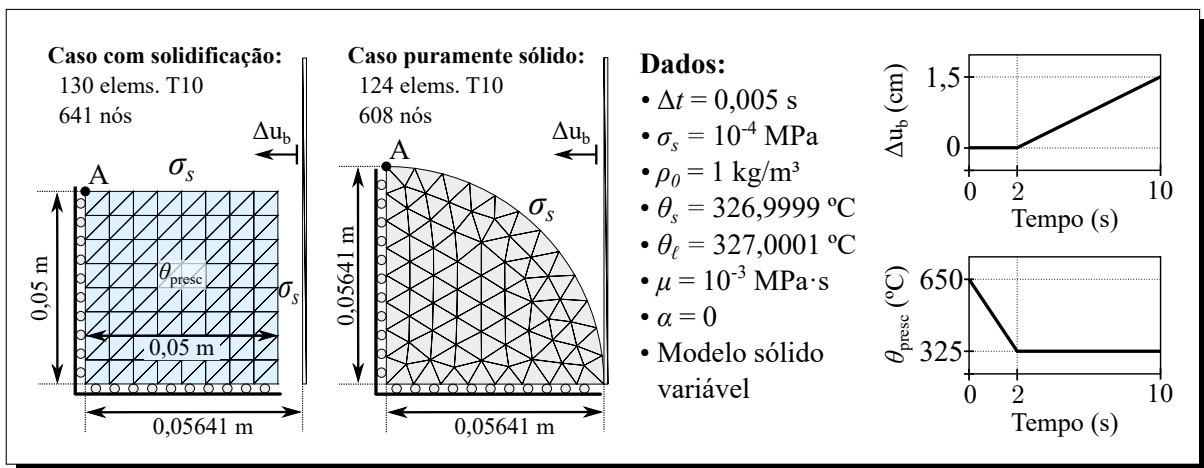
9.2.7.3 Compressão diametral de cilindro solidificado

Este exemplo possui como principal objetivo verificar a consistência cinemática do modelo em uma análise bidimensional. Inicialmente, simula-se 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 compressão diametral por meio do contato com duas paredes rígidas paralelas que se aproximam em direção ao centro do cilindro. Em uma outra análise, simula-se um sólido, já no formato cilíndrico e com raio equivalente, submetido ao mesmo efeito. Durante a fase sólida, os

dois casos tratam-se essencialmente do mesmo problema, mas partem de históricos de fases e configurações iniciais diferentes – retangular líquida no primeiro, e circular sólida no segundo. Para que o modelo numérico aplicado ao problema de fluido e à mudança de fase sejam consistentes, é necessário que as duas respostas coincidam apesar das diferentes referências Lagrangianas.

Os dados do exemplo para as duas análises são dispostos na [Figura 147](#), incluindo as malhas utilizadas. Aproveitando-se da simetria, apenas um quadrante da geometria é discretizado, 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, desconsideram-se o peso próprio e demais forças externas além da tensão superficial, bem como o efeito da contração térmica. A análise é dinâmica, sendo utilizado o integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$. Além disso, aplica-se a estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1$.

Figura 147 – Compressão diametral de cilindro solidificado: dados do exemplo



Fonte: Elaborado pelo autor

Para o caso com solidificação, impõe-se uma temperatura uniforme sobre o 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 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, aplica-se o movimento à parede rígida, que entra em contato com o sólido, provocando a compressão diametral. Conforme ilustrado na [Figura 147](#), a parede desloca-se 1,5 cm ao longo de 8 s, correspondendo a uma velocidade de módulo $1,875 \cdot 10^{-3}$ m/s.

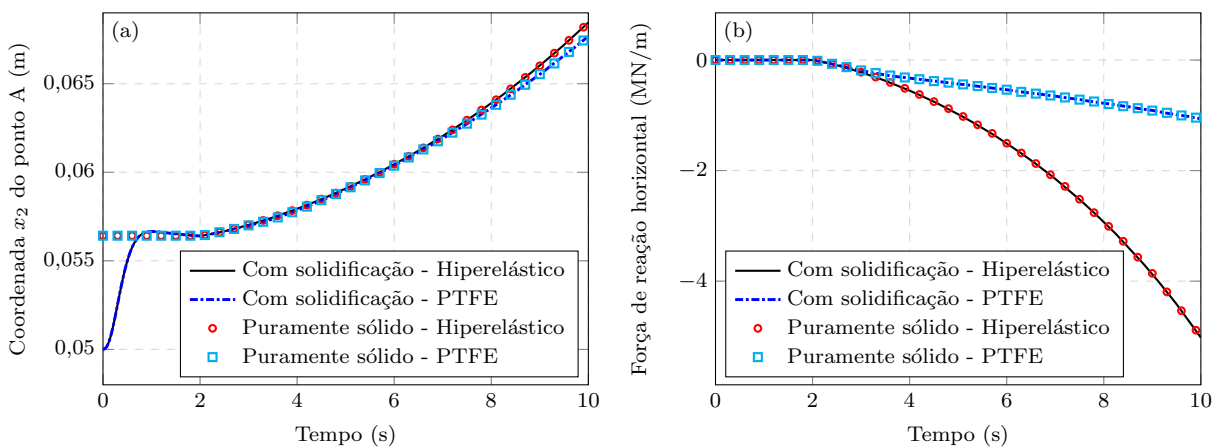
No caso puramente sólido, desconsidera-se a variação térmica, e mantém-se uma configuração praticamente estática nos 2 segundos iniciais antes do início da prensagem. Para garantir a objetividade da comparação, a tensão superficial é aplicada neste caso

também. Como seu efeito no sólido é muito pequeno, a mudança de forma que ocorre antes do contato é desprezível.

Para demonstrar a consistência da formulação em diferentes cenários, são considerados dois materiais para a fase sólida. No primeiro, utiliza-se um modelo hiperelástico incompressível com $G = 160$ MPa. No segundo cenário, é aplicado 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. Em todos os cenários considerados, aplica-se o estado plano de deformação (EPD).

Na Figura 148(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 Figura 148(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 148 – Compressão diametral de cilindro solidificado: (a) Coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo



Fonte: Elaborado pelo autor

As configurações deformadas dos problemas, com componente σ_{11} da tensão de Cauchy em mapa de cores, estão apresentadas nas Figuras 149 e 150 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 149 – Compressão diametral de cilindro solidificado: configurações deformadas para o material hiperelástico, com σ_{11} em mapa de cores

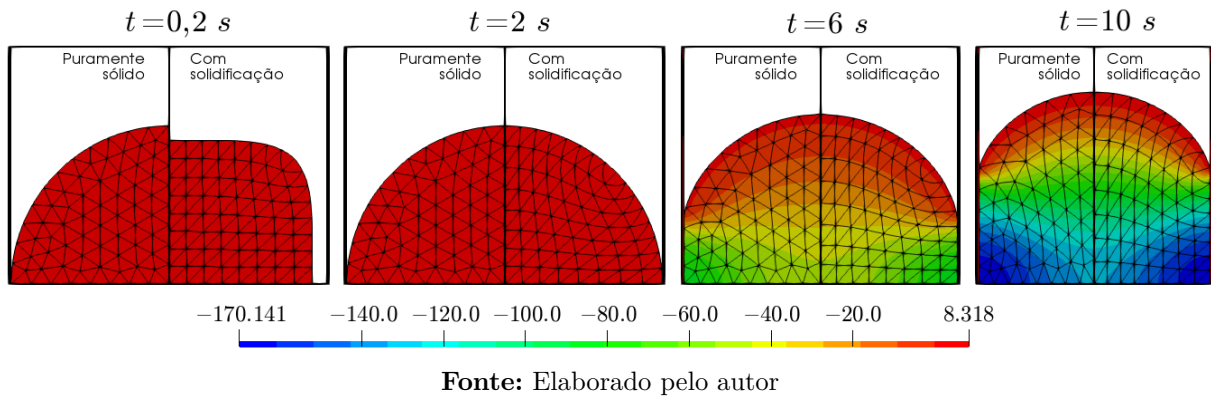
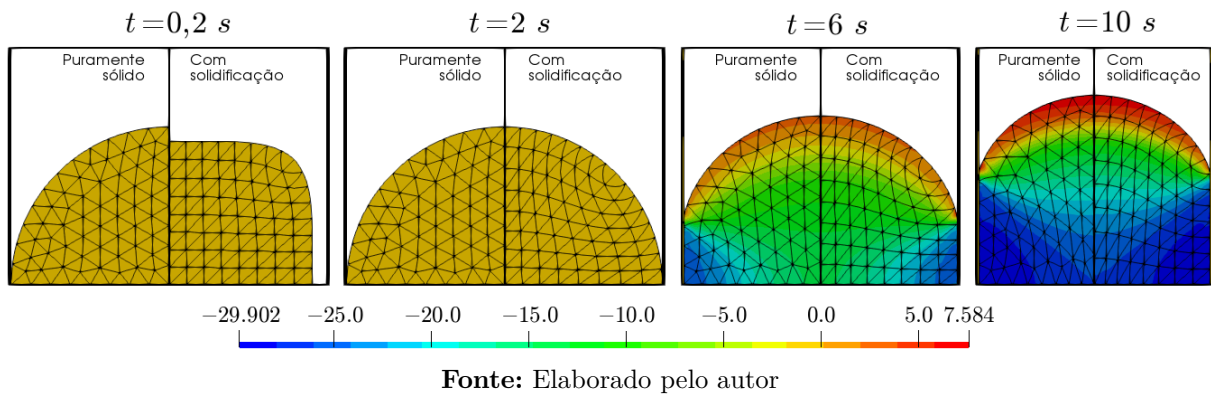


Figura 150 – Compressão diametral de cilindro solidificado: configurações deformadas para o PTFE, com σ_{11} em mapa de cores



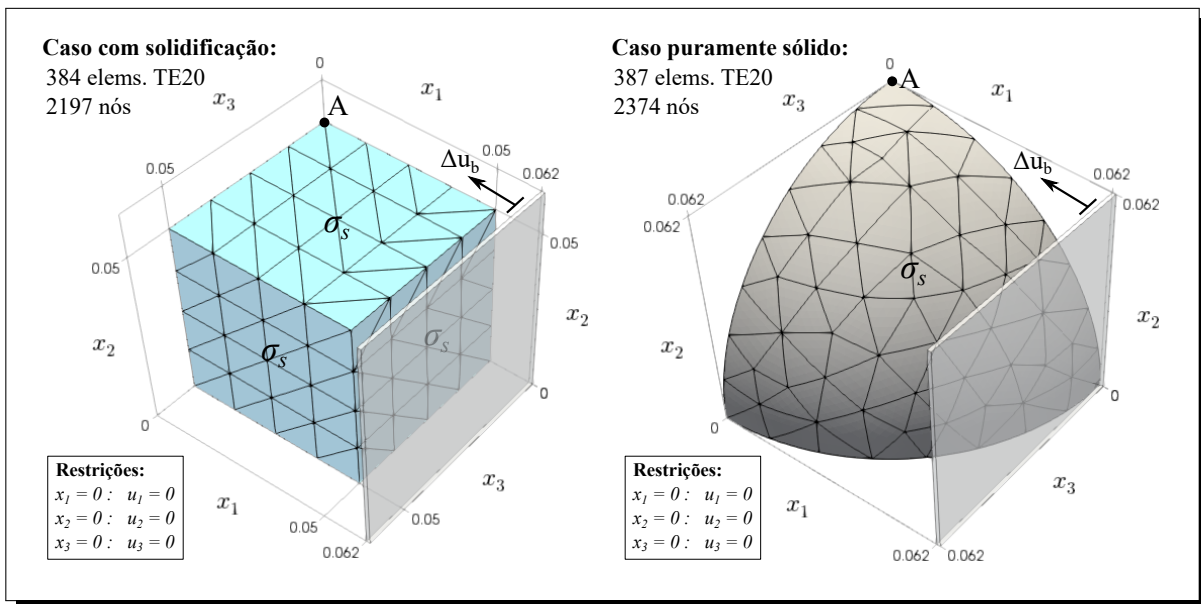
9.2.7.4 Compressão diametral de esfera solidificada

Similarmente ao exemplo anterior (9.2.7.3), este caso busca verificar a consistência cinemática do modelo, mas desta vez em uma análise tridimensional. Simula-se 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 compressão diametral por duas paredes rígidas paralelas que se movem em direção ao centro da esfera. Novamente, a resposta é comparada 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 Figura 151, 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 (subseção 9.2.7.3). Porém, neste caso, analisa-se 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 151 – Compressão diametral de esfera solidificada: dados geométricos e condições de contorno



Fonte: Elaborado pelo autor

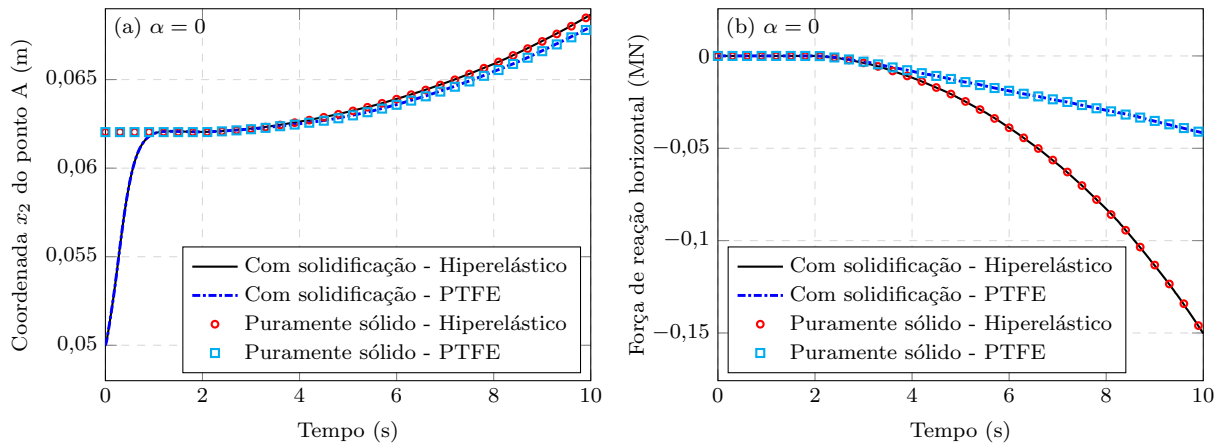
Assim como no exemplo anterior, utiliza-se como base de comparação os gráficos da coordenada x_2 no ponto A e força de reação horizontal (eixo x_1) ao longo do tempo. Esses gráficos são mostrados nas Figuras 152 e 153 para os casos com $\alpha = 0$ e $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, respectivamente. O primeiro caso apresenta perfis similares aos do exemplo anterior. Já no segundo caso, nota-se 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, conseqüentemente 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.

Nas Figuras 154 a 157, são apresentadas as configurações deformadas para todas as variações consideradas de materiais e dos coeficientes α . Para cada instante selecionado, apresenta-se 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.

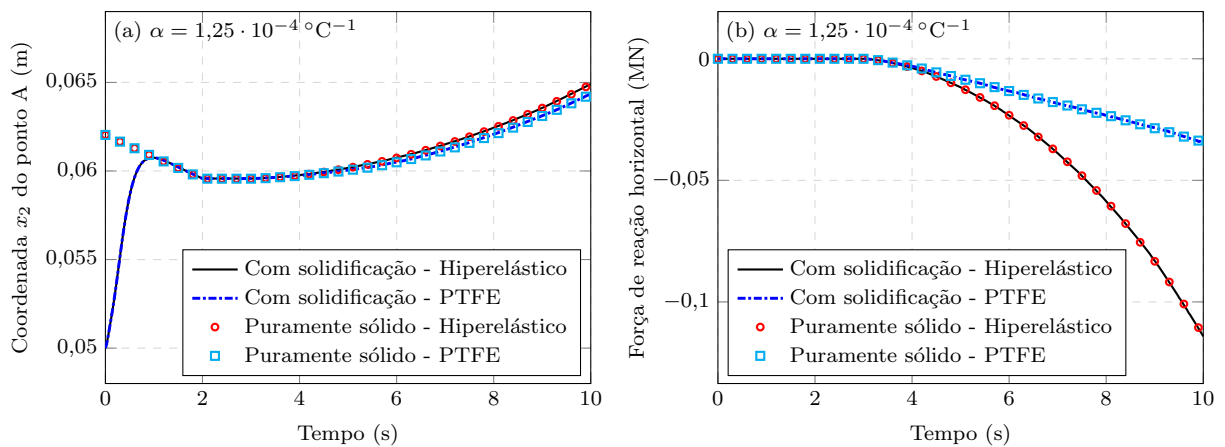
A parede rígida foi omitida das figuras para não obstruir a visualização dos resultados, mas o efeito da compressão diametral é evidente nos instantes de 6 e 10 segundos. O impacto da contração térmica nas configurações deformadas é sutil, mas a variação no

Figura 152 – Compressão diametral de esfera solidificada: (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo para $\alpha = 0$



Fonte: Elaborado pelo autor

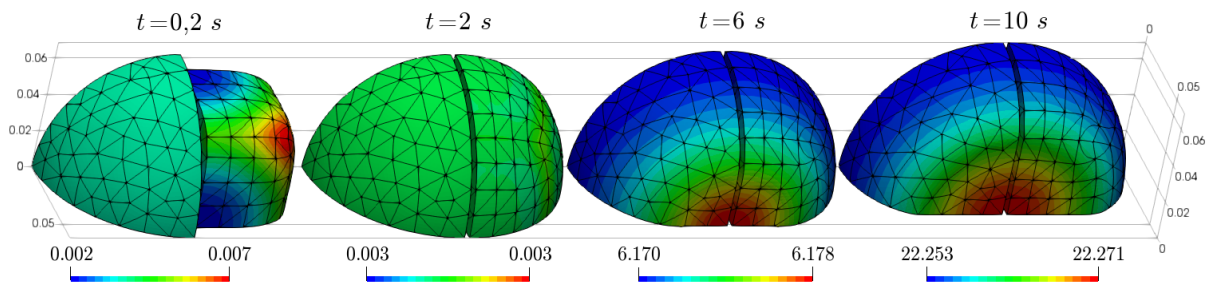
Figura 153 – Compressão diametral de esfera solidificada: (a) coordenada x_2 no ponto A e (b) força de reação horizontal ao longo do tempo para $\alpha = 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$



Fonte: Elaborado pelo autor

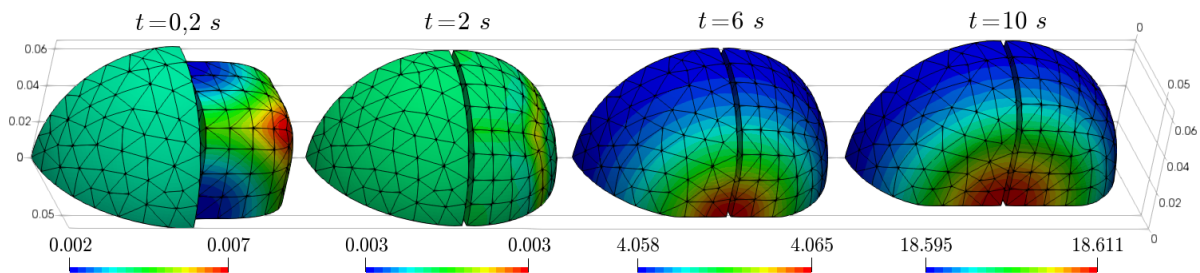
volume pode ser percebida ao comparar as configurações do caso puramente sólido nos instantes de 0,2 e 2 segundos das Figuras 155 e 157.

Figura 154 – 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



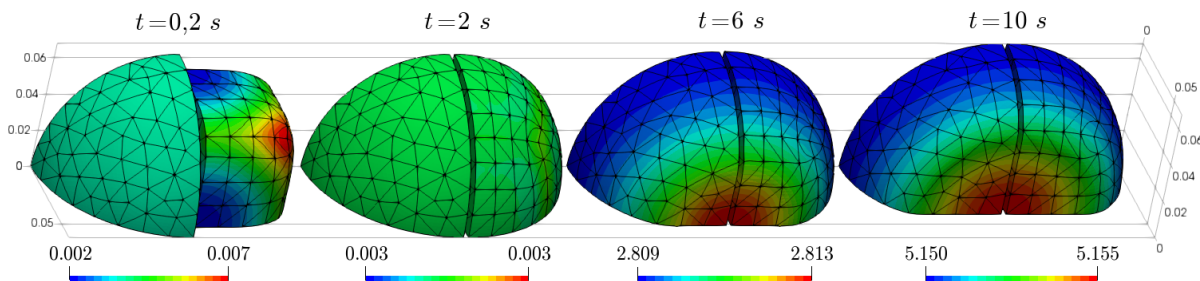
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 155 – 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



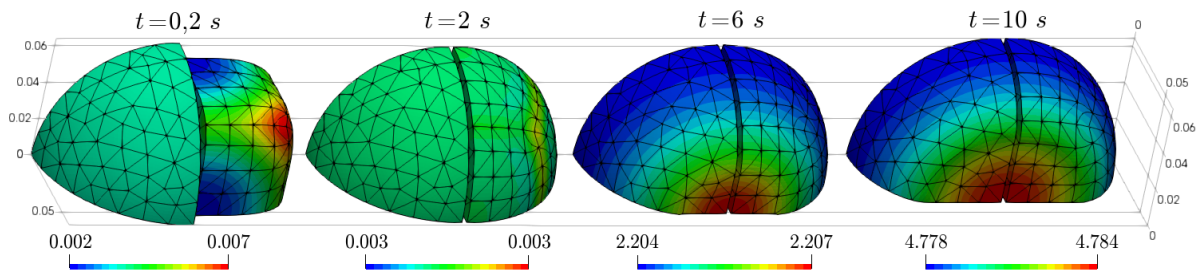
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 156 – 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



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 157 – 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



Fonte: Elaborado pelo autor

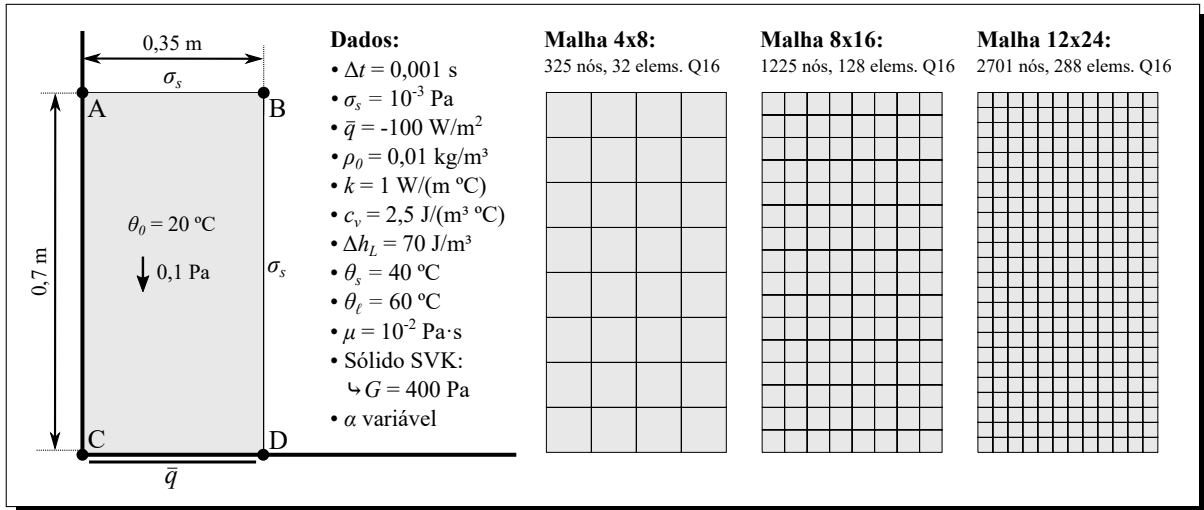
9.2.7.5 Derretimento de coluna: caso 2D

Nesta seção, propõe-se uma generalização do problema apresentado na [subseção 8.3.2.2](#), incorporando a mudança de fase. Neste caso, o domínio é inicialmente sólido e, através de um fluxo de calor aplicado na face 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 [Figura 158](#), incluindo geometria, condições de contorno, e parâmetros do material e da análise. As forças aplicadas incluem apenas o peso próprio e uma tensão superficial, sendo considerados constantes ao longo do tempo. Para a fase sólida, onde a rigidez é elevada, espera-se que essas forças provoquem apenas pequenas deformações. Assim, opta-se por utilizar a lei de Saint Venant-Kirchhoff nessa fase, com

estado plano de deformações (EPD). Novamente, considera-se uma análise dinâmica, sendo utilizado o integrador de Newmark- β com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$, e aplica-se a estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1$.

Figura 158 – Derretimento de coluna 2D: dados do exemplo



Fonte: Elaborado pelo autor

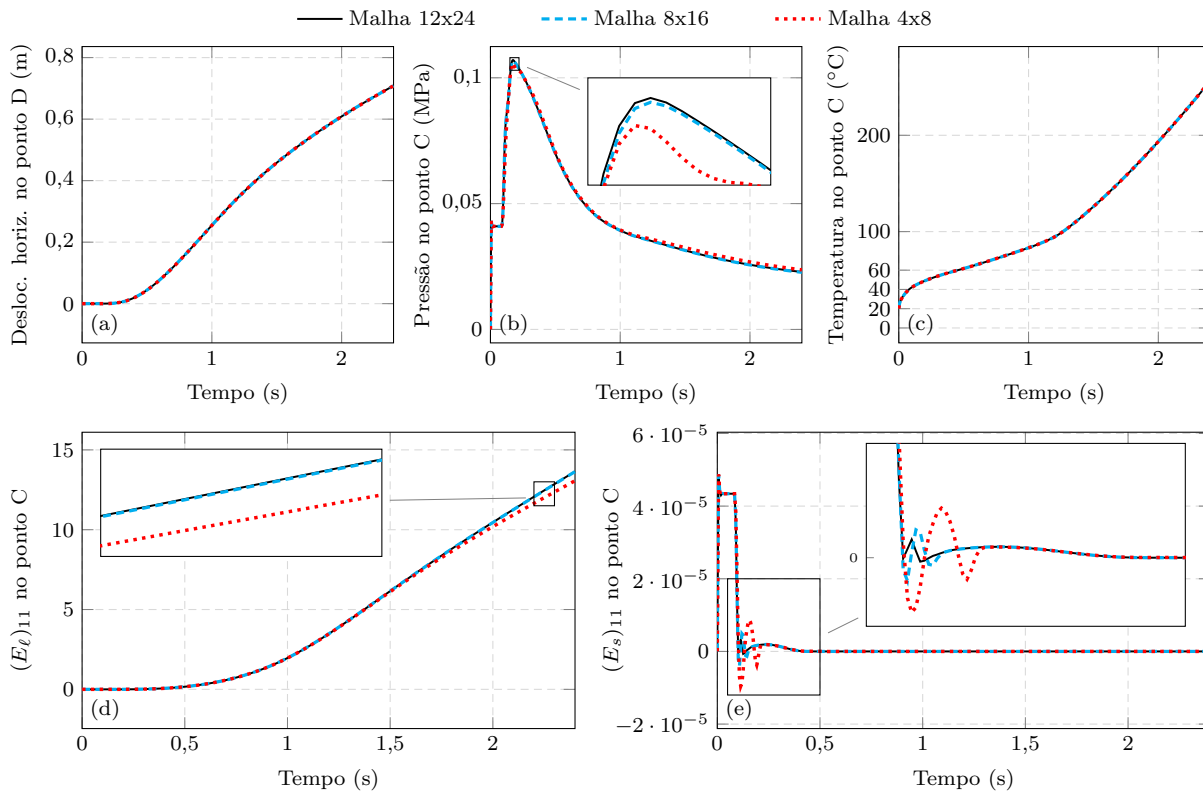
Inicialmente, realiza-se uma análise com o objetivo de verificar a sensibilidade dos resultados à discretização espacial, considerando as três malhas distintas da [Figura 158](#). Nesta análise, não é aplicada expansão térmica, e utiliza-se apenas o modelo com multiplicadores quárticos ([Tabela 15](#)) para a fase de transição.

Na [Figura 159\(a\)](#), são apresentados os gráficos de deslocamento horizontal no ponto D (canto inferior direito) ao longo do tempo, que mostram resultados idênticos para as três malhas consideradas. 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.

Os demais gráficos apresentados na [Figura 159](#) são referentes ao ponto C (canto inferior esquerdo), registrando a evolução temporal da pressão, da temperatura, e das componentes líquida e sólida da componente horizontal de deformação de Green-Lagrange – $(E_s)_{11}$ e $(E_\ell)_{11}$, respectivamente. Nesses casos, percebe-se uma maior sensibilidade das respostas em relação à malha, com exceção do gráfico de temperatura, indicando uma maior estabilidade do problema térmico em relação ao problema mecânico, para as malhas consideradas.

A [Figura 160](#) ilustra a evolução do derretimento da coluna, mostrando as configurações deformadas em determinados instantes da análise para a malha mais refinada (12x24), com fases indicadas em mapa de cores. Nos primeiros instantes, onde o material encontra-se completamente na fase sólida, ou no início da fase de transição, a coluna permanece em uma configuração muito semelhante à inicial. À medida que o calor continua a ser aplicado pela base, o material começa a transitar para a fase líquida, causando um aumento gradual nas deformações. Esse processo progride de baixo para cima, levando à formação de uma

Figura 159 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes malhas, com $\alpha = 0$ e multiplicadores quínticos

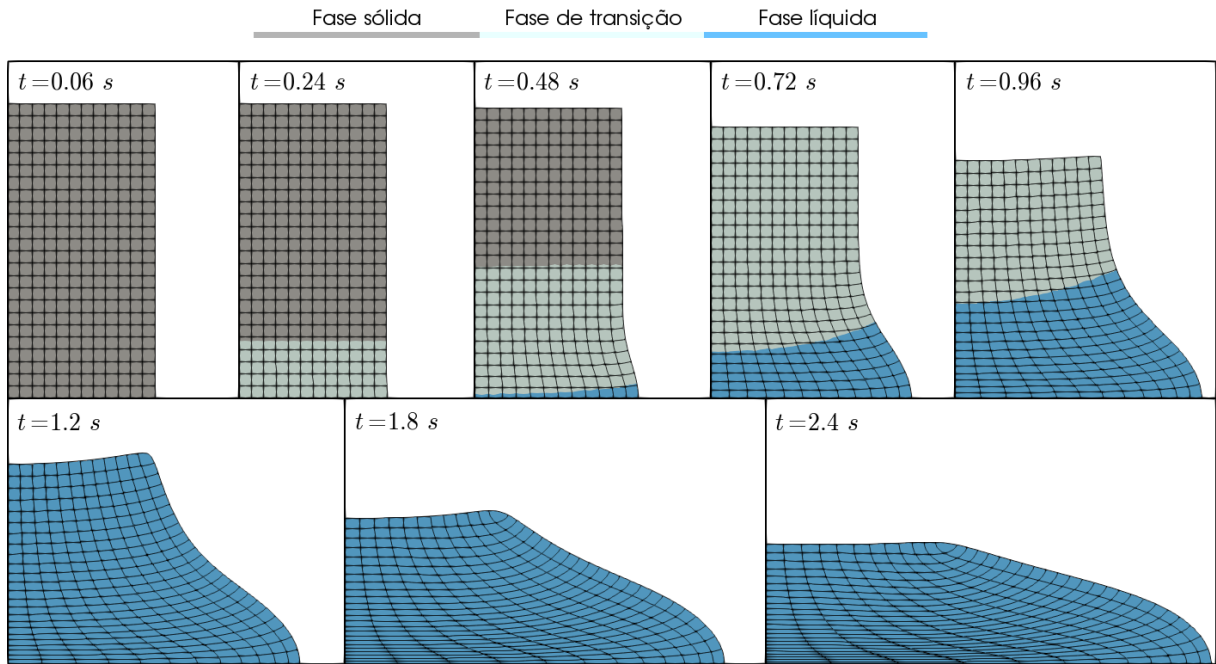


Fonte: Elaborado pelo autor

região líquida em expansão e ao deslocamento gradual do material sólido remanescente. Nota-se que as regiões da fase de transição mais próximas da fase líquida, onde a fração líquida é maior, exibem deformações mais expressivas, enquanto as regiões mais próximas da fase sólida exibem deformações menores. Esse comportamento reflete a continuidade e suavidade do modelo constitutivo proposto para a fase de transição.

A [Figura 161](#) ilustra os campos de pressão para os mesmos instantes selecionados anteriormente, permitindo observar como a pressão se comporta para cada perfil de distribuição de fases. Em quase todos os instantes, observa-se uma concentração de pressão no ponto B (canto superior direito), devido à tensão superficial atuante. Fora esse efeito, os maiores valores positivos de pressão são geralmente localizados na base, mais especificamente no ponto C. À medida que o tempo avança, e o material começa a aquecer, surgem valores negativos de pressão aproximadamente na interface entre a região sólida e de transição, onde o material está sendo tensionado devido ao alongamento causado pelo derretimento das regiões inferiores. Quando o domínio se torna totalmente líquido, a distribuição tende a assumir um perfil similar ao do exemplo de barragem apresentado na [subseção 8.3.2.2](#), com pressão próxima a zero nas superfícies livres e maior quanto mais próximo do ponto C. A concentração de pressão no ponto B se dispersa à medida que o mesmo avança para a fase líquida, havendo uma tendência gradual de suavização do canto

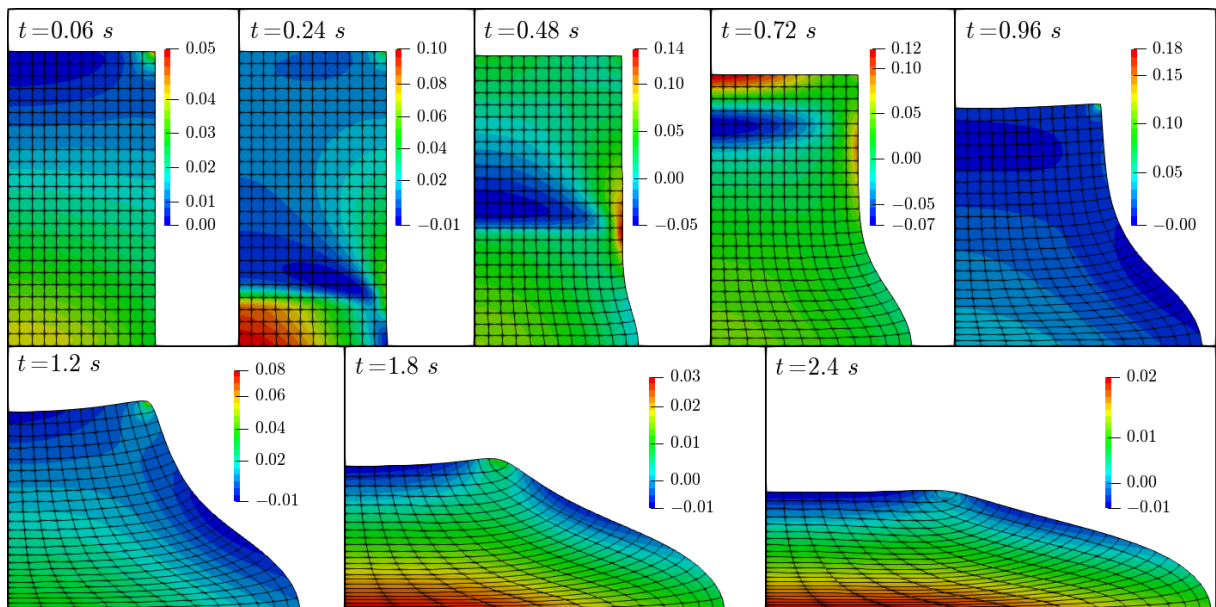
Figura 160 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com fases em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 0$, e multiplicadores quárticos



Fonte: Elaborado pelo autor

devido à tensão superficial.

Figura 161 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com pressões (Pa) em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 0$, e multiplicadores quárticos

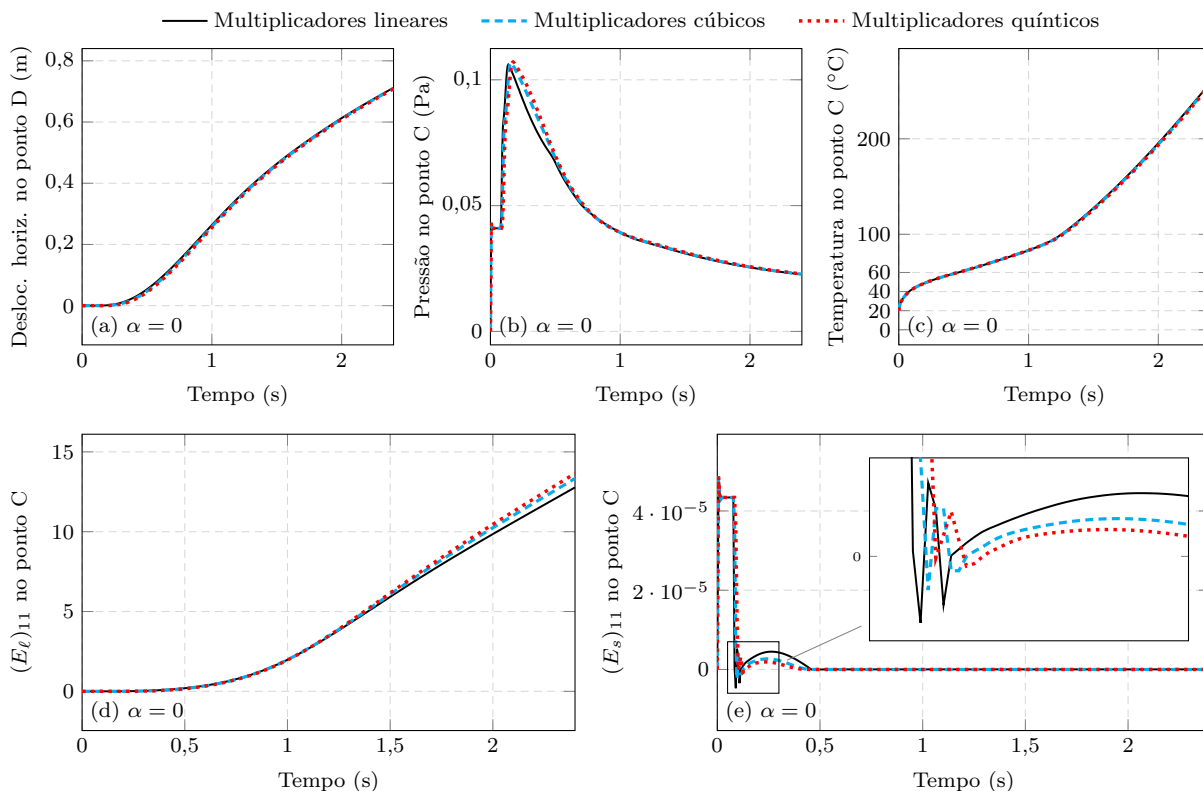


Fonte: Elaborado pelo autor

Em uma segunda análise, fixa-se a malha 12x24, e aplicam-se os três modelos de multiplicadores da Tabela 15, ainda utilizando $\alpha = 0$. Os gráficos dessa análise são apresentados na Figura 162. Novamente, observa-se uma baixa variação na história de deslocamento e

de temperatura em relação ao modelo empregado, com diferenças mais perceptíveis nos gráficos de pressão, $(E_s)_{11}$ e $(E_\ell)_{11}$. As diferenças de pressão são mais significativas nos instantes em que o ponto C encontra-se na fase de transição (aproximadamente de 0,1 a 0,5 segundos). A transição desse gráfico para a fase líquida demonstra ser suave para os modelos com multiplicadores cúbicos e quárticos. Já para o modelo com multiplicadores lineares, nota-se uma variação na inclinação da curva aproximadamente em 0,5 segundos. O mesmo comportamento pode ser observado no gráfico de $(E_s)_{11}$.

Figura 162 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores, com $\alpha = 0$ e malha 12x24

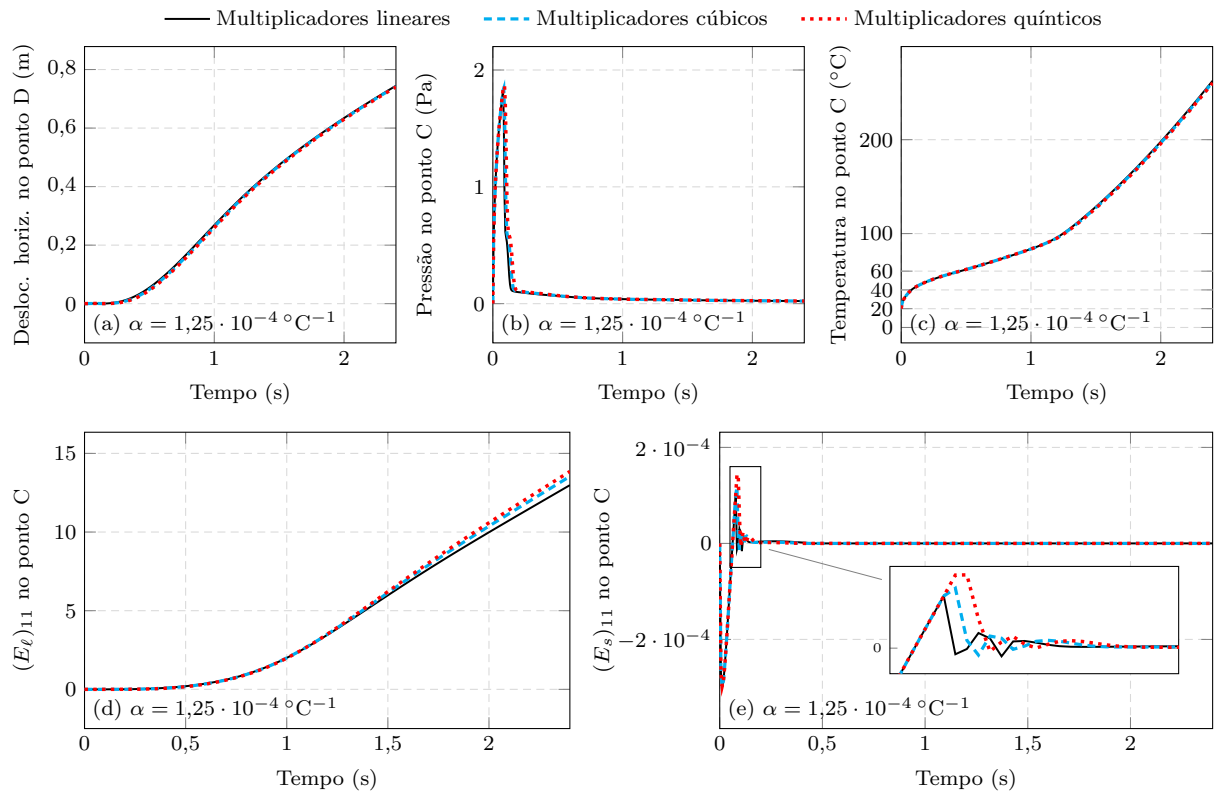


Fonte: Elaborado pelo autor

Por fim, é incorporada a expansão térmica exponencial com $\alpha = 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Novamente, são analisados os três diferentes modelos de multiplicadores, fixando-se a malha 12x24. Os gráficos dessa análise são apresentados na Figura 163, e as configurações deformadas com o campo de pressão podem ser vistas na Figura 164. Como pode ser observado, a consideração da expansão térmica altera significativamente o perfil de pressão, especialmente durante a fase sólida. Além disso, os valores iniciais de $(E_s)_{11}$ na Figura 163(e) não apenas possuem magnitudes de valores diferentes em relação ao caso anterior, mas também sinais invertidos.

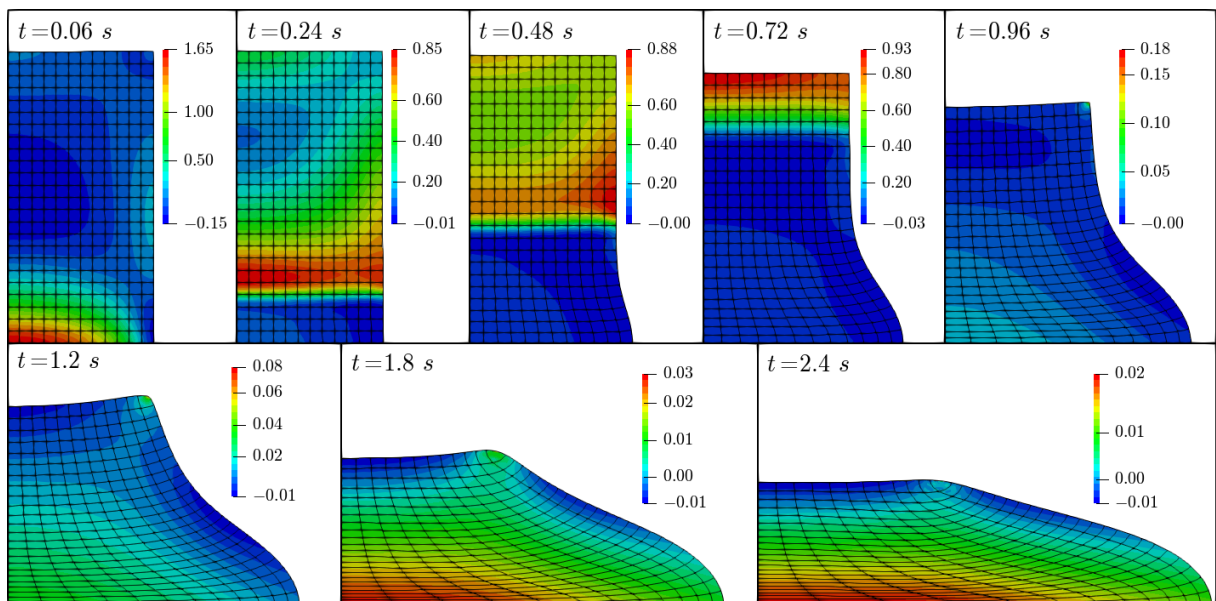
Essa alteração é muito influenciada pelo estado plano de deformação, que impõe restrições no eixo transversal, limitando a dilatação nessa direção. Como resultado, surgem deformações mecânicas de compressão para compensar a expansão térmica nesse eixo, o que leva ao aumento da magnitude na tensão e na pressão. Esse aumento é mais significativo

Figura 163 – Derretimento de coluna 2D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores, com $\alpha = 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ e malha 12x24



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 164 – Derretimento de coluna 2D: configurações deformadas com pressões (Pa) em mapa de cores, considerando malha 12x24, $\alpha = 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, e multiplicadores quinticos



Fonte: Elaborado pelo autor

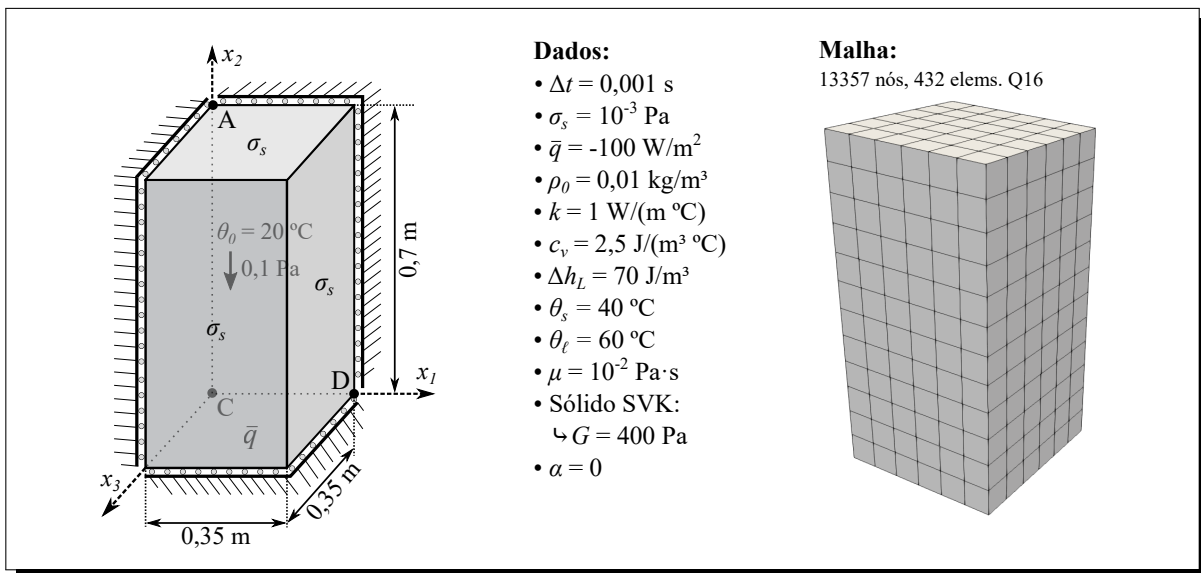
na fase sólida pois, nesse caso, as deformações mecânicas estão diretamente associadas às tensões. Já na fase líquida, as tensões se associam às taxas de deformação mecânica, que

são pequenas no eixo transversal. De fato, o campo de pressão para os instantes finais, quando o domínio é totalmente líquido, é similar ao caso sem expansão térmica, como pode ser visto comparando as Figuras 161 e 164.

9.2.7.6 Derretimento de coluna: caso 3D

Estendendo o exemplo anterior ao caso tridimensional, simula-se o derretimento de uma coluna com as condições dispostas na Figura 165. Todos os dados, exceto os geométricos, permanecem iguais aos do exemplo anterior (subseção 9.2.7.5), incluindo as forças e o calor aplicados, as propriedades do material e as condições gerais da análise. Entretanto, apenas o caso sem expansão térmica ($\alpha = 0$) é considerado.

Figura 165 – Derretimento de coluna 3D: dados do exemplo

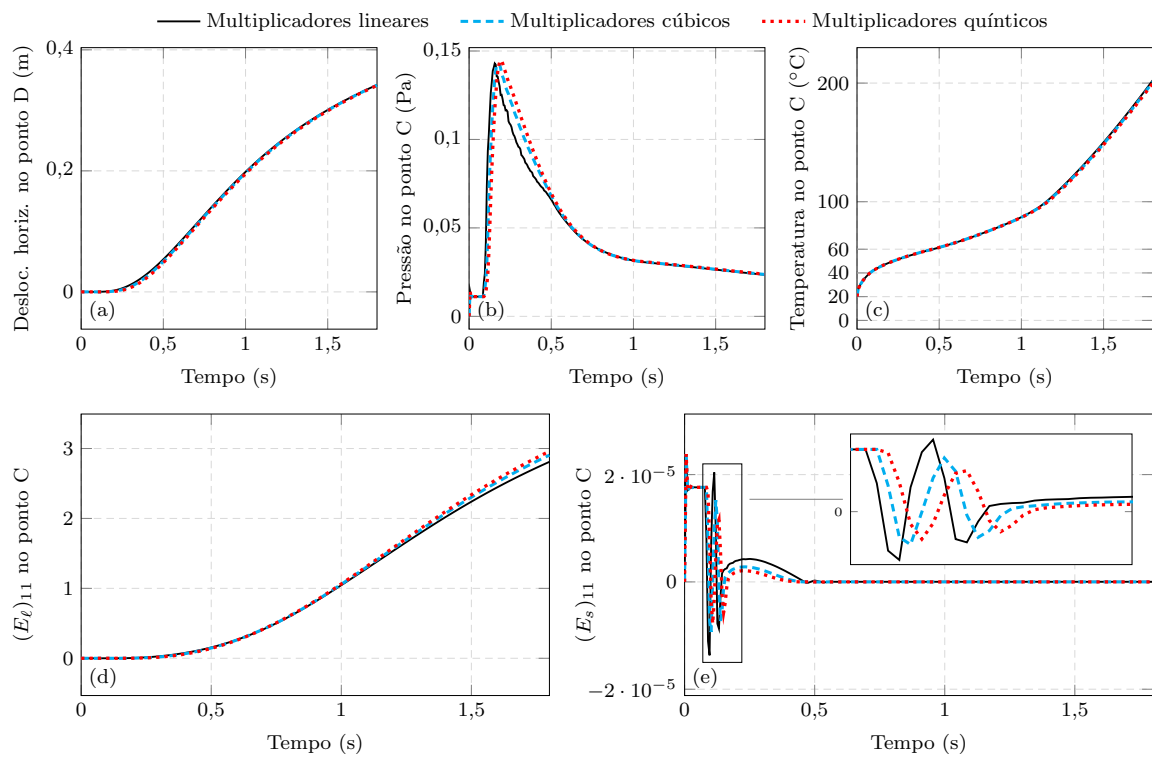


Fonte: Elaborado pelo autor

Os gráficos resultantes deste problema são apresentados na Figura 166. Apesar dos valores serem diferentes, esses gráficos mostram perfis similares aos do exemplo anterior, com exceção do gráfico de $(E_s)_{11}$, que exhibe oscilações mais acentuadas. Novamente, são perceptíveis as diferenças de suavidade das curvas entre o modelo com multiplicadores lineares e os demais modelos.

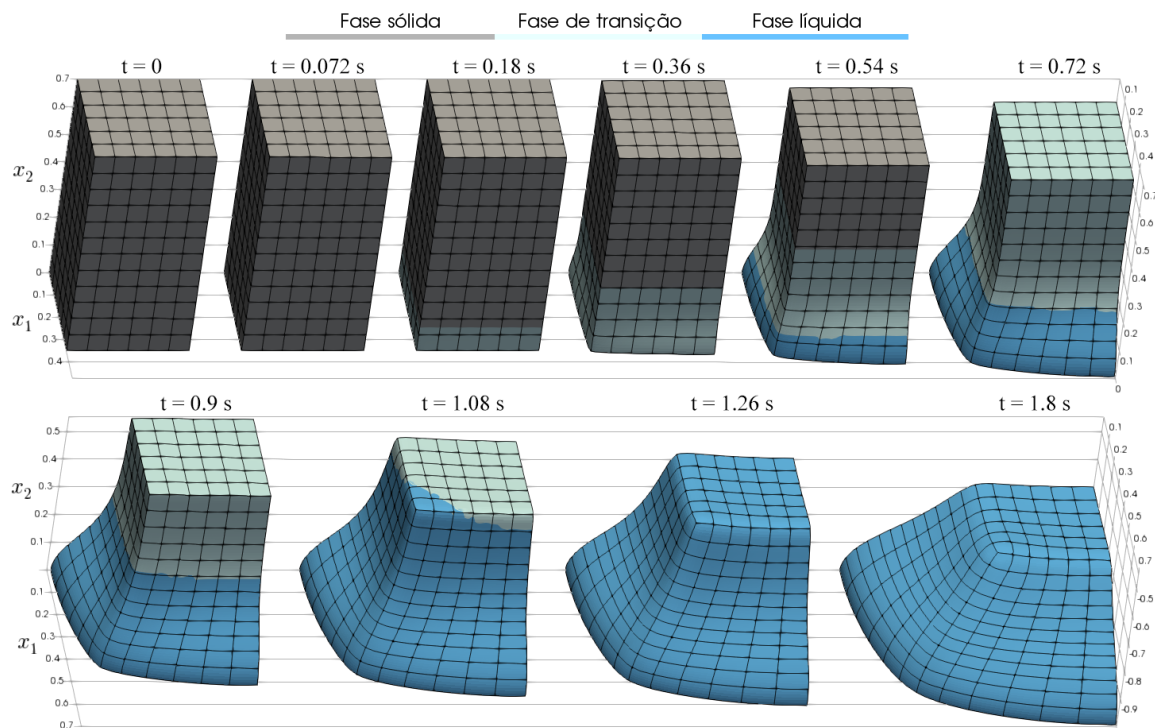
A progressão tridimensional do derretimento, ilustrada na Figura 167, exhibe comportamentos semelhantes aos observados no caso 2D, com a expansão progressiva da região líquida da base para o topo. Novamente, a evolução das deformações na fase de transição varia gradualmente de acordo com a proximidade às regiões sólida e líquida. Nessa figura, também pode-se observar o fenômeno de suavização da aresta vertical, que ocorre por conta da tensão superficial. Essa suavização é mais acentuada na fase líquida, causando um efeito de arredondamento na base da coluna derretida. Por outro lado, nas regiões sólidas, a aresta mantém-se intacta, devido à rigidez do material. Já na fase de transição, o arredondamento evolui gradualmente conforme a proximidade com a região líquida.

Figura 166 – Derretimento de coluna 3D: gráficos considerando diferentes modelos de multiplicadores



Fonte: Elaborado pelo autor

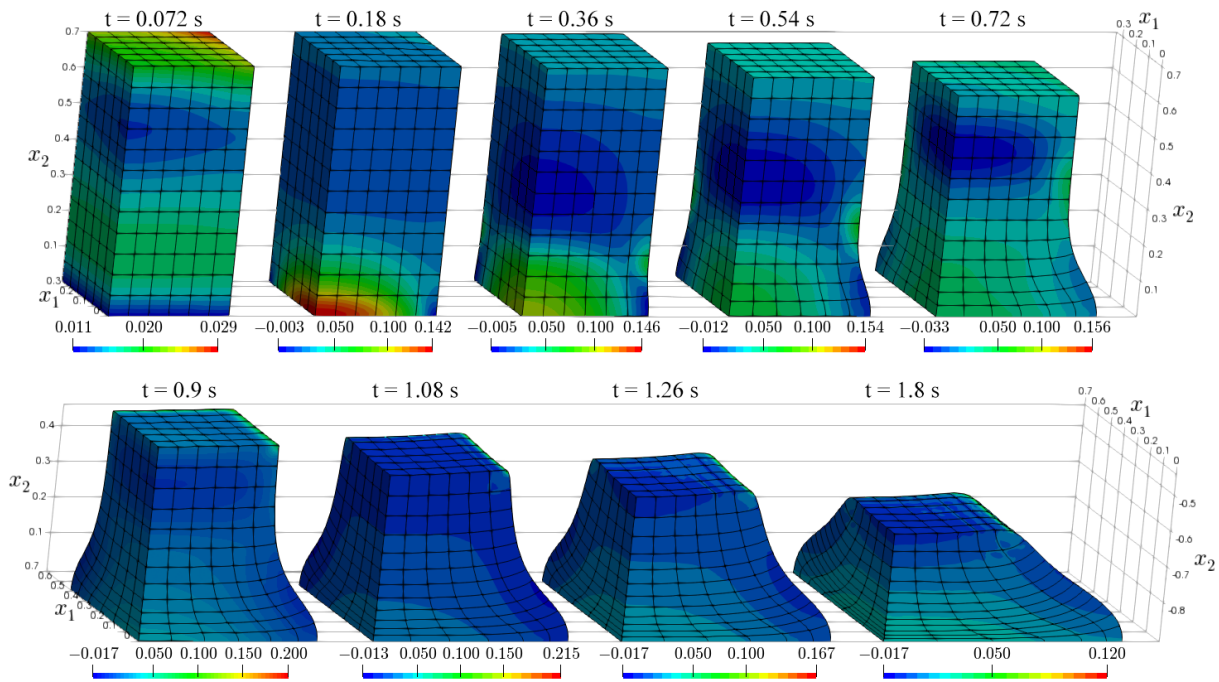
Figura 167 – Derretimento de coluna 3D: configurações deformadas com multiplicadores quínticos, e fases em mapa de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 168](#), são apresentados os campos de pressão em mapas de cores sobre a configuração deformada em uma vista que permite visualizar o ponto C. O perfil de pressão demonstra ser uma extensão natural do exemplo anterior para o caso tridimensional, com picos de valores positivos na base e nas arestas, devido à tensão superficial, e valores negativos ao redor da interface entre a fase sólida e a fase de transição.

Figura 168 – Derretimento de coluna 3D: configurações deformadas com multiplicadores quádruplos, e pressão (Pa) em mapa de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

9.2.7.7 Moldagem de material elasto-plástico solidificado

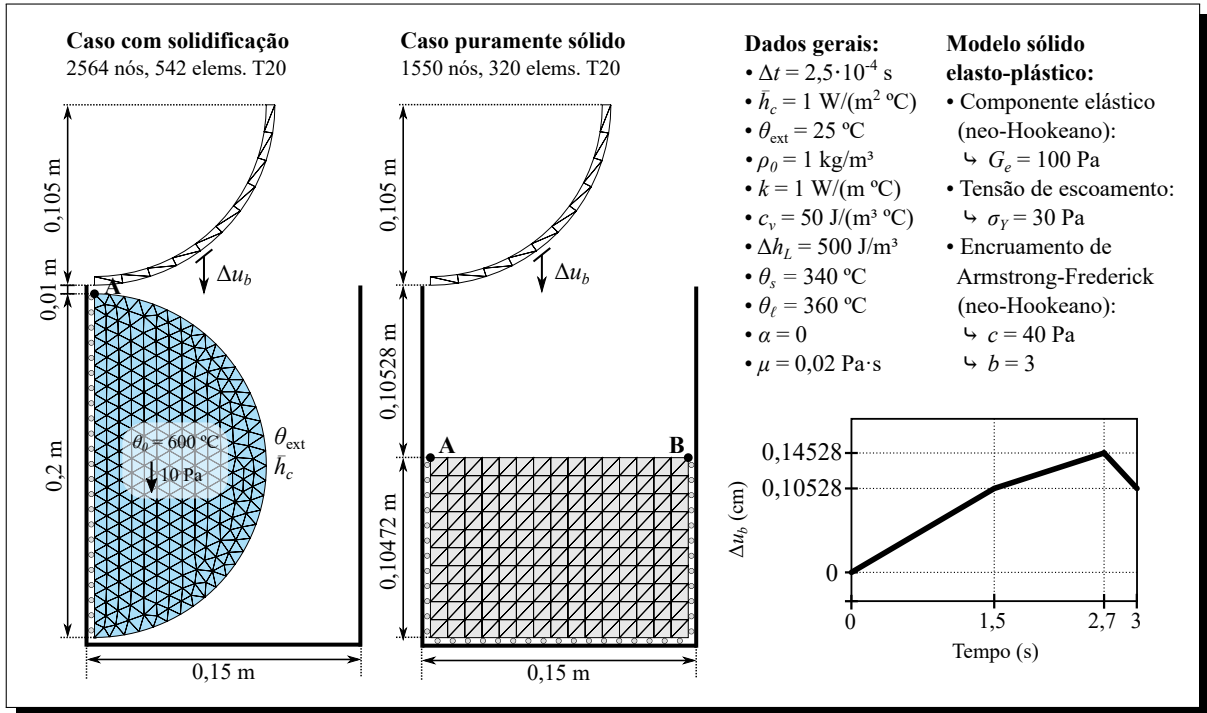
Nesta seção, analisa-se um problema complexo de moldagem que ocorre em várias etapas. Considera-se um material líquido em formato circular/cilíndrico, inicialmente aquecido a 600°C , injetado sobre um molde retangular através do seu peso próprio. Simultaneamente, o material é resfriado por convecção no contorno externo, com temperatura ambiente de 25°C , resultando eventualmente em sua solidificação. Em seguida, o material é prensado por um anteparo rígido com formato semi-circular, concluindo o processo de moldagem.

Assim como nas subseções [9.2.7.3](#) e [9.2.7.4](#), as respostas são comparadas com um caso puramente sólido, onde o material já possui formato retangular equivalente e encontra-se na fase sólida desde o início da análise. No entanto, é importante destacar que a equivalência entre os dois problemas é menos precisa neste caso, pois, no problema original, o formato anterior à prensagem não é exatamente retangular, exibindo leves curvaturas na interface superior.

Os dados do problema são apresentados na [Figura 169](#), sendo novamente aplicada uma análise dinâmica com parâmetros $\beta = 1$ e $\gamma = 1,5$, e estabilização PSPG com $\alpha_{\text{pspg}} = 1$.

Devido à simetria do problema, apenas metade do domínio é discretizada. Adota-se o modelo com multiplicadores quánticos para a fase de transição, e desconsidera-se o efeito da expansão/contração térmica.

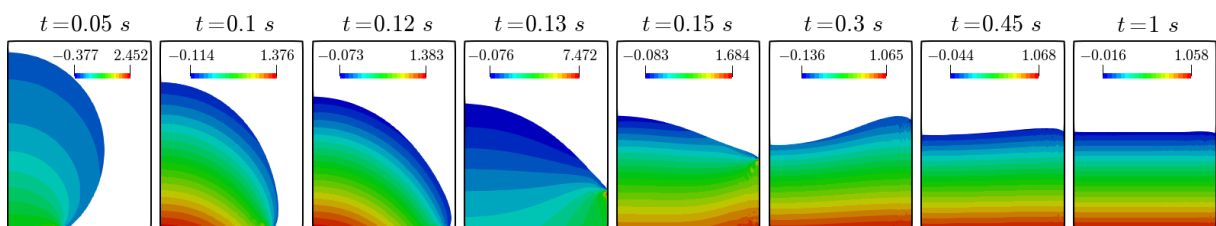
Figura 169 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: dados do exemplo



Fonte: Elaborado pelo autor

Na Figura 170, são apresentadas as configurações deformadas da etapa líquida do problema, onde o material é conformado no molde retangular. Embora a configuração no instante de 1 segundo seja bem próxima de um formato retangular, é perceptível uma curvatura no canto superior direito do domínio, próximo ao ponto de contato com a parede. Os campos de pressão são ilustrados em mapa de cores para todos os instantes, mostrando-se coerentes com o problema apresentado. Em particular, a distribuição de pressão em $t = 1$ s é consistente com a pressão hidrostática em um tanque contendo líquido, variando linearmente ao longo da altura.

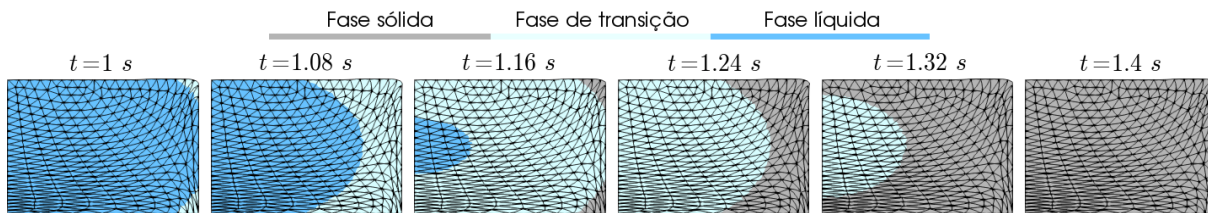
Figura 170 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa líquida do problema, com pressão (Pa) em mapas de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

O processo de solidificação ocorre aproximadamente entre 1 e 1,4 segundos da análise, onde as temperaturas alcançam valores entre 360 °C e 340 °C. Esse processo é ilustrado na [Figura 171](#), com as fases indicadas ao longo do domínio. Nessa etapa, a configuração deformada encontra-se praticamente estabilizada, não sendo observadas variações mecânicas significativas.

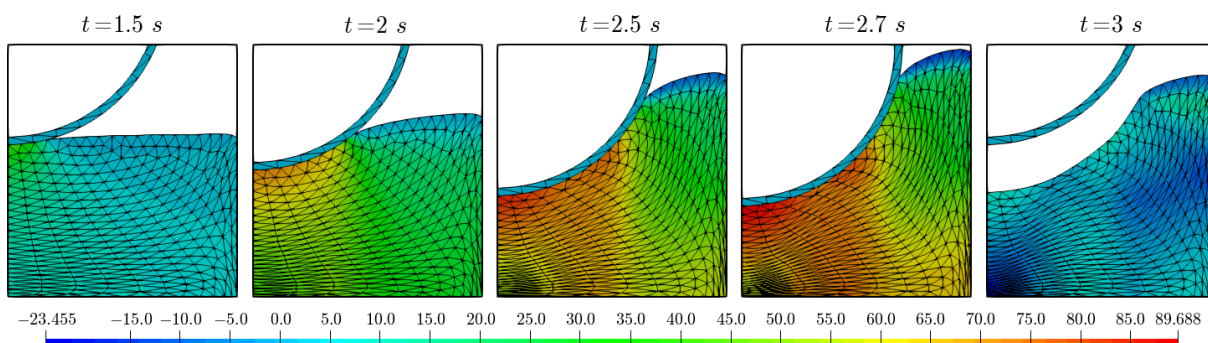
Figura 171 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa de mudança de fase do problema, com fases indicadas em mapas de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

O processo de moldagem após a solidificação é ilustrado na [Figura 172](#), com os campos de pressão ilustrados por mapa de cores. No instante de 2,7 segundos, o anteparo rígido atinge seu deslocamento máximo, o que também se reflete no aumento da pressão. Em seguida, o anteparo é gradualmente removido, revelando a configuração final do domínio. Por ser um material elasto-plástico, observa-se uma boa conformação do sólido à sua configuração deformada, demonstrando a eficácia da moldagem. No entanto, pressões residuais são notadas após a retirada do anteparo, decorrentes da redistribuição das tensões ao longo do processo.

Figura 172 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para a etapa pós-solidificação do problema, com pressão (Pa) em mapas de cores

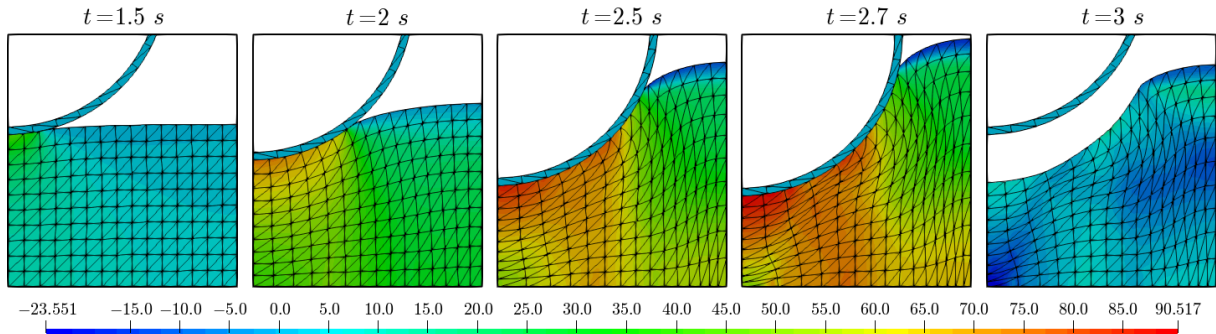


Fonte: Elaborado pelo autor

Na [Figura 173](#), são apresentados os mesmos instantes para o caso puramente sólido, podendo ser observada uma boa correspondência entre as configurações deformadas e as distribuições de pressão, apesar das diferenças geométricas discutidas anteriormente.

Por fim, a [Figura 174](#) apresenta as componentes horizontal e vertical da tensão normal de Cauchy no ponto A (canto superior esquerdo), e posição vertical do ponto B (canto superior direito) ao longo do tempo. Para o caso com solidificação, o ponto B não possui uma delimitação precisa, sendo tomado simplesmente como o nó mais elevado a entrar em

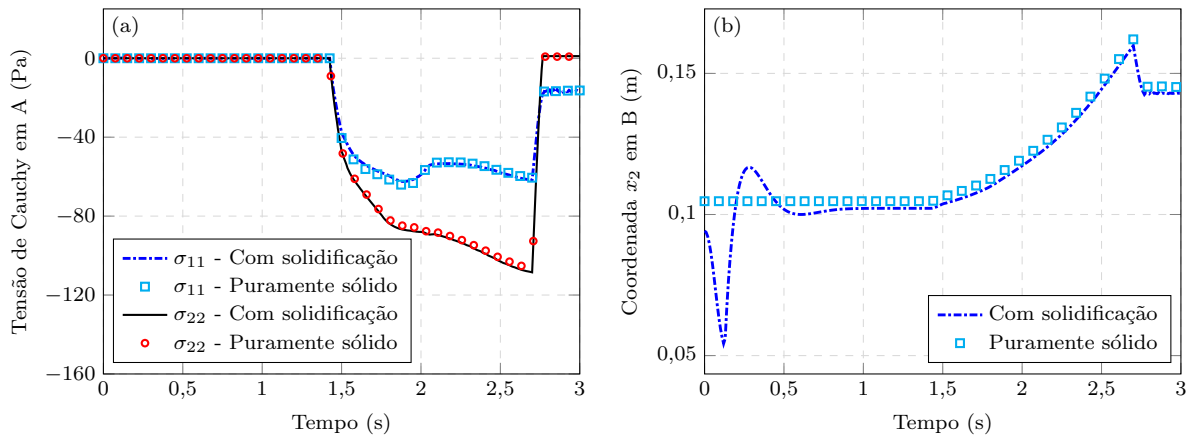
Figura 173 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: configurações deformadas para o caso puramente sólido, com pressão (Pa) em mapas de cores



Fonte: Elaborado pelo autor

contato com a parede direita. As figuras mostram os gráficos para o caso com solidificação e para o caso puramente sólido, permitindo uma comparação entre os dois cenários. A partir de aproximadamente 1,4 segundos, quando ambos passam a representar essencialmente o mesmo problema, as respostas apresentam uma concordância satisfatória, sendo as diferenças atribuídas ao fato de que a geometria dos sólidos não é exatamente igual nos dois modelos. Após 2,7 segundos, é possível observar na [Figura 174\(b\)](#) o *springback*, ou seja, o recuo da peça após a retirada do anteparo, refletindo a natureza elasto-plástica do material.

Figura 174 – Moldagem de material elasto-plástico solidificado: (a) Tensão de Cauchy em A e (b) coordenadas x_2 em B ao longo do tempo



Fonte: Elaborado pelo autor

Capítulo 10

Conclusão

Neste trabalho, foi desenvolvida uma ferramenta numérica utilizando o Método dos Elementos Finitos para a análise de problemas termomecânicos com mudança de fase, incluindo sólidos com modelo termo-viscoelástico-viscoplástico, fluidos Newtonianos incompressíveis e situações de contato. A formulação apresentada é totalmente Lagrangiana, termodinamicamente consistente, e adequada para problemas que envolvem grandes deformações, sendo empregadas cinemáticas baseadas na decomposição multiplicativa.

Os resultados deste trabalho podem ser melhor analisados separando-os em cinco grupos: modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico, modelos constitutivos termomecânicos, problemas de contato, materiais incompressíveis e mudança de fase.

10.1 Modelo viscoelástico-viscoplástico

Os desenvolvimentos relacionados ao modelo constitutivo viscoelástico-viscoplástico, neste trabalho, partiram do que já havia sido desenvolvido em [Carvalho \(2019\)](#), sendo realizada 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 ao PTFE realizada 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 apresentados por [Khan e Zhang \(2001\)](#). Conforme observado na [Figura 25](#), o modelo desenvolvido foi capaz de acomodar satisfatoriamente os resultados das quatro diferentes taxas de deformação consideradas, sendo constatada a importância da componente viscosa de encruamento cinemático. Em seguida, foi realizada a validação do modelo com resultados de ensaios de fluência e relaxação, também apresentados por [Khan e Zhang \(2001\)](#). 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](#). Observa-se, no entanto, que o componente viscoso do encruamento cinemático, apesar de ser necessário para representar o comportamento em diferentes taxas, introduziu um certo erro nos resultados após o primeiro intervalo de relaxação, demonstrando que esse componente ainda pode ser aprimorado para reduzir a queda nos valores de tensão ao

longo de intervalos de tempo muito grandes.

No contexto puramente numérico, realizou-se ainda uma avaliação da propriedade de conservação dos volumes inelásticos, onde concluiu-se que, para todos os casos considerados, os erros dos jacobianos apresentam 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 um exemplo tridimensional utilizando o método dos elementos finitos, sendo analisados aspectos numéricos como desempenho computacional, influência da discretização espacial 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.

10.2 Modelos constitutivos termomecânicos

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 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 termomecânico foi implementado utilizando um método particionado forte (implícito) do tipo bloco-iterativo. Observa-se, a partir dos resultados da [subseção 4.7.1](#), 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 incorporada no modelo constitutivo do sólido.

Esses modelos foram aplicados a um problema de viga biapoiada sujeita a variação de temperatura ([subseção 4.7.2](#)). Por ser um problema isostático, a expectativa inicial era de que as tensões resultantes fossem nulas. No entanto, isso foi observado apenas nos modelos que utilizam a lei de expansão térmica exponencial. Nos casos com expansão linear, foram observadas tensões residuais. Em ambos os casos, as deformações térmicas superaram significativamente as deformações mecânicas, minimizando as diferenças entre as decomposições aditiva e multiplicativa. Já na [subseção 4.7.3](#), o mesmo exemplo é apresentado considerando também carregamentos mecânicos, sendo possível observar diferenças maiores entre as duas decomposições.

Um problema termo-elástico com altos níveis de deformação foi proposto a fim de se analisar as limitações dos modelos adotados, conforme apresentado na [subseção 4.7.4](#). Concluiu-se, a partir desse exemplo, que os modelos baseados na decomposição aditiva

podem apresentar problemas de inversão do material, sendo, portanto, inadequados para casos com grandes deformações. O mesmo pode ser dito para modelos que utilizam a lei de expansão térmica linear, conforme já havia sido discutido na [seção 4.4](#). Já o modelo que emprega decomposição multiplicativa e lei de expansão térmica exponencial mostrou-se consistente mesmo nos elevados níveis de deformação a que foi submetido.

Foi então desenvolvido um modelo termo-viscoelástico-viscoplástico ([Capítulo 6](#)) por meio do acoplamento entre os modelos termomecânico e viscoelástico-viscoplástico considerados até então. Nesse modelo, foram utilizadas apenas a decomposição multiplicativa e a lei de expansão térmica exponencial. Observa-se que modelos termomecânicos inelásticos demandam um cuidado adicional, uma vez que sua natureza dissipativa é capaz de gerar calor ao sistema.

O modelo termo-viscoelástico-viscoplástico foi então aplicado em exemplos numéricos considerando o material PTFE ([seção 6.5](#)). Na [subseção 6.5.1](#), foram simulados novamente os ensaios de carregamento monotônico da [seção 5.7](#), mas dessa vez utilizando uma abordagem térmica, sendo permitida a variação de temperatura devido à dissipação mecânica. Os resultados indicaram um maior aumento de temperatura nos casos com maiores taxas de deformação, mas o efeito térmico demonstrou ter pouca influência sobre os gráficos de tensão-deformação nesse caso. Na [subseção 6.5.2](#), o modelo foi aplicado a um problema bidimensional de um cubo de PTFE parcialmente comprimido. Nessa análise, foram observadas maiores variações de temperatura nos cenários com menores taxas de carregamento, uma vez que as deformações nesses casos também são mais expressivas.

Grandezas relacionadas à energia também foram analisadas nos exemplos apresentados. A partir das relações termodinâmicas, as taxas de trabalho foram decompostas em componentes conservativas e dissipativas, permitindo a caracterização detalhada do trabalho dissipado em cada caso. Essa análise evidenciou a consistência da implementação numérica do modelo por meio da verificação do erro das taxas de trabalho.

Em seguida, o modelo proposto foi aprimorado com a incorporação de uma descrição paramétrica das componentes viscosas, permitindo a simulação de materiais com perfis distintos de relaxação. Esse modelo foi particularizado ao caso termo-viscoelástico e aplicado à simulação do material Adiprene-L100 na [seção 6.7](#), utilizando os dados experimentais de [Khan e Lopez-Pamies \(2002\)](#) e [Khan, Lopez-Pamies e Kazmi \(2006\)](#).

Os parâmetros viscoelásticos foram determinados com base em ensaios de relaxação realizados à temperatura ambiente, inicialmente utilizando modelos hiperelásticos auxiliares como referência. Funções polinomiais e sigmóides foram exploradas para construir a descrição paramétrica do modelo. As simulações com funções paramétricas constantes (representando um modelo viscoelástico padrão) não foram capazes de capturar adequadamente a curva de relaxação do material, independentemente do parâmetro de viscosidade aplicado. Em contraste, os modelos paramétricos cúbico e sigmoide IV obtiveram um bom ajuste. O modelo cúbico foi então selecionado para as demais aplicações devido à sua convergência ligeiramente superior em relação ao número de pontos de integração. Em seguida, o modelo foi validado com ensaios adicionais de deformação monotônica em

várias taxas de deformação, demonstrando um alinhamento satisfatório com os dados experimentais, embora algumas diferenças tenham sido observadas em taxas de deformação mais baixas.

Para abordar as variações de temperatura, o modelo foi calibrado usando ensaios de carregamento monotônico realizados em cinco temperaturas diferentes, variando de 199 K a 405 K. Os parâmetros de viscosidade e rigidez transversal foram ajustados utilizando-se funções multiplicadoras dependentes da temperatura, resultando em gráficos de tensão alinhados com as observações experimentais. A calibração foi realizada com temperaturas prescritas constantes, mas também foi considerado um cenário alternativo considerando variações de temperatura devido à dissipação mecânica e ao acoplamento termomecânico. Os resultados indicaram variações de temperatura mais significativas para o caso com temperatura absoluta mais baixa (199 K), o que afetou a relação tensão-deformação. No entanto, as diferenças nos outros casos de temperatura foram praticamente desprezíveis. Nesses exemplos, a consistência do modelo também foi evidenciada com a análise das taxas de trabalho. Além disso, análises semelhantes foram conduzidas para a taxa de entropia. No geral, o modelo proposto mostrou ser uma ferramenta robusta e eficaz para simular o comportamento termomecânico acoplado em materiais com viscosidade complexa.

10.3 Problemas de contato

Implementou-se um modelo numérico de contato para os casos bi e tridimensionais utilizando a estratégia nó-a-superfície com multiplicadores de Lagrange e o modelo de atrito de Coulomb. Partindo-se da abordagem numérica tradicional, sem atrito, já considerado em [Carvalho \(2019\)](#) para o caso bidimensional, o modelo numérico foi aprimorado visando melhor desempenho quando aplicado a elementos de alta ordem: as coordenadas adimensionais dos pontos de contato são adicionadas como parâmetros do sistema, e a detecção do contato é feita com base na intersecção das trajetórias, como apresentado no [Capítulo 7](#). Esse modelo foi avaliado por meio dos exemplos numéricos apresentados na [seção 7.4](#), onde, em geral, observou-se que o modelo com a aprimoração das técnicas numéricas exibe resultados similares ao original, utilizando, porém, menos etapas para 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](#), teve 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](#) foram apresentados mais dois exemplos tridimensionais, com e sem atrito, para demonstrar as possíveis aplicações do algoritmo desenvolvido. Exemplos adicionais de conformação de metal também foram apresentados, incluindo problemas de dobramento e extrusão. Esses exemplos são similares aos propostos em [Carvalho \(2019\)](#), mas considerando também o atrito. No exemplo de dobramento direcionado, observou-se que o atrito provoca poucas diferenças na forma final

da chapa, sendo, no entanto, altamente relevante para a força necessária para promover a conformação. Um resultado similar quanto à força necessária também foi observado no exemplo de extrusão. No entanto, observou-se que, nesse caso, além de influenciar nas forças de reação, o coeficiente de atrito também provoca mudanças na configuração interna da chapa.

10.4 Materiais incompressíveis

Com base no trabalho de [Avancini e Sanches \(2020\)](#), apresentou-se no [Capítulo 8](#) uma formulação mista do Método dos Elementos Finitos baseada em posição e pressão para lidar com materiais incompressíveis, tanto sólidos quanto fluidos. Essa formulação impõe a condição de incompressibilidade por meio de multiplicadores de Lagrange com significado físico de pressão. A fim de poder empregar a mesma aproximação para pressão e posição evitando as instabilidades numéricas inerentes a esse problema, foi implementada a técnica de estabilização PSPG.

Para verificar a formulação no contexto sólido, foi proposto na [subseção 8.2.1](#) um problema simples de um cubo hiperelástico sob compressão uniaxial. Os resultados desse problema foram comparados com o caso compressível para diversos valores do parâmetro de Lamé, mostrando que a resposta incompressível é obtida como um caso limite do modelo compressível quando o parâmetro de Lamé tende ao infinito. Além disso, constatou-se que valores elevados de Lamé podem levar a problemas de mau condicionamento da matriz de rigidez, impactando a convergência da solução.

Em seguida, a formulação foi aplicada ao modelo de fluido Newtoniano incompressível considerando apenas casos com distorções finitas. Para verificar esse modelo, inicialmente simulou-se um problema de *sloshing* de pequena amplitude. Posteriormente, foram analisados problemas mais complexos, como o colapso de uma barragem de água, demonstrando a capacidade da formulação de lidar com grandes deformações. Os resultados desses exemplos foram comparados com os da literatura, mostrando excelente concordância.

Por fim, foram analisados exemplos bidimensionais e tridimensionais de fluidos com tensão superficial. Diversos parâmetros foram variados, incluindo a viscosidade do fluido, a massa específica, e o valor da tensão superficial, com o intuito de verificar a sensibilidade da resposta a cada um desses parâmetros. Os resultados obtidos foram consistentes com as expectativas, mostrando ainda concordância satisfatória com soluções analíticas.

10.5 Mudança de fase

No [Capítulo 9](#), foi apresentado um modelo numérico para simular o fenômeno da mudança de fase em materiais, considerando tanto o contexto puramente térmico quanto o contexto termomecânico. Para verificar a formulação puramente térmica, foi simulado na [subseção 9.1.3](#) um exemplo clássico da literatura de solidificação de uma chapa unidimensional, cujos resultados mostraram uma boa concordância com a solução analítica.

Para o problema termomecânico, o modelo constitutivo proposto se baseia na decom-

posição multiplicativa do gradiente de deformação mecânica em componentes sólidos e líquidos. Dessa forma, é mantida uma descrição cinemática consistente, e a evolução de cada componente pode ser tratada isoladamente, de acordo com o modelo constitutivo de cada fase. Para modelar a fase de transição, foram introduzidos multiplicadores que representam a contribuição das fases sólida e líquida conforme a temperatura.

O modelo termomecânico de mudança de fase foi testado inicialmente com a aplicação a problemas locais (subseções 9.2.7.1 e 9.2.7.2), onde a resposta mecânica e térmica de um ponto do material é avaliada isoladamente, sem considerar o domínio ao redor. Esses exemplos permitiram uma análise detalhada do comportamento constitutivo do modelo em diferentes fases e transições de fase, e também evidenciaram a importância da escolha adequada dos multiplicadores para garantir a continuidade e a suavidade da resposta. Particularmente para os exemplos apresentados, observaram-se algumas descontinuidades nos modelos com multiplicadores lineares, bem como quebras de suavidade nos modelos cúbicos. Apenas o modelo com multiplicadores quárticos manteve respostas contínuas e suaves em todas as transições de fases.

Na sequência, o modelo foi implementado no programa de elementos finitos desenvolvido, e foram simulados exemplos envolvendo solidificação seguida de solicitação mecânica no estado sólido por meio de contato (subseções 9.2.7.3, 9.2.7.4 e 9.2.7.7). Para verificar a consistência cinemática do modelo proposto, os mesmos exemplos foram simulados considerando o material na fase sólida desde o início da análise. Ambos os cenários representam aproximadamente o mesmo problema, mas partem de configurações iniciais e histórico de fases diferentes. Os resultados obtidos apresentaram uma ótima concordância, indicando que a resposta independe do referencial Lagrangiano utilizado.

Ainda, nas subseções 9.2.7.5 e 9.2.7.6, foram realizadas análises bidimensionais e tridimensionais do derretimento de uma coluna sob a ação do seu peso próprio e da tensão superficial. Nesses exemplos, foram utilizados diferentes modelos de multiplicadores para a fase de transição, sendo comparadas as respostas para cada um desses casos. Verificou-se também a sensibilidade dos resultados à discretização espacial, sendo adotadas três malhas distintas, e foram considerados casos com e sem expansão térmica, permitindo avaliar a influência desse efeito sobre o problema. Os resultados obtidos foram consistentes, apresentando respostas suaves que representam adequadamente o fenômeno analisado.

A partir desses resultados, conclui-se que o modelo proposto se mostra eficaz para simular o fenômeno da mudança de fase em materiais, considerando tanto os aspectos térmicos quanto os mecânicos, com potencial para diversas aplicações, tais como na simulação de processos de manufatura. Além disso, deve-se notar que a formulação apresentada é flexível e pode ser facilmente adaptada para diferentes tipos de materiais e condições de contorno.

10.6 Continuidade da pesquisa e sugestões para trabalhos futuros

Em relação à continuidade da pesquisa e trabalhos futuros, consideram-se os seguintes pontos:

- Neste trabalho, foi realizada uma validação experimental dos modelos viscoelástico-viscoplástico e termo-viscoelástico. Já o modelo termo-viscoelástico-viscoplástico, embora tenha sido aplicado a exemplos numéricos, não foi validado com resultados experimentais, ficando esse passo a cargo de estudos futuros.
- Similarmente ao item anterior, é importante validar experimentalmente o modelo constitutivo para a mudança de fase, especialmente durante a fase de transição, onde o comportamento pode variar drasticamente entre materiais. Para isso, as expressões que definem os multiplicadores líquidos e sólidos podem ser calibradas de acordo com as observações experimentais do material analisado.
- Para permitir a simulação de problemas com mudanças topológicas mais complexas, como separação e junção de domínios, o modelo proposto de mudança de fase pode facilmente ser integrado ao Método dos Elementos Finitos e Partículas (PFEM) utilizando a formulação apresentada em [Avancini et al. \(2024\)](#). Tanto o trabalho de [Avancini et al. \(2024\)](#) quanto o presente trabalho utilizam uma abordagem baseada em posição e pressão, o que facilita a adaptação do modelo. No entanto, o PFEM emprega uma abordagem Lagrangiana atualizada, que é simples para fluidos Newtonianos e sólidos elásticos, mas pode introduzir desafios na implementação de modelos constitutivos sólidos mais complexos, como os apresentados neste trabalho. Estudos futuros podem focar em compatibilizar esses modelos com a abordagem Lagrangiana atualizada, a fim de permitir sua aplicação direta ao PFEM.
- A formulação de mudança de fase apresentada pode ser generalizada, sem grandes dificuldades, para materiais compressíveis ou quase-incompressíveis, desconsiderando os parâmetros nodais de pressão e adotando uma abordagem puramente baseada em posições. No entanto, essa adaptação apenas é direta caso se aplique a todas as fases. Quando uma das fases é incompressível e a outra não, surgem desafios de implementação, pois as formulações utilizadas nos dois casos são globalmente distintas, dificultando a representação de domínios que contenham simultaneamente ambas as fases. Para enfrentar esses desafios, estratégias alternativas ou técnicas mais robustas devem ser exploradas.
- O modelo de contato apresentado neste trabalho também pode ser aprimorado do ponto de vista térmico, considerando a troca de calor por contato, e a geração de calor por atrito. Essas implementações são relevantes para ampliar a gama de aplicações da ferramenta numérica desenvolvida.

Referências

ABDUL-HAMEED, H.; MESSEGER, T.; ZAÏRI, F.; NAÏT-ABDELAZIZ, M. Large-strain viscoelastic–viscoplastic constitutive modeling of semi-crystalline polymers and model identification by deterministic/evolutionary approach. **Computational Materials Science**, v. 90, p. 241 – 252, 2014. ISSN 0927-0256.

Abu Al-Rub, R. K.; DARABI, M. K. A thermodynamic framework for constitutive modeling of time- and rate-dependent materials. part i: Theory. **International Journal of Plasticity**, v. 34, p. 61–92, 2012. ISSN 0749-6419.

ALBERT, M. R.; O’NEILL, K. Moving boundary-moving mesh analysis of phase change using finite elements with transfinite mappings. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 23, n. 4, p. 591–607, 1986.

ALLEN, D. H. Thermomechanical Coupling in Inelastic Solids. **Applied Mechanics Reviews**, v. 44, n. 8, p. 361–373, 08 1991. ISSN 0003-6900.

ARGYRIS, J. An excursion into large rotations. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 32, n. 1-3, p. 85–155, 1982.

ARGYRIS, J.; BALMER, H.; DOLTSINIS, J.; DUNNE, P.; HAASE, M.; KLEIBER, M.; MALEJANNAKIS, G.; MLEJNEK, H.-P.; MÜLLER, M.; SCHARPF, D. Finite element method — the natural approach. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 17, n. Part 1, p. 1 – 106, 1979. ISSN 0045-7825.

ARMSTRONG, P. J.; FREDERICK, C. **A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect**. Berkeley Nuclear Laboratories, Research & Development Department Berkeley: Central Electricity Generating Board, 1966. v. 731.

AUBRY, R.; IDELSOHN, S.; OÑATE, E. Particle finite element method in fluid-mechanics including thermal convection-diffusion. **Computers & Structures**, v. 83, n. 17, p. 1459 – 1475, 2005. ISSN 0045-7949. Advances in Meshfree Methods.

AVANCINI, G. **Análise numérica bidimensional de interação fluido-estrutura: Uma formulação posicional baseada em elementos finitos e partículas**. 2018. 138 p. Dissertação (Mestrado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

AVANCINI, G. **Formulação unificada para análise tridimensional de interação fluido-estrutura com escoamento de superfície livre: Uma abordagem Lagrangiana baseada em posições**. 2024. 213 p. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2024.

AVANCINI, G.; FRANCI, A.; IDELSOHN, S.; SANCHES, R. A. A particle-position-based finite element formulation for free-surface flows with topological changes. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 429, p. 117118, 2024. ISSN 0045-7825.

AVANCINI, G.; SANCHES, R. A. A total lagrangian position-based finite element formulation for free-surface incompressible flows. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 169, p. 103348, 2020. ISSN 0168-874X.

AYACHIT, U. **The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application**. USA: Kitware, Inc., 2015. ISBN 1930934300, 9781930934306.

BABUSKA, I. The finite element method with lagrangian multipliers. **Numerische Mathematik**, v. 20, p. 179–192, 1972/73.

BACH, P.; HASSAGER, O. An algorithm for the use of the lagrangian specification in newtonian fluid mechanics and applications to free-surface flow. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 152, p. 173–190, 1985.

BALAY, S.; ABHYANKAR, S.; ADAMS, M. F.; BENSON, S.; BROWN, J.; BRUNE, P.; BUSCHELMAN, K.; CONSTANTINESCU, E. M.; DALCIN, L.; DENER, A.; EIJKHOUT, V.; FAIBUSSOWITSCH, J.; GROPP, W. D.; HAPLA, V.; ISAAC, T.; JOLIVET, P.; KARPEEV, D.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M. G.; KONG, F.; KRUGER, S.; MAY, D. A.; MCINNES, L. C.; MILLS, R. T.; MITCHELL, L.; MUNSON, T.; ROMAN, J. E.; RUPP, K.; SANAN, P.; SARICH, J.; SMITH, B. F.; ZAMPINI, S.; ZHANG, H.; ZHANG, J. PETSc/TAO users manual (rev. 3.20). 2023. Disponível em: <https://www.osti.gov/biblio/2205494>.

BALDONI, F.; RAJAGOPAL, K. A continuum theory for the thermomechanics of solidification. **International Journal of Non-Linear Mechanics**, v. 32, n. 1, p. 3 – 20, 1997. ISSN 0020-7462.

BATHE, K. **Finite Element Procedures**. [S.l.]: Prentice Hall, 2006. ISBN 9780979004902.

BATHE, K. J.; CHAUDHARY, A. A solution method for planar and axisymmetric contact problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, John Wiley and Sons, Ltd, v. 21, n. 1, p. 65–88, 1985. ISSN 1097-0207.

BATHE, K.-J.; RAMM, E.; WILSON, E. L. Finite element formulations for large deformation dynamic analysis. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 9, n. 2, p. 353–386, 1975.

BAZILEVS, Y.; TAKIZAWA, K.; TEZDUYAR, T. **Computational Fluid-Structure Interaction: Methods and Applications**. [S.l.]: Wiley, 2013. (Wiley Series in Computational Mechanics). ISBN 9781118483572.

BELGACEM, F.; HILD, P.; LABORDE, P. The mortar finite element method for contact problems. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 28, n. 4-8, p. 263–271, 1998. ISSN 08957177.

BELYTSCHKO, T.; SCHWER, L.; KLEIN, M. Large displacement, transient analysis of space frames. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 11, n. 1, p. 65–84, 1977.

BENAARBIA, A.; CHATZIGEORGIOU, G.; KIEFER, B.; MERAGHNI, F. A fully coupled thermo-viscoelastic-viscoplastic-damage framework to study the cyclic variability of the taylor-quinney coefficient for semi-crystalline polymers. **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 163, p. 105128, 2019. ISSN 0020-7403.

BENAARBIA, A.; ROUSE, J.; SUN, W. A thermodynamically-based viscoelastic-viscoplastic model for the high temperature cyclic behaviour of 9–12% cr steels. **International Journal of Plasticity**, v. 107, p. 100 – 121, 2018. ISSN 0749-6419.

BENSON, D. J.; HALLQUIST, J. O. A single surface contact algorithm for the post-buckling analysis of shell structures. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 78, n. 2, p. 141 – 163, 1990. ISSN 0045-7825.

BENZERGA, A.; BRÉCHET, Y.; NEEDLEMAN, A.; Van der Giessen, E. The stored energy of cold work: Predictions from discrete dislocation plasticity. **Acta Materialia**, v. 53, n. 18, p. 4765–4779, 2005. ISSN 1359-6454.

BERNARDI, C.; DEBIT, N.; MADAY, Y. Coupling finite element and spectral methods: First results. **Mathematics of Computation**, American Mathematical Society, v. 54, n. 189, p. 21–39, 1990. ISSN 00255718, 10886842.

BERNARDI, C.; MADAY, Y.; PATERA, A. T. A new nonconforming approach to domain decomposition: The mortar element method. In: **Nonlinear partial differential equations and their applications. Collège de France Seminar, volume XI. Lectures presented at the weekly seminar on applied mathematics**. [S.l.: s.n.], 1994. p. 13–51. ISBN 0-582-23800-5.

BIOT, M. A. Thermoelasticity and irreversible thermodynamics. **Journal of Applied Physics**, American Institute of Physics, v. 27, n. 3, p. 240–253, 1956.

BLATZ, P. J.; KO, W. L. Application of Finite Elastic Theory to the Deformation of Rubbery Materials. **Transactions of The Society of Rheology**, v. 6, n. 1, p. 223–252, 03 1962. ISSN 0038-0032.

BOBACH, B.-J.; BOMAN, R.; CELENTANO, D.; TERRAPON, V.; PONTHOT, J.-P. Simulation of the marangoni effect and phase change using the particle finite element method. **Applied Sciences**, v. 11, p. 11893, 12 2021.

BONET, J.; WOOD, R. **Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997. ISBN 9780521572729.

BONET, J.; WOOD, R.; MAHANEY, J.; HEYWOOD, P. Finite element analysis of air supported membrane structures. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 190, n. 5, p. 579 – 595, 2000. ISSN 0045-7825.

BREPOLS, T.; VLADIMIROV, I. N.; REESE, S. Numerical comparison of isotropic hypo- and hyperelastic-based plasticity models with application to industrial forming processes. **International Journal of Plasticity**, v. 63, p. 18 – 48, 2014. ISSN 0749-6419. Deformation Tensors in Material Modeling in Honor of Prof. Otto T. Bruhns.

BREZZI, F. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. **R.A.I.R.O. Analyse Numérique**, v. 8, p. 129–151, 1974.

BREZZI, F.; FALK, R. S. Stability of higher-order hood-taylor methods. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 28, n. 3, p. 581–590, 1991. ISSN 00361429.

BROOKS, A. N.; HUGHES, T. J. Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 32, n. 1, p. 199 – 259, 1982. ISSN 0045-7825.

CAMPELLO, E.; PIMENTA, P.; WRIGGERS, P. A triangular finite shell element based on a fully nonlinear shell formulation. **Computational mechanics**, Springer, v. 31, n. 6, p. 505–518, 2003.

CAMPELLO, E. d. M. B.; PIMENTA, P.; WRIGGERS, P. An exact conserving algorithm for nonlinear dynamics with rotational dofs and general hyperelasticity. part 2: shells. **Computational Mechanics**, Springer, v. 48, p. 195–211, 2011.

CARPENTER, N. J.; TAYLOR, R. L.; KATONA, M. G. Lagrange constraints for transient finite element surface contact. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, John Wiley & Sons, Ltd, v. 32, n. 1, p. 103–128, 1991. ISSN 1097-0207.

CARRAZEDO, R. **Estudo e desenvolvimento de código computacional para análise de impacto entre estruturas levando em consideração efeitos térmicos**. 2009. 152 p. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

CARVALHO, P. R.; CODA, H. B.; SANCHES, R. A. A large strain thermodynamically-based viscoelastic–viscoplastic model with application to finite element analysis of polytetrafluoroethylene (PTFE). **European Journal of Mechanics - A/Solids**, v. 97, p. 104850, 2023. ISSN 0997-7538.

CARVALHO, P. R. P. **Análise numérica bidimensional de sólidos com comportamento visco-elasto-plástico em grandes deformações e situações de contato**. 2019. 179 f. Dissertação (Mestrado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

CARVALHO, P. R. P.; CODA, H. B.; SANCHES, R. A. K. Positional finite element formulation for two-dimensional analysis of elasto-plastic solids with contact applied to cold forming processes simulation. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 42, n. 5, p. 245, Apr 2020. ISSN 1806-3691.

CELENTANO, D.; OLLER, S.; OÑATE, E. A coupled thermomechanical model for the solidification of cast metals. **International Journal of Solids and Structures**, v. 33, n. 5, p. 647–673, 1996. ISSN 0020-7683.

CELENTANO, D.; OÑATE, E.; OLLER, S. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 37, n. 20, p. 3441–3465, 1994.

CELENTANO, D.; PEREZ, E. A phase-change temperature-based formulation including general latent heat effects. **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow**, MCB UP Ltd, v. 6, n. 8, p. 71–79, 1996.

CERVERA, M.; SARACIBAR, C. A. D.; CHIUMENTI, M. Thermo-mechanical analysis of industrial solidification processes. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 46, n. 9, p. 1575–1591, 1999.

CHABOCHE, J. Time-independent constitutive theories for cyclic plasticity. **International Journal of Plasticity**, v. 2, n. 2, p. 149 – 188, 1986. ISSN 0749-6419.

CHAUDHARY, A. B.; BATHE, K.-J. A solution method for static and dynamic analysis of three-dimensional contact problems with friction. **Computers and Structures**, v. 24, n. 6, p. 855 – 873, 1986. ISSN 0045-7949.

CHESSA, J.; SMOLINSKI, P.; BELYTSCHKO, T. The extended finite element method (xfem) for solidification problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 53, n. 8, p. 1959–1977, 2001.

CLOUGH, R. The finite element method in plane stress analysis. In: SECOND ASCE CONFERENCE ON ELECTRONIC COMPUTATION. Pittsburgh, PA, 1960. p. 345–378.

CODA, H. B. **Análise não linear geométrica de sólidos e estruturas**: Uma formulação posicional baseada no MEF. 2003. Tese (Tese para concurso de professor titular) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

CODA, H. B. **O Método dos elementos finitos posicional**: sólidos e estruturas – não linearidade geométrica e dinâmica. São Carlos: EESC/USP, 2018. 284 p. ISBN 978-85-8023-068-0.

CODA, H. B.; GRECO, M. A simple FEM formulation for large deflection 2D frame analysis based on position description. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 33-35, p. 3541–3557, 2004. ISSN 00457825.

CODA, H. B.; PACCOLA, R. R. Unconstrained finite element for geometrical nonlinear dynamics of shells. **Mathematical Problems in Engineering**, 2009. ISSN 1024123X.

COLEMAN, B. D.; GURTIN, M. E. Thermodynamics with internal state variables. **The Journal of Chemical Physics**, v. 47, n. 2, p. 597–613, 1967.

COLEMAN, B. D.; NOLL, W. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, v. 13, n. 1, p. 167–178, Dec 1963. ISSN 1432-0673.

COLEMAN, B. D.; OWEN, D. R. On the thermodynamics of elastic-plastic materials with temperature-dependent moduli and yield stresses. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, Springer, v. 70, n. 4, p. 339–354, 1979.

CRANK, J. **Free and Moving Boundary Problems**. [S.l.]: Clarendon Press, 1987. (Oxford science publications). ISBN 9780198533702.

CRISFIELD, M. A consistent co-rotational formulation for non-linear, three-dimensional, beam-elements. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 81, n. 2, p. 131–150, 1990. ISSN 0045-7825.

CRISFIELD, M. A. **Non-Linear Finite Element Analysis of Solids and Structures: Advanced Topics**. 1st. ed. New York, NY, USA: John Wiley and Sons, Inc., 1997. ISBN 047195649X.

DARABI, M. K.; AL-RUB, R. K. A.; MASAD, E. A.; HUANG, C.-W.; LITTLE, D. N. A thermo-viscoelastic–viscoplastic–viscodamage constitutive model for asphaltic materials. **International Journal of Solids and Structures**, v. 48, n. 1, p. 191 – 207, 2011. ISSN 0020-7683.

DETTMER, W.; REESE, S. On the theoretical and numerical modelling of armstrong-frederick kinematic hardening in the finite strain regime. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 1, p. 87 – 116, 2004. ISSN 0045-7825.

DHONDT, G.; SONS, J. W. . **The Finite Element Method for Three-Dimensional Thermomechanical Applications**. [S.l.]: Wiley, 2004. (Título collana). ISBN 9780470857526.

DICK, E. Introduction to finite element methods in computational fluid dynamics. In: _____. **Computational Fluid Dynamics**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009. p. 235–274. ISBN 978-3-540-85056-4.

DILLON, O. A nonlinear thermoelasticity theory. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 10, n. 2, p. 123 – 131, 1962. ISSN 0022-5096.

DILLON, O. Coupled thermoplasticity. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 11, n. 1, p. 21 – 33, 1963. ISSN 0022-5096.

DONEA, J.; GIULIANI, S.; HALLEUX, J. An arbitrary lagrangian-eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 33, n. 1, p. 689–723, 1982. ISSN 0045-7825.

DRESCHER, A.; KRINGOS, N.; SCARPAS, T. On the behavior of a parallel elasto-visco-plastic model for asphaltic materials. **Mechanics of Materials**, v. 42, n. 2, p. 109 – 117, 2010. ISSN 0167-6636.

DUARTE, C. A.; ODEN, J. T. H-p clouds—an h-p meshless method. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, v. 12, n. 6, p. 673–705, 1996.

DUHAMEL, J. M. C. Mémoire sur le calcul des actions moléculaires développées par les changements de température dans les corps solides. **Mémoires présentés par divers savants à l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France - Sciences Mathématiques et Physiques**, v. 5, p. 440–498, 1837.

DUHAMEL, J. M. C. Second memoire sur les phenomenes thermo-mecaniques. **Journal de l'École polytechnique**, v. 15, n. 25, p. 1–57, 1837.

DUNAVANT, D. A. High degree efficient symmetrical Gaussian quadrature rules for the triangle. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 21, p. 1129–1148, 1985.

DUVAUT, G.; LIONS, J. **Inequalities in mechanics and physics**. [S.l.]: Springer-Verlag, 1976. (Grundlehren der mathematischen Wissenschaften). ISBN 9783540073277.

FENG, Z.-Q.; PEYRAUT, F.; LABED, N. Solution of large deformation contact problems with friction between blatz–ko hyperelastic bodies. **International Journal of Engineering Science**, v. 41, n. 19, p. 2213 – 2225, 2003.

FERNANDES, J. W. D.; CODA, H. B.; SANCHES, R. A. K. Ale incompressible fluid–shell coupling based on a higher-order auxiliary mesh and positional shell finite element. **Computational Mechanics**, Aug 2018. ISSN 1432-0924.

FISCHER, K. A.; WRIGGERS, P. Frictionless 2D contact formulations for finite deformations based on the mortar method. **Computational Mechanics**, v. 36, n. 3, p. 226–244, Aug 2005. ISSN 1432-0924.

FOURIER, J. **Théorie analytique de la chaleur**. [S.l.]: F. Didot, 1822.

FRANCI, A.; OÑATE, E.; CARBONELL, J. M. Unified lagrangian formulation for solid and fluid mechanics and fsi problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 298, p. 520 – 547, 2016. ISSN 0045-7825.

FRANCI, A.; OÑATE, E.; CARBONELL, J. M.; CHIUMENTI, M. Pfm formulation for thermo-coupled fsi analysis. application to nuclear core melt accident. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 325, p. 711 – 732, 2017. ISSN 0045-7825.

FRANK, G. J.; BROCKMAN, R. A. A viscoelastic–viscoplastic constitutive model for glassy polymers. **International Journal of Solids and Structures**, v. 38, n. 30, p. 5149–5164, 2001. ISSN 0020-7683.

FRÉMOND, M. **Phase Change in Mechanics**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2012. (Lecture Notes of the Unione Matematica Italiana). ISBN 9783642246098.

GARINO, C. G.; VAIRO, M. R.; FAGÉ S, S. A.; MIRASSO, A.; PONTHOT, J.-P. Numerical simulation of finite strain viscoplastic problems. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 246, p. 174 – 184, 2013. ISSN 0377-0427. Fifth International Conference on Advanced COmputational Methods in ENgineering (ACOMEN 2011).

GENNES, P. de; BROCHARD-WYART, F.; QUERE, D. **Capillarity and Wetting Phenomena: Drops, Bubbles, Pearls, Waves**. [S.l.]: Springer New York, 2003. ISBN 9780387005928.

GEUZAINÉ, C.; REMACLE, J.-F. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 79, p. 1309 – 1331, 2009.

Gingold, R. A.; Monaghan, J. J. Smoothed particle hydrodynamics - Theory and application to non-spherical stars. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 181, p. 375–389, nov. 1977.

GRAY, G.; BLUMENTHAL, W.; TRUJILLO, C.; II, R. Influence of temperature and strain rate on the mechanical behavior of adiprene l-100. <http://dx.doi.org/10.1051/jp4:1997390>, v. 07, 08 1997.

- GRECO, M. **Análise de problemas de contato/impacto em estruturas de comportamento não linear pelo método dos elementos finitos**. 2004. 153 p. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.
- GRECO, M.; CODA, H. B. Positional FEM formulation for flexible multi-body dynamic analysis. **Journal of Sound and Vibration**, v. 290, n. 3-5, p. 1141–1174, 2006. ISSN 10958568.
- GRECO, M.; GESUALDO, F.; VENTURINI, W.; CODA, H. Nonlinear positional formulation for space truss analysis. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 42, n. 12, p. 1079 – 1086, 2006. ISSN 0168-874X.
- GREEN, A. E.; NAGHDI, P. M. A general theory of an elastic-plastic continuum. **Archive for rational mechanics and analysis**, Springer, v. 18, n. 4, p. 251–281, 1965.
- GUDIMETLA, M. R.; DOGHRI, I. A finite strain thermodynamically-based constitutive framework coupling viscoelasticity and viscoplasticity with application to glassy polymers. **International Journal of Plasticity**, v. 98, p. 197 – 216, 2017. ISSN 0749-6419.
- HALLQUIST, J.; GOUDREAU, G.; BENSON, D. Sliding interfaces with contact-impact in large-scale lagrangian computations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 51, n. 1, p. 107 – 137, 1985. ISSN 0045-7825.
- HALLQUIST, J. O. **NIKE2D - an implicit, finite-deformation finite-element code for analyzing the static and dynamic response of two-dimensional solids**. Berkeley, CA: Lawrence Berkeley Nat. Lab., 1979.
- HARTMANN, S. **Comparison of the multiplicative decompositions $\mathbf{F} = \mathbf{F}\theta\mathbf{F}\mathbf{M}$ and $\mathbf{F} = \mathbf{F}\mathbf{M}\mathbf{F}\theta$ in finite strain thermo-elasticity**. Technical Report Series Fac3-12-01, Faculty of Mathematics/Computer Sciences . . . , 2012.
- HARTMANN, S.; RAMM, E. A mortar based contact formulation for non-linear dynamics using dual Lagrange multipliers. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 44, n. 5, p. 245–258, 2008. ISSN 0168874X.
- HAUPT, P. On the concept of an intermediate configuration and its application to a representation of viscoelastic-plastic material behavior. **International Journal of Plasticity**, v. 1, n. 4, p. 303 – 316, 1985. ISSN 0749-6419.
- HEERES, O. M.; SUIKER, A. S.; BORST, R. de. A comparison between the perzyna viscoplastic model and the consistency viscoplastic model. **European Journal of Mechanics - A/Solids**, v. 21, n. 1, p. 1 – 12, 2002. ISSN 0997-7538.
- HILLS, R.; LOPER, D.; ROBERTS, P. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. **The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics**, Oxford University Press, v. 36, n. 4, p. 505–540, 1983.
- HOLMES, D. W.; LOUGHRAN, J. G.; SUEHRCKE, H. Constitutive model for large strain deformation of semicrystalline polymers. **Mechanics of Time-Dependent Materials**, v. 10, n. 4, p. 281–313, Dec 2006. ISSN 1573-2738.
- HOLZAPFEL, G. **Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering**. [S.l.]: Wiley, 2000. ISBN 9780471823193.

- HOLZAPFEL, G. a. On large strain viscoelasticity: continuum formulation and finite element applications to elastomeric structures. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 39, n. 22, p. 3903–3926, 1996. ISSN 0029-5981.
- HSU, T. **The Finite Element Method in Thermomechanics**. [S.l.]: Springer Netherlands, 2012. ISBN 9789401159982.
- HU, N. A solution method for dynamic contact problems. v. 63, p. 1053–1063, 06 1997.
- HUBER, N.; TSAKMAKIS, C. Finite deformation viscoelasticity laws. **Mechanics of Materials**, v. 32, p. 1–18, 01 2000.
- HUGHES, T.; TAYLOR, R.; SACKMAN, J.; CURNIER, A.; KANOKNUKULCHAI, W. A finite element method for a class of contact-impact problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 8, n. 3, p. 249–276, 1976. ISSN 0045-7825.
- IBRAHIMBEGOVIĆ, A.; CHORFI, L. Viscoplastic model at finite deformations with combined isotropic and kinematic hardening. **Computers & Structures - COMPUT STRUCT**, v. 77, p. 509–525, 07 2000.
- IDELSOHN, S.; MARTI, J.; LIMACHE, A.; OÑATE, E. Unified lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids: Application to fluid–structure interaction problems via the PFEM. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 197, n. 19, p. 1762 – 1776, 2008. ISSN 0045-7825. Computational Methods in Fluid–Structure Interaction.
- IDELSOHN, S.; MIER-TORRECILLA, M.; OÑATE, E. Multi-fluid flows with the particle finite element method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 198, n. 33, p. 2750 – 2767, 2009. ISSN 0045-7825.
- IDELSOHN, S.; OÑATE, E.; PIN, F. D. The particle finite element method: a powerful tool to solve incompressible flows with free-surfaces and breaking waves. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 61, n. 7, p. 964–989, 2004.
- IDELSOHN, S.; OÑATE, E.; PIN, F. D.; CALVO, N. Fluid–structure interaction using the particle finite element method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 195, n. 17, p. 2100 – 2123, 2006. ISSN 0045-7825. Fluid-Structure Interaction.
- IMAM, A.; JOHNSON, G. C. Decomposition of the Deformation Gradient in Thermoelasticity. **Journal of Applied Mechanics**, v. 65, n. 2, p. 362–366, 06 1998. ISSN 0021-8936.
- JOHNSON, K. **Contact Mechanics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1987. ISBN 9780521347969.
- JOULIN, C.; XIANG, J.; LATHAM, J.-P. A novel thermo-mechanical coupling approach for thermal fracturing of rocks in the three-dimensional fdem. **Computational Particle Mechanics**, Springer, p. 1–12, 2020.
- KAMLAH, M.; HAUPT, P. On the macroscopic description of stored energy and self heating during plastic deformation. **International Journal of Plasticity**, v. 13, n. 10, p. 893 – 911, 1997. ISSN 0749-6419.

KHAN, a. S.; HUANG, S. Continuum Theory of Plasticity. **New York WileyInterscience** 1995, p. 440, 1995. ISSN 1520-5207.

KHAN, A. S.; LOPEZ-PAMIES, O. Time and temperature dependent response and relaxation of a soft polymer. **International Journal of Plasticity**, v. 18, n. 10, p. 1359–1372, 2002. ISSN 0749-6419.

KHAN, A. S.; LOPEZ-PAMIES, O.; KAZMI, R. Thermo-mechanical large deformation response and constitutive modeling of viscoelastic polymers over a wide range of strain rates and temperatures. **International Journal of Plasticity**, v. 22, n. 4, p. 581–601, 2006. ISSN 0749-6419.

KHAN, A. S.; ZHANG, H. Finite deformation of a polymer: Experiments and modeling. **International Journal of Plasticity**, v. 17, p. 1167–1188, 09 2001.

KIM, J. S.; MULIANA, A. H. A time-integration method for the viscoelastic–viscoplastic analyses of polymers and finite element implementation. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 79, n. 5, p. 550–575, 2009.

KORIC, S.; HIBBELER, L. C.; THOMAS, B. G. Explicit coupled thermo-mechanical finite element model of steel solidification. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 78, n. 1, p. 1–31, 2009.

KOSHIZUKA, S.; OKA, Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. **Nuclear Science and Engineering**, Taylor & Francis, v. 123, n. 3, p. 421–434, 1996.

KRAIRI, A.; DOGHRI, I. A thermodynamically-based constitutive model for thermoplastic polymers coupling viscoelasticity, viscoplasticity and ductile damage. **International Journal of Plasticity**, v. 60, p. 163–181, 2014. ISSN 0749-6419.

KRAIRI, A.; DOGHRI, I.; SCHALNAT, J.; ROBERT, G.; Van Paepegem, W. Thermo-mechanical coupling of a viscoelastic-viscoplastic model for thermoplastic polymers: Thermodynamical derivation and experimental assessment. **International Journal of Plasticity**, v. 115, p. 154–177, 2019. ISSN 0749-6419.

KRÖNER, E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, v. 4, n. 4, p. 273–334, 1960. Cited By 23.

LAI, J.; BAKKER, A. An integral constitutive equation for nonlinear plasto-viscoelastic behavior of high-density polyethylene. **Polymer Engineering & Science**, v. 35, n. 17, p. 1339–1347, 1995.

LAMMENS, N.; KERSEMANS, M.; BAERE, I. D.; PAEPEGEM, W. V. On the visco-elasto-plastic response of additively manufactured polyamide-12 (pa-12) through selective laser sintering. **Polymer Testing**, v. 57, p. 149 – 155, 2017. ISSN 0142-9418.

LANCASTER, P.; SALKAUSKAS, K. Surfaces Generated by Moving Least Squares Methods. **Mathematics of Computation**, American Mathematical Society, v. 37, n. 155, p. 141–158, 1981. ISSN 00255718.

LEE, E. H. Elastic-plastic deformation at finite strains. **Journal of Applied Mechanics**, v. 36, n. 1, p. 1–6, 1969. ISSN 0749-6419. NUMISHEET2005 Conference.

- LEE, J.; CHEN, Y. A theory of thermo-visco-elastic-plastic materials: thermomechanical coupling in simple shear. **Theoretical and Applied Fracture Mechanics**, v. 35, n. 3, p. 187 – 209, 2001. ISSN 0167-8442.
- LEMAITRE, J.; CHABOCHE, J. **Mechanics of Solid Materials**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1985.
- LEMAITRE, J. J. **Handbook of materials behavior models**. [S.l.]: Academic Press, 2001. ISBN 9780124433410.
- LEWIS, R.; NITHIARASU, P.; SEETHARAMU, K. **Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow**. [S.l.]: Wiley, 2004. ISBN 9780470847893.
- LIENHARD, J. **A Heat Transfer Textbook**. [S.l.]: Dover Publications, 2011. (Dover Books on Engineering). ISBN 9780486479316.
- LIKOZAR, B.; KRAJNC, M. A study of heat transfer during molding of elastomers. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 12, p. 3181–3192, 2008. ISSN 0009-2509.
- LION, A. A physically based method to represent the thermo-mechanical behaviour of elastomers. **Acta Mechanica**, v. 123, n. 1, p. 1–25, Mar 1997. ISSN 1619-6937.
- LION, A. Constitutive modelling in finite thermoviscoplasticity: a physical approach based on nonlinear rheological models. **International Journal of Plasticity**, v. 16, n. 5, p. 469 – 494, 2000. ISSN 0749-6419.
- LU, S.; PISTER, K. Decomposition of deformation and representation of the free energy function for isotropic thermoelastic solids. **International Journal of Solids and Structures**, v. 11, n. 7, p. 927 – 934, 1975. ISSN 0020-7683.
- MÄHLER, L.; EKH, M.; RUNESSON, K. A class of thermo-hyperelastic–viscoplastic models for porous materials: theory and numerics. **International Journal of Plasticity**, v. 17, n. 7, p. 943 – 969, 2001. ISSN 0749-6419.
- MANDEL, J. Thermodynamics and plasticity. In: DOMINGOS, J. J. D.; NINA, M. N. R.; WHITELAW, J. H. (Ed.). **Foundations of Continuum Thermodynamics**. London: Macmillan Education UK, 1973. p. 283–304. ISBN 978-1-349-02235-9.
- MARQUES, G. C. S. C. **Estudo e desenvolvimento de código computacional baseado no MEF para análise dinâmica não linear geométrica de sólidos bidimensionais**. 2006. 93 f. Dissertação (Mestrado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.
- MARTIN, J. C.; MOYCE, W.; PENNEY, W. G.; PRICE, A. T.; THORNHILL, C. K. Part iv. an experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v. 244, p. 312 – 324, 1952.
- MASON, J.; ROSAKIS, A.; RAVICHANDRAN, G. On the strain and strain rate dependence of the fraction of plastic work converted to heat: an experimental study using high speed infrared detectors and the kolsky bar. **Mechanics of Materials**, v. 17, n. 2, p. 135 – 145, 1994. ISSN 0167-6636.

- MENG, S. S.; ZHANG, B. M. Effects of curing temperature on glass fiber/urethane composite's mechanical and thermal properties. In: **Advanced Composites for Marine Engineering**. [S.l.]: Trans Tech Publications Ltd, 2015. (Materials Science Forum, v. 813), p. 194–201.
- MIĆUNOVIĆ, M. A geometrical treatment of thermoelasticity of simple inhomogeneous bodies. i: Geometrical and kinematical relations. **Bulletin de l'Académie Polonaise des Sciences, Série des Sciences Techniques**, v. 22, 01 1974.
- MILED, B.; DOGHRI, I.; DELANNAY, L. Coupled viscoelastic–viscoplastic modeling of homogeneous and isotropic polymers: Numerical algorithm and analytical solutions. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 200, n. 47, p. 3381 – 3394, 2011. ISSN 0045-7825.
- MINSKI, R. L. **Aprimoramento de formulação de identificação e solução do impacto bidimensional entre estrutura e anteparo rígido**. 2008. 126 p. Dissertação (Mestrado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.
- MOLLICA, F.; RAJAGOPAL, K.; SRINIVASA, A. The inelastic behavior of metals subject to loading reversal. **International Journal of Plasticity**, v. 17, n. 8, p. 1119 – 1146, 2001. ISSN 0749-6419.
- NEDJAR, B. An enthalpy-based finite element method for nonlinear heat problems involving phase change. **Computers & Structures**, v. 80, n. 1, p. 9–21, 2002. ISSN 0045-7949.
- NEWMARK, N. **A Method of Computation for Structural Dynamics**. [S.l.]: American Society of Civil Engineers, 1959. (A Method of Computation for Structural Dynamics, N° 179-181).
- NGUYEN, V. D.; LANI, F.; PARDOEN, T.; MORELLE, X.; NOELS, L. A large strain hyperelastic viscoelastic-viscoplastic-damage constitutive model based on a multi-mechanism non-local damage continuum for amorphous glassy polymers. **International Journal of Solids and Structures**, v. 96, 06 2016.
- NITHIARASU, P. An arbitrary lagrangian eulerian (ale) formulation for free surface flows using the characteristic-based split (cbs) scheme. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 48, n. 12, p. 1415–1428, 2005.
- OGDEN, R. **Non-linear Elastic Deformations**. [S.l.]: Dover Publications, 1997. (Dover Civil and Mechanical Engineering). ISBN 9780486696485.
- OLIVEIRA, M.; ALVES, J.; CHAPARRO, B.; MENEZES, L. Study on the influence of work-hardening modeling in springback prediction. **International Journal of Plasticity**, v. 23, n. 3, p. 516 – 543, 2007. ISSN 0749-6419. NUMISHEET2005 Conference.
- O'NEILL, K. Boundary integral equation solution of moving boundary phase change problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, Wiley Online Library, v. 19, n. 12, p. 1825–1850, 1983.

OñATE, E.; MARTI, J. M.; RYZHAKOV, P.; ROSSI, R.; IDELSOHN, S. Analysis of the melting, burning and flame spread of polymers with the particle finite element method. **Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences**, v. 20, p. 165–184, 01 2013.

OñATE, E.; ROSSI, R.; IDELSOHN, S. Prediction of melt flow and spread of thermoplastic objects with the particle finite element method. **Fire Safety Science**, v. 9, p. 291–302, 01 2009.

OñATE, E.; ROSSI, R.; IDELSOHN, S. R.; BUTLER, K. M. Melting and spread of polymers in fire with the particle finite element method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 81, n. 8, p. 1046–1072, 2010.

PAPADOPOULOS, P.; TAYLOR, R. L. A mixed formulation for the finite element solution of contact problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 94, n. 3, p. 373 – 389, 1992. ISSN 0045-7825.

PARKUS, H. **Thermoelasticity**. [S.l.]: Springer Vienna, 2012. ISBN 9783709184479.

PASCON, J.; CODA, H. Large deformation analysis of elastoplastic homogeneous materials via high order tetrahedral finite elements. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 76, p. 21 – 38, 2013a. ISSN 0168-874X.

PASCON, J. P.; CODA, H. B. Finite deformation analysis of visco-hyperelastic materials via solid tetrahedral finite elements. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 133, p. 25 – 41, 2017. ISSN 0168-874X.

PERIĆ, D.; DETTMER, W. A computational model for generalized inelastic materials at finite strains combining elastic, viscoelastic and plastic material behaviour. **Engineering Computations: Int J for Computer-Aided Engineering**, v. 20, p. 768–787, 09 2003.

PERZYNA, P. Fundamental problems in viscoplasticity. In: CHERNYI, G.; DRYDEN, H.; GERMAIN, P.; HOWARTH, L.; OLSZAK, W.; PRAGER, W.; PROBSTEIN, R.; ZIEGLER, H. (Ed.). [S.l.]: Elsevier, 1966, (Advances in Applied Mechanics, v. 9). p. 243 – 377.

PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. **Journal of Computational Physics**, v. 10, n. 2, p. 252–271, 1972. ISSN 0021-9991.

PETITEAU, J.-C.; VERRON, E.; OTHMAN, R.; SOURNE, H. L.; SIGRIST, J.-F.; BARRAS, G. Large strain rate-dependent response of elastomers at different strain rates: convolution integral vs. internal variable formulations. **Mechanics of Time-Dependent Materials**, v. 17, n. 3, p. 349–367, Aug 2013. ISSN 1573-2738.

PIMENTA, P.; CAMPELLO, E.; WRIGGERS, P. A fully nonlinear multi-parameter shell model with thickness variation and a triangular shell finite element. **Computational Mechanics**, Springer, v. 34, n. 3, p. 181–193, 2004.

POURIAYEVALI, H.; ARABNEJAD, S.; GUO, Y.; SHIM, V. A constitutive description of the rate-sensitive response of semi-crystalline polymers. **International Journal of Impact Engineering**, v. 62, p. 35–47, 12 2013.

- PUSO, M. A.; LAURSEN, T. A. A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 6, p. 601 – 629, 2004. ISSN 0045-7825.
- RADOVITZKY, R.; ORTIZ, M. Lagrangian finite element analysis of newtonian fluid flows. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 43, n. 4, p. 607–619, 1998.
- RAE, P.; BROWN, E. The properties of poly(tetrafluoroethylene) (PTFE) in tension. **Polymer**, v. 46, n. 19, p. 8128 – 8140, 2005. ISSN 0032-3861. Controlled Macromolecular Synthesis and Controlled Architectures - Supramolecular Polymer Assemblies.
- RAE, P.; DATTELBAUM, D. The properties of poly(tetrafluoroethylene) (PTFE) in compression. **Polymer**, v. 45, n. 22, p. 7615 – 7625, 2004. ISSN 0032-3861.
- RAMASWAMY, B.; KAWAHARA, M. Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface fluid flow. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 7, n. 9, p. 953–984, 1987.
- REDDY, M.; REDDY, J. Numerical simulation of forming processes using a coupled fluid flow and heat transfer model. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 35, n. 4, p. 807–833, 1992.
- REESE, S.; GOVINDJEE, S. Theoretical and numerical aspects in the thermo-viscoelastic material behaviour of rubber-like polymers. **Mechanics of Time-Dependent Materials**, v. 1, n. 4, p. 357–396, Dec 1997. ISSN 1573-2738.
- ROBISON, A. D. C++ gets faster for scientific computing. **Comput. Phys.**, American Institute of Physics Inc., USA, v. 10, n. 5, p. 458–462, sep 1996. ISSN 0894-1866.
- ROLPH, W. D. I.; BATHE, K.-J. An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 18, n. 1, p. 119–134, 1982.
- ROSAKIS, P.; ROSAKIS, A.; RAVICHANDRAN, G.; HODOWANY, J. A thermodynamic internal variable model for the partition of plastic work into heat and stored energy in metals. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 48, n. 3, p. 581 – 607, 2000. ISSN 0022-5096.
- RUBERT, J. B. **Grandes deformações e anisotropia por tensores de mapeamento aplicados a problemas de materiais compostos e na conformação de metais**. 1997. 237 p. Tese (Doutorado) — Departamento de Engenharia de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1997.
- SADIK, S.; YAVARI, A. Geometric nonlinear thermoelasticity and the time evolution of thermal stresses. **Mathematics and Mechanics of Solids**, v. 22, n. 7, p. 1546–1587, 2017.
- SAKSONO, P.; PERIC, D. On finite element modelling of surface tension variational formulation and applications – part i: Quasistatic problems. **Computational Mechanics - COMPUTATION MECH**, v. 38, p. 265–281, 08 2006.
- SAKSONO, P. H. **On finite element modelling of surface tension phenomena**. 2002. 162 p. Tese (Doutorado) — Swansea University, United Kingdom, 2002.

- SALCUDEAN, M.; ABDULLAH, Z. On the numerical modelling of heat transfer during solidification processes. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 25, n. 2, p. 445–473, 1988.
- SANCHES, R. A.; CODA, H. B. Unconstrained vector nonlinear dynamic shell formulation applied to fluid structure interaction. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 259, p. 177 – 196, 2013. ISSN 0045-7825.
- SHAHSAVARI, H.; NAGHDABADI, R.; BAGHANI, M.; SOHRABPOUR, S. A finite deformation viscoelastic–viscoplastic constitutive model for self-healing materials. **Smart Materials and Structures**, IOP Publishing, v. 25, n. 12, p. 125027, nov 2016.
- SHAMSUNDAR, N.; SPARROW, E. M. Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model. **ASME Journal of Heat Transfer**, v. 97, p. 333–340, ago. 1975.
- SIMO, J. Algorithms for static and dynamic multiplicative plasticity that preserve the classical return mapping schemes of the infinitesimal theory. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 99, n. 1, p. 61 – 112, 1992. ISSN 0045-7825.
- SIMO, J.; HUGHES, T. **Computational Inelasticity**. [S.l.]: Springer New York, 2000. (Interdisciplinary Applied Mathematics). ISBN 9780387975207.
- SIMO, J. C. On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 60, n. 2, p. 153–173, 1987. ISSN 00457825.
- SIMO, J. C.; WRIGGERS, P.; TAYLOR, R. L. A perturbed lagrangian formulation for the finite element solution of contact problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 50, n. 2, p. 163 – 180, 1985. ISSN 0045-7825.
- SOLBERG, J. M.; PAPADOPOULOS, P. A finite element method for contact/impact. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 30, n. 4, p. 297 – 311, 1998. ISSN 0168-874X.
- SONG, S.; YOVANOVICH, M. Relative contact pressure: Dependence on surface roughness and vickers microhardness. v. 2, p. 43–47, 01 1988.
- STOJANOVIĆ, R.; DJURIĆ, S.; VUJOSEVIĆ, L. On finite thermal deformations. **Arhivum Mehaniki Stosowanej**, v. 1, n. 16, p. 103–108, 1964.
- SVENDSEN, B. A thermodynamic formulation of finite-deformation elastoplasticity with hardening based on the concept of material isomorphism. **International Journal of Plasticity**, v. 14, n. 6, p. 473 – 488, 1998. ISSN 0749-6419.
- SVENDSEN, B.; ARNDT, S.; KLINGBEIL, D.; SIEVERT, R. Hyperelastic models for elastoplasticity with non-linear isotropic and kinematic hardening at large deformation. **International Journal of Solids and Structures**, v. 35, n. 25, p. 3363 – 3389, 1998. ISSN 0020-7683.
- SZE, K.; ZHENG, S.-J.; LO, S. A stabilized eighteen-node solid element for hyperelastic analysis of shells. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 40, n. 3, p. 319–340, 2004. ISSN 0168-874X.

TAYLOR, C.; HOOD, P. A numerical solution of the navier-stokes equations using the finite element technique. **Computers and Fluids**, v. 1, n. 1, p. 73–100, 1973. ISSN 0045-7930.

TAYLOR, G. I.; QUINNEY, H. The latent energy remaining in a metal after cold working. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 143, n. 849, p. 307–326, 1934.

TAYLOR, R. L.; PAPADOPOULOS, P. On a finite element method for dynamic contact/impact problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, John Wiley & Sons, Ltd, v. 36, n. 12, p. 2123–2140, 1993. ISSN 1097-0207.

TEZDUYAR, T. Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations††this research was sponsored by nasa-johnson space center (under grant nag 9-449), nsf (under grant msm-8796352), u.s. army (under contract daal03-89-c-0038), and the university of paris vi. In: HUTCHINSON, J. W.; WU, T. Y. (Ed.). [S.l.]: Elsevier, 1991, (Advances in Applied Mechanics, v. 28). p. 1–44.

TEZDUYAR, T.; BEHR, M.; LIOU, J. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the deforming-spatial-domain/space-time procedure: I. the concept and the preliminary numerical tests. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 94, n. 3, p. 339–351, 1992. ISSN 0045-7825.

TEZDUYAR, T.; MITTAL, S.; RAY, S.; SHIH, R. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 95, n. 2, p. 221–242, 1992. ISSN 0045-7825.

TRUESDELL, C.; TRUESDELL, C.; NOLL, W.; ANTMAN, S.; NOLL, W. **The Non-Linear Field Theories of Mechanics**. [S.l.]: Springer, 2004. (The non-linear field theories of mechanics, v. 3). ISBN 9783540027799.

TSAKMAKIS, C.; WILLUWEIT, A. Use of the elastic predictor-plastic corrector method for integrating finite deformation plasticity laws. In: HUTTER, K.; BAASER, H. (Ed.). **Deformation and Failure in Metallic Materials**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003. p. 79–106. ISBN 978-3-540-36564-8.

TURNER, M.; CLOUGH, R.; MARTIN, H.; TOPP, L. Stiffness and deflection analysis of complex structures. **Journal of Aeronautical Sciences**, v. 23, n. 9, p. 805–823, 1956.

TURNER, M.; DILL, E.; MARTIN, H. Large deflections of structures subjected to heating and external loads. **Journal of the Aerospace Sciences**, v. 26, n. 2, p. 97–106, 1960.

VASILYEVA, M.; AMMOSOV, D.; VASIL'EV, V. Finite element simulation of thermo-mechanical model with phase change. **Computation**, MDPI, v. 9, n. 1, p. 5, 2021.

VLADIMIROV, I. N.; PIETRYGA, M. P.; REESE, S. On the modelling of non-linear kinematic hardening at finite strains with application to springback – comparison of time integration algorithms. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 75, n. 1, p. 1–28, 2007.

VLADIMIROV, I. N.; PIETRYGA, M. P.; REESE, S. Anisotropic finite elastoplasticity with nonlinear kinematic and isotropic hardening and application to sheet metal forming. **International Journal of Plasticity**, v. 26, n. 5, p. 659 – 687, 2010. ISSN 0749-6419.

- VOLLER, V. R.; SWAMINATHAN, C.; THOMAS, B. G. Fixed grid techniques for phase change problems: a review. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 30, n. 4, p. 875–898, 1990.
- VUJOŠEVIĆ, L.; LUBARDA, V. Finite-strain thermoelasticity based on multiplicative decomposition of deformation gradient. **Theoretical and applied mechanics**, n. 28-29, p. 379–399, 2002.
- WANG, Z.; ZHAO, Y. Thermo-hyperelastic models for nanostructured materials. **Science China: Physics, Mechanics and Astronomy**, v. 54, p. 948–956, 05 2011.
- WILLIAMS, T.; KELLEY, C. **Gnuplot 4.6: an interactive plotting program**. 2013. <<http://gnuplot.sourceforge.net/>>.
- WRIGGERS, P. **Computational Contact Mechanics**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2006. ISBN 9783540326090.
- YANG, B.; LAURSEN, T. A.; MENG, X. Two dimensional mortar contact methods for large deformation frictional sliding. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 62, n. 9, p. 1183–1225, 2005.
- YU, J.-S.; MANIATTY, A. M.; KNORR, D. B. Model for predicting thermal stresses in thin polycrystalline films. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 45, n. 4, p. 511 – 534, 1997. ISSN 0022-5096.
- ZABARAS, N.; RUAN, Y. Moving and deforming finite-element simulation of two-dimensional stefan problems. **Communications in Applied Numerical Methods**, v. 6, n. 7, p. 495–506, 1990.
- ZAVARISE, G.; WRIGGERS, P.; SCHREFLER, B. A. On augmented lagrangian algorithms for thermomechanical contact problems with friction. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 38, n. 17, p. 2929–2949, 1995.
- ZAVARISE, G.; WRIGGERS, P.; STEIN, E.; SCHREFLER, B. A. Real contact mechanisms and finite element formulation—a coupled thermomechanical approach. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 35, n. 4, p. 767–785, 1992.
- ZENER, C. M.; SIEGEL, S. Elasticity and anelasticity of metals. **The Journal of Physical Chemistry**, ACS Publications, v. 53, n. 9, p. 1468–1468, 1949.
- ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R. **The Finite Element Method: Fluid dynamics**. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000. (The Finite Element Method). ISBN 9780340759837.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. **The finite element method for solid and structural mechanics**. [S.l.]: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. 733 p. ISBN 9780750664318.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; WU, J. Incompressibility without tears—how to avoid restrictions of mixed formulation. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 32, n. 6, p. 1189–1203, 1991.

