



**António Gil d'Orey
de Andrade Campos**

**Modelação e Análise Numérica do Comportamento
Mecânico e Térmico de Ligas de Alumínio**

**Numerical Analysis and Modelling of the Mechanical
and Thermal Behaviour of Aluminium Alloys**





**António Gil d'Orey
de Andrade-Campos**

**Modelação e Análise Numérica do Comportamento
Mecânico e Térmico de Ligas de Alumínio**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação científica do Dr. Filipe Teixeira-Dias, Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, e do Dr. Fernando Neto da Silva, Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro.

Apoio financeiro da FCT e do FSE
no âmbito do III Quadro Comunitário
de Apoio.

o júri

presidente

Prof. Dr. Maria Celeste da Silva do Carmo
Professora Catedrática da Universidade de Aveiro

Prof. Dr. Paulo António Firme Martins
Professor Catedrático do Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa

Prof. Dr. José Joaquim de Almeida Grácio
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Prof. Dr. Luís Filipe Martins Menezes
Professor Associado com agregação da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Prof. Dr. Rogério Augusto da Costa Pereira Leal
Professor Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Prof. Dr. José Luís Martins Alves
Professor Auxiliar da Universidade do Minho

Prof. Dr. Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

Prof. Dr. Fernando José Neto da Silva
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

agradecimentos

Ao Professor Doutor Filipe Teixeira-Dias. Pelo grande desafio que me lançou, pela confiança, incentivo e disponibilidade manifestadas. Também pelas discussões proveitosas que tivemos, por vezes em oposição, e pela amizade, sempre demonstrada ao longo destes anos, contribuíram fortemente para o trabalho representado na presente dissertação e para o meu desenvolvimento científico. O meu enorme obrigado.

Ao Professor Doutor Fernando Neto. Pela disponibilidade, encorajamento e optimismo, para além da amizade que sempre me dispensou. Também pelo apoio na actividade de docência nestes últimos anos.

Ao Professor Doutor José Grácio, pela maneira como fui recebido no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, pelos meios disponibilizados, oportunidades oferecidas e pelo constante auxílio nas tarefas experimentais.

Ao Professor Doutor Luís Filipe Menezes, professor do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Coimbra, pela constante disponibilidade, interesse e apoio demonstrado ao longo dos anos decorrentes deste trabalho. As conversas que tivemos contribuíram, de forma essencial, na orientação e rumo dos trabalhos aqui apresentados.

Ao Engenheiro Alexandre Cruz, colega de gabinete, gostaria de agradecer o apoio, colaboração e amizade que me proporcionou. As infindáveis horas de discussão e conversa que tivemos durante o desenrolar deste trabalho, nos laboratórios onde passámos ou mesmo nos corredores, têm sido de uma importância extrema. Agradeço também o elevado conhecimento e curiosidade científica demonstrada.

Ao Engenheiro João Alexandre Oliveira, colega de investigação e grande amigo. Pela companhia nesta caminhada, boa disposição e constante apoio. As muitas horas à mesa de restaurantes, acompanhadas por um constante bom humor, permitiram conversas frutuosas e de grande interesse científico que, posteriormente, ajudaram à concretização deste trabalho. Obrigado pelos ensinamentos "gráficos".

De salientar, também, aqueles que me receberam no *Laboratoire de Génie Mécanique et Matériaux* (LG2M) da *Université de Bretagne-Sud*, onde realizei uma parte importante deste trabalho. À Professora Doutora Sandrine Thuillier e ao Professor Doutor Philippe Pilvin, agradeço a forma calorosa com que me receberam no seio do Laboratório e todos os meios disponibilizados para o desenvolvimento do meu trabalho.

Ao Stéphane Catalao, meu colega de gabinete durante a estadia no LG2M, em França. Pela amizade e interesse sempre manifestados e pelo ambiente de trabalho proporcionado.

Ao Professor Doutor Rogério Leal. Pelo auxílio na iniciação aos Algoritmos genéticos e pelo despertar do meu interesse na área da optimização. Também por me transmitir uma parte das suas altas competências pedagógicas e científicas.

Ao Professor Doutor Paulo Martins, do Grupo de Deformação Plástica do Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa, pela disponibilidade e gentileza demonstradas durante algumas visitas ao IST e pelos esclarecimentos sobre o programa I-FORM.

Aos colegas professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, em particular ao Professor Doutor António Sousa, ao Professor Doutor José Simões e à Professora Doutora Mónica Oliveira, o meu agradecimento pelo acolhimento proporcionado e pelo incentivo pessoal demonstrado.

Ao Miguel Sardinha. Pelo constante apoio e ajuda indispensável nos momentos de grande aflição com o material informático. Também pelas inúmeras conversas que tivemos sobre programação, que me permitiram ter uma visão alargada sobre este universo.

À Joana Cortez, pela amizade e pela ajuda que me proporcionou na correcção dos esboços desta dissertação.

Aos meus colegas do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, em especial ao Eng. Gil Cabral, o meu obrigado pelas palavras de apoio e amizade. Ao Sr. Ventura, D. Cecília e D. Isabel, pela ajuda que me deram em todos os problemas logísticos.

À Fundação Portuguesa para a Ciência e a Tecnologia, por todo o apoio através da bolsa de Doutoramento SFRH/BD/3273/2000, e do *Programa Operacional Ciência, Tecnologia, Inovação* do Quadro Comunitário de Apoio III, FEDER.

Aos meus amigos do CAMTIL, da Companhia de Jesus, CVX, Tubaralho-Team e Carlos-Seixas que directa ou indirectamente contribuíram com o seu esforço e apoio para a concretização deste objectivo pessoal.

À minha família, cujo apoio incondicional sempre pude contar e como só ela sabe dar. A presença deles foi fundamental para que esta tese chegasse ao fim. Ao meu irmão, a quem devo os primeiros passos num teclado de computador, e ao meu Pai que, apesar de estarmos ocasionalmente em oposição, constitui exemplo para mim.

À João. Por tudo... e sempre!

palavras-chave

Modelo termoelástico-viscoplástico, acoplamento termomecânico, ligas de alumínio, elementos finitos, identificação de parâmetros, algoritmos evolucionários.

resumo

Neste trabalho desenvolve-se e implementa-se um modelo matemático tridimensional conducente à simulação do comportamento térmico e mecânico das ligas de alumínio. O objectivo é a simulação de processos tecnológicos que envolvam deformações termomecânicas nestas ligas.

Neste âmbito, introduz-se uma formulação cinemática preparada para processos em grandes deformações e rotações. Considera-se um modelo constitutivo termoelástico-viscoplástico baseado num conjunto de variáveis de estado internas e externas e com o qual é possível modelar os fenómenos de encruamento e restauração estática e dinâmica do material. Este modelo, preparado para gamas de temperatura que vão desde a temperatura de solidificação até à temperatura ambiente, é implementado recorrendo a uma formulação lagrangeana reactualizada e a um método de integração temporal semi-implícito.

O comportamento térmico do material é modelado recorrendo a um algoritmo do tipo *previsão-correcção*. A fase de *previsão* é baseada num esquema semi-implícito, com o qual é possível determinar uma primeira estimativa para a configuração final do incremento. A solução semi-implícita é corrigida na fase de *correcção*, recorrendo a um esquema implícito do tipo Newton-Raphson. A solução de acoplamento termomecânico, que envolve a implementação de um modelo termoplástico, é encontrada recorrendo a uma abordagem *staggered*.

Desenvolve-se um programa específico, baseado em algoritmos evolucionários, para a determinação dos parâmetros materiais associados ao modelo constitutivo. A eficiência do método utilizado, que conduz a resultados excelentes, é comparada com um método baseado no gradiente.

Realizam-se testes numéricos com o objectivo de validar os modelos e algoritmos implementados. Descreve-se um ensaio numérico de têmpera de um sólido de geometria complexa e analisam-se e discutem-se os resultados obtidos. As simulações efectuadas confirmam o bom desempenho do programa quer em problemas mecânicos e térmicos quer em problemas com acoplamento termomecânico.

keywords

Thermoelastic-viscoplastic model, thermo-mechanical coupling, aluminium alloys, finite elements, material parameter identification, evolutionary algorithms.

abstract

A three-dimensional mathematical model is developed and presented leading to the simulation of the thermal and mechanical behaviour of aluminium alloys. The main goal is the simulation of specific technological processes that involve the thermo-mechanical deformation of aluminium alloys.

A kinematic formulation suitable for large deformations and rotations is introduced. A thermoelastic-viscoplastic constitutive model is considered based on a set of internal and external state variables and with which it is possible to model strain hardening and static and dynamic restoration effects. This model, prepared for temperature levels that range from the solidification temperature to room temperature, is implemented with an updated lagrangean formulation and a forward gradient time integration procedure.

The thermal behaviour of the material is modelled with a *prediction-correction* algorithm. The *prediction* stage is based on a semi-implicit scheme and is used to determine a first estimate of the final configuration of the increment. This first solution is then corrected using a Newton-Raphson implicit scheme. A thermoplastic model is implemented and a *staggered* approach is adopted for the solution of the thermo-mechanical coupling problem.

A specific program, based on evolutionary algorithms, is developed in order to determine the large number of material parameters associated to the constitutive model. The efficiency of the method developed for this particular purpose is compared with a gradient based method, leading to excellent results.

Numerical tests are performed in order to validate the set of implemented models and algorithms. The numerical simulation of the quenching of a geometrically complex solid is presented and its results are thoroughly analysed and discussed. Results from the numerical simulations confirm the good performance of the program in mechanical, thermal and thermo-mechanically coupled problems.

mots clés

Modèle thermoélasto-viscoplastique, couplage thermomécanique, alliages d'aluminium, éléments finis, identification des paramètres, algorithmes évolutionnaires.

résumé

Au cours de ce travail, un modèle mathématique tridimensionnel pour la simulation du comportement thermique et mécanique des alliages d'aluminium a été développé et implémenté. L'objectif est la simulation des processus industriels des alliages d'aluminium dans le cas de sollicitations thermomécaniques.

Dans ce contexte, une formulation cinématique développée pour des processus en grandes déformations et rotations a été introduite. Le modèle constitutif est un modèle thermoélasto-viscoplastique basé sur un ensemble de variables d'état externes et internes et avec lequel il est possible modéliser avec précision les phénomènes d'écroutissage et de restauration statique et dynamique du matériau. Ce modèle, préparé pour un domaine de températures allant de l'ambiante à la température de fusion, est mis en oeuvre avec une formulation lagrangienne réactualisée et un schéma d'intégration temporelle semi-implicite.

Le comportement thermique du matériel est modélisé en utilisant un algorithme du type *prédicteur-correcteur*. Le *prédicteur* est basé sur un schéma semi-implicite et fournit une première estimation de la configuration à la fin du pas. Il est ensuite relayé par le *correcteur* qui est basé sur un schéma implicite de type Newton-Raphson. Un modèle thermoplastique a été implémenté et la solution du couplage thermomécanique est trouvée par un schéma *staggered*.

Un logiciel d'identification des paramètres du modèle de comportement en utilisant des algorithmes évolutionnaires a été développé. La méthode utilisée, qui conduit à des résultats excellents, a été comparée avec une méthode basée sur le gradient.

Des essais numériques ont été utilisés pour la validation des modèles et des algorithmes mis en oeuvre. Un essai numérique de trempe d'un solide de géométrie complexe d'un alliage d'aluminium d'une série 2000 a été présenté. Les résultats obtenus ont été analysés et discutés. Les simulations effectuées confirment les bonnes performances du programme aussi bien pour des sollicitations mécaniques ou thermiques, que pour des cas de couplages thermomécaniques.

"Employ another metal instead of iron."

"Copper?" said Morgan.

"No! that would be too heavy. I have better than that to offer."

"What then?" asked the major.

"Aluminium!" replied Barbicane.

"Aluminium?" cried his three colleagues in chorus.

"Unquestionably, my friends. This valuable metal possesses the whiteness of silver, the indestructibility of gold, the tenacity of iron, the fusibility of copper, the lightness of glass. It is easily wrought, is very widely distributed, forming the base of most of the rocks, is three times lighter than iron, and seems to have been created for the express purpose of furnishing us with the material for our projectile."

Júlio Verne
em *From the Earth to the Moon*, 1865

Conteúdo

I	Enquadramento	1
1	Introdução	3
1.1	O Trabalho Apresentado	3
1.2	Modelação Matemática	4
1.3	Métodos Numéricos	4
1.4	Objectivos e Desafios Tecnológicos	5
1.5	Guia de Leitura	5
1.6	Terminologia Utilizada	8
2	As Ligas de Alumínio — Generalidades	9
2.1	Introdução	9
2.2	Princípios Básicos	10
2.3	Processo de Fabrico e Transformação	10
2.4	Constituição, Propriedades e Microestrutura	13
2.5	Endurecimento por Precipitação e Tratamentos Térmicos	16
2.6	Encruamento e Mecanismos de Deformação	20
2.7	Aplicações	23
2.7.1	Indústria aeroespacial	24
2.7.2	Indústria automóvel	25
2.7.3	Indústria de embalagem e acondicionamento	26
3	Investigação e Desenvolvimento — O Estado da Arte	29
3.1	Introdução	29
3.2	Modelos Constitutivos	30
3.3	Identificação de Parâmetros dos Modelos Constitutivos	31
3.4	Influência da Temperatura	32
3.5	Acoplamento Termomecânico	33
3.5.1	Estratégias de acoplamento	34
3.6	Cálculo Paralelo de Sistemas Acoplados	38
II	Modelação Matemática	41
4	Cinemática dos Meios Contínuos	43
4.1	Introdução	43
4.2	Relações Cinemáticas	44

4.3	Objectividade	49
4.4	Derivada Objectiva da Tensão	50
4.5	Referencial da Lei Constitutiva	51
5	Modelação Constitutiva	53
5.1	Introdução	53
5.1.1	Modelos constitutivos de variáveis internas	54
5.2	Modelo de Comportamento Mecânico	55
5.3	Outros Modelos de Comportamento de Variável Interna	60
5.3.1	Modelo de Nix e Gibeling	60
5.3.2	Modelo de Prinz e Argon	62
5.3.3	Modelo de Miller e Sherby	63
5.3.4	Modelo de Brown e Anand	64
6	Comportamento Termomecânico	67
6.1	Introdução	67
6.2	Comportamento Térmico	68
6.2.1	O efeito da temperatura sobre a resposta mecânica	70
6.2.2	O efeito térmico da deformação plástica	70
6.3	Modelo Termoplástico	71
6.4	Outros Modelos Termoplásticos	72
6.4.1	Modelos baseados em variáveis de estado internas	72
6.4.2	Modelos baseados na teoria clássica dos processos irreversíveis	73
6.4.3	Outros modelos termoplásticos	74
7	Discretização e Integração Temporal do Modelo Constitutivo	77
7.1	Introdução	77
7.2	Integração Temporal do Modelo Mecânico	78
7.2.1	Referencial de ortotropia	78
7.2.2	Determinação do incremento de deformação e rotação	79
7.2.3	Determinação do incremento de deformação plástica	80
7.2.4	Módulo elastoviscopoplástico secante	85
7.3	Equações de Equilíbrio e Condições de Fronteira	86
7.4	Formulação Variacional do Problema	87
7.4.1	Princípio das potências virtuais	87
7.4.2	Formulação lagrangeana reactualizada	88
7.4.3	Discretização do princípio das potências virtuais	89
7.5	Cálculos Elementares	90
7.5.1	Sistema global de equações	91
8	Problema Térmico - Discretização e Integração Temporal	93
8.1	Introdução	93
8.2	Determinação da Equação Discretizada	94
8.3	Integração Temporal do Problema Térmico	97
8.3.1	Método semi-implícito	97
8.3.2	Método implícito	98
8.3.3	Regime estacionário	101

8.4	Convergência e Estabilidade	102
8.4.1	Violação da realidade física	103
8.4.2	Oscilações numéricas	104
8.4.3	Diagonalização da matriz capacitância	106
8.4.4	Universo de utilização dos métodos de integração	106
8.5	Algoritmo de Previsão/Correcção - Interesse na Previsão	107
9	O Programa NOSTRADAMUS	111
9.1	Introdução	111
9.2	Elementos Finitos	112
9.2.1	Tipo de elementos	112
9.2.2	Interpolação isoparamétrica	112
9.2.3	Integração volúmica	114
9.2.4	Métodos de integração	115
9.2.5	Gradientes de temperatura em elementos lineares	118
9.3	Algoritmos Mais Relevantes	119
9.3.1	Visão global do programa	119
9.3.2	Algoritmo da fase de cálculo	119
9.3.3	Cálculo do tensor rotação	121
9.3.4	Resolução do sistema global	123
9.3.5	Aplicação e atribuição das condições de fronteira	125
9.4	Perspectiva do Utilizador	127
9.4.1	A fase de pré-processamento	128
9.4.2	A fase de pós-processamento	129
9.4.3	Integração gráfica	130
10	Identificação de Parâmetros de Modelos Constitutivos	131
10.1	Introdução	131
10.2	Método de Identificação: Problema Inverso	132
10.3	Metodologia de Identificação	133
10.3.1	Formulação do problema de identificação	133
10.3.2	Problema de optimização	134
10.4	Método de Optimização Baseado no Gradiente	136
10.4.1	Método dos gradientes	136
10.4.2	Programa de optimização S1DoLo	139
10.5	Método de Optimização Baseado em Algoritmos Evolucionários	140
10.5.1	Algoritmos evolucionários para um espaço de busca real	141
10.5.2	Comparação com AG clássicos	144
10.5.3	Programa ADAPCO	147
III	Resultados, Validação e Discussão	149
11	Identificação dos Parâmetros do Modelo de Comportamento	151
11.1	Introdução	151
11.2	Universo dos Parâmetros	152
11.3	Análise Experimental	154

11.3.1	Liga de alumínio AA1050-O	154
11.3.2	Alumínio puro	155
11.4	Resultados do Método Baseado no Gradiente	155
11.5	Resultados do Método Baseado em Algoritmos Evolucionários	162
11.6	Análise Comparativa dos Métodos de Optimização	165
11.7	Conclusões	166
12	Validação Numérica	169
12.1	Introdução	169
12.2	Problema Mecânico em Grandes Deformações	169
12.2.1	Ensaio de flexão de uma viga	170
12.3	Problema Térmico	175
12.3.1	Estudo de uma placa plana com temperatura prescrita	175
12.3.2	Estudo de uma placa plana com convecção	177
12.3.3	Estudo da condução de calor entre dois materiais	180
12.3.4	Estudo do arrefecimento de uma placa plana	182
12.4	Acoplamento Termomecânico	185
12.4.1	Expansão de uma barra com temperatura prescrita	186
12.4.2	Ensaio de compressão de um cilindro sem atrito	189
12.4.3	Ensaio de tracção do aço 304 — resultados experimentais e numéricos	194
12.5	Conclusões	203
13	Modelação de Tratamentos Térmicos	205
13.1	Introdução	205
13.2	Têmpera de Sólidos Complexos	206
13.3	Dificuldades na Simulação do Processo de Têmpera	206
13.4	Tempera de um Rotor de Alumínio Forjado	208
13.4.1	Modelo geométrico e malha de elementos finitos	209
13.4.2	Condições fronteira e propriedades do material	210
13.4.3	Resultados	213
13.5	Conclusões	222
14	Considerações Finais	227
14.1	Conclusões Gerais	228
14.2	Perspectivas de Trabalho Futuro	230
A	Notações, Nomenclatura e Siglas	233
A.1	Notações Algébricas	233
A.2	Operadores e Funções	234
A.3	Índices	234
A.3.1	Sub-índices	234
A.3.2	Super-índices	234
A.4	Relações Menos Usuais	235
A.5	Siglas	235
A.6	Mecânica dos Meios Contínuos	235
A.7	Modelação Constitutiva	236
A.8	Comportamento Termomecânico	237

A.9	Métodos Numéricos	238
A.10	Discretização por Elementos Finitos	238
A.11	Identificação de Parâmetros de Modelos Constitutivos	239
B	Cálculos Adicionais	241
B.1	Cálculo do Tensor Gradiente de Velocidade	241
B.2	Decomposição do Gradiente de Velocidade	241
B.3	Tensor de Rotação Logarítmico	242
B.4	Lei de Comportamento Hipoelástica	242
B.5	Cálculo da Relação Constitutiva para \mathbf{D}^{VP}	243
C	Considerações Sobre a Termodinâmica da Plasticidade	245
C.1	Princípios Básicos	245
C.2	Equação da Evolução da Temperatura	247
D	Violação da Realidade Física — Exemplo	249
	Bibliografia	251

Lista de Figuras

2.1	Resistência à tracção das ligas de alumínio (R_m). Comparação com outras ligas metálicas. Tensão limite de elasticidade média das ligas de alumínio. . .	16
2.2	Representação esquemática do processo de endurecimento por precipitação. . .	19
2.3	Distribuição da produção de ligas de alumínio nas diferentes indústrias. . . .	24
2.4	Airbus A380, no qual se utilizam uma grande parte de componentes em novas ligas de alumínio.	25
2.5	Cabeça de cilindro do Saab GM L850 totalmente feita em liga de alumínio.	26
2.6	Ferrari 612 Scaglietti, que recorre à utilização de uma estrutura leve e rígida em liga de alumínio, para aumentar a <i>performance</i> . A sua estrutura em liga de alumínio, desenvolvida pela ALCOA, é 37% mais leve que a estrutura comparável em aço e oferece uma melhoria de 58% em rigidez de torsão comparativamente à de aço utilizado no Ferrari 456.	26
2.7	O novo protótipo da PININFARINA contém um chassis de estrutura tubular feita de alumínio extrudido ligado por resinas epóxicas.	27
2.8	(a) Latas de refrigerantes feitas de alumínio e (b) lata de liga de alumínio com a forma de garrafa.	27
3.1	Estratégias de acoplamento: (a) tratamento simultâneo e tratamento sequencial de (b) forma paralela e (c) de forma sucessiva dos vários domínios	38
3.2	Estratégias de acoplamento com tratamento sequencial dos diferentes domínios (a) de forma paralela e (b) de forma sucessiva com auxílio da computação paralela.	39
4.1	Representação esquemática da transformação cinemática de um meio contínuo genérico Ψ . Representação da configuração actual, C_t , e da configuração de referência, C_0 , do meio nos instantes de tempo presente, t , e inicial do incremento, t_0 , respectivamente.	45
4.2	Representação esquemática dos dois métodos de decomposição polar da transformação \mathbf{F}	46
4.3	Representação esquemática da decomposição do gradiente de transformação \mathbf{F} nas respectivas partes termoelástica e viscoplástica.	47
6.1	Representação esquemática genérica das condições de fronteira num meio sólido Ω	69

7.1	Ponderação da avaliação do tensor velocidade de deformação viscoplástica relativamente aos instantes de partida t e de chegada $t + \Delta t$	81
7.2	Interpretação gráfica dos módulos elastoviscoplasticos tangente e secante.	82
8.1	Método de Newton-Raphson para eliminação do resíduo.	100
8.2	Cálculo iterativo do problema térmico pelo método de Newton-Raphson.	101
8.3	Regiões de operação para as formulações de elementos finitos consistente e diagonalizada.	107
8.4	Esquema de integração temporal.	108
9.1	Representação dos elementos finitos tetraédricos, de um e quatro pontos de integração, e hexaédrico, respectivamente, no sistema de coordenadas canónicas $\xi \equiv (\xi, \eta, \zeta)$ e no sistema de coordenadas globais cartesianas $\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$. Os nós são indicados pelo símbolo \circ e os pontos de Gauss pelo símbolo \square	113
9.2	Representação esquemática da mudança de referencial ao longo do cálculo tensorial.	121
9.3	Representação esquemática do princípio de funcionamento do programa NOSTRADAMUS na perspectiva do utilizador. Destaca-se a total integração gráfica no programa GiD [®]	127
9.4	Janela de início da interface TriCreator no GiD [®]	128
9.5	Interface TriCreator no programa GiD [®] : (a) janela atribuição das propriedades dos materiais e (b) janela de atribuição dos parâmetros de cálculo numéricos.	129
9.6	Janela de especificação do tipo de problema e dos parâmetros do processo tecnológico. Interface TriCreator no programa GiD [®]	130
10.1	Metodologia do problema inverso na identificação de parâmetros.	133
10.2	Mínimos locais do funcional não-linear $\mathcal{L}(\mathbf{A})$	135
10.3	Representação tridimensional do funcional I.	145
10.4	Representação tridimensional do funcional II.	145
10.5	Representação tridimensional do funcional III.	146
10.6	Representação tridimensional do funcional IV.	146
10.7	Evolução do valor médio do funcional objectivo para o funcional I com os diferentes algoritmos testados.	147
10.8	Evolução do valor médio do funcional objectivo para o funcional II com os diferentes algoritmos testado.	147
10.9	Evolução do valor médio do funcional objectivo para o funcional III com os diferentes algoritmos testados.	148
10.10	Evolução do valor médio do funcional objectivo para o funcional IV com os diferentes algoritmos testados.	148
11.1	Montagem experimental utilizada nos ensaios de tracção uniaxial e de corte puro a diferentes temperaturas. (a) Preparação e (b) ensaio.	155
11.2	Curvas experimentais $\sigma - \varepsilon$ para os ensaios de tracção uniaxial a diferentes temperaturas.	156

11.3	Curvas experimentais $\tau - \gamma$ para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas.	156
11.4	Evolução da deformação ao longo do tempo para os ensaios de tracção uniaxial e para os diferentes valores de temperatura.	157
11.5	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção realizados a velocidade de deformação constante ($\dot{\epsilon} = 0.167 \text{ s}^{-1}$) e a três temperaturas [Miller e Sherby 78].	157
11.6	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção uniaxial a diferentes temperaturas (AA1050-O). Comparação entre os resultados experimentais e os numéricos.	160
11.7	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas (AA1050-O). Comparação entre os resultados experimentais e os numéricos.	160
11.8	Evolução do erro entre os valores observados experimentalmente e os diferentes conjuntos de parâmetros ao longo da evolução do cálculo iterativo.	161
11.9	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção uniaxial. Comparação entre os resultados experimentais [Miller e Sherby 78] e numéricos com o conjunto de parâmetros encontrados para o alumínio puro.	162
11.10	Evolução do erro relativo global para diferentes tamanhos de população. Tempo despendido por cada teste.	163
11.11	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção uniaxial a diferentes temperaturas. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos.	164
11.12	Curvas de tensão-deformação para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos.	164
11.13	Comparação da convergência dos métodos baseados em algoritmos evolucionários e no gradiente.	166
12.1	Dimensões do provete utilizado no ensaio de flexão.	170
12.2	Perfil inferior da secção $y = 0$ e ângulo do referencial de rotação ao longo do provete utilizado no ensaio de flexão.	172
12.3	Isovalores da tensão σ_{xx} no final do ensaio de flexão para (a) integração completa e (b) integração reduzida selectiva (valores em MPa).	173
12.4	Isovalores de (a) deformação plástica equivalente, $\bar{\epsilon}^p$; (b) tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa]; (c) ângulo do referencial corrotacional, θ [°] e (d) variável interna s [MPa], para o ensaio de flexão H8SRI-IR.	174
12.5	Geometria e malha de elementos finitos utilizadas no estudo de uma placa plana com temperatura prescrita.	175
12.6	Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com temperatura prescrita.	176
12.7	Distribuição de temperatura ao longo da placa plana.	177
12.8	Isovalores (a) de temperatura (valores em °C) e (b) do fluxo de calor na direcção Ox (valores em Wm^{-2}) da placa plana com temperatura prescrita.	178
12.9	Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com condições de fronteira de convecção.	178
12.10	Distribuição de temperatura numa placa plana sujeita a convecção na fronteira.	179

12.11	Isovalores (a) da temperatura (valores em °C) e (b) do fluxo de calor na direcção Ox (valores em W/m^2) da placa plana com convecção.	180
12.12	Geometria e malha de elementos finitos utilizadas no estudo da condição de calor entre dois materiais.	180
12.13	Condições de fronteira atribuídas no estudo da condução de calor entre dois materiais.	181
12.14	Distribuição de temperatura entre dois materiais. Erro entre a solução numérica e a solução analítica.	182
12.15	Isovalores de temperatura (valores em °C) ao longo dos dois materiais.	182
12.16	Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com condições de fronteira de convecção.	183
12.17	Evolução de temperatura no tempo para a placa plana de resistência interna desprezável. Erro entre as soluções numérica e analítica.	185
12.18	(a) Geometria e malha de elementos finitos e (b) representação gráfica das condições fronteira utilizadas no ensaio de expansão de uma barra.	186
12.19	Evolução da temperatura no tempo em diferentes nós ao longo da barra.	187
12.20	Isovalores de temperatura [K] para $t = 100$ s (ampliação $300\times$).	188
12.21	Evolução do deslocamento na direcção x no tempo em diferentes nós ao longo da barra.	188
12.22	Evolução do deslocamento na direcção y no tempo em diferentes nós ao longo da barra. Evolução da tensão equivalente num nó estrangulado.	189
12.23	(a) Geometria do problema e (b) discretização em elementos finitos do modelo utilizado no ensaio de compressão de um cilindro.	190
12.24	Representação da malha de elementos finitos original e deformada (a) no plano Oxy e (b) visão 3D.	193
12.25	Curvas de tensão-deformação para o ensaio de compressão de um cilindro.	193
12.26	Curvas de temperatura-deformação para o ensaio de compressão de um cilindro.	194
12.27	Dimensões do provete utilizado no ensaio de tracção do aço 304.	195
12.28	Malha de elementos finitos utilizada no ensaio de tracção do aço 304.	195
12.29	Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 5 mm min^{-1}	197
12.30	Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 50 mm min^{-1}	197
12.31	Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 500 mm min^{-1}	198
12.32	Evolução da temperatura com a deformação no ensaio de tracção de um aço inox 304 às velocidades de 5, 50 e 500 mm/min	199
12.33	Ensaio de tracção do aço AISI 304 a 50 mm min^{-1} . Distribuições de temperatura obtidas por termografia e isovalores de temperatura obtidos numericamente para (a) e (b) $t = 6.7$ s; (c) e (d) $t = 13.2$ s; (e) e (f) $t = 20.0$ s.	200
12.34	Ensaio de tracção do aço AISI 304 a 50 mm min^{-1} . Distribuições de temperatura obtidas por termografia e isovalores de temperatura obtidos numericamente para (a) e (b) $t = 26.7$ s; (c) e (d) $t = 33.4$ s; (e) e (f) $t = 40.12$ s.	201

12.35	Ensaio de tracção do aço AISI 304. Isovalores da (a) deformação plástica equivalente $\bar{\epsilon}^P$; (b) tensão equivalente $\bar{\sigma}$ [MPa]; (c) tensão de corte τ_{xy} e (d) variável interna s [MPa] para $t = 46$ s.	202
13.1	Evolução do coeficiente de transferência de calor de película com a temperatura.	207
13.2	Coeficiente de transferência de calor para diferentes inclinações de uma superfície no arrefecimento em água a 373 K [Boër <i>et al.</i> 86].	208
13.3	Exemplos de rotores forjados: Rotores de compressão (a) de pá curva e (b) de pá direita. (c) Turbocompressor centrífugo.	209
13.4	(a) Modelo geométrico do rotor de alumínio forjado e (b) 1/4 da peça.	209
13.5	Malha elementos finitos utilizada no rotor de alumínio.	210
13.6	Condições de fronteira mecânicas: restrições ao deslocamento nos graus de liberdade dos nós.	210
13.7	Coeficiente de transferência de calor médio, \bar{h} , em função da temperatura.	211
13.8	Dependência de (a) k , c_p , (b) E e CET da temperatura para a liga de alumínio 2618.	212
13.9	Liga de alumínio 2618: (a) Evolução da tensão limite de elasticidade e (b) curvas de tensão-deformação a diferentes temperaturas.	213
13.10	Curvas de arrefecimento calculadas de nós seleccionados.	214
13.11	Velocidade de arrefecimento de nós seleccionados ao longo do processo de têmpera.	215
13.12	Distribuição de temperatura [K] na secção do rotor após imersão no fluido de têmpera.	216
13.13	Distribuição de temperatura [K] (a) na secção sem alheta e (b) na secção da alheta ($t = 27$ s).	217
13.14	Isovalores de temperatura [K] no rotor de alumínio ($t = 20$ s).	217
13.15	Modelo geométrico deformado após têmpera. (a) Perfil da secção deformada e (b) 1/4 do rotor deformado. Comparação com a geometria original (coeficiente de ampliação 3).	218
13.16	Deformação da face do furo interior do rotor de alumínio.	219
13.17	Evolução da tensão σ_{xx} ao longo do processo de têmpera do rotor.	219
13.18	Distribuição da tensão σ_{xx} [MPa] na secção do rotor após imersão no fluido de têmpera.	221
13.19	Tensões σ_{xx} [MPa] ao longo das superfícies (a) inferior e (b) superior da secção.	222
13.20	Tensões na superfície interior do furo do rotor: (a) tensão σ_{xx} [MPa] e (b) tensão σ_{yy} [MPa].	222
13.21	Isovalores (a) da deformação plástica equivalente, $\bar{\epsilon}^P$, e (b) de tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa], na secção do rotor no final do processo.	223
13.22	Influência da alheta na distribuição da tensão σ_{xx} [MPa] durante a têmpera. Distribuição da tensão σ_{xx} (a) na secção sem alheta e (b) na secção com alheta ($t = 50$ s).	223
13.23	Distribuição de tensões nas alhetas: (a) tensão σ_{yy} [MPa] e (b) tensão de corte τ_{yz} [MPa] no final da têmpera.	224
13.24	Isovalores da tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa], no rotor ($t = 50$ s).	225

D.1	Representação esquemática de uma vareta cilíndrica fina isolada. Modelação em elementos finitos unidimensionais.	249
D.2	Resultados finais, após o incremento de 1 s, do campo de temperaturas da vareta isolada.	250

Lista de Tabelas

2.1	Propriedades físicas e mecânicas de algumas ligas de alumínio [Aluselect database].	17
2.2	Resistência e dureza de algumas ligas de alumínio [Aluselect database].	18
2.3	Aplicações típicas de algumas ligas de alumínio.	24
3.1	Algoritmo de integração implícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento simultâneo dos domínios.	36
3.2	Algoritmo de integração explícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento sequencial dos domínios: solução paralela.	37
3.3	Algoritmo de integração explícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento sequencial dos domínios. Solução sucessiva.	37
8.1	Valores de Λ para cada método de integração temporal.	98
8.2	Algoritmo da solução implícita pelo método de Newton-Raphson.	101
9.1	Descrição sintética do algoritmo global do programa NOSTRADAMUS.	120
9.2	Descrição sintética do algoritmo da fase de cálculo térmico.	121
9.3	Descrição sintética do algoritmo da fase de cálculo mecânico do programa.	122
9.4	Descrição sintética do algoritmo dos cálculos elementares mecânicos.	123
9.5	Algoritmo do cálculo do tensor rotação pelo método da decomposição polar.	124
10.1	Algoritmo de otimização baseado em métodos do gradiente.	138
10.2	Estrutura básica de um algoritmo evolucionário.	140
10.3	Parâmetros internos para os diferentes algoritmos	146
11.1	Valores-limite para os parâmetros do modelo de comportamento.	152
11.2	Composição química da liga de alumínio AA1050-O.	154
11.3	Parâmetros utilizados para estimativa inicial no método do gradiente.	158
11.4	Erro relativo entre as curvas experimentais e as simuladas, obtido por cada conjunto de parâmetros após estagnação de cálculo.	159
11.5	Parâmetros obtidos pelo método do gradiente.	159
11.6	Conjunto de parâmetros do modelo de comportamento obtido para o alumínio puro.	162
11.7	Parâmetros constitutivos do material AA1050-O encontrados com o método baseado em algoritmos evolucionários.	165
12.1	Designações dos estudos efectuados.	170
12.2	Parâmetros do modelo constitutivo utilizados no ensaio de flexão.	171

12.3	Tempos de cálculo normalizados para os ensaios de flexão.	172
12.4	Propriedades do material e parâmetros de cálculo.	176
12.5	Propriedades do material e parâmetros do problema.	179
12.6	Propriedades do material e parâmetros do problema.	181
12.7	Propriedades do material e parâmetros do problema.	184
12.8	Incrementos de tempo utilizados em cada estudo.	184
12.9	Propriedades do material e parâmetros de cálculo.	187
12.10	Parâmetros do material utilizados no ensaio de compressão de um cilindro. .	191
12.11	Propriedades do material e parâmetros do estudo.	191
12.12	Parâmetros do material utilizados no ensaio de tracção do aço AISI 304. . .	196
12.13	Propriedades do material e parâmetros do estudo.	196
13.1	Composição química da liga de alumínio Al 2618.	211
13.2	Parâmetros do modelo constitutivo para a liga de alumínio 2618.	213
13.3	Propriedades do material e parâmetros do estudo.	214

Parte I

Enquadramento

Capítulo 1

Introdução

Introduz-se o trabalho dando realce a aspectos que justificam a sua realização e descreve-se o conteúdo da presente dissertação. Apresentam-se os objectivos globais do trabalho, justificando-os face aos desenvolvimentos actuais e aos desafios tecnológicos na área científica em que se inserem.

1.1 O Trabalho Apresentado

As ligas de alumínio têm presentemente uma aplicação industrial ainda limitada uma vez que não contemplam situações de exigência extrema como, por exemplo, as que surgem com frequência nas indústrias automóvel e aeroespacial. Estas limitações prendem-se com vários factores sendo alguns de ordem financeira e a maior parte de ordem tecnológica. Existem mesmo algumas questões para as quais não existe explicação científica plausível como, por exemplo, as particularidades de comportamento destas ligas em gamas de temperatura médias e elevadas.

A temperatura desempenha um papel preponderante no comportamento dos materiais metálicos e, em especial, nas ligas de alumínio. A interdependência entre o campo de temperaturas e o comportamento mecânico manifesta-se através de fenómenos físicos como, por exemplo, a expansão térmica do material e a geração de calor por deformação plástica.

A associação e interdependência de questões do foro mecânico, térmico e metalúrgico tornam o tratamento destes materiais muito complexo. Deste modo, é muito importante o desenvolvimento de meios tecnológicos, nomeadamente de simulação numérica, que permitam prever com eficiência essas particularidades de comportamento.

O trabalho apresentado nesta dissertação surge como consequência de todas as considerações anteriores e encontra-se estruturado na áreas referidas, ou seja: (i) pesquisa e estudo dos processos de fabrico e transformação de ligas de alumínio; (ii) constituição, propriedades e fenómenos envolvidos nos processos tecnológicos mais usuais; (iii) estudo das

estratégias numéricas de acoplamento termomecânico; (iv) modelos de comportamento mecânico e térmico; (v) métodos numéricos para a implementação dos modelos constitutivos referidos; (vi) desenvolvimento e implementação de algoritmos de cálculo; (vii) determinação dos parâmetros característicos envolvidos nos modelos implementados; (viii) validação dos modelos de comportamento e técnicas numéricas implementadas.

1.2 Modelação Matemática

O desenvolvimento de modelos matemáticos e sua implementação numérica, aplicáveis à simulação do comportamento termomecânico das ligas de alumínio, é uma tarefa de grande complexidade. Parte desta complexidade prende-se com o facto de a generalidade das leis constitutivas existentes para estes materiais serem fortemente não-lineares. Adicionalmente, a compatibilização entre os comportamentos mecânico e térmico aumenta consideravelmente a complexidade inerente à modelação matemática.

Durante o processamento tecnológico destes materiais, ou em situações extremas de serviço, desenvolvem-se frequentemente grandes deformações e grandes rotações. Os estados de tensão/deformação que resultam de solicitações mecânicas e térmicas impostas às ligas de alumínio podem ser complexos e dependem de inúmeros factores como, por exemplo, (i) a natureza e comportamento do material; (ii) a dependência deste comportamento da temperatura e do tempo; (iii) a influência da geometria dos componentes; (iv) o tipo de condições exteriores impostas às peças; (v) as eventuais mudanças de fase resultantes de variações extremas de temperatura e a sua coexistência no seio de uma mesma peça; etc. A modelação matemática e numérica do comportamento global destes materiais deverá tomar em consideração todos os factores relevantes na previsão de um dado estado de tensão/deformação. A elevada dependência do comportamento das ligas de alumínio da temperatura e da história de deformação exige a utilização de modelos termoelásticos-viscoplásticos. Estes modelos recorrem muitas vezes a variáveis de estado internas e externas.

1.3 Métodos Numéricos

A simulação dos processos tecnológicos que envolvem ligas de alumínio passa, necessariamente, pela utilização de métodos numéricos. De entre estes métodos, o método dos elementos finitos tem um papel fundamental e indispensável na investigação e desenvolvimento científico. Os métodos numéricos devem ser simultaneamente robustos, de forma a suportar as fortes não-linearidades dos modelos e eficientes, para que conduzam a uma relação qualidade/custo computacional favorável.

Os métodos numéricos aplicados e desenvolvidos ao longo deste trabalho deverão mostrar-se capazes de dar resposta às particularidades do comportamento mecânico e térmico das ligas metálicas a estudar.

Os métodos numéricos utilizados em simulação podem agrupar-se consoante o tipo de integração temporal realizada sobre as equações de movimento. Se esta tiver em conta os efeitos de inércia ou capacitivos, o método denomina-se dinâmico. Caso contrário, o modelo é denominado por quase-estático. Ambos estes métodos podem ser integrados de forma explícita, semi-implícita ou implícita. A escolha do tipo de integração depende,

directamente, do tipo de problema a resolver. Os problemas que envolvem um curto espaço de tempo são tipicamente dinâmicos e, geralmente, resolvidos de forma explícita. Nos processos quase-estáticos, as abordagens têm tendido para a integração implícita.

Na simulação pelo método dos elementos finitos, o modo como se leva a cabo a etapa de discretização é fundamental para a qualidade de resultados. A escolha do tipo de elemento finito deve tomar em consideração o equilíbrio entre o custo computacional, a precisão de resultados e o tipo de representação. A escolha de um elemento finito deve ter em conta a representação do meio contínuo da forma o mais realista possível.

1.4 Objectivos e Desafios Tecnológicos

Os processos de fabrico e transformação das ligas de alumínio estão largamente difundidos nas indústrias metalúrgicas e de transformação de materiais metálicos. Estes processos têm sofrido alterações significativas através dos tempos. A maioria destas alterações têm sido introduzidas como consequência dos resultados obtidos em estudos empíricos e de análises experimentais.

A simulação de processos de tratamento térmico das ligas de alumínio como, por exemplo, dos processos de endurecimento por precipitação (solubilização, têmpera e envelhecimento), permite um maior entendimento dos fenómenos envolvidos e consequente optimização do processo. Em relação aos estudos experimentais, a simulação numérica de todos estes processos apresenta as seguintes vantagens: (i) é mais rápida e mais económica do que a realização de ensaios experimentais, sendo possível obter um grande número de soluções em pouco tempo e (ii) permite pesar e analisar a influência de diferentes parâmetros tecnológicos. A simulação numérica pode assim contribuir para o desenvolvimento e optimização dos processos tecnológicos, conduzindo a ganhos económicos e avanços técnicos e científicos significativos.

Consequentemente, o objectivo principal do trabalho que aqui se apresenta é o desenvolvimento de um modelo matemático e a sua implementação num programa de cálculo numérico, recorrendo ao método dos elementos finitos. Pretende-se ainda que esse programa se revele capaz de simular processos tecnológicos que envolvam transformações termomecânicas em ligas de alumínio. De entre estes processos, destaca-se o tratamento térmico de têmpera pelos grandes gradientes térmicos e de tensão envolvidos. Adicionalmente, importa desenvolver e testar os modelos constitutivos dos materiais bem como desenvolver métodos que permitam determinar todos os parâmetros neles envolvidos.

1.5 Guia de Leitura

O presente texto está organizado em três partes distintas. Com a primeira parte, intitulada **Enquadramento**, da qual fazem parte os primeiros três capítulos, pretende-se enquadrar o trabalho. Descrevem-se as ligas de alumínio, as suas características e propriedades. São ainda discutidos os mecanismos de deformação, tratamentos térmicos e aplicações. Descreve-se também a situação actual em termos de modelação numérica e investigação e desenvolvimento.

Capítulo 1 – Introdz-se o trabalho dando realce a aspectos que justificam a sua realização e descreve-se o conteúdo da presente dissertação. Apresentam-se os objectivos

globais do trabalho, justificando-os face aos desenvolvimentos actuais e aos desafios tecnológicos na área científica em que se inserem.

Capítulo 2 – Apresentam-se algumas considerações e generalidades sobre as ligas de alumínio. Descrevem-se sucintamente os processos mais comuns envolvidos no fabrico e transformação destes materiais, assim como os tratamentos térmicos que lhe podem ser aplicados. Por fim, apresentam-se as propriedades e principais aplicações de ligas de alumínio comerciais.

Capítulo 3 – Fazem-se algumas considerações sobre a investigação e desenvolvimento no âmbito da simulação numérica de problemas com acoplamento termomecânico. Descrevem-se alguns modelos constitutivos existentes e frequentemente utilizados para simular processos tecnológicos bem como as dificuldades inerentes a cada tipo de modelo. Apresentam-se ainda algumas técnicas numéricas que permitem aumentar a eficiência computacional.

A segunda parte deste trabalho, intitulada **Modelação Matemática**, é constituída por sete capítulos relacionados com os modelos matemáticos e formulações numéricas dos processos termomecânicos a estudar. O programa de simulação desenvolvido é descrito. Apresenta-se ainda a metodologia envolvida na identificação dos parâmetros do modelo matemático.

Capítulo 4 – Introduzem-se as hipóteses e noções associadas à modelação cinemática em grandes deformações. Aborda-se a mecânica dos meios contínuos aplicada aos materiais metálicos submetidos a grandes transformações termoelásticas-viscoplásticas e definem-se os referenciais dos modelos constitutivos.

Capítulo 5 – Apresenta-se o modelo constitutivo adoptado na descrição do comportamento mecânico das ligas de alumínio. Enquadra-se o modelo de comportamento na classe dos modelos que utilizam variáveis internas para descrever o estado do material. Justifica-se a sua escolha. Apresentam-se modelos constitutivos de variável interna alternativos dependentes da velocidade de deformação quer isotérmicos quer dependentes da temperatura.

Capítulo 6 – Descreve-se o comportamento térmico dos materiais metálicos e a sua interdependência com o comportamento mecânico. Apresenta-se ainda o modelo termoplástico associado ao comportamento termomecânico destes materiais. Descrevem-se os efeitos da temperatura sobre a resposta mecânica e de geração de calor por deformação plástica.

Capítulo 7 – Descreve-se o método de integração temporal aplicado ao modelo constitutivo adoptado. Apresenta-se o método do gradiente progressivo a aplicar na integração temporal do problema mecânico. Determina-se o módulo elastoviscoplastico secante e o problema mecânico é discretizado pelo método dos elementos finitos.

Capítulo 8 – Apresentam-se as relações matemáticas discretizadas e os métodos de integração temporal para o problema térmico. Descreve-se pormenorizadamente o algoritmo global térmico do tipo *previsão-correcção*. Enquanto que a etapa de previsão utiliza a integração semi-implícita, a fase de correcção utiliza um esquema implícito

baseado no método de Newton-Raphson. Discutem-se a convergência e estabilidade dos algoritmos desenvolvidos.

Capítulo 9 – Apresenta-se o programa desenvolvido no decurso deste trabalho. Descreve-se o algoritmo de acoplamento termomecânico global e detalham-se os algoritmos de cálculo mais relevantes. Introduzem-se as técnicas de discretização espacial e os métodos de integração elementar. Descreve-se o programa na perspectiva do utilizador dando ênfase especial às fases de pré- e pós-processamento.

Capítulo 10 – Apresenta-se a metodologia geral da determinação de parâmetros de modelos constitutivos. Descreve-se pormenorizadamente a utilização de métodos de optimização baseados no gradiente e em algoritmos evolucionários na determinação destes parâmetros. Introduz-se o programa desenvolvido para determinar os parâmetros do modelo de comportamento utilizado neste trabalho. Compara-se a eficiência do método de optimização implementado efectuando alguns testes genéricos.

A última parte, designada por **Resultados, Validação e Discussão**, é constituída pelos últimos três capítulos. Nestes, identificam-se os parâmetros dos modelos constitutivos para um conjunto particular de ligas de alumínio e validam-se as formulações e algoritmos descritos na parte II. Por fim, apresenta-se um exemplo que se enquadra no conjunto de aplicações possíveis para o código desenvolvido.

Capítulo 11 – Descreve-se a base experimental utilizada na identificação de parâmetros do modelo constitutivo. Determinam-se os parâmetros para diversas ligas de alumínio baseados em ensaios experimentais e em resultados obtidos por outros autores. Comparam-se os métodos de optimização descritos no capítulo anterior.

Capítulo 12 – Efectuam-se alguns ensaios numéricos com o objectivo de validar os modelos matemáticos implementados. Comparam-se as soluções obtidas com soluções analíticas, experimentais e numéricas de outros autores. Compara-se a eficácia dos diferentes elementos finitos, métodos de integração e algoritmos implementados.

Capítulo 13 – Apresenta-se um exemplo complexo que demonstra as potencialidades do código desenvolvido. Discutem-se as dificuldades demonstradas na modelação de tratamentos térmicos em ligas de alumínio e as possibilidades da simulação numérica neste domínio. Descreve-se a simulação da têmpera de um sólido de geometria complexa. Comparam-se as curvas de evolução do campo de temperatura e do estado de tensão em diferentes pontos no sólido.

Capítulo 14 – Descrevem-se, de modo global, as principais conclusões deste trabalho. Apresentam-se igualmente algumas perspectivas de desenvolvimento futuro no seguimento dos assuntos apresentados.

Inclui-se um conjunto de **Anexos** nos quais se complementam algumas secções desta dissertação. Estabelecem-se ainda algumas notações e convenções.

Anexo A – Indicam-se a notação, nomenclatura e siglas utilizadas na presente dissertação. As definições são agrupadas em notações algébricas, operadores e funções, índices, relações matemáticas, simbologia e siglas.

Anexo B – Apresentam-se algumas passagens intermédias de desenvolvimentos matemáticos não incluídos no texto principal.

Anexo C – Tecem-se algumas considerações sobre a termodinâmica da plasticidade, não incluídas no texto principal, mas cuja importância justifica a sua inclusão em anexo.

Anexo D – Apresenta-se um exemplo de violação da realidade física num problema térmico justificando a importância do tipo de integração temporal implementado.

1.6 Terminologia Utilizada

Devido à grande quantidade de terminologia específica e informação envolvida neste trabalho é útil referir alguns pontos relacionados com a escrita da presente dissertação:

1. A utilização de termos em língua estrangeira é levada a cabo apenas nas situações em que não existe termo exacto ou próximo em português ou este possa induzir o leitor em erro.
2. Na utilização de termos técnicos em português, sempre que se considere útil, faz-se referência ao termo inglês em nota de rodapé.
3. A referência a alguns materiais é feita pela sua composição química (por exemplo Al_2O_3 para a alumina).

Capítulo 2

As Ligas de Alumínio — Generalidades

Apresentam-se algumas considerações e generalidades sobre ligas de alumínio. Descrevem-se de forma sucinta os processos mais comuns de fabrico e transformação destes materiais assim como os tratamentos térmicos passíveis de lhes serem aplicados. Por fim, apresentam-se as propriedades e principais aplicações de ligas de alumínio comerciais.

2.1 Introdução

O alumínio é o terceiro elemento mais abundante na crosta terrestre e o mais abundante dos elementos metálicos, constituindo mais de 5% da massa terrestre [IAI-Stat 04]. Contudo, na natureza, o alumínio existe unicamente em combinação com outros materiais, particularmente como óxidos e silicatos.

A palavra Alumínio deriva do latim *Alumen*, que designava o alume ($\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$). Nos finais do século XVIII, o químico francês Guyton de Morveau propôs o nome de *Alumine* como material base para o alume. Posteriormente, em 1808, a existência e conhecimento deste material foi estabelecida pelo inglês Sir Humphry Davy [IAI 04] que sugeriu que se utilizasse o nome *Aluminium*. Mais tarde, este cientista alterou-o para a designação final de *Aluminium* (alumínio) de modo a ter a mesma terminação da maior parte dos elementos.

Julga-se que o dinamarquês Hans Christian Oersted foi o primeiro a preparar alumínio metálico através do aquecimento de cloreto de alumínio anidro com uma amálgama de potássio (constituída por mercúrio e potássio). Após alguns desenvolvimentos do referido processo, realizados por Frederick Wöhler, Henri Saint-Claire Deville substituiu o potássio por sódio. Este cientista utilizou o cloreto de alumínio-sódio em vez do cloreto de alumínio, baixando assim os custos do processo. Esta evolução permitiu a criação de diversas fábricas de produção comercial de alumínio em França e na Grã-Bretanha.

Em 1886, o americano Charles Martin Hall e o francês Paul Héroult descobriram e patentearam, quase em simultâneo, o processo de dissolução da alumina em criolite fundida e decomposta electroliticamente. Esta técnica de redução, conhecida por processo Hall-Héroult, é actualmente a base do processo de produção industrial de alumínio. No final do século XIX, o austríaco Karl Josef Bayer inventou o processo Bayer para a produção em grande escala de alumina a partir da bauxite. Desde então, a produção de alumínio tem aumentado constantemente atingindo, nos dias de hoje, mais de 24 milhões de toneladas por ano [IAI-Stat 04].

O alumínio tem sido produzido comercialmente desde há cerca de 150 anos e, por este facto, é visto como um metal recente por comparação, por exemplo, com a utilização de cobre ou chumbo. Porém, a sua produção é maior do que a do conjunto de todos os outros metais não-ferrosos [IAI-Stat 04].

2.2 Princípios Básicos

O alumínio puro é um metal leve que, quando misturado com pequenas quantidades de outros materiais — ferro, magnésio, silício, zinco, cobre, níquel, cromo, tungsténio, zircónio, boro, titânio, lítio e estanho — produz ligas com propriedades específicas. O principal objectivo da adição de elementos ao alumínio é o aumento do limite de elasticidade, da resistência e da dureza. Muito embora o alumínio puro apresente baixa resistência mecânica, as ligas de alumínio podem ter resistências muito elevadas [Bay 97]. Em contrapartida, propriedades como, por exemplo, a ductilidade, a condutividade térmica e a resistência à corrosão diminuem com a adição de alguns elementos de liga [Seabra 81].

As ligas de alumínio têm uma densidade inferior a um terço da do aço, são dúcteis e maleáveis. São excelentes condutoras térmicas e eléctricas. O alumínio e algumas das suas ligas, quando polidas, apresentam a reflexão mais elevada de todos os materiais. As ligas de alumínio podem ser fundidas, laminadas e extrudidas recorrendo a um grande número de processos tecnológicos [Shackelford 99].

2.3 Processo de Fabrico e Transformação

O minério de alumínio (bauxite) consiste essencialmente em óxidos de alumínio hidratados e é abundante em algumas áreas tropicais e subtropicais do globo terrestre.

No processo de fabrico Bayer, após lavagem e moagem, a bauxite é obrigada a reagir com hidróxido de sódio a temperatura e pressão elevadas. Consequentemente, o minério de alumínio é convertido em aluminato de sódio de acordo com a seguinte reacção:

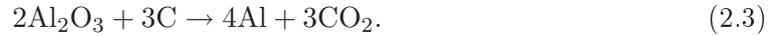


Depois da separação dos elementos insolúveis, o hidróxido de alumínio é precipitado a partir da solução do aluminato. O hidróxido de alumínio é parcialmente seco e calcinado, dando origem ao óxido de alumínio, ou alumina (Al_2O_3) [IAI 04], isto é,



Posteriormente, a alumina é dissolvida num banho de criolite (Na_3AlF_6), fundida a cerca de 980 °C e electrolisada numa célula electrolítica. Para este processo, utilizam-se ânodos

e cátodos de carbono [Smith 96]. No processo de electrólise, que decorre a baixa tensão, forma-se alumínio metálico no estado líquido, de acordo com a reacção



Este deposita-se no fundo da célula e é retirado periodicamente. O alumínio retirado tem normalmente 99.5 a 99.9% de alumínio, sendo o ferro e o silício as principais impurezas.

O alumínio extraído é transferido para fornos onde é refinado antes do vazamento. Nesta etapa, lingotes enriquecidos com elementos de liga são fundidos e misturados na carga do forno. Na operação de refinamento, de modo a remover o hidrogénio gasoso dissolvido, o metal líquido é purificado com cloro gasoso [Smith 96]. Remove-se também a camada superficial de metal líquido a fim de retirar todo o metal oxidado. Após esta operação, o material é vazado em lingotes. Neste processo, são necessárias quatro a seis toneladas de bauxite para produzir duas toneladas de alumina. Dessas duas toneladas de alumina obtém-se somente uma tonelada de alumínio ou liga de alumínio [IAI-Stat 04].

Fundição

A fundição de ligas de alumínio pode ser dividida em fundição em lingotes e fundição em moldes. Na primeira, a liga de alumínio é fundida em lingotes para laminagem, extrusão e trefilagem. Estes, subsequentemente, são transformados em produtos finais ou quase-finais. O segundo processo, usado na produção de peças fundidas, é o meio mais antigo e mais simples de fabrico de componentes e é realizado com auxílio de moldes de aço ou areia.

Do processo de fundição em moldes destaca-se a fundição em molde de aço sob pressão ou fundição injectada. Esta técnica é a mais utilizada e representa cerca de metade de todos os processos de fundição de ligas leves [EAA 03]. Neste processo, o metal líquido é injectado no molde metálico por um pistão hidráulico a velocidade e pressão controladas sendo forçado a preencher as cavidades do molde. Após a solidificação do metal, o molde é aberto para retirar a peça vazada. Posteriormente, fecha-se o molde e repete-se o ciclo de vazamento.

O equipamento necessário para o processo é de custo elevado e, como tal, este processo apresenta-se unicamente económico para uma produção em grande escala.

Laminagem

A produção de chapa de liga de alumínio é feita por laminagem. Este processo tecnológico começa com a operação de *escapelar*, que se baseia na remoção de uma camada da superfície do lingote que entrará em contacto com os rolos de laminagem. Seguidamente, os lingotes são pré-aquecidos durante algum tempo, permitindo a difusão atómica e a obtenção de uma composição homogénea em todo o lingote.

Após reaquecimento a 500 °C, os lingotes são laminados a quente utilizando, geralmente, um trem de laminagem reversível de quatro andares. Esta operação permite laminar lingotes de 60 cm até espessuras de 5 a 8 cm. Num estágio posterior, são reaquecidos e relaminados a quente até cerca 2.5 cm num laminador intermédio.

Para obter espessuras menores utiliza-se a laminagem a frio. Pode ainda fazer-se um recozimento antes da laminagem, de modo a amaciar o material, evitando o encruamento eventualmente produzido durante a laminagem a quente.

Nos últimos anos, a indústria de laminagem tem feito um grande esforço de forma a assegurar que os produtos laminados possuam as características adequadas, nomeadamente as propriedades como, por exemplo, a dureza, tenacidade, resistência à corrosão e acabamento superficial. Na laminagem a quente, o conhecimento da influência das condições de superfície do material e dos rolos de laminagem, da lubrificação, etc. tem sido essencial para a evolução da eficiência do processo [Baque *et al.* 67, Fernandes 85].

Extrusão

A extrusão de ligas de alumínio é feita a partir de um cilindro sólido desse material, chamado bilette. Neste processo de conformação plástica, por acção de uma pressão elevada, o material é forçado a passar através de uma matriz, forçando uma redução de secção transversal. A maioria das ligas de alumínio são extrudidas a quente (450-500 °C) para que a resistência à deformação seja menor.

A extrusão pode ser levada a cabo de forma directa ou indirecta. Na primeira hipótese, o bilette de material, colocado no contentor de uma prensa de extrusão, é forçado pelo êmbolo a passar directamente através da matriz. Na segunda, tanto o êmbolo como o contentor movem-se em conjunto não existindo movimento relativo entre o bilette e o contentor. Por conseguinte, o processo inverso necessita de menor potência devido às menores forças de atrito envolvidas.

O processo de extrusão é utilizado para produzir barras, tubos e outros produtos com secções de forma irregular [Aluselect database, Seabra 81].

Todas as ligas de alumínio podem ser extrudidas. Porém, nem sempre este processo é vantajoso. Algumas ligas requerem pressões demasiado elevadas, com velocidades de produção reduzidas o que leva frequentemente a acabamentos insatisfatórios. As ligas de alumínio mais utilizadas para extrusão são as Al-Mg-Si.

Reciclagem

As ligas de alumínio apresentam a vantagem da facilidade de reciclagem. Estas ligas têm sido recicladas desde os primeiros dias da sua comercialização e, nos dias de hoje, o alumínio reciclado representa cerca de um terço do consumo total de alumínio em todo o mundo. Por razões económicas, tecnológicas e ecológicas, a reciclagem constitui uma parte essencial da indústria do alumínio.

No final da sua vida útil, todos os produtos de alumínio retêm um determinado valor, definido pela possibilidade de serem reciclados em novos produtos. O custo de reaproveitamento do alumínio é menor em comparação com a extracção do alumínio proveniente do minério de bauxite. A energia gasta para reciclar 20 latas equivale à energia necessária para produzir uma lata a partir do minério.

O alumínio destinado à reciclagem pode ser classificado em duas categorias: (i) sucata nova e (ii) sucata velha. Ao primeiro grupo pertence o material excedente e que é descartado durante o processo de fabrico. Na sua maioria, este material apresenta boa qualidade, composição e não é revestido. Dessa forma, pode ser directamente fundido sem preparação prévia. O material do segundo grupo é recuperado quando o produto foi descartado no final da sua vida útil. Neste grupo incluem-se as latas, componentes da indústria automóvel, caixilharia, etc.

O material a reciclar é processado de forma a se libertar de qualquer contaminação. Posteriormente, é centrifugado, removendo-se eventuais resíduos de óleo e água. É magneticamente separado de qualquer ferro presente. No caso de latas de bebidas, o revestimento interior de verniz e a tinta exterior são também removidas.

A reciclagem de sucata velha de alumínio é frequentemente realizada em refinarias secundárias ao passo que a sucata nova é predominantemente reciclada em fundições de alumínio. As refinarias de alumínio convertem a maioria do material em lingotes fundidos.

Na União Europeia, o alumínio e suas ligas apresentam elevadas taxas de reciclagem. Cerca de 41% nas latas de refrigerantes, 85% no sector da construção civil e 95% no sector dos transportes [EAA 03, IAI-Stat 04]. Devido ao facto do o alumínio poder ser reciclado infinitamente sem perda de qualidade, há fortes incentivos naturais para recuperar e reciclar produtos após uso.

Para uma consulta mais aprofundada e diversificada sobre os processos de fabrico e transformação de ligas de alumínio aqui referidos, sugerem-se, por exemplo, os trabalhos de [Baque *et al.* 67, King 87, Smith 96, Dwight 98, Belov *et al.* 02, Totten e Mackenzie 03].

2.4 Constituição, Propriedades e Microestrutura

A maioria dos elementos metálicos ligam-se facilmente ao alumínio. Porém, somente alguns são importantes nas ligas de alumínio comerciais. Não obstante, um número apreciável de outros elementos servem como elementos de liga suplementares para melhorar propriedades e características destes materiais.

Os principais sistemas envolvidos nas ligas de alumínio são os do alumínio (Al) com o cobre (Cu), lítio (Li), magnésio (Mg), manganês (Mn), silício (Si), zinco (Zn) e os Al-Cu-Li, Al-Cu-Si, Al-Cu-Mg-Si, Al-Mg-Si, Al-Mg-Li, Al-Mg-Zi [Hatch 84].

Devido à sua apreciável solubilidade e efeito de reforço, o cobre é um dos principais elementos das ligas de alumínio. Muitas ligas comerciais contêm cobre como adição principal (concentrações de 1 a 10%). O cobre é frequentemente utilizado em combinação com o magnésio. O sistema Al-Cu foi estudado em detalhe, por exemplo, por [Mondolfo 76].

As ligas binárias de Al-Li combinam a baixa densidade com um módulo de elasticidade elevado. O lítio tem boa solubilidade no alumínio (5.2% máximo) e as suas ligas endurecem apreciavelmente por precipitação.

As ligas binárias Al-Mg são a base para uma importante classe de ligas sem tratamento térmico. Embora o magnésio tenha uma solubilidade substancial no alumínio, estas ligas não endurecem por precipitação para concentrações de magnésio inferiores a 7%. Contudo, o magnésio aumenta a resistência mecânica e ductilidade, a resistência à corrosão e a soldabilidade [Hatch 84].

Quanto ao manganês, é um elemento de liga que aumenta a resistência mecânica das ligas forjadas. Porém, diminui a ductilidade e a resistência à corrosão intergranular [Mondolfo 76].

A importância comercial das ligas de Al-Si é devida à sua elevada fluidez e reduzida contracção na fundição e soldadura. Ao longo dos tempos, estas ligas foram substituindo as ligas de Al-Zn, as primeiras ligas de alumínio desenvolvidas comercialmente.

Dos sistemas ternários, destaca-se o sistema Al-Mg-Si, base de uma das classes principais de ligas tratáveis termicamente. As deste sistema ternário combinam características

favoráveis como, por exemplo, alta resistência, pouca sensibilidade à têmpera e elevada resistência à corrosão. Estas ligas são utilizadas frequentemente em aplicações de arquitetura e *design*, geralmente na forma de secções extrudidas.

As ligas de alumínio são classificadas a partir do elemento de liga mais abundante. Geralmente, utiliza-se uma designação com quatro algarismos para identificar a liga. O primeiro indica o grupo de ligas que contém determinados elementos de liga. Os dois últimos algarismos identificam a liga de alumínio ou o grau de pureza do alumínio. O segundo indica eventuais modificações da liga original ou limites de impureza [Hatch 84, Smith 96]. As designações dos tratamentos térmicos indicam-se após a referência de liga. As subdivisões do tratamento térmico básico são indicadas por um ou mais dígitos e aparecem a seguir à letra que designa o tratamento térmico (por exemplo, 1100-H14).

É, também, conveniente dividir as ligas de alumínio em dois grupos: (i) as ligas tratáveis termicamente e (ii) as ligas não-tratáveis termicamente. As ligas do segundo grupo não endurecem por precipitação, sendo apenas endurecíveis por deformação a frio [Sun *et al.* 99]. As séries de ligas que pertencem a este grupo são as 1xxx, 3xxx, 4xxx e 5xxx. As restantes séries, 2xxx, 6xxx e 7xxx, podem ser submetidas a tratamento térmico de endurecimento por precipitação. As séries de ligas de alumínio podem ser caracterizadas do seguinte modo [Totten e Mackenzie 03, Hatch 84]:

LIGAS 1XXX: Estas ligas contêm mais de 99% de alumínio, sendo o ferro e o silício os principais elementos de liga. Nesta classe, adiciona-se cerca de 0.12% de cobre para aumentar a resistência mecânica [Smith 96]. Como exemplo, a liga 1100 apresenta uma resistência à tracção de cerca de 90 MPa no estado recozido e é, em geral, usada em chapa fina para trabalho mecânico. Esta classe de ligas é também seleccionada para condutores eléctricos e aplicações em que se requerem grande resistência à corrosão e excelente formabilidade.

LIGAS 2XXX: Esta classe contém as ligas cujo principal elemento de liga é o cobre. O magnésio também é adicionado à generalidade destas ligas. A adição de pequenas quantidades de outros elementos torna esta liga de microestrutura bastante complexa. A liga mais usual desta classe é a 2024 que, contendo cerca de 4.5% de cobre, 1.5% de magnésio e 0.6% de manganésio, apresenta uma estrutura multifásica complexa. O efeito de solução sólida e precipitação, em especial do composto intermetálico Al_2CuMg , faz aumentar a resistência mecânica desta liga. Esta liga apresenta uma resistência à tracção de cerca de 450 MPa no estado T6. As ligas deste grupo são frequentemente utilizadas na indústria aeroespacial [Kammer *et al.* 95].

LIGAS 3XXX: O manganês é o principal elemento de liga deste grupo. Este elemento existe em partículas finamente distribuídas no material e aumenta a resistência do alumínio através de solução sólida. A liga mais utilizada deste grupo é a 3003, que apresenta uma resistência à tracção de 110 MPa no estado recozido e é usada sempre que se requer uma liga de aplicabilidade geral, com excelentes propriedades de corrosão e com boa capacidade de deformação [Hatch 84]. Esta liga também é utilizada no fabrico de tubagens e alhetas para caldeiras e geradores de calor.

LIGAS 4XXX: Este grupo contém o silício como principal elemento de liga. A maioria destas ligas, com alto volume de silício, são usadas como fios de soldadura, onde

são refundidas. Contudo, as boas características de ligação podem depender da uniformidade da estrutura forjada. Os tratamentos térmicos nesta liga causam a indesejável coalescência do silício, enquanto que a fase insolúvel do ferro é inalterada.

LIGAS 5XXX: O magnésio é o principal elemento de liga deste grupo. Este elemento é adicionado em quantidades até 5% para promover o endurecimento por solução sólida. O alto conteúdo de magnésio tem um grande efeito na resistência à deformação. Este facto é demonstrado pela alta resistência à tracção destas ligas mesmo em condições recozidas. Uma das ligas mais importantes deste grupo é a liga 5052, que contém cerca de 2.5% de magnésio e 0.2% de crómio. No estado recozido, esta liga apresenta uma resistência à tracção de 193 MPa. Esta liga é utilizada sob a forma de chapas finas para a indústria de transportes e aplicações navais devido à sua elevada resistência à corrosão.

LIGAS 6XXX: Actualmente, cerca de 80% da produção mundial anual de produtos extrudidos diz respeito às ligas Al-Mg-Si. Os principais elementos de liga deste grupo são o magnésio e o silício, que se combinam no composto intermediário, Mg_2Si , cuja precipitação provoca o endurecimento das ligas deste grupo. Estas ligas também possuem quantidades pequenas de cobre, crómio e manganês. Este grupo de ligas apresenta características adequadas à extrusão, soldadura e aplicações onde a resistência à corrosão é importante. Em termos comerciais, uma das ligas mais importantes deste grupo é a 6061 (1% Mg, 0.6% Si, 0.3% Cu e 0.2% Cr) que, em condição T6, apresenta uma resistência à tracção de cerca de 290 MPa.

LIGAS 7XXX: Este grupo contém materiais de alto desempenho em que os principais elementos de liga são o zinco, o magnésio e o cobre. O zinco e o magnésio combinam-se, formando um composto intermetálico ($MgZn_2$) responsável pelo endurecimento destas ligas quando tratadas termicamente. A elevada solubilidade do zinco e do magnésio no alumínio torna possível o aparecimento de grandes densidades de precipitados. Consegue-se assim um aumento substancial da resistência mecânica. Estas ligas exibem a resistência mais elevada de todas as ligas de alumínio comerciais. Apesar de terem características inferiores às ligas 6xxx na extrusão, elas exibem uma sensibilidade menor à têmpera. A liga 7075 (5.6% Zn, 2.5% Mg, 1.6% Cu e 0.25% Cr) é uma das mais importantes deste grupo e, após o tratamento T6, apresenta uma resistência à tracção de cerca de 500 MPa. Esta é utilizada na indústria aeroespacial em componentes sujeitos a tensões elevadas.

LIGAS 8XXX: Este grupo refere-se às ligas de outros elementos ainda não referidos. As ligas deste grupo revelam ainda alguma imaturidade e, por este facto, a sua comercialização não é ainda usual. Deste grupo, podem destacar-se as ligas Al-Sn para aplicações que envolvam atrito e Al-Fe para condutores eléctricos.

O desenvolvimento das ligas de alumínio tem sido altamente impulsionado pela necessidade de materiais que possuam elevados níveis de resistência mecânica, maquinabilidade, baixo peso específico e, essencialmente, baixo custo [Bay 97, Alcoa 04]. Apesar das ligas de alumínio não apresentarem níveis de resistência mecânica como os dos aços ou das ligas de titânio (figura 2.1), o seu peso específico, de cerca de 2.7 gcm^{-3} é muito inferior à gene-

ralidade dos dos outros materiais metálicos. Nas tabelas 2.1 e 2.2 apresentam-se algumas propriedades mecânicas das principais ligas de alumínio.

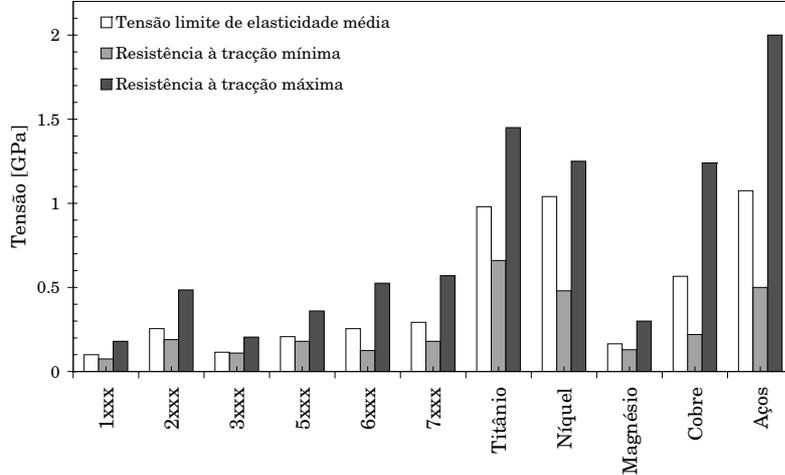


Figura 2.1: Resistência à tração das ligas de alumínio (R_m). Comparação com outras ligas metálicas. Tensão limite de elasticidade média das ligas de alumínio.

Outra característica de grande importância é a resistência à corrosão. A criação natural de um filme de óxido estável e denso na superfície permite às ligas de alumínio serem utilizadas em condições bastante adversas sem ser necessário aplicar tratamentos anticorrosão.

O alumínio também é amplamente utilizado na indústria eléctrica devido à sua boa condutibilidade eléctrica. As propriedades e vantagens referidas, aliadas a custos relativamente baixos, têm permitido aumentar a utilização das ligas de alumínio e diminuir as desvantagens relativamente às ligas ferrosas. Para uma perspectiva mais abrangente das propriedades, constituição e microestrutura de ligas de alumínio, consultar, por exemplo, os trabalhos de [Bay 97, Totten e Mackenzie 03, Aluselect database].

2.5 Endurecimento por Precipitação e Tratamentos Térmicos

O processo de endurecimento por precipitação é utilizado para aumentar a resistência mecânica de um grande número de ligas metálicas [Miau e Laughlin 99]. Com este processo obtém-se, na liga tratada termicamente, uma dispersão de precipitados numa matriz de metal deformável [Smith 96]. Estas partículas vão actuar como obstáculos ao movimento das deslocações, mecanismo principal de deformação. Como consequência, aumentam a resistência mecânica da liga tratada termicamente.

De uma forma geral, o processo de endurecimento por precipitação pode envolver as seguintes três etapas distintas, que podem ser executadas em diversas sequências:

1. Solubilização ou tratamento térmico de solubilização: a liga é aquecida e mantida a uma temperatura entre o ponto de solidificação e o ponto de fusão, até que se forme uma estrutura uniforme de solução sólida.

Tabela 2.1: Propriedades físicas e mecânicas de algumas ligas de alumínio [Aluselect database].

Liga	ρ [g cm ⁻³]	E [GPa]	G [GPa]	CET [$\times 10^{-6} \text{K}^{-1}$]	c_p [J/kg K]	T_f [°C]	T_s [°C]
1050	2.7	69	25.9	24	899	658	645
1070	2.7	69	25.9	24	899	658	645
2014	2.8	73	27.4	23	869	640	505
3003	2.73	69.5	26.1	23	892	655	640
3103	2.73	69.5	26.1	23	892	655	640
5005	2.7	69.5	26.1	24	897	655	630
5052	2.68	70	26.3	24	901	650	605
5083	2.66	71	26.8	24	899	640	580
5086	2.67	71	26.7	24	900	640	585
5154	2.67	70.5	26.5	24	901	645	590
5251	2.69	70	26.3	24	898	650	605
5454	2.69	70.5	26.5	24	897	645	600
5754	2.68	70.5	26.5	24	897	645	595
6060	2.7	69.5	26.1	23	898	655	610
6061	2.7	70	26.3	23	895	650	580
6063	2.7	69.5	26.1	23	898	655	615
6082	2.71	70	26.4	23	894	650	575
6351	2.71	70	26.3	23	894	650	585
7010	2.82	72	27.1	24	857	630	475
7020	2.78	70	26.4	23	873	645	605
7075	2.81	72	27.1	24	862	635	475

ρ - densidade; E - Módulo de elasticidade; G - Módulo de corte;
 CET - Coeficiente de expansão térmica; c_p - Calor específico;
 T_f - Temperatura de fusão; T_s - Temperatura de solidificação.

2. Têmpera ou tratamento térmico de têmpera: a liga é arrefecida rapidamente geralmente até à temperatura ambiente, sendo em geral utilizado, como fluido de têmpera, a água.
3. Tratamento de envelhecimento ou revenido: este tratamento é necessário para que se possam formar precipitados finos e dispersos, sendo este o objectivo principal de todo o processo de endurecimento por precipitação. O envelhecimento pode ser natural, se for à temperatura ambiente, ou artificial, se realizado a temperaturas mais elevadas.

Na figura 2.2 ilustram-se as fases do tratamento térmico de endurecimento por precipitação.

No caso de solubilização, a liga de alumínio é aquecida a uma temperatura de cerca de 500 °C e mantida a essa temperatura durante o tempo necessário para que se dê solubilização completa [Seabra 81]. Após este tratamento, a liga é sujeita a têmpera em água à temperatura ambiente. No caso de peças de forma complexa, podem desenvolver-se tensões internas que poderão dar lugar a distorções. Neste caso, deve usar-se água em

Tabela 2.2: Resistência e dureza de algumas ligas de alumínio [Aluselect database].

Liga	Têmpera	$R_{p0.2}$ [MPa]	R_m [MPa]	HB
1050	O	20-60	65-95	18-22
1070	O	20-50	60-90	18-22
1370	O	20-60	60-90	18-22
2014	T6	350-430	410-490	120-140
3003	O	35-70	95-140	30-35
3103	O	35-70	95-140	30-35
6005	T6	240-280	260-300	85-100
6060	T6	160-230	180-250	50-80
6061	T6	240-310	270-330	85-105
6063	T6	170-240	200-260	55-85
6082	T6	240-320	270-350	85-110
6463	T6	170-240	200-260	55-85
6101	T6	170-240	200-260	55-85
7020	T6	270-350	350-420	105-125
7108	T6	270-350	350-420	105-125

$R_{p0.2}$ - Tensão a 0.2% de deformação uniaxial;
 R_m - Tensão de ruptura; HB - Dureza Brinell.

ebulição (100 °C), óleo ou sais fundidos. Após têmpera, pode realizar-se um tratamento de libertação de tensões para reduzir as tensões residuais em produtos extrudidos, laminados ou em peças forjadas de geometria complexa.

Estas ligas de alumínio podem, após têmpera, endurecer por envelhecimento à temperatura ambiente. A maior parte das ligas requer o endurecimento acelerado por envelhecimento artificial a temperaturas que oscilam entre 110 e os 215 °C. Por exemplo, nas ligas Al-Cu-Mg e Al-Mg-Si, o endurecimento resultante é devido à precipitação do cobre e do magnésio sob a forma de CuAl_2 e CuAl_2Mg .

Em certas ligas, pode conseguir-se um considerável aumento de resistência mecânica e dureza pela deformação controlada a frio após têmpera [Sun *et al.* 99]. A porção de aumento de resistência mecânica obtida por esta prática é atribuída ao encruamento.

As designações básicas dos tratamentos, incluindo os tratamentos térmicos, são as seguintes:

- F** Tal como fabricado. Aplica-se a produtos de processos nos quais não houve controlo das condições térmicas ou do encruamento (endurecimento por deformação); sem limites para as propriedades mecânicas [Hatch 84].
- O** Recozimento e recristalização. Aplica-se a produtos que são recozidos e recristalizados. Com este tratamento obtêm-se menor resistência mecânica e maior ductilidade.
- W** Tratamento térmico de solubilização. Esta têmpera instável é aplicada unicamente a ligas que envelhecem espontaneamente à temperatura ambiente após o tratamento de solubilização.

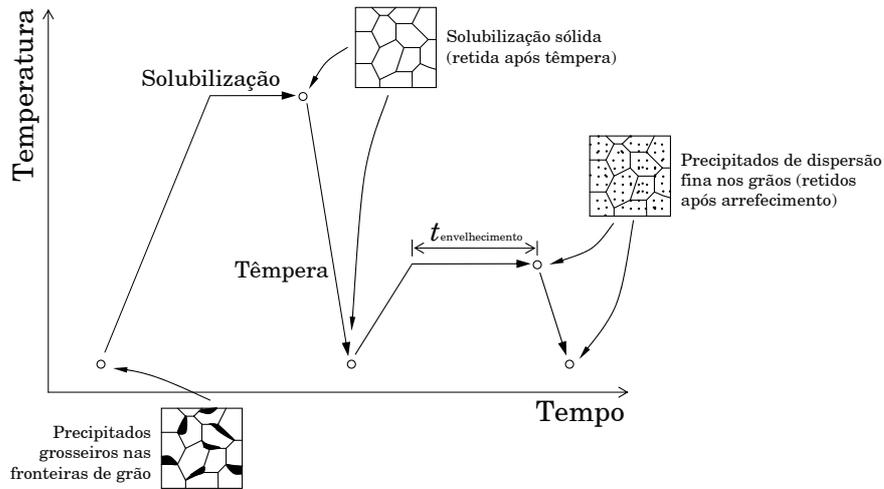


Figura 2.2: Representação esquemática do processo de endurecimento por precipitação.

H Tratamento de endurecimento por encruamento. Aplica-se a produtos endurecidos por processos de deformação.

T Tratamento térmico para obtenção de estruturas estáveis para além de F, O ou H. Aplica-se a produtos tratados termicamente, com ou sem encruamento suplementar.

A designação T é sempre seguida de um ou dois dígitos. Um período de envelhecimento natural à temperatura ambiente pode ocorrer entre ou após a operação listada nas têmperas T. Geralmente é feito um elevado controlo deste período quando os aspectos metalúrgicos são importantes. As sequências dos tratamentos são dados por:

T1 Arrefecimento e envelhecimento natural até um estado estável. Aplica-se a produtos arrefecidos desde a temperatura elevada a que estes foram enformados e envelhecidos naturalmente até um estado razoavelmente estável.

T2 Arrefecimento, deformação a frio e envelhecimento natural até um estado estável. Aplica-se a produtos que foram deformados a frio, para melhorar a sua resistência mecânica, após o arrefecimento desde a temperatura elevada a que foram enformados, e envelhecidos naturalmente até um estado razoavelmente estável.

T3 Solubilização, deformação a frio e envelhecimento natural até um estado estável. Aplica-se a todos os produtos que foram deformados a frio após o tratamento de solubilização e envelhecidos naturalmente até um estado razoavelmente estável.

T4 Tratamento térmico de solubilização e envelhecimento natural até um estado estável. Aplica-se a produtos sujeitos ao tratamento de solubilização e envelhecidos naturalmente até um estado razoavelmente estável.

T5 Arrefecimento e envelhecimento artificial. Aplica-se a produtos arrefecidos desde a temperatura elevada a que foram enformados e envelhecidos artificialmente.

- T6** Solubilização seguida de envelhecimento artificial. Aplica-se a produtos que sofreram tratamento de solubilização e foram envelhecidos artificialmente.
- T7** Solubilização seguida de estabilização. Aplica-se a produtos estabilizados após o tratamento de solubilização
- T8** Solubilização, deformação a frio e envelhecimento natural. Aplica-se a produtos que são deformados a frio para melhorar a resistência após o tratamento de solubilização.
- T9** Solubilização, envelhecimento artificial e deformação a frio. Aplicado a produtos deformados a frio e cujo objectivo é aumentar a resistência mecânica.
- T10** Arrefecimento, deformação a frio e envelhecimento artificial. Aplica-se a produtos que são deformados a frio após arrefecimento e, posteriormente, sujeitos a envelhecimento artificial.
- T42** Tratamento de solubilização do estado de têmpera O ou F e envelhecimento natural até a um estado razoavelmente estável.
- T51** Relaxação de tensões por tracção. Aplica-se a alguns produtos (barras, tubos extrudidos, etc.) cujas tensões residuais são relaxadas por tracção após tratamento de solubilização ou arrefecimento da temperatura de enformação.
- T52** Relaxação de tensões por compressão. Aplica-se a produtos cujas tensões residuais são relaxadas por compressão após tratamento de solubilização ou arrefecimento a partir da temperatura de enformação.
- T54** Relaxação de tensões por tracção combinada com compressão. Aplica-se geralmente a ferramentas forjadas.
- T62** Tratamento de solubilização do estado de têmpera O ou F e envelhecimento natural.

As têmperas mais usuais em produtos extrudidos são as T4, T5 e T6 [Hatch 84].

O aumento de resistência mecânica nas ligas que exibem envelhecimento natural continuam indefinidamente à temperatura ambiente ou estabilizam. O envelhecimento a temperaturas elevadas aumenta a dureza até certo limite e, subsequentemente, diminui. Os efeitos de amaciamento, observados com uma precipitação mais completa, ocorrem durante um envelhecimento extenso a temperaturas elevadas. Este envelhecimento é chamado de sobre-envelhecimento [Murayama e Hono 99]. O amaciamento resulta de alterações do tipo e dimensão dos precipitados e da solução sólida. A condição de menor resistência mecânica, e consequente maior amaciamento, das ligas de alumínio é obtida por tratamentos de recozimento que precipitam a quantidade máxima de solutos em partículas grandes e espaçadas [Shackelford 99].

2.6 Encruamento e Mecanismos de Deformação

As ligas de alumínio são metais policristalinos. A deformação das ligas de alumínio procede de processos normais de escorregamento cristalográfico — movimento das deslocações [Fernandes 85]. Em materiais policristalinos, os limites de grão actuam como obstáculos ao

movimento das deslocações aumentando a sua resistência mecânica. Excepção feita a temperaturas elevadas, em que os limites de grão se tornam regiões de fraqueza. Na maioria das aplicações das ligas de alumínio, onde a resistência mecânica é um factor importante, é desejável um tamanho de grão pequeno.

Durante a deformação plástica, em que os átomos são deslocados permanentemente das posições originais e passam a ocupar novas posições, as deslocações que se movem num determinado plano de escorregamento não podem passar directamente de um grão para outro. Em cada grão, as deslocações movem-se em planos de escorregamento preferenciais que têm orientações diferentes das dos grãos vizinhos.

Por deformação plástica a frio, os grãos sofrem distorção uns em relação aos outros devido à criação, movimento e rearranjo das deslocações. Por exemplo, numa operação de laminagem, quando a deformação a frio aumenta, os grãos ficam alongados segundo a direcção de laminagem devido ao movimento das deslocações.

Apesar do mecanismo exacto pelo qual se rege a densidade das deslocações com a deformação não ser ainda perfeitamente compreendido, sabe-se que a densidade de deslocações aumenta com o aumento da deformação a frio [Miau e Laughlin 99]. Devido à deformação criam-se novas deslocações que irão interactuar com as previamente existentes. Uma vez que a densidade de deslocações aumenta com a deformação, o movimento de deslocações através da floresta de deslocações torna-se cada vez mais difícil e, por conseguinte, o metal encrua com o aumento da deformação.

A deformação ou o encruamento são consequência da maioria dos processos e operações de enformação nas ligas de alumínio. O encruamento também aumenta a resistência mecânica adquirida através de solubilização sólida e dispersão de partículas. Em ligas tratadas termicamente, o encruamento não só aumenta a resistência adquirida por precipitação como eleva a taxa de endurecimento por precipitação.

Os produtos encruados por deformação a frio podem ser restaurados à condição amaciada e dúctil por recozimento. Este processo, designado pela referência O, elimina o encruamento e as características microestruturais resultantes.

O encruamento é também um processo extensamente utilizado para aumentar a resistência mecânica em ligas não tratadas termicamente. Este tratamento detém as seguintes designações [Hatch 84]:

- H1** Encruamento simples. O grau de encruamento é indicado por um eventual segundo dígito e varia de um quarto endurecido (H12) a totalmente endurecido (H18), que se obtém com uma redução de área de cerca de 75%.
- H2** Encruamento e recozimento parcial. Os tratamentos variam entre um quarto endurecido e totalmente endurecido, o que se consegue por recozimento parcial de materiais deformados a frio com resistência mecânica inicial maior do que a desejada. Os tratamentos são designados por H22, H24, H26 e H28.
- H3** Encruamento e estabilização. Tratamentos para ligas de alumínio-magnésio amaciadas por envelhecimento, que são encruadas e posteriormente aquecidas a baixa temperatura para aumentar a ductilidade e estabilizar as propriedades mecânicas. Os tratamentos são designados por H32, H34, H36 e H38.
- H112 e H321** Encruamento durante o fabrico. No segundo processo, o nível de encruamento é controlado durante a deformação a quente e a frio.

H116 Encruamento especial para ligas de alumínio-magnésio com o objectivo de aumentar a resistência à corrosão.

A maioria da energia dispendida na deformação plástica é dissipada sob a forma de calor. Porém, uma parte é armazenada no material sob a forma de deslocções e outros defeitos. Este permanece em equilíbrio metastável, os seus grãos estão distorcidos e existe uma grande quantidade de defeitos estruturais [Shackelford 99]. No entanto, a microestrutura e as propriedades iniciais da liga podem ser restauradas por reaquecimento a uma temperatura elevada (recozimento). A activação térmica irá permitir que certos mecanismos se processem de modo a modificar ou anular os defeitos estruturais existentes e recuperar a estrutura inicial de grãos não-deformados. Estas modificações são progressivas e, como tal, durante o aumento de temperatura podem distinguir-se as seguintes etapas:

1. Recuperação ou restauração estática: dão-se apenas alterações nos defeitos estruturais e não se processa qualquer movimento das fronteiras de grão;
2. Recristalização: substituição da textura existente de grãos deformados por uma nova textura de grãos finos, não-deformados e aproximadamente equiaxiais.
3. Crescimento de grão: quando a temperatura crítica de coalescência é ultrapassada, dá-se o crescimento dos grãos. Se alguns grãos atingirem um determinado tamanho crítico, estes crescem desmesuradamente à custa da recristalização de outros grãos. Este processo anormal de crescimento de grão também pode ser designado por recristalização secundária.

A recuperação das ligas de alumínio processa-se a temperaturas relativamente baixas (10 a 30% da temperatura de fusão). Durante este processo, como é fornecida energia térmica suficiente para que as deslocções se rearranjem em configurações de menor energia, as tensões internas do material são aliviadas. A recuperação do alumínio origina uma estrutura de subgrão com limites de grão de pequena desorientação. Este processo designa-se por poligonização. A energia interna do material restaurado é inferior à do material deformado e, conseqüentemente, a sua resistência mecânica diminui ligeiramente. Porém, uma vez que a dureza diminui, dá-se um aumento de ductilidade.

A duração e a temperatura a que se efectua a recuperação podem afectar a fase subsequente de recristalização, retardando-a quando a recuperação for apreciável. Se prosseguir o aumento da temperatura, há nucleação de novos grãos não-deformados na estrutura da liga recuperada. Estes crescem formando uma estrutura cristalizada. Após permanência num intervalo de tempo relativamente longo à temperatura que acontece a recristalização, a estrutura deformada é totalmente substituída por uma estrutura de grão recristalizado.

A recristalização primária ocorre através da expansão de um núcleo isolado para o interior de um grão deformado ou da migração de um limite de grão original de grande desorientação para o interior de uma região da liga mais fortemente deformada [Daaland e Nes 96]. Durante esta recristalização primária, e uma vez que as regiões deformadas são substituídas por regiões não-deformadas, o crescimento de um novo grão em expansão conduz a uma diminuição da energia interna do material.

A temperatura de recristalização depende da quantidade de deformação a frio. Grandes deformações correspondem a níveis elevados de encruamento e a uma temperatura de

recristalização correspondente mais baixa. Neste caso, a energia térmica requerida para iniciar a recuperação da microestrutura é menor [Seabra 81].

Nos processos de deformação a quente, a recuperação e recristalização podem ter lugar sob tensão e condições de deformação a temperaturas elevadas [Vieira 89, Daaland e Nes 96]. Por conseguinte, estes processos distinguem-se dos respectivos processos estáticos pela denominação de recuperação e recristalização dinâmicas.

Nas ligas de alumínio sujeitas a deformação a quente, a tensão cresce até a um valor máximo, denominado por tensão máxima ou de pico, diminuindo depois até se fixar num valor constante, independente da deformação. Nesse instante, em que a tensão se fixa num valor intermédio da tensão máxima e da tensão limite de elasticidade, os mecanismos de recuperação sobrepõem-se aos de encruamento. Esta tensão média, designada por tensão de regime estacionário, é a evidência mecânica da existência de um equilíbrio dinâmico entre o encruamento e a recuperação [Vieira 89]. O regime estacionário só se atinge após um período transitório que se pode estender por uma deformação significativa. A taxa de encruamento anula-se quando a densidade de deslocações se estabiliza graças a um equilíbrio dinâmico entre a velocidade de geração das deslocações e a velocidade de aniquilação [Haddadi 96].

Os mecanismos de recuperação e recristalização dinâmica, ao contrário dos respectivos mecanismos estáticos, não produzem grãos isentos de deslocações. Os novos grãos apresentam, durante o crescimento, um gradiente de deformação entre a zona em que nuclearam (onde começou mais cedo a deformação), que apresenta a maior densidade de deslocações, e a zona adjacente à fronteira móvel, que tem a menor densidade de deslocações.

2.7 Aplicações

Presentemente, a gama de aplicações das ligas de alumínio é muito extensa, percorrendo áreas desde os caixilhos de portas e janelas até elementos de motores e estruturas aeronáuticas [EAA Automotive]. Estes materiais foram já aceites como materiais de engenharia viáveis e de baixo custo e são considerados essenciais no mundo moderno [Alcan 04]. Por exemplo, a não-existência destes materiais, traduzir-se-ia pela inexistência do transporte aéreo comercial. O primeiro avião construído, pelos irmãos Wright em 1903, continha um motor automóvel de quatro cilindros modificado com um bloco de 13 kg em alumínio para se reduzir o peso. Na indústria aeroespacial, um Boeing 747 contém cerca de 75 toneladas de alumínio. 90% da estrutura do vaivém espacial americano é também de alumínio [IAI 04].

A contribuição das ligas de alumínio é um factor-chave na eficiência de motores de combustão interna em automóveis e camiões assim como em comboios de alta velocidade. Esta torna relativamente simples a construção de edifícios de baixa manutenção e resistentes à corrosão. Na indústria alimentar, preserva a qualidade dos alimentos economizando os combustíveis envolvidos no transporte alimentar devido ao seu baixo peso.

Na figura 2.3 mostra-se a utilização presente de ligas de alumínio. De acordo com esta figura, a indústria dos transportes, que inclui as indústrias automóvel, aeroespacial, ferroviária e naval, lidera o fabrico e utilização de componentes em alumínio. Seguidamente encontra-se a indústria de embalagem e acondicionamento. Dentro da fracção denominada por outros, encontram-se os equipamentos desportivos, mobiliário e maquinaria. No quadro

2.3 apresentam-se aplicações típicas de algumas ligas de alumínio. Realça-se, também, a utilização de ligas de alumínio no fabrico de materiais compósitos e de materiais celulares.

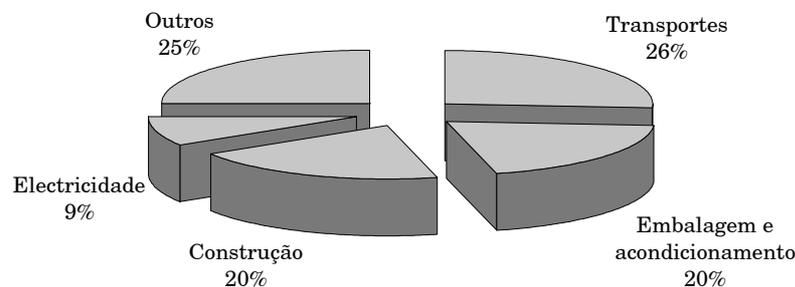


Figura 2.3: Distribuição da produção de ligas de alumínio nas diferentes indústrias.

Tabela 2.3: Aplicações típicas de algumas ligas de alumínio.

Liga	Estado	Aplicações típicas
1100	O H14	Chapa fina para trabalho mecânico, varões.
3003	O H14	Reservatórios de pressão, equipamento químico, chapa para trabalho mecânico.
5052	O H14	Transportes pesados, indústria naval, tubos hidráulicos.
2024	O T6	Estruturas aeronáuticas.
6061	O T6	Estruturas para transportes terrestres e navais, oleodutos, carris de comboio.
7075	O T6	Estruturas aeronáuticas e outras.

2.7.1 Indústria aeroespacial

Hoje em dia, existem cerca de 5300 aviões comerciais de passageiros a voar no mundo, e muitos milhares de helicópteros e aviões ligeiros. Prevê-se que a procura pela aviação comercial aumente cerca de 60% na próxima década. Estes factos demonstram a importância da indústria aeronáutica [IAI-Stat 04].

O desenvolvimento da indústria de aviação comercial moderna dependeu das ligas de alumínio desde a sua criação pelos irmãos Wright até aos dias de hoje. No início do século XX, as ligas de alumínio substituíram gradualmente a madeira, o aço e outros componentes. O primeiro avião que utilizava o alumínio extensivamente foi construído nos anos vinte.

A combinação da leveza, resistência e ductilidade torna as ligas de alumínio materiais ideais para a produção em massa de aviões comerciais. As ligas de alumínio mais resistentes suportam as pressões e tensões elevadas envolvidas em voos de alta altitude e os painéis laminares finos servem de isolamento térmico. As cadeiras dos pilotos e dos passageiros

dos aviões comerciais e militares são feitas de ligas ou compósitos de alumínio de modo a se poupar peso e, consequentemente, combustível.

Na indústria aeronáutica, a necessidade de desenvolvimento de novas ligas de alumínio também se vai sentindo. No desenvolvimento do Airbus A380 (figura 2.4), o maior e o mais avançado avião comercial até aos dias de hoje, a investigação e desenvolvimento de novas ligas de alumínio teve uma acção preponderante [Alcoa 04]. Esta tarefa ficou a cargo da empresa ALCOA, que trouxe novas ligas que adicionam resistência e durabilidade às asas e fuselagem, novos elementos de junção da asa e trens de aterragem forjados que resistem à fadiga imposta pelas frequentes aterragens e levantamentos durante todo o tempo útil de vida do avião.



Figura 2.4: Airbus A380, no qual se utilizam uma grande parte de componentes em novas ligas de alumínio.

As ligas de alumínio também são aplicadas em áreas de engenharia relacionadas com a indústria aeroespacial. Muitos dos componentes envolvidos nos satélites, telescópios orbitais e vaivéns espaciais actuais são fabricados em ligas ou compósitos de matriz de alumínio [Teixeira-Dias 99].

2.7.2 Indústria automóvel

A utilização de ligas de alumínio em blocos de motores de camiões e automóveis tem aumentado nas últimas décadas, assim como o fabrico de cabeças de cilindros (figura 2.5), radiadores, caixas de transmissão e jantes [Miller *et al.* 00].

É sabido que o uso do alumínio e das suas ligas, além de diminuir o peso total de um veículo, contribui para a sustentabilidade ambiental, visto que estes materiais podem ser totalmente reciclados. A sua utilização também é explorada em termos de segurança [EAA Automotive]. As ligas de alumínio possuem alto poder de absorção de energia cinética. Deste modo, num choque de um veículo que contém a estrutura maioritariamente em liga de alumínio, o impacto é absorvido pela estrutura e não pelos seus ocupantes.

Estima-se que cerca de 90% dos camiões, assim como autocarros e contentores, contêm corpos em ligas de alumínio. A escolha prende-se com a sua resistência à corrosão comparativamente à dos aços. A carroçaria de um veículo em alumínio tem uma vida útil três vezes superior à de uma carroçaria em aço. As ligas de alumínio são pouco reactivas, permitindo transportar cargas variadas incluindo carvão, químicos e alimentos.



Figura 2.5: Cabeça de cilindro do Saab GM L850 totalmente feita em liga de alumínio.

Em veículos comerciais pequenos, as carroçarias de alumínio podem pesar cerca de 45% menos do que as de aço, permitindo levar cargas maiores, aumentar a *performance* (figuras 2.6 e 2.7) e poupar o consumo de combustível [EAA Auto Manual].



Figura 2.6: Ferrari 612 Scaglietti, que recorre à utilização de uma estrutura leve e rígida em liga de alumínio, para aumentar a *performance*. A sua estrutura em liga de alumínio, desenvolvida pela ALCOA, é 37% mais leve que a estrutura comparável em aço e oferece uma melhoria de 58% em rigidez de torção comparativamente à de aço utilizado no Ferrari 456.

2.7.3 Indústria de embalagem e acondicionamento

Na indústria de embalagem e acondicionamento, a grande utilização de ligas de alumínio vai para as latas de refrigerantes, recipientes em folha metálica e utensílios de culinária [EAA 03, IAI-Stat 04].

As latas de alumínio, como as representadas na figura 2.8, são contentores perfeitos pois são resistentes, leves, compactos, impermeáveis, seguros e recicláveis. A maior quantidade de latas de bebidas são feitas em alumínio e a sua popularidade é facilmente compreendida [Bay 97]. Este material não transmite sabor, mantém os aromas, cheiros e gaseificação original, é leve e não absorve humidade.

Uma lata de alumínio típica pesa cerca de 28 gramas quando vazia. As latas de aço



Figura 2.7: O novo protótipo da PININFARINA contém um chassis de estrutura tubular feita de alumínio extrudido ligado por resinas epóxicas.

pesam o dobro e uma garrafa de vidro nove vezes mais. Desde a primeira utilização do alumínio na produção das latas de refrigerantes, o fabrico de latas evoluiu radicalmente. Actualmente gasta-se apenas 60% do material que era necessário para fabricar uma lata nos anos 70.



Figura 2.8: (a) Latas de refrigerantes feitas de alumínio e (b) lata de liga de alumínio com a forma de garrafa.

A chamada folha de alumínio é muito utilizada numa grande variedade de aplicações devido à combinação única de propriedades [IAI 04]. Uma pequena camada de folha de liga de alumínio pode embalar qualquer volume tornando-o completamente impenetrável pela luz ou por qualquer líquido. A boa condutibilidade térmica deste material permite também aquecer o interior de um volume embalado sem dificuldades.

O uso do alumínio em utensílios culinários, ou de cozinha, é reportado à época de Napoleão III. O general Francês serviu um banquete ao monarca de Sião com pratos e talheres feitos deste material, raro na época. Os convidados menos importantes tiveram

de se alimentar em pratos feitos de ouro puro [EAA 03].

A boa condutibilidade térmica e resistência à corrosão, complementadas por uma baixa densidade, tornam as ligas de alumínio ideais para utensílios de culinária. Com algum cuidado estes utensílios, recomendados pelos grandes profissionais de culinária, podem durar uma vida inteira.

Capítulo 3

Investigação e Desenvolvimento — O Estado da Arte

Fazem-se algumas considerações sobre a investigação e desenvolvimento no âmbito da simulação numérica de problemas com acoplamento termomecânico. Descrevem-se alguns modelos constitutivos existentes e frequentemente utilizados para simular processos tecnológicos bem como as dificuldades inerentes a cada tipo de modelo. Apresentam-se ainda algumas técnicas numéricas que permitem aumentar a eficiência computacional.

3.1 Introdução

Para melhor compreender os fenómenos de comportamento físico de alguns materiais metálicos torna-se necessário desenvolver métodos e técnicas de análise específicos. As técnicas de investigação passíveis de serem aplicadas para este propósito passam pela vertente da experimentação e da simulação numérica. A abordagem de simulação prende-se com o desenvolvimento, implementação e aplicação de métodos numéricos baseados na mecânica dos meios contínuos. Os métodos numéricos aplicados a meios sólidos requerem uma descrição matemática dos estados de tensão e de deformação, bem como de outras variáveis do problema resultando num conjunto de condições que devem ser cumpridas. Deste modo obtêm-se as equações de equilíbrio, para as tensões, e as equações de compatibilidade, para as deformações. Também é imprescindível considerar relações que caracterizem o comportamento de cada material. Estas equações denominam-se equações constitutivas, pois descrevem o comportamento macroscópico que resulta da constituição interna do material.

As equações constitutivas podem apresentar-se de diversas formas. Desde conjuntos de equações independentes, que descrevem distintos tipos de resposta, a sistemas de equações unificadas, que pretendem descrever todo o comportamento do material numa só função

composta. A tentativa de descrever o maior número de particularidades de comportamento dos materiais conduz ao aparecimento de equações constitutivas complexas. Esta complexidade manifesta-se, também, no elevado número de parâmetros envolvidos.

3.2 Modelos Constitutivos

As equações gerais da física, como as equações de conservação da massa, momento, energia, etc., não são suficientes para determinar o campo de tensões ou de deslocamento numa estrutura [François *et al.* 98]. É necessário adicionar as leis físicas, para o material constituinte, que relacionem as variáveis dinâmicas, geométricas e cinemáticas. Por exemplo, as equações de equilíbrio, para a tensão, apenas fornecem seis equações para nove incógnitas, e as equações de compatibilidade de deformação apenas estabelecem três equações para seis incógnitas. São as equações constitutivas que, ligando as tensões e as deformações, possibilitam a utilização conjunta dos dois grupos de equações. Estas, com auxílio das condições fronteira, fornecem equações suficientes para determinar quer as tensões quer as deformações.

Podem distinguir-se três classes de comportamento que se podem combinar para os materiais metálicos [Fernandes 85, François *et al.* 98, Belytschko *et al.* 00, Prat e Gens 02]:

1. Elástico : quando o carregamento é removido a estrutura recupera da deformação. Quando a relação é linear e homogénea, diz-se que a elasticidade é *linear*.
2. Plástico : após a remoção do carregamento, subsiste uma deformação permanente. O carregamento imposto é suficientemente elevado a fim de ultrapassar um limiar. Geralmente, este limiar aumenta com o escoamento plástico — fenómeno do encruamento. Caso permaneça constante, a plasticidade é dita como *perfeita*. No caso da deformação anterior ao limiar plástico ser negligenciável, o comportamento é descrito como *rígido-perfeitamente plástico*.
3. Viscoso : o comportamento do material depende da velocidade.

A combinação destes três tipos de comportamento pode dar origem à elastoplasticidade, viscoplasticidade ou a elastoviscoplasticidade [Prat e Gens 02].

Com a excepção do caso de elasticidade perfeita, o comportamento mecânico apresenta a propriedade de hereditariedade. Ou seja, a resposta ao carregamento não depende unicamente do valor do carregamento imposto no momento, mas também da história de deformações [Anand 91, François *et al.* 98]. Nas equações constitutivas, esta propriedade pode ser levada em conta quer por uma relação entre as variáveis geométricas e dinâmicas quer pela dependência de um conjunto de parâmetros internos que descrevem o estado do material.

Em processos tecnológicos de transformação de materiais metálicos dá-se especial ênfase ao comportamento plástico e seu limiar, sendo, frequentemente, desprezado o comportamento elástico. As leis de comportamento plástico são essencialmente de dois tipos: as fenomenológicas e as baseadas na estrutura cristalográfica [Habraken 00, Alves 03]. As primeiras descrevem o comportamento plástico do material de um ponto de vista macroscópico, enquanto que as segundas baseiam-se no domínio do comportamento dos cristais

e da evolução da sua textura. Devido à complexidade dos modelos baseados na estrutura cristalográfica, os modelos fenomenológicos apresentam-se numericamente mais eficientes.

Os modelos fenomenológicos são constituídos por uma superfície de plasticidade associada a leis de encruamento isotrópico e/ou cinemático. Esta estrutura, apesar de constituir uma simplificação, parece ser aceitável [Barlat *et al.* 97, Alves 03]. Desde as últimas décadas, têm sido continuamente propostos numerosos critérios de plasticidade. Nos critérios de plasticidade isotrópicos mais divulgados encontram-se os de Tresca (1864), von Mises (1913) e Drucker (1949). Os critérios de plasticidade anisotrópicos mais relevantes são os propostos por Hill (1948, 1990 e 1993), Budiansky (1984), Barlat *et al.* (1989, 1997 e 2000), Karafillis & Boyce (1993) e Cazacu & Barlat (2001) [Menezes 94, Barlat *et al.* 97, Habraken 00, Alves 03].

As leis de encruamento podem depender de variáveis internas do material e determinam a evolução da dimensão, forma e posição da superfície de plasticidade. Das leis de encruamento isotrópico propostas, citam-se as seguintes: Ludwick (1909), Prager (1938), Hollomon (1944), Swift (1947) e Voce (1948) [Alves 03]. Dos modelos de encruamento cinemático destacam-se os de Prager (1955), Ziegler (1959) e Lemaître & Chaboche (1985) [Habraken 00].

Outras formas de modelos fenomenológicos partem das teorias clássicas em que, não existindo superfície de cedência, é utilizado um critério de carregamento/não-carregamento. Estes modelos, quando pretendem descrever os diversos fenómenos existentes nos materiais por um único conjunto de equações evolutivas e de encruamento, são denominados por modelos constitutivos unificados [Anand 91]. Os modelos unificados têm a sua principal utilização quando se fala de viscoplasticidade a temperaturas elevadas. No decorrer das últimas décadas, este tipo de modelo tem tentado atribuir significado físico e micromecânico às variáveis dos modelos, passando a estar entre as categorias dos modelos fenomenológicos e dos baseados na estrutura micromecânica.

O estudo dos modelos físicos mostra que o comportamento viscoplástico ocorre em diversas condições. Este facto explica porque é que estes modelos podem ter formas diferentes. Todos eles são caracterizados por uma expressão da velocidade de deformação plástica como função do encruamento e do estado de tensão [François *et al.* 98b]. Esta relação evita a formação de deformação plástica instantânea e separa a deformação nas partes elástica e inelástica. Destes modelos destacam-se os modelos de Norton e de Sellars & Teggart [François *et al.* 98], com ou sem encruamento, e o conjunto dos modelos propostos por Anand [Anand *et al.* 85, Anand 85, Anand 91, Brown *et al.* 89, Balasubramanian e Anand 02].

3.3 Identificação de Parâmetros dos Modelos Constitutivos

A tentativa de modelar os fenómenos envolvidos nos processos tecnológicos trouxeram um aumento da complexidade dos modelos constitutivos, quer fenomenológicos quer nos baseados na estrutura cristalográfica. Esta complexidade evidencia-se pelo maior número de equações e pelo maior número de parâmetros que devem ser determinados para cada material. Como exemplo, tome-se um modelo que utilize o critério de plasticidade de Cazacu & Barlat [Cazacu e Barlat 01]. A expressão que define este critério envolve 18 parâmetros de anisotropia para estados de tensão triaxiais e 11 para estados planos de

tensão, impossíveis de se determinarem de uma forma imediata ou exploratória.

Nos modelos baseados na evolução da estrutura cristalográfica, o valor dos parâmetros envolvidos, e que apresentam um significado físico bem definido, deve ser encontrado recorrendo a métodos experimentais. Nos modelos fenomenológicos, estes podem ser encontrados por técnicas numéricas. Apesar de existirem técnicas numéricas capazes de identificar com sucesso um número elevado de parâmetros, estas necessitam sempre de resultados experimentais de referência. Consequentemente, a maioria das metodologias propostas utiliza metodologias inversas [Cailletaud e Pilvin 94].

As técnicas numéricas de determinação dos parâmetros de modelos constitutivos estão intrinsecamente aliadas a métodos de optimização. Estas podem dividir-se em três grupos: (i) as baseadas em gradientes, (ii) as de procura por tentativa inteligente e (iii) as baseadas em inteligência artificial.

No primeiro grupo incluem-se todos os métodos que utilizam, além do valor do funcional a minimizar, informação sobre os gradientes [Cailletaud e Pilvin 94, Zhao e Lee 04]. Estes métodos, de eficiência mais elevada [Polak 97, Andrade-Campos *et al.* 04a], necessitam de um conjunto inicial de parâmetros e da resolução de um sistema de equações em cada iteração.

Os outros dois grupos são métodos exploratórios, no sentido que utilizam unicamente o valor da função a minimizar. Nas técnicas de procura por tentativa inteligente, encontram-se as estratégias evolucionárias [Furukawa e Yagawa 97, Andrade-Campos *et al.* 04a], os algoritmos genéticos [Brierley 98, Costa *et al.* 99, Coello 02, Leal e Ramos 02] e os algoritmos imunes [Castro e Timmis 02].

As técnicas baseadas na inteligência artificial tentam reproduzir numericamente os processos cognitivos humanos. Destas destaca-se o procedimento por redes neuronais [Furukawa e Yagawa 98].

Também têm sido utilizadas com sucesso outros métodos e técnicas, como a regularização sem peso¹, na identificação de parâmetros dos modelos constitutivos fenomenológicos [Furukawa 01].

Além dos métodos de identificação de parâmetros, são ainda desenvolvidos métodos inteligentes de criação de modelos e identificação de parâmetros pelas técnicas referidas [Furukawa e Yagawa 98]. Este assunto é discutido com maior detalhe no capítulo 10.

3.4 Influência da Temperatura

A temperatura possui um papel preponderante no comportamento dos materiais. A influência da temperatura no comportamento mecânico não se limita às propriedades. Existe também uma interacção através da geração de calor por deformação plástica e do contacto com atrito entre sólidos.

Caso o ambiente exterior esteja a uma temperatura significativamente diferente da peça, o calor perdido por convecção e radiação, adicionado ao calor perdido pelo contacto com ferramentas, é responsável pelo desenvolvimento de gradientes de temperatura no interior da peça. Estes gradientes induzidos podem ser responsáveis pelo aparecimento de deformação e, consequentemente, tensões inesperadas. Face ao referido, compreende-se a importância de se introduzir o efeito mútuo da temperatura na análise mecânica do

¹Do Inglês *weightless regularization*.

comportamento das ligas de alumínio.

Os modelos constitutivos devem ter em consideração os fenômenos induzidos pela temperatura e produzidos à luz da termodinâmica da plasticidade, como a geração de calor por deformação plástica. Também as propriedades mecânicas, utilizadas pela modelação constitutiva, devem ser função da temperatura. A necessidade de inclusão da temperatura torna o custo computacional mais elevado.

As primeiras técnicas numéricas apresentadas, de forma a analisar processos termomecânicos, tomavam a hipótese da temperatura do material permanecer constante durante toda a operação de fabrico. Este procedimento, conhecido por modelação isotérmica, despreza o calor gerado por deformação plástica e por atrito, bem como o calor trocado com o meio ambiente [Alves 04]. Estas técnicas também consideravam apenas a temperatura média na avaliação das propriedades mecânicas do material. Nestas condições, o universo de aplicação deste tipo de modelação apresentava-se muito restrito.

Posteriormente, as técnicas desenvolvidas para a analisar a influência da temperatura em processos mecânicos baseavam-se na hipótese do campo de temperatura do material permanecer homogêneo durante o processo. Esta simplificação apoia-se na consideração de uma resistência térmica desprezável. A técnica referida, que já possibilitava avaliar as propriedades em função da temperatura, permitia, de uma forma aproximada, modelar processos que envolvessem arrefecimentos ou aquecimentos.

Em meados dos anos 70, Zienkiewicz [Zienkiewicz *et al.* 86, Zienkiewicz e Taylor 91] propôs uma primeira solução acoplada para resolver um problema de extrusão. Inicialmente, o algoritmo utilizado resolvia o problema mecânico para uma dada distribuição estacionária de temperaturas. Posteriormente, o esquema numérico utilizado permitiu obter simultaneamente a distribuição da temperatura e o campo de velocidades no interior da peça (em deformação plana).

Recorrendo a uma estratégia de acoplamento semelhante, em 1980, Rebelo e Kobayashi [Rebelo e Kobayashi 80a, Rebelo e Kobayashi 80b] apresentaram algoritmos de elementos finitos para determinar a solução de processos transientes de deformação plástica. As soluções térmica e mecânica, assim como a distribuição do campo de temperatura nas ferramentas, são obtidas simultaneamente.

Outras abordagens, considerando a influência da temperatura, têm sido apresentadas. Destas destacam-se as de Perzyna [Perzyna 93], Szabo e Varga [Szabo e Varga 95], Vaz Junior [Vaz Jr. 98], Rodrigues e Martins [Rodrigues e Martins 98] e Doltsinis [Doltsinis 04].

3.5 Acoplamento Termomecânico

Os problemas acoplados surgem, frequentemente, em aplicações de engenharia. Esta classe de problemas pode definir-se da seguinte maneira [Zienkiewicz e Taylor 91]:

Formulações e sistemas acoplados são aqueles que podem ser aplicados a domínios múltiplos e variáveis dependentes e que descrevem fenômenos físicos diferentes. Nestes sistemas (a) nenhum domínio pode ser estudado independentemente dos outros e (b) nenhum conjunto de variáveis dependentes pode ser eliminado ao nível das equações diferenciais.

É também usual classificar os problemas acoplados em duas categorias distintas: (i) problemas cujo acoplamento ocorre no domínio da interface pelas condições fronteira aí impostas

e (ii) problemas cujo acoplamento provém de diferentes fenómenos físicos que ocorrem, total ou parcialmente, em domínios sobrepostos [Cervera *et al.* 93]. Os processos de deformação de acoplamento termomecânico são um exemplo da segunda classe de problemas referidos. As variáveis de campos distintos influenciam-se mutuamente e afectam as equações que governam o campo individual. A interacção ocorre ao nível local do meio contínuo.

Na classe em que as variáveis do problema podem ser determinadas independentemente em cada subdomínio e o acoplamento acontece nas fronteiras comuns encontram-se, por exemplo, os problemas em que o propósito da decomposição do domínio é a computação paralela/distribuída, sem qualquer motivação física. Esta forma de acoplamento é um requisito em aplicações de grande escala.

De uma forma geral, o problema acoplado pode ser encarado como uma composição de subproblemas. Em cada um existe coerência quer do ponto de vista físico quer topológico. Porém, os problemas são dependentes uns dos outros [Doltsinis 04]. Podem aplicar-se técnicas de resolução distintas em cada subproblema que continua a obter-se a solução do problema acoplado original. São diversas as estratégias numéricas de abordar um problema acoplado.

3.5.1 Estratégias de acoplamento

As estratégias mais comuns para a resolução de problemas de acoplamento dividem-se nas seguintes categorias [Cervera *et al.* 96]:

1. Tratamento simultâneo dos domínios: esta estratégia leva a um único conjunto de equações algébricas que envolve todas as variáveis relevantes. Geralmente, estas variáveis representam a discretização de diferentes domínios ou de fenómenos físicos diferentes.
2. Tratamento sequencial dos domínios. É necessário considerar os termos de acoplamento no segundo membro das equações. A estratégia conduz a vários sistemas de equações algébricas. Cada equação deverá ser resolvida exclusivamente para as variáveis relacionadas com o domínio a que diz respeito.

Ambas as estratégias possuem vantagens e desvantagens. A primeira estratégia necessita do desenvolvimento de um programa com uma estrutura específica e distinta da utilizada na generalidade dos programas comerciais. Este código complexo, de difícil modificação e utilização, poderá ser paralelizado unicamente ao nível básico de instruções. Apesar da elevada eficiência de resultados que esta estratégia poderá oferecer, o esforço necessário de desenvolvimento de semelhante código é excessivo tendo em conta a alternativa [Cervera *et al.* 93].

A segunda estratégia permite que a solução de cada subproblema seja encontrada isoladamente. Os programas utilizados poderão ser desenvolvidos particularmente ou ser adaptados de forma a considerarem os termos de acoplamento. Uma das vantagens desta estratégia é que permite que os diferentes programas possam ser desenvolvidos por diferentes investigadores utilizando estratégias e métodos diferentes. A resolução para cada domínio pode ser facilmente modificada, adaptada e/ou aperfeiçoada. Esta estratégia modular é facilmente adaptável a computação paralela/distribuída [Cervera *et al.* 96].

Todavia, esta abordagem apresenta o inconveniente de necessitar de um programa de interligação entre os vários problemas. Este deve transferir informação entre os diferentes problemas, verificar a convergência e sincronizar todo o processo globalmente.

Tratamento simultâneo dos domínios

As equações que governam o problema termomecânico discretizado em elementos finitos podem ser dadas da seguinte forma:

$$\mathbf{R}_M(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}; \mathbf{T}, \dot{\mathbf{T}}) = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{R}_T(t, \mathbf{T}, \dot{\mathbf{T}}; \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \quad (3.2)$$

onde a expressão $\mathbf{R}_M = \mathbf{0}$ representa a forma residual da condição de equilíbrio e rege a velocidade $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$ para um sólido viscoso. A segunda equação vectorial, $\mathbf{R}_T = \mathbf{0}$, define a forma residual da equação da condução de calor em regime transiente. As grandezas vectoriais \mathbf{x} e \mathbf{T} e as suas velocidades referem-se aos mesmos nós, sendo considerada uma única discretização em elementos finitos. No caso presente, as evoluções da geometria \mathbf{x} e da temperatura \mathbf{T} são dadas incrementalmente durante o processo de deformação.

No caso de problemas de acoplamento termomecânico de tratamento simultâneo dos domínios, a estratégia leva à resolução de um sistema não-linear de equações algébricas na forma seguinte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{R}_M(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}; \mathbf{T}, \dot{\mathbf{T}}) \\ \mathbf{R}_T(t, \mathbf{T}, \dot{\mathbf{T}}; \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{array} \right\}. \quad (3.3)$$

Neste sistema, $\dot{\mathbf{x}}$ e $\dot{\mathbf{T}}$ são os vectores de incógnitas nodais. Esta estratégia pode ser encontrada em diversos esquemas de linearização temporal para resolução de problemas não-lineares. De entre eles, destacam-se os métodos implícitos de Newton-Raphson (e suas variantes), e os métodos de Newton secantes [Cervera *et al.* 93]. Estes métodos, quando utilizados em sistemas acoplados, apresentam as mesmas vantagens e a mesma estrutura que em problemas desacoplados de características similares. Por exemplo, o esquema totalmente implícito,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{t+\Delta t} &= \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t} \\ \mathbf{T}_{t+\Delta t} &= \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

requer a solução do sistema (3.3) para $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{t+\Delta t}$ e $\mathbf{T} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}$ no instante $t + \Delta t$. Então, obtém-se o sistema [Doltsinis 04]

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{R}_M(t + \Delta t, \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}; \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}) \\ \mathbf{R}_T(t + \Delta t, \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}; \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{array} \right\}. \quad (3.5)$$

O algoritmo geral baseado numa estratégia de tratamento simultâneo dos vários domínios utilizando uma integração temporal implícita encontra-se representado de forma esquemática no quadro 3.1. Uma desvantagem desta estratégia prende-se com a elevada dimensão e mau condicionamento da matriz global relativamente às matrizes de problemas de domínios independentes. Esta desvantagem é ainda dilatada pelo facto de os membros da matriz global, que provêm dos diferentes domínios, representarem magnitudes físicas/numéricas distintas. Porém, esta abordagem apresenta a vantagem do algoritmo final ser bem definido e a sua análise de convergência ser exequível [Cervera *et al.* 96].

Tabela 3.1: Algoritmo de integração implícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento simultâneo dos domínios.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Inicialização; $t = t_0, \mathbf{x} = \mathbf{x}(t_0), \mathbf{T} = \mathbf{T}(t_0)$ 2. Ciclo dos incrementos de tempo; $t \Rightarrow t + \Delta t$ Ciclo iterativo de convergência; $\left. \begin{array}{l} \mathbf{R}_M(t + \Delta t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t; \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}) = \mathbf{0} \\ \mathbf{R}_T(t + \Delta t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t; \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}, \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}) = \mathbf{0} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t} \\ \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t} \end{array}$ Até convergência 3. Actualização; $\mathbf{x}_t \Leftarrow \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}$ $\mathbf{T}_t \Leftarrow \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}$ $\dot{\mathbf{x}}_t \Leftarrow \dot{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}$ $\dot{\mathbf{T}}_t \Leftarrow \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t}$ $t \Leftarrow t + \Delta t$ 4. Fim do ciclo dos incrementos de tempo
--

Tratamento sequencial dos domínios

O tratamento sequencial dos problemas envolvidos permite utilizar um algoritmo por blocos. Esta característica reduz o tamanho dos subproblemas resultantes. No quadro 3.2 apresenta-se o esquema geral de uma estratégia explícita e sequencial de resolução do problema de acoplamento termomecânico. Neste algoritmo, destaca-se a resolução individual das equações vectoriais, para $\dot{\mathbf{T}}_t$ e $\dot{\mathbf{x}}_t$. Os problemas envolvidos neste esquema podem ser executados concorrentemente em diferentes unidades de processamento e em diferentes programas [Doltsinis 04]. No final de cada incremento, os resultados são trocados entre os diversos programas e a sua computação decorre até ao final do incremento seguinte. Nos processos de tratamento sequencial, se os processos individuais forem desenvolvidos sucessivamente, cada resultado pode ser utilizado nos cálculos subsequentes do incremento. No algoritmo da tabela 3.3 mostra-se esta estrutura.

Apesar da solução explícita ter sido apresentada, é de realçar que os algoritmos de resolução individual de cada um dos problemas podem tomar a forma implícita ou semi-implícita sem perda de validade dos algoritmos 3.2 e 3.3.

Na figura 3.1 apresentam-se as estratégias referidas. Nesta figura, T_1 e T_2 referem-se aos problemas dos domínios térmico (1) e mecânico (2), respectivamente.

A análise de cada uma das estratégias deve considerar a estabilidade da integração temporal. Enquanto que na estratégia do tratamento simultâneo dos vários domínios a análise de estabilidade é análoga à de um problema desacoplado, no caso do tratamento sequencial o mesmo não é observado [Hughes 87]. O algoritmo geral do problema termomecânico pode ser condicionalmente estável ainda que os algoritmos dos domínios individuais sejam incondicionalmente estáveis [Cervera *et al.* 96]. Foram propostos, para algoritmos deste tipo (iterativo por blocos), métodos de estabilização incondicional

Tabela 3.2: Algoritmo de integração explícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento sequencial dos domínios: solução paralela.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Inicialização; $t = t_0, \mathbf{x} = \mathbf{x}(t_0), \mathbf{T} = \mathbf{T}(t_0)$ 2. Ciclo dos incrementos; Resolver para $\dot{\mathbf{T}}_t$ e $\dot{\mathbf{x}}_t$; <ol style="list-style-type: none"> 2.1. $\mathbf{R}_T(t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t) = \mathbf{0}$ 2.2. $\mathbf{R}_M(t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t) = \mathbf{0}$ 3. Actualização; $t \leftarrow t + \Delta t$ $\mathbf{T}_t \leftarrow \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_t$ $\mathbf{x}_t \leftarrow \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_t$ 4. Troca de informação: \mathbf{T}_t e \mathbf{x}_t 5. Fim do ciclo dos incrementos.
--

Tabela 3.3: Algoritmo de integração explícita do processo termomecanicamente acoplado por tratamento sequencial dos domínios. Solução sucessiva.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Inicialização; $t = t_0, \mathbf{x} = \mathbf{x}(t_0), \mathbf{T} = \mathbf{T}(t_0)$ 2. Ciclo dos incrementos; <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Resolver para $\dot{\mathbf{T}}_t$; $\mathbf{R}_T(t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t) = \mathbf{0}$ 2.2. Actualização; $\mathbf{T}_t \leftarrow \mathbf{T}_t + \Delta t \dot{\mathbf{T}}_t$ 2.3. Troca de informações: \mathbf{T}_t 2.4. Resolver para $\dot{\mathbf{x}}_t$; $\mathbf{R}_M(t, \mathbf{x}_t, \dot{\mathbf{x}}_t, \mathbf{T}_t, \dot{\mathbf{T}}_t) = \mathbf{0}$ 2.5. Actualização; $\mathbf{x}_t \leftarrow \mathbf{x}_t + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_t$ 2.6. Troca de informação: \mathbf{x}_t 3. Actualização; $t \leftarrow t + \Delta t$ 4. Fim do ciclo dos incrementos.
--

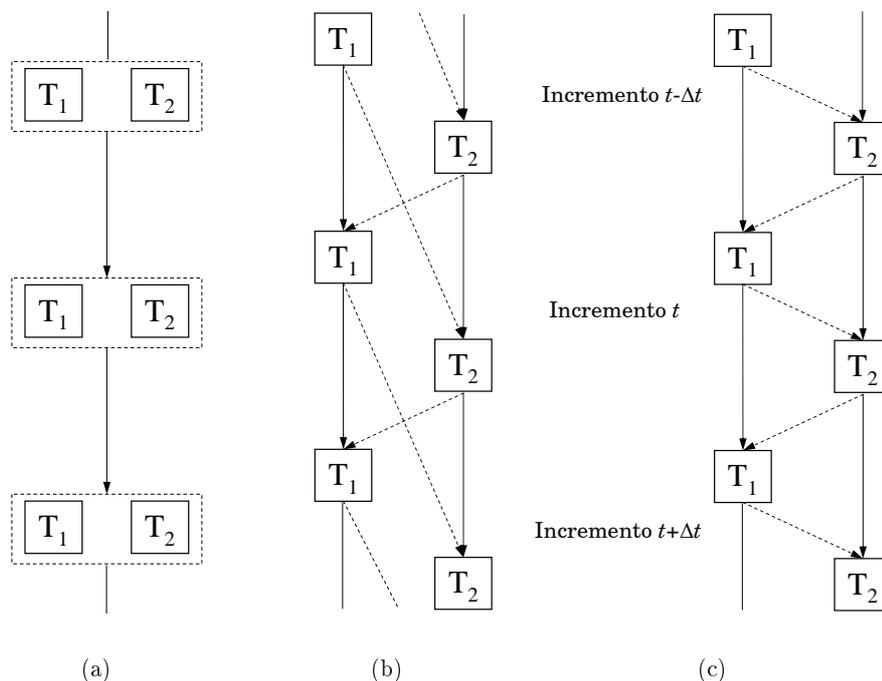


Figura 3.1: Estratégias de acoplamento: (a) tratamento simultâneo e tratamento sequencial de (b) forma paralela e (c) de forma sucessiva dos vários domínios .

[Zienkiewicz e Taylor 91, Zienkiewicz *et al.* 86]. Porém, estes ainda se apresentam de utilização limitada.

A utilização de algoritmos condicionalmente estáveis não auxiliados por métodos de estabilização obriga à utilização de incrementos de tempo pequenos. Esta opção pode ser praticável se compensada por uma redução do esforço computacional.

No caso limite, em que a solução termomecânica é iterada até se atingir convergência total, as características do processo de convergência tornam-se semelhantes às utilizadas no tratamento simultâneo dos domínios. Por outro lado, quando não é feita qualquer verificação de convergência, a abordagem torna-se explícita em blocos ou *staggered* e apresenta-se condicionalmente estável [Filippa e Parks 00]. Actualmente, não existe uma teoria geral que estabeleça convergência e estabilidade para esquemas não-lineares acoplados de tratamento dos domínios sequencialmente [Cervera *et al.* 96].

3.6 Cálculo Paralelo de Sistemas Acoplados

A resolução de problemas de domínios diferentes acarreta um custo computacional elevado. Presentemente, apesar do crescimento quase exponencial da capacidade de cálculo dos processadores, é sabido que o cálculo paralelo possibilita um aumento significativo adicional da velocidade de computação.

Ambas as estratégias de tratamento sequencial dos domínios apresentadas na secção anterior (esquematisadas nas figuras 3.1(b) e (c)), permitem utilizar favoravelmente as po-

tencialidades destas técnicas numéricas. A estratégia por etapas, independentemente de utilizar integração explícita ou implícita, apresenta uma estrutura naturalmente paralelizável. Enquanto o problema do domínio 1 é resolvido, pode obter-se, simultaneamente, a solução do problema do domínio 2. Na figura 3.2(a) esta estratégia representa-se de forma esquemática.

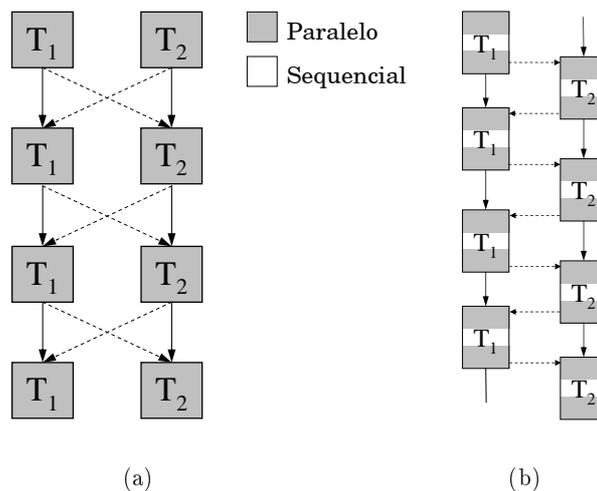


Figura 3.2: Estratégias de acoplamento com tratamento sequencial dos diferentes domínios (a) de forma paralela e (b) de forma sucessiva com auxílio da computação paralela.

A solução acoplada pela estratégia sequencial sucessiva parece não permitir processamento paralelo. Para obter a solução do problema no domínio 2, é necessária a solução obtida do domínio 1 no mesmo incremento. Contudo, se se utilizar uma integração temporal implícita ou um algoritmo do tipo *previsão-correcção* no problema do domínio 1, é possível exportar resultados para o problema do domínio 2, mesmo que prévios, antes de finalizar o cálculo neste domínio. Deste modo, o cálculo do problema no domínio 2 pode ser executado paralelamente. Esta estratégia é representada na figura 3.2(b). Apesar de não utilizar os recursos da computação paralela como a estratégia anterior, esta pode conduzir a resultados computacionalmente mais eficientes [Cervera *et al.* 93].

A computação paralela/distribuída permite outras possibilidades de aumento de desempenho num programa de simulação pelo método dos elementos finitos, para além das já referidas. O método da decomposição do domínio é a técnica de paralelização ou distribuição mais utilizada [Doltsinis 04, Pinho-da-Cruz *et al.* 05]. Este consiste na partição do domínio global num conjunto de subdomínios, iguais ao número de processadores disponíveis, que interagem entre eles nas fronteiras comuns. Esta técnica de aumento de eficiência computacional transforma o problema inicial num problema acoplado da classe (i) (ver secção 3.5).

A divisão em subdomínios deve ser conciliável com o número de processadores ou unidades de processamento disponíveis, condições fronteira e com a dimensão do problema. Deve realçar-se que, em problemas de pequena dimensão, o cálculo paralelo pode ter custos mais elevados do que a computação em uniprocessamento. Tal se deve a custos adicionais

de comunicação e troca de informação entre as unidades de processamento.

O algoritmo global paralelo é semelhante ao sequencial e muitas das etapas permanecem inalteradas. Cada processador executa instruções idênticas, mas sobre diferentes conjuntos de dados, seguindo o equilíbrio da decomposição do domínio discretizado [Doltsinis 04]. Durante a fase de inicialização, a conectividade dos subdomínios é estabelecida. Durante o ciclo de iterações, cada processador constrói as matrizes e vectores elementares e verifica as condições de fronteira em cada nó do subdomínio. Esta fase é realizada em paralelo, sem a necessidade de troca de informação entre os processadores. De seguida, as matrizes e vectores elementares são assemblados num sistema global. O sistema global pode também resolver-se em paralelo [Cervera *et al.* 96, Fragakis e Papadrakakis 02, Doltsinis 04]. Uma vez atingida a convergência, a solução é actualizada de forma paralela e o mesmo procedimento é continuado até que o processo termine.

A simulação numérica revela que grande parte do tempo de computação é gasto na resolução do sistema de equações. No caso implícito, a resolução do sistema de equações é realizada várias vezes num incremento de tempo até à solução ser encontrada [Alves e Menezes 02, Doltsinis 04]. Para problemas tridimensionais e de grandes dimensões ainda é mais notório que o consumo de tempo de computação é dominado pela fase de resolução do sistema de equações. Como tal, a paralelização de um programa de simulação de processos de deformação pode ser limitada a esta etapa, sem prejuízo da modularidade.

Embora a paralelização de um programa ocasione uma eficiência computacional mais elevada, esta acarreta um grande esforço de programação. O tempo necessário para a paralelização do código pode ser superior ao tempo de desenvolvimento da capacidade de uniprocessamento que iguala a eficiência da paralelização. Por conseguinte, para alguns investigadores, a importância da computação paralela tem diminuído [Löhner 03].

Parte II

Modelação Matemática

Capítulo 4

Cinemática dos Meios Contínuos

Introduzem-se as hipóteses e noções associadas à modelação cinemática em grandes deformações. Aborda-se a mecânica dos meios contínuos aplicada aos materiais metálicos submetidos a grandes transformações termoelásticas-viscoplásticas e definem-se os referenciais dos modelos constitutivos.

4.1 Introdução

Em processos tecnológicos como, por exemplo, a forjagem, a extrusão e a laminagem, desenvolvem-se grandes deformações e rotações. A modelação de qualquer um destes processos, assim como qualquer outro processo que envolva níveis de deformação e de velocidade de deformação elevadas, deve ter em conta as particularidades da cinemática das grandes transformações. Do ponto de vista da mecânica dos meios contínuos, a maneira conveniente de descrever as grandes deformações em sólidos é feita pela utilização de um referencial ligado ao corpo e que se deforme com este [Rodríguez-Ferran e Huerta 96, Simo e Hughes 98]. Porém, a abordagem mais usual em mecânica computacional não-linear é a da utilização de um referencial cartesiano fixo [Zienkiewicz e Taylor 91], como se de um caso linear se tratasse. Esta aproximação, embora recorra a uma descrição cinemática mais simples, pode conduzir à acumulação de erros aquando da aplicação incremental da lei constitutiva.

O comportamento não-linear de um material pode ser descrito por equações diferenciais, relacionando as derivadas da deformação e da tensão. Em grandes transformações, a escolha da derivada de tensão mais adequada é de extrema importância devido ao princípio da objectividade [Rodríguez-Ferran e Huerta 96]. Neste princípio todas as relações constitutivas devem ser covariantes, *i.e.*, estas devem permanecer invariantes quando formuladas nas configurações espaciais, materiais ou em qualquer outra configuração referencial conveniente [Andrade-Campos *et al.* 03]. Este princípio é unicamente alcançado quando são utilizadas grandezas objectivas [Rodríguez-Ferran e Huerta 96]. Por exemplo, a derivada material (temporal) da tensão não é um tensor objectivo e, como tal, por forma a obedecer

ao princípio da objectividade, torna-se necessário utilizar uma derivada objectiva do tensor das tensões. Uma escolha menos cuidada da grandeza objectiva da derivada da tensão também pode conduzir a efeitos não desejados, como o caso de uma resposta instável em níveis de deformação de corte puro elevados, denominado por fenómeno de oscilação em corte [Xiao *et al.* 97].

Neste trabalho, a formulação apresentada, estendida ao universo das grandes deformações, é baseada no caso em que a parte elástica da deformação é modelada por uma lei hipoeelástica. O uso deste tipo de leis é uma prática comum em trabalhos analíticos e numéricos [Simo e Hughes 98, Ortiz 87, Menezes 94] e é apropriado quando se modela o comportamento de metais, onde as deformações elásticas são pequenas quando comparadas com as plásticas.

4.2 Relações Cinemáticas

Para se conhecer o movimento do sólido em grandes transformações é imperativo definir a posição de cada ponto material em cada instante de tempo. Para tal, consideram-se as duas configurações do meio contínuo genérico Ψ representadas na figura 4.1. Estas configurações podem ser descritas como:

- i) uma configuração de referência C_0 , correspondente ao instante de tempo t_0 . Nesta configuração, a posição de um ponto material genérico P , pertencente ao meio contínuo Ψ , é definida pelo vector de posição \mathbf{x}_0 ,

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

e

- ii) a configuração actual do meio, C_t , no instante de tempo t . Nesta configuração, a posição da partícula material P é definida pelo vector de posição \mathbf{x} , dado por

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t). \quad (4.2)$$

Deste modo, os vectores \mathbf{x} e \mathbf{x}_0 podem relacionar-se de acordo com

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t), \quad (4.3)$$

em que $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)$ representa o deslocamento do ponto material P entre as configurações de referência C_0 e corrente C_t . Por conseguinte, a velocidade \mathbf{v} do ponto de referência \mathbf{x}_0 , dada pela derivada temporal do vector posição, é definida por:

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t). \quad (4.4)$$

A equação (4.4) define o campo de velocidades associado. A deformação local na vizinhança do ponto P é definida pelo tensor gradiente da transformação pontual \mathbf{F} (ver figura 4.1). Este tensor é definido por

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_0, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t), \quad \det(\mathbf{F}) > 0. \quad (4.5)$$

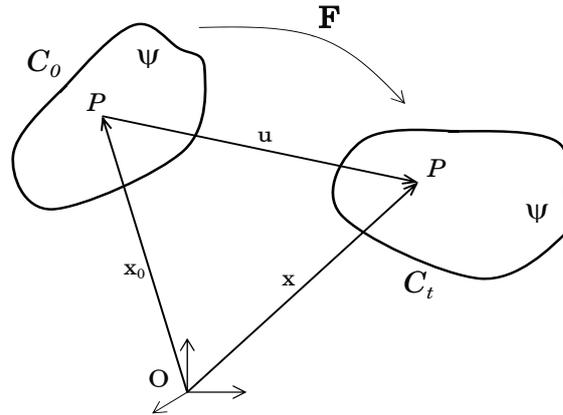


Figura 4.1: Representação esquemática da transformação cinemática de um meio contínuo genérico Ψ . Representação da configuração actual, C_t , e da configuração de referência, C_0 , do meio nos instantes de tempo presente, t , e inicial do incremento, t_0 , respectivamente.

O tensor \mathbf{F} corresponde à transformação finita de \mathbf{x}_0 para \mathbf{x} , definindo o movimento local do meio contínuo [Menezes 94]. Introduzindo a equação (4.3) na definição anterior obtém-se

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} [\mathbf{x}_0 + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)] = \mathbf{1} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t), \quad (4.6)$$

em que $\mathbf{1}$ representa o tensor identidade de segunda ordem e $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)$ o gradiente dos deslocamentos.

A decomposição polar do tensor gradiente de transformação \mathbf{F} pode ser obtida por cada uma das relações seguintes:

$$\mathbf{F} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad (4.7)$$

ou

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}, \quad (4.8)$$

onde \mathbf{V} e \mathbf{U} são os tensores de deformação linear simétrico esquerdo e simétrico direito, respectivamente. Os tensores \mathbf{V} e \mathbf{U} são definidos positivos ($\mathbf{V} = \mathbf{V}^T$ e $\mathbf{U} = \mathbf{U}^T$). \mathbf{R} é um tensor ortogonal de rotação elástica que verifica as seguintes propriedades:

$$\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T \quad \text{e} \quad \det(\mathbf{R}) = 1. \quad (4.9)$$

Os dois métodos de decomposição da transformação \mathbf{F} definidos pelas equações (4.7) e (4.8) estão esquematicamente ilustrados na figura 4.2.

Define-se um sistema de eixos ortogonais, associado a cada ponto material na configuração de referência C_0 , de forma a que o movimento relativo a este eixo seja unicamente devido à deformação. Na decomposição $\mathbf{V}\mathbf{R}$ (equação (4.7)) o sistema de eixos segue a rotação, na transformação de C_0 para C_v . Todavia, durante a transformação de C_v para C_t , estes são considerados como *espaciais* uma vez que são invariantes com a deformação. Para a decomposição $\mathbf{R}\mathbf{U}$ (equação (4.8)), durante a transformação de C_0 para C_u , os eixos

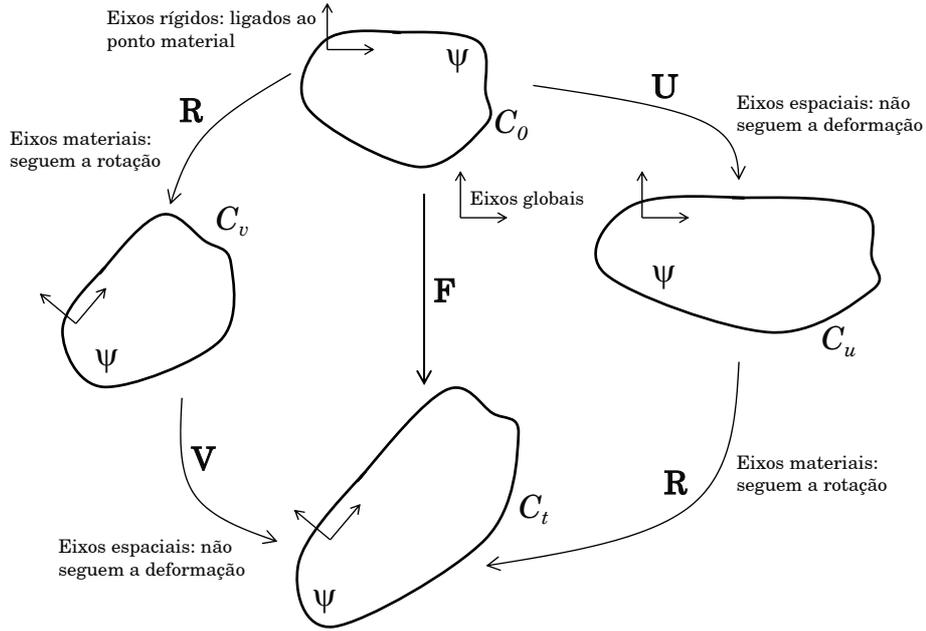


Figura 4.2: Representação esquemática dos dois métodos de decomposição polar da transformação \mathbf{F} .

são considerados *espaciais* e invariantes com a deformação, ou seja, não se alteram com a deformação. Contudo, durante a transformação de C_u para C_t , os eixos são modificados para *materiais* no sentido em que rodam com o corpo Ψ . As grandezas, como os tensores de deformação e de tensão, bem como os seus gradientes, quando referidas nestes eixos dizem-se definidas na configuração irrotacional [Johnson e Bauman 84, Dogui 87].

O gradiente de velocidade \mathbf{L} é definido por

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \text{grad}[\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)] = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x}_0(\mathbf{x}, t). \quad (4.10)$$

Uma vez que, a partir da expressão (4.5),

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, t) = \dot{\mathbf{F}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x}_0(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}^{-1}, \quad (4.11)$$

a expressão do gradiente de velocidade \mathbf{L} pode ser escrita na forma mais simples

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (4.12)$$

O tensor gradiente de transformação \mathbf{F} será utilizado para descrever a cinemática da termoelastoviscoplasticidade em grandes deformações. Para tal, considera-se uma configuração intermédia de C_0 e C_t , representada na figura 4.3, definida como a configuração obtida por relaxamento total das tensões na configuração C_t [Menezes 94] e que é geralmente designada por configuração relaxada total [Lee 69, Sidoroff 81, Teodosiu 89]. Definem-se ainda as seguintes configurações virtuais [Teodosiu e Genevois 88, Teixeira-Dias 99]:

Γ_0 – Configuração da vizinhança infinitesimal do ponto material P , no instante t_0 e à temperatura T_0 ;

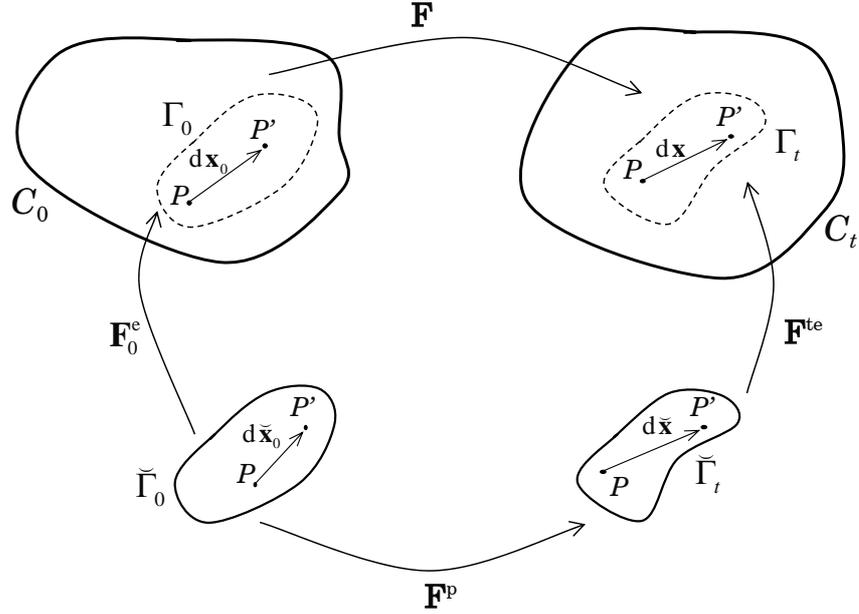


Figura 4.3: Representação esquemática da decomposição do gradiente de transformação \mathbf{F} nas respectivas partes termoelástica e viscoplástica.

$\check{\Gamma}_0$ – Configuração obtida após relaxação elástica da configuração Γ_0 ;

Γ_t – Configuração da vizinhança infinitesimal do ponto material P , no instante t e à temperatura T ;

$\check{\Gamma}_t$ – Configuração obtida após relaxação elástica da configuração Γ_t .

Sejam $d\mathbf{x}_0$, $d\check{\mathbf{x}}_0$, $d\mathbf{x}$ e $d\check{\mathbf{x}}$ os vectores de posição do ponto material P nas configurações Γ_0 , $\check{\Gamma}_0$, Γ_t e $\check{\Gamma}_t$, respectivamente. O gradiente de deformação \mathbf{F} , os gradientes de transformações elásticas \mathbf{F}_0^e e \mathbf{F}^{te} nos instantes de tempo t_0 e t , respectivamente, e o gradiente de transformação plástica \mathbf{F}^p são definidos pelas seguintes relações [Teodosiu e Genevois 88]:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{x}_0; \quad d\mathbf{x} = \mathbf{F}^{te}d\check{\mathbf{x}}; \quad d\mathbf{x}_0 = \mathbf{F}_0^e d\check{\mathbf{x}}_0; \quad d\check{\mathbf{x}} = \mathbf{F}^p d\check{\mathbf{x}}_0. \quad (4.13)$$

Com base nestas transformações é ainda possível relacionar os vectores $d\mathbf{x}_0$ e $d\mathbf{x}$ do seguinte modo:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}^{te}\mathbf{F}^p(\mathbf{F}_0^e)^{-1}d\mathbf{x}_0. \quad (4.14)$$

Da expressão (4.14) pode concluir-se que o gradiente de transformação também pode ser decomposto por:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{te}\mathbf{F}^p(\mathbf{F}_0^e)^{-1}. \quad (4.15)$$

Substituindo \mathbf{F} na equação do gradiente de velocidade \mathbf{L} (equação (4.12)), resulta¹:

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}^{te}(\mathbf{F}^{te})^{-1} + \dot{\mathbf{F}}^{te}\mathbf{F}^p(\mathbf{F}^p)^{-1}(\mathbf{F}^{te})^{-1}, \quad (4.16)$$

¹Ver cálculos adicionais no apêndice B.1.

ou ainda

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^{\text{te}} + \mathbf{L}^{\text{p}}, \quad (4.17)$$

em que $\mathbf{L}^{\text{te}} = \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}$ representa a parte termoelástica e $\mathbf{L}^{\text{p}} = \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}$ a parte viscoplástica do tensor gradiente de velocidade \mathbf{L} [Anand *et al.* 85, Teixeira-Dias 99].

A partir da equação da decomposição polar termoelástica e da equação (4.17), obtém-se²:

$$\mathbf{L}^{\text{te}} = \dot{\mathbf{V}}\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{V}\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} \quad (4.18)$$

$$\mathbf{L}^{\text{p}} = \mathbf{V}\mathbf{R}\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} \quad (4.19)$$

Tendo em conta que, para a generalidade dos materiais metálicos, as deformações elásticas envolvem pequenas deformações, mas, possivelmente, grande rotações, o tensor simétrico \mathbf{V} pode ser decomposto em $\mathbf{V} = \mathbf{1} + \boldsymbol{\varepsilon}$, com $|\boldsymbol{\varepsilon}| \ll \mathbf{1}$ e em que $\boldsymbol{\varepsilon}$ designa o tensor das deformações [Teodosiu e Genevois 88]. Após a substituição de \mathbf{V} , e desprezando em \mathbf{L}^{e} os termos de segunda ordem em $|\boldsymbol{\varepsilon}|$ e em \mathbf{L}^{p} os de primeira ordem em $|\boldsymbol{\varepsilon}|$, as relações (4.18) e (4.19) transformam-se em

$$\mathbf{L}^{\text{te}} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{\text{T}}, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{L}^{\text{p}} = \mathbf{R}\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}\mathbf{R}^{\text{T}}, \quad (4.21)$$

onde

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{\text{T}} - \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{\text{T}}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.22)$$

é a derivada temporal objectiva de $\boldsymbol{\varepsilon}$, calculada com a velocidade de rotação associada à rotação elástica \mathbf{R} [Menezes 94].

O gradiente de velocidade \mathbf{L} pode ainda ser decomposto numa parte simétrica \mathbf{D} , a velocidade de deformação, e numa parte anti-simétrica \mathbf{W} , a velocidade de rotação. Isto é,

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}. \quad (4.23)$$

Tendo em conta as relações (4.20) e (4.21) e uma vez decompostos nas suas partes elástica e plástica, os tensores \mathbf{D} e \mathbf{W} tomam a seguinte forma:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{\text{e}} + \mathbf{D}^{\text{p}} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{R} \left[\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1} \right]^{\text{S}} \mathbf{R}^{\text{T}}, \quad (4.24)$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^{\text{e}} + \mathbf{W}^{\text{p}} = \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{\text{T}} + \mathbf{R} \left[\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1} \right]^{\text{A}} \mathbf{R}^{\text{T}}. \quad (4.25)$$

De acordo com as expressões anteriores, em que os superíndices S e A designam a parte simétrica e anti-simétrica, respectivamente, as velocidades de rotação elástica e plástica podem ser definidas pelas expressões seguintes [Sidoroff 82]:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{L}^{\text{S}} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^{\text{T}}) \quad (4.26)$$

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{L}^{\text{A}} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^{\text{T}}). \quad (4.27)$$

O tensor \mathbf{W} representa a velocidade de rotação dos eixos principais da velocidade de deformação espacial \mathbf{D} . Tanto \mathbf{D} como \mathbf{W} são velocidades instantâneas e, como tal, não têm influência no historial de deformação [Gullerud *et al.* 02].

²Ver cálculos adicionais no apêndice B.2.

O termo $\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T$ é designado por velocidade ou taxa de rotação do corpo rígido, isto é,

$$\boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T. \quad (4.28)$$

A velocidade de rotação \mathbf{W} e a velocidade de rotação do corpo rígido $\boldsymbol{\Omega}$ são idênticas quando os eixos principais de \mathbf{D} coincidem com os eixos principais do tensor de deformação linear \mathbf{V} . Esta condição é unicamente satisfeita em extensão simples ou rotação pura.

Como se demonstrará posteriormente, torna-se também conveniente escrever a equação (4.24) na seguinte forma:

$$\mathbf{D} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{D}^P, \quad (4.29)$$

em que

$$\mathbf{D}^P = \mathbf{R}\hat{\mathbf{D}}^P\mathbf{R}^T, \quad \text{e} \quad \hat{\mathbf{D}}^P = \left[\dot{\mathbf{F}}^P(\mathbf{F}^P)^{-1} \right]^S. \quad (4.30)$$

$\hat{\mathbf{D}}^P$ é o tensor velocidade de deformação plástica não-rodado (irrotacional ou livre de rotações). Este define uma velocidade de deformação material relativamente ao sistema de eixos ortogonais de referência indicado na configuração C_t , representada na figura 4.2.

4.3 Objectividade

O comportamento do material pode ser descrito por uma lei constitutiva que relaciona derivadas de tensão com velocidades de deformação e, eventualmente, variáveis internas. Esta lei é, na maioria das vezes, apresentada numa forma diferencial. No caso particular das leis constitutivas hipoeásticas, considerado neste trabalho, em que a derivada temporal da tensão depende linearmente do tensor velocidade de deformação \mathbf{D} , a derivada temporal do tensor das tensões de Cauchy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ é dada por:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}, \quad (4.31)$$

onde \mathbf{C}^e é o tensor de quarta ordem das constantes elásticas, $\mathbf{C}_{ijkl}^e = \mathbf{C}_{jikl}^e = \mathbf{C}_{ijlk}^e$. Para materiais isotrópicos, \mathbf{C}^e pode ser definido em termos das constantes de Lamé, λ e μ . A lei constitutiva da expressão (4.31) pode ser estendida a problemas elastoplásticos pela decomposição do tensor velocidade de deformação \mathbf{D} nas suas partes elástica e plástica (ver capítulo 5).

Embora seja frequente recorrer-se à equação (4.31), esta é válida unicamente em pequenas deformações. A derivada temporal do tensor das tensões de Cauchy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ não pode ser utilizada para representar variações de tensão num problema de grandes deformações uma vez que não é um tensor objectivo [Rodríguez-Ferran e Huerta 96].

O princípio da objectividade ou da indiferença material é satisfeito se as equações constitutivas apresentarem grandezas objectivas, ou seja, se todas as grandezas das equações constitutivas puderem ser transformadas, tensorialmente e sem perda de informação, sob um movimento de corpo rígido.

Considere-se que o movimento de corpo rígido é representado por um tensor rotação ortogonal $\mathbf{Q}(t)$ e uma translação $\mathbf{G}(t)$. A equação que define, no mesmo instante, uma mudança de referencial espacial ortonormado é dada por

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{G}(t) + \mathbf{Q}(t)\mathbf{x}, \quad (4.32)$$

onde \mathbf{x}^* representa a transformação da grandeza vectorial genérica \mathbf{x} num novo referencial. Considerando que o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ é de segunda ordem objectivo, então pode transformar-se num novo referencial de acordo com

$$\boldsymbol{\sigma}^*(t) = \mathbf{Q}(t)\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}(t)^T. \quad (4.33)$$

Derivando a equação anterior em ordem ao tempo, é possível observar que a derivada material do tensor objectivo, na realidade, não é objectiva, pois não é invariante com uma mudança de referencial:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^* = \dot{\mathbf{Q}}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\dot{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}\dot{\mathbf{Q}}^T \neq \mathbf{Q}\dot{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{Q}^T. \quad (4.34)$$

Este facto, demonstrado pela equação (4.34), invalida o uso de $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ como derivada da tensão na equação constitutiva. Logo, torna-se necessário utilizar uma derivada objectiva do tensor das tensões de Cauchy $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}$.

Embora o tensor \mathbf{W} não seja objectivo, pode demonstrar-se que o tensor velocidade de deformação \mathbf{D} é um tensor objectivo e, como tal, pode ser utilizado para representar as deformações na lei constitutiva [Sidoroff 82, Anand *et al.* 85, Rodríguez-Ferran e Huerta 96, Xiao *et al.* 97]. Logo, a equação constitutiva hipoeástica pode ser reescrita no universo das grandes deformações como

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}. \quad (4.35)$$

4.4 Derivada Objectiva da Tensão

O modo de construir ou escolher uma derivada objectiva do tensor das tensões de Cauchy adequada, de forma a eliminar as rotações parasitas derivando o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ num referencial ligado ao material [Sidoroff 82], tem sido um aspecto importante em hipoeasticidade. Algumas possibilidades, analisadas em Pinsky *et al.* 83 e Xiao *et al.* 98, são:

i) a derivada objectiva de Truesdell:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{Tr}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{L}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{L}^T + \text{tr}(\mathbf{D})\boldsymbol{\sigma}, \quad (4.36)$$

ii) a derivada objectiva de Jaumann:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{J}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}, \quad (4.37)$$

iii) a derivada objectiva de Green-Nadghi:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{GN}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\sigma}, \text{ e} \quad (4.38)$$

iv) a derivada objectiva logarítmica:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{log}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\Omega}^{\text{log}} - \boldsymbol{\Omega}^{\text{log}}\boldsymbol{\sigma}, \quad (4.39)$$

onde $\boldsymbol{\Omega}^{\text{log}}$ é o tensor rotação logarítmico dado por [Xiao *et al.* 97] e

$$\boldsymbol{\Omega}^{\text{log}} = \mathbf{W} + \mathbf{N}^{\text{log}}, \quad (4.40)$$

em que \mathbf{N}^{log} é o tensor de rotação definido no anexo B.3.

A derivada objectiva de Truesdell (equação (4.36)) apresenta o inconveniente de ser determinada no referencial material, portanto não-ortonormado. Consequentemente, a derivada não pode ser considerada como uma derivada num referencial ortonormado (particular) e, por conseguinte, o seu tratamento matemático não pode ser realizado como uma derivada habitual [Sidoroff 82].

Contrariamente à derivada de Truesdell, a derivada objectiva de Jaumann é definida num referencial ortonormado que segue unicamente a rotação do meio contínuo. Todavia, os modelos hipoeelásticos baseados na derivada objectiva de Jaumann, que utilizam o tensor velocidade de rotação \mathbf{W} , prevêm respostas instáveis em corte puro, denominadas por fenómeno oscilatório de corte [Dafalias 83, Dogui e Sidoroff 84, Dashner 86, Dogui 87].

A derivada objectiva de Green-Naghdi (equação (4.38)) oferece uma resposta mais realista do que a derivada de Jaumann no problema de corte puro. Apesar de esta derivada objectiva ser matematicamente correcta, Dashner [Dashner 86] questiona as bases físicas dos seus postulados. Na derivada de Jaumann, \mathbf{W} pode ser calculado com base em tensores já necessários para cálculo de \mathbf{D} , enquanto que para determinar $\mathbf{\Omega}$ é necessária a decomposição polar de \mathbf{F} , computacionalmente mais cara.

A derivada objectiva logarítmica é a forma objectiva da tensão apresentada mais recentemente. Os autores, Xiao, Bruhns e Meyers [Xiao *et al.* 97, Xiao *et al.* 98], provaram que um tensor rotacional suave (infinitamente diferenciável), $\mathbf{\Omega}^{\log}$, pode ser encontrado de forma a que o tensor de deformação linear \mathbf{V} seja escrito (de forma não-aproximada) como a derivada objectiva corrotacional da medida da deformação logarítmica euleriana $\ln(\mathbf{V})$. O tensor de rotação logarítmica $\mathbf{\Omega}^{\log}$ é definido pela equação (4.40). Apesar da derivada objectiva logarítmica se mostrar como a derivada corrotacional objectiva mais exacta, o seu tensor rotacional associado, $\mathbf{\Omega}^{\log}$, é de custo computacional elevado.

Em 1980, Hughes e Winget [Hughes e Winget 80] mostraram que uma velocidade de rotação constante, \mathbf{W} ou $\mathbf{\Omega}$, limita os tamanhos de incremento para os códigos implícitos pelo método dos elementos finitos. Para ultrapassar esta limitação, aqueles autores desenvolveram um esquema de integração a partir da derivada de Jaumann que preserva a objectividade para incrementos com rotações que excedem os 30° (a partir do qual surgia o fenómeno oscilatório de corte). Contudo, estes aperfeiçoamentos não removeram a causa fundamental das respostas oscilatórias em corte puro provocadas pelo uso de \mathbf{W} [Gullerud *et al.* 02]. Posteriormente, foi utilizado o procedimento de Hughes-Winget para integrar a derivada objectiva de Green-Naghdi, $\overset{\nabla}{\sigma}^{\text{GN}}$, com sucesso [Roy *et al.* 92]. Este procedimento utiliza o tensor $\mathbf{\Omega}$ calculado pela decomposição polar de \mathbf{F} no início e no fim de cada incremento. Outra hipótese que permite estender a relação (4.31) a grandes deformações e rotações, respeitando o princípio de objectividade, é escrever a lei constitutiva relativamente a um eixo de referência cuja velocidade de rotação é $\mathbf{\Omega}$. Esta solução apresenta como vantagem conduzir a uma manipulação mais simples de leis constitutivas anisotrópicas e separar a formulação das grandes rotações da formulação das relações constitutivas [Desbordes *et al.* 86].

4.5 Referencial da Lei Constitutiva

A lei de comportamento deve relacionar as tensões com as deformações. Em grandes deformações, o tensor gradiente \mathbf{F} descreve não só a deformação local do meio contínuo

mas também a sua rotação. Assim, de forma a que a lei constitutiva seja bem formulada, torna-se necessário eliminar essa rotação [Sidoroff 82].

Os procedimentos de discretização temporal padrões, quando aplicados a equações constitutivas de derivadas objectivas, só alcançam objectividade quando o tamanho do incremento de tempo tende para zero. De forma a obter objectividade noutras situações além da discretização em incrementos de tempo muito pequenos, as equações constitutivas são reescritas num referencial corrotacional.

Com as rotações definidas na relação (4.28), em que $\mathbf{R}(t_0) = \mathbb{1}$, torna-se possível proceder a uma mudança dos eixos cartesianos fixos para os eixos referenciais rotativos (corrotacionais). Deste modo, o tensor das tensões de Cauchy resulta

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{R}^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{R}. \quad (4.41)$$

Diferenciando a expressão anterior em ordem ao tempo obtém-se

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbf{R}^T (\dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\Omega}) \mathbf{R} = \mathbf{R}^T \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{R}. \quad (4.42)$$

A expressão anterior indica que, com uma mudança de eixos apropriada, a derivada objectiva transforma-se na derivada temporal do tensor das tensões. Este facto sugere que todo o procedimento numérico resulta simplificado quando transformado no sistema rodado por $\boldsymbol{\Omega}$ [Ponthot 02]. Adicionalmente, os requerimentos de objectividade são automaticamente verificados.

Contrariamente às quantidades escalares, que permanecem inalteráveis com o referencial, os tensores de deformação \mathbf{D} e das constantes elásticas \mathbf{C}^e devem ser transformados para o referencial corrotacional:

$$\hat{\mathbf{D}} = \mathbf{R}^T \mathbf{D} \mathbf{R}, \quad (4.43)$$

$$\hat{\mathbf{C}}^e = \mathbf{R}^T (\mathbf{R}^T \mathbf{C}^e \mathbf{R}) \mathbf{R} = \mathbf{C}^e. \quad (4.44)$$

Consequentemente, a lei constitutiva pode ser reescrita na expressão seguinte:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbf{C}^e : \hat{\mathbf{D}}. \quad (4.45)$$

Após as transformações cinemáticas terem eliminado os efeitos de rotação nas grandezas tensoriais, os procedimentos são semelhantes aos das formulações de pequenas deformações.

A desvantagem deste referencial constitutivo é a necessidade do esforço numérico para calcular \mathbf{R} a partir da decomposição polar $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ nos pontos de integração para cada incremento temporal. Outro método, a partir da actualização incremental de \mathbf{R} e sem a necessidade da decomposição polar, também pode ser utilizado para cálculo do tensor de rotação \mathbf{R} .

Capítulo 5

Modelação Constitutiva

Apresenta-se o modelo constitutivo adoptado na descrição do comportamento mecânico das ligas de alumínio. Enquadra-se o modelo de comportamento na classe dos modelos que utilizam variáveis internas para descrever o estado do material. Justifica-se a sua escolha. Apresentam-se modelos constitutivos de variável interna alternativos dependentes da velocidade de deformação quer isotérmicos quer dependentes da temperatura.

5.1 Introdução

O modelo de comportamento toma uma posição essencial em qualquer programa de simulação. É este modelo que relaciona todas as propriedades e variáveis internas e/ou externas do problema. Estas equações devem ser encaradas como uma representação matemática aproximada do comportamento real do material [Cailletaud e Pilvin 94].

Os modelos de comportamento viscoplásticos, usualmente utilizados em programas de elementos finitos, são, por vezes, generalizações tridimensionais de relações tensão uniaxial-velocidade de deformação. As tensões e as velocidades de deformação são obtidas dos respectivos valores no estado estacionário, após o desaparecimento de fenómenos transientes [Brown *et al.* 89]. Porém, se o modelo de comportamento tem como objectivo representar a resposta do material a temperaturas elevadas, então este não pode considerar unicamente o comportamento em estado estacionário. As condições de comportamento a alta temperatura são inerentemente não-estacionárias. O estado final de um componente mecânico submetido a trabalho a quente é afectado pela sua história de deformação. Assim, torna-se importante recorrer a modelos de comportamento que consigam caracterizar e reproduzir toda a história de deformação.

Os modelos de comportamento que, de forma mais simples, conseguem caracterizar a história de deformação são os de variáveis internas. Nestes modelos, o estado corrente (ou condição microestrutural) é representado por um conjunto de variáveis que evoluem

com a história de deformação e temperatura. As variáveis externas, como a velocidade de deformação, a tensão e a temperatura, e as variáveis internas, são suficientes para representar a resposta mecânica do material. Estas variáveis, tanto internas como externas, também são suficientes para definir a sua evolução. Geralmente, as expressões matemáticas que caracterizam a evolução das variáveis externas, genericamente representadas por e_i , e das variáveis internas, genericamente representadas por s_i , são definidas da seguinte forma diferencial:

$$\frac{de_i}{dt} = \ddot{e}_i(e_i, s_i), \quad (5.1)$$

$$\frac{ds_i}{dt} = \ddot{s}_i(e_i, s_i). \quad (5.2)$$

em que \ddot{e} e \ddot{s} são as funções da evolução das variáveis externas e internas, respectivamente.

5.1.1 Modelos constitutivos de variáveis internas

Nas últimas décadas têm sido propostos vários modelos constitutivos baseados em variáveis internas. Estes modelos constitutivos podem ser classificados em três categorias: (i) os modelos empíricos; (ii) os modelos de inspiração mecânica e (iii) os modelos analíticos alternativos.

No grupo de modelos empíricos incluem-se todos os modelos que representam o comportamento real do material através de relações empíricas, não necessariamente associadas de forma directa a processos físicos de deformação. A grande maioria dos modelos de variáveis internas pertence a esta categoria. Destes modelos destacam-se aqui os modelos propostos por Chaboche, Hart e Miller [Miller e Sherby 78]. Estes apresentam uma relação de proporcionalidade entre a velocidade de deformação plástica \mathbf{D}^P e o tensor desviador das tensões $\boldsymbol{\sigma}'$, isto é,

$$\mathbf{D}^P = f\left(\frac{\bar{\sigma}}{s}, T\right) \frac{\boldsymbol{\sigma}'}{\bar{\sigma}}. \quad (5.3)$$

s representa uma variável interna, $\bar{\sigma}$ é a tensão equivalente e T a temperatura. A função f contém a dependência térmica e estrutural do material. Na generalidade destes modelos, a variável interna s é considerada unicamente como uma fracção da tensão equivalente. A equação da evolução da variável escalar interna pode assumir uma das seguintes formas: (i) a variação da variável interna é função da diferença entre o seu valor actual e um valor de saturação, s_{sat} , de tal forma que

$$\frac{ds}{dt} = \ddot{s}(s_{\text{sat}} - s); \quad (5.4)$$

ou (ii) a variação da variável interna é proporcional à diferença entre a velocidade de deformação plástica equivalente, $\dot{\epsilon}^P$, e uma função dependente das variáveis internas e externas, isto é,

$$\frac{ds}{dt} = H_0 \dot{\epsilon}^P - \ddot{s}(\bar{\sigma}, T, s). \quad (5.5)$$

Na expressão anterior, H_0 é uma constante de proporcionalidade.

A categoria dos modelos constitutivos de inspiração mecânica contém os modelos baseados em observações mecânicas que, com um só conjunto de equações, acumulam modelos para os diferentes mecanismos físicos. Como exemplo, Prinz e Argon [Prinz e Argon 84],

e Balasubramanian e Anand [Balasubramanian e Anand 02] desenvolveram modelos de múltiplas variáveis internas, considerando a evolução da estrutura de deslocações para materiais monocristalinos e considerando a homogeneidade do gradiente de deformação de cada grão para materiais policristalinos.

A escolha, o número e a interpretação das variáveis internas não é evidente. Tal se deve ao facto de que as suposições acerca dos processos físicos de deformação podem sugerir um grande número de variáveis internas [Brown *et al.* 89]. Consequentemente, estes modelos tornam-se demasiadamente complexos e de difícil implementação. Esta complexidade aumenta ainda a dificuldade da identificação dos parâmetros materiais.

Por último, nos modelos analíticos alternativos, incluem-se os modelos motivados por conveniência analítica, sem intenção de representar qualquer mecanismo físico. Em 1971, Valanis [Valanis 71] propôs um modelo constitutivo que pode ser incluído nesta categoria. Este assume uma escala de tempo baseado numa medida da deformação plástica acumulada, $d\xi$, que é combinada com o tempo para formar uma medida de tempo intrínseca, $d\zeta$, dado por

$$d\zeta^2 = \alpha^2 d\xi^2 + \beta^2 dt^2 \quad (5.6)$$

onde α e β são parâmetros escalares do material. Note-se que esta escala de tempo não está associada a nenhum mecanismo de deformação.

Das categorias apresentadas e dos modelos referidos, os mais indicados são os modelos baseados em observações micromecânicas. Mas estes, de forma a serem exaustivos, tornam-se de difícil implementação. Assim, o modelo ideal deve ser um equilíbrio entre as duas primeiras categorias.

5.2 Modelo de Comportamento Mecânico

O modelo constitutivo utilizado no presente trabalho, embora colocando-se na categoria dos modelos empíricos, representa um bom compromisso entre a fenomenologia micromecânica e a complexidade em si inerente.

O modelo de comportamento baseia-se, fundamentalmente, nos modelos propostos por Brown e Anand [Brown 87, Anand *et al.* 85] e por Miller e Sherby [Miller e Sherby 78]. Ambos os modelos recorrem à utilização de uma única variável interna de estado. Com esta variável torna-se possível descrever os fenómenos de restauração estática e dinâmica existentes em processos a temperaturas médias e elevadas.

O modelo de Brown e Anand foi desenvolvido para descrever a deformação de metais a temperaturas elevadas e velocidades de deformação moderadas. Este modelo representa os aspectos mais significativos do estado microestrutural dos metais e sua evolução durante a deformação. Embora apresente excelentes resultados em deformação a quente, o modelo de Brown e Anand não caracteriza satisfatoriamente o comportamento de metais como, por exemplo, as ligas de alumínio, a temperaturas próximas da temperatura ambiente.

Por outro lado, o modelo de Miller e Sherby, que considera a dependência da energia de activação relativamente à temperatura, consegue descrever o comportamento dos metais numa gama de temperatura mais ampla que o modelo de Brown e Anand. Porém, a lei de evolução da variável interna é bastante menos eficiente [Teixeira-Dias 99].

O modelo de comportamento que se apresenta neste trabalho pretende agregar as vantagens de cada um dos modelos referidos, utilizando uma formulação matemática baseada,

sempre que possível, em aspectos fenomenológicos. Pretende também ser um equilíbrio entre a complexidade e o número de mecanismos físicos abrangidos. O modelo implementado baseia-se nas seguintes ideias e aspectos físicos [Brown *et al.* 89]:

1. A deformação plástica é inerentemente dependente da velocidade. Este fenómeno deve-se à dependência térmica dos vários fenómenos de escoamento. Consequentemente, o escoamento plástico é, também, intrinsecamente sensível à temperatura [Knocks 75].
2. A resposta instantânea de um material é determinada pelo seu estado actual. O estado actual, que se deve a todo um passado de deformações sofrido pelo material, pode ser representado por um número reduzido de variáveis internas macroscópicas, sendo a respectiva evolução determinada por um conjunto de equações diferenciais.

Os mecanismos físicos modelados incluem:

- i) a sensibilidade à velocidade de deformação e à temperatura;
- ii) os efeitos da história da velocidade de deformação e da temperatura;
- iii) o encruamento e os processos de restauração estáticos e dinâmicos;
- iv) o dano interno e a sua evolução;
- v) a evolução da textura cristalina.

O modelo constitutivo utiliza uma única variável de estado interna — a variável escalar s . Esta variável representa a resistência média isotrópica do material ao escoamento plástico. A utilização de uma única variável de estado prende-se com o facto de ser suficiente para definir a correlação entre a densidade de deslocações e a tensão limite de elasticidade.

O modelo constitutivo adoptado recorre a três variáveis de estado: o tensor das tensões de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, a temperatura absoluta T e o parâmetro escalar interno s . A variável s tem dimensões de tensão e considera a contribuição da estrutura das deslocações, do subgrão e dos efeitos de tamanho de grão, endurecimento de solução sólida, etc. Para materiais puros de fase única, o parâmetro s pode ser directamente correlacionado com a densidade das deslocações que é a contribuição primária para a resistência à deformação a temperaturas elevadas.

O modelo constitutivo baseia-se na decomposição aditiva do tensor velocidade de deformação, \mathbf{D} , nas suas partes elástica, \mathbf{D}^e , térmica, \mathbf{D}^t e viscoplástica, \mathbf{D}^{vp} . Isto é:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^t + \mathbf{D}^{vp} \quad (5.7)$$

em que,

$$\mathbf{D}^t = \alpha^* \dot{T} \mathbf{1}, \quad (5.8)$$

com

$$\alpha^* = \alpha + \frac{d\alpha}{dT} (T - T_0). \quad (5.9)$$

$\alpha = \alpha(T)$ é o coeficiente de expansão térmica do material (CET) e T_0 é uma temperatura de referência. $\mathbf{1}$ representa o tensor identidade de segunda ordem. O tensor velocidade de deformação viscoplástica é considerado isocórico, ou seja, $\text{tr}(\mathbf{D}^{vp}) = 0$.

Assumindo que

i) as deformações são pequenas relativamente à unidade e
 ii) a influência da deformação plástica sobre as constantes elásticas pode ser desprezada,
 é possível descrever o comportamento do material recorrendo a uma lei de comportamento hipoeelástica (ver anexo B.4). Assim, a derivada objectiva de Green-Naghdi do tensor das tensões de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, toma a seguinte forma:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e. \quad (5.10)$$

Alternativamente, esta derivada pode ser descrita como a derivada temporal do tensor das tensões de Cauchy no referencial corrotacional ou não-rodado, $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{R} \dot{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{R}^T, \quad (5.11)$$

onde \mathbf{R} representa o tensor de rotação. Considerando o comportamento isotrópico, o tensor das constantes elásticas, \mathbf{C}^e , é dado por:

$$\mathbf{C}^e = 2\mu \mathfrak{S} + \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad (5.12)$$

em que \mathfrak{S} é o tensor identidade de quarta ordem. Os coeficientes de Lamé μ e λ são funções da temperatura e definem-se do seguinte modo:

$$\mu(T) = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad \text{e} \quad \lambda(T) = \frac{2\mu\nu}{(1-2\nu)}, \quad (5.13)$$

em que $E = E(T)$ e $\nu = \nu(T)$ são o módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson, respectivamente. Introduzindo a equação (5.12) e substituindo \mathbf{D}^e , de acordo com a expressão (5.7), na relação constitutiva (5.10), obtém-se

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu (\mathbf{D} - \mathbf{D}^t - \mathbf{D}^{vp}) + \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr} (\mathbf{D} - \mathbf{D}^t - \mathbf{D}^{vp}) \mathbf{1} \quad (5.14)$$

em que o módulo de compressibilidade ou volumétrico, κ , é dado por

$$\kappa = \lambda + \frac{2}{3}\mu. \quad (5.15)$$

Após alguma manipulação algébrica e substituindo o tensor \mathbf{D}^t , definido pela expressão (5.8), chega-se a

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{vp}) + \left[\left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr} (\mathbf{D}) - 3\kappa \alpha^* \dot{T} \right] \mathbf{1}. \quad (5.16)$$

A equação constitutiva para o tensor da velocidade de deformação plástica, \mathbf{D}^{vp} , é dada por (ver anexo B.5)

$$\mathbf{D}^{vp} = \dot{\varepsilon}^p \left(\frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}'}{\bar{\sigma}} \right). \quad (5.17)$$

Na lei de escoamento (5.17), $\dot{\varepsilon}^p$ representa a velocidade de deformação plástica equivalente, $\boldsymbol{\sigma}'$, dado por

$$\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr} (\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1}, \quad (5.18)$$

é o tensor desviador das tensões de Cauchy e $\bar{\sigma}$,

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}'}, \quad (5.19)$$

é a tensão equivalente de von Mises. A velocidade de deformação plástica equivalente, $\dot{\epsilon}^p$, é função da tensão equivalente $\bar{\sigma}$, da temperatura T e da variável escalar interna s . Esta dependência pode ser matematicamente representada pela função f , isto é,

$$\dot{\epsilon}^p = f(\bar{\sigma}, s, T) > 0 \quad \text{com} \quad \bar{\sigma} < s. \quad (5.20)$$

Os autores Knocks, Argon e Ashby [Knocks 75] sugerem que, na função f , a variável interna s seja relacionada directamente com a tensão equivalente na seguinte forma:

$$\dot{\epsilon}^p = f\left(\frac{\bar{\sigma}}{s}, T\right). \quad (5.21)$$

Esta estrutura também foi sugerida por Rice [Rice 70], apesar de não existir nenhuma exigência fundamental para que uma variável escalar interna seja incorporada neste modo [Brown 87]. A forma da relação (5.21) deve apresentar a vantagem de poder ser invertida de tal maneira que possa ser escrita como $\bar{\sigma} = cs$, onde c é uma função da velocidade de deformação e da temperatura.

A função da velocidade de deformação plástica equivalente adoptada deve englobar tanto a lei da potência como a dependência exponencial entre a velocidade de deformação e a tensão. Através de ensaios de sensibilidade à velocidade de deformação, Brown [Brown 87] e Mitra e McLean [Mitra e McLean 67] mostraram que a função de potência é a mais indicada para descrever o comportamento das ligas de alumínio. Por outro lado, para uma liga Fe2%Si, a função exponencial caracteriza melhor a dependência entre a velocidade de deformação e a tensão. É também importante que a velocidade de deformação plástica equivalente acomode, de forma suave, a passagem da função exponencial para a lei da potência. De acordo com estas observações, a função f toma a seguinte forma, adoptada por Brown [Brown 87]:

$$\dot{\epsilon}^p = A \exp\left(-\frac{Q}{R_g T}\right) \left[\sinh\left(\xi \frac{\bar{\sigma}}{s}\right)\right]^{\frac{1}{m}}. \quad (5.22)$$

No modelo de comportamento proposto, os parâmetros característicos do material são A , Q , m e ξ . O parâmetro A é designado por factor pré-exponencial, Q é a energia de activação e o expoente m denomina-se sensibilidade à velocidade de deformação. R_g é a constante dos gases perfeitos.

Contrariamente ao modelo proposto por Brown [Brown 87], o valor da energia de activação Q é função da temperatura. Por uma questão de simplicidade, assume-se que, para deformações não-elásticas, a energia de activação é unicamente função da temperatura. Desta forma, desprezam-se os efeitos da velocidade de deformação na energia de activação. Deste modo, a energia de activação é definida por [Miller e Sherby 78]:

$$Q = \begin{cases} Q_0 [1 + \log(\frac{T_t}{T})] & \text{se } T \leq T_t \\ Q_0 & \text{se } T > T_t \end{cases}. \quad (5.23)$$

Q_0 é o valor da energia de activação do material em condições estacionárias e T_t é a temperatura de transição de comportamento do material. Geralmente, $T_t \approx 0.6T_f$, sendo T_f a temperatura de fusão do material.

A relação (5.22) apresenta uma vantagem que advém da sua simplicidade e que, de algum modo, também justifica a relação (5.21). O facto de, na relação (5.22), a razão entre a tensão equivalente e a variável interna s aparecer uma única vez oferece a vantagem da proporcionalidade directa entre a variável interna s e a tensão equivalente $\bar{\sigma}$. Deste modo, é possível determinar indirectamente a variável s . Logo,

$$\bar{\sigma} = cs, \quad (5.24)$$

em que

$$c = \frac{1}{\xi} \sinh^{-1} \left[\left\{ \frac{\dot{\varepsilon}^p}{A} \exp \left(\frac{Q}{R_g T} \right) \right\}^m \right]. \quad (5.25)$$

Importa agora definir a evolução da variável interna s . A função que governa a evolução da variável escalar s é dependente de $\bar{\sigma}$, T e da própria variável s , isto é,

$$\dot{s} = g(\bar{\sigma}, s, T). \quad (5.26)$$

A equação da evolução da variável interna s adoptada neste trabalho é proposta por Anand [Anand *et al.* 85]. Esta é definida pela seguinte expressão:

$$\dot{s} = h(\bar{\sigma}, s, T) \dot{\varepsilon}^p - \dot{r}(s, T). \quad (5.27)$$

A função $h(\bar{\sigma}, s, T)$ é associado a processos dinâmicos como, por exemplo, o encruamento e a restauração dinâmica. A restauração estática é representada pela função $\dot{r}(s, T)$.

A função $h(\bar{\sigma}, s, T)$ pode ser determinada realizando ensaios uniaxiais à temperatura e velocidade de deformação constantes. Neste caso, e após o limite de elasticidade, consegue tirar-se partido da expressão (5.24) tomando $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^p$ e $s \simeq h(\bar{\sigma}, s, T)$. A forma adoptada para a função de encruamento e restauração dinâmica $h(\bar{\sigma}, s, T)$ foi a encontrada por Brown [Brown 87] após realização dos ensaios referidos. Esta toma a seguinte forma:

$$h(\bar{\sigma}, s, T) = h_0 \left| \left(1 - \frac{s}{s^*} \right) \right|^a \operatorname{sgn} \left(1 - \frac{s}{s^*} \right). \quad (5.28)$$

Na expressão anterior, h_0 representa a velocidade de encruamento atérmico e s^* o valor de saturação de s , associado ao par temperatura-velocidade de deformação plástica. Quer h_0 quer $a > 0$ são parâmetros característicos do material. $|x|$ representa o valor absoluto de x e $\operatorname{sgn}(x)$ a função sinal. A utilização do módulo e da função $\operatorname{sgn}(x)$ é atribuída à necessidade de acomodar situações em que o valor corrente da variável de estado interna s é superior ao respectivo valor de saturação [Brown *et al.* 89]. Tal permite modelar efeitos de amaciamento, passíveis de ocorrerem sempre que haja diminuição da velocidade de deformação ou aumento localizado de temperatura [Teixeira-Dias 99]. Esta alteração poderia fazer com que o valor de s fosse superior ao valor assintótico, representado por s^* , calculado sob as novas condições.

O valor de saturação da variável interna s é dado por

$$s^* = \bar{s} \left[\frac{\dot{\varepsilon}^p}{A} \exp \left(\frac{Q_{ds}}{R_g T} \right) \right]^n, \quad (5.29)$$

onde \bar{s} e n são parâmetros do material. O valor de saturação s^* aumenta com a velocidade de deformação plástica e é influenciado por processos termicamente activados. Q_{ds} é a energia de activação associada aos processos de amaciamento dinâmico.

A definição apresentada para o valor de saturação da variável interna s , equação (5.29), é uma extensão à definição apresentada por Brown *et al.* [Brown *et al.* 89]. Este autor considera o mesmo valor da energia de activação tanto na equação da velocidade de deformação plástica equivalente, equação (5.22), como na equação da evolução da variável interna. Na realidade, espera-se que diferentes processos termicamente activados influenciem a velocidade de deformação e a evolução microestrutural. Deste modo, $Q \neq Q_{ds}$.

A função da restauração estática, \dot{r} , é uma forma generalizada da função proposta por Nix e Gibeling em 1985 [Nix *et al.* 85] e por Prinz e Argon em 1984 [Prinz e Argon 84]. Esta função é baseada nos modelos da reorganização de deslocações e é dada por

$$\dot{r} = -\mu B \exp\left(\frac{Q_r}{R_g T}\right) \left(\frac{s}{\mu}\right)^p, \quad (5.30)$$

onde μ é o módulo de corte e B e p são parâmetros característicos do material. O parâmetro Q_r é a energia de activação de auto-difusão do material e é diferente de Q . Para identificar os parâmetros B , p e Q_r é necessário realizar de ensaios de carga-descarga com diferentes intervalos de tempo em descarga. Desta forma, é possível medir o fenómeno de restauração estática do material a diferentes níveis de temperatura. O termo da equação da evolução da variável escalar interna s , caracterizado pela equação (5.30), só tem expressão quando o termo $h(\bar{\sigma}, s, T)$ ou $\dot{\epsilon}^p$ forem nulos.

O valor inicial da variável interna de estado s , s_0 , pode ser dado por uma função linear da temperatura, da seguinte forma:

$$s_0 = s_{0,1} + s_{0,2}T. \quad (5.31)$$

A equação anterior caracteriza o estado inicial da resistência à deformação do material consoante a temperatura inicial do processo. O valor de s_0 pode ser determinado com o auxílio da expressão (5.24), substituindo $\bar{\sigma}$ pela tensão limite de elasticidade do material.

5.3 Outros Modelos de Comportamento de Variável Interna

Nesta secção apresenta-se um conjunto de modelos de comportamento do tipo de variável interna quer empíricos quer de base fenomenológica. Seria impossível mencionar todos os modelos de variável interna existentes, até porque estes parecem aumentar constantemente. Porém, uma lista exaustiva incluiria certamente os modelos aqui apresentados. Estes são aqueles que se considerou constituírem um marco no avanço na investigação de leis constitutivas de variável interna, e podem apresentar-se como alternativa ao modelo utilizado neste trabalho.

5.3.1 Modelo de Nix e Gibeling

O modelo de Nix e Gibeling, sugerido para alumínio puro, é apresentado no presente trabalho por caracterizar a dependência entre a tensão e a velocidade de deformação por uma relação matemática exponencial. A forma matemática que caracteriza os fenómenos

de restauração estática do modelo adoptado goza da mesma estrutura que a do modelo de Nix e Gibeling.

Contrariamente ao modelo adoptado neste trabalho, o modelo constitutivo de base mecânico-fenomenológica apresentado por Nix e Gibeling em 1985 [Nix *et al.* 85] utiliza duas variáveis internas, $\hat{\tau}_c$ e $\hat{\tau}_w$. Estas pretendem caracterizar a estrutura celular cristalina de deslocações de um material monocristalino. A primeira variável interna escalar, $\hat{\tau}_c$, define o estado estrutural no interior das células cristalográficas, enquanto que a segunda, $\hat{\tau}_w$, define a estrutura das paredes do arranjo celular. A lei do escoamento, definida pela velocidade de deformação plástica de corte $\dot{\gamma}_{c,w}$, é dada pela seguinte equação:

$$\dot{\gamma}_{c,w} = \dot{\gamma}_0 \left\{ \exp \left(-\frac{\Delta F}{kT} \right) \right\} \left\{ \exp \left(\frac{\Delta F}{kT} \frac{\tau_{c,w}}{\hat{\tau}_{c,w}} \right) - 1 \right\}. \quad (5.32)$$

Na expressão anterior ΔF representa a energia de activação, $k = R_g$ é a constante dos gases perfeitos e T define o valor da temperatura. $\dot{\gamma}_0$ é um parâmetro constitutivo do material denominado por factor pré-multiplicador. As equações da evolução das variáveis internas $\hat{\tau}_c$ e $\hat{\tau}_w$ são definidas, respectivamente, por

$$\frac{d\hat{\tau}_c}{d\gamma_c} = \frac{\mu}{200} - 10 \frac{b}{w} \nu_0 \frac{\mu}{\dot{\gamma}_c} \left[\exp \left(-\frac{W_{cs}}{kT} \right) \right] \left[\exp \left(\frac{\tau_c b \alpha W_{cs}}{\mu k T} \right) - 1 \right] \quad (5.33)$$

e

$$\frac{d\hat{\tau}_w}{d\gamma_c} = \frac{b\mu^2}{L_w \hat{\tau}_w} - \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\hat{\tau}_w}{\mu} \right)^3 \frac{\mu b}{kT} D_1 \frac{1}{\dot{\gamma}_c}. \quad (5.34)$$

Os parâmetros utilizados nas equações da evolução das variáveis internas, equações (5.33) e (5.34), gozam de significado fenomenológico e, como tal, podem ser encontrados experimentalmente. Os parâmetros constitutivos do modelo tomam a seguinte definição, atribuída por Nix e Gibeling, baseado na deformação plástica de uma estrutura celular cristalográfica:

- μ – módulo de rigidez característico do material;
- w – espaçamento entre deslocações;
- ν_0 – frequência de tentativa de escorregamento¹;
- W_{cs} – entalpia de activação de escorregamento;
- α – parâmetro de ajuste de escorregamento;
- L_w – largura das paredes da célula cristalográfica;
- D_1 – constante de difusividade intersticial ou coeficiente de difusão.

Este modelo de comportamento termoviscoplastico, embora tenha em conta os fenómenos de restauração estática e dinâmica e inclua fenómenos de escorregamento activados termicamente, tem a desvantagem de permitir continuamente o encruamento sem se atingir saturação. Esta situação de saturação ocorre a temperaturas elevadas. O conjunto de

¹Do Inglês *cross-slip attempt frequency*.

equações (5.32) a (5.34) ainda tem de obedecer às equações de compatibilidade e equilíbrio entre o interior e as paredes da estrutura celular cristalográfica, dadas pelas equações

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_c + \frac{\dot{\tau}_c}{\mu} = \dot{\gamma}_w + \frac{\dot{\tau}_w}{\mu}, \quad (5.35)$$

$$\tau = \frac{L_c}{L_c + L_w} \tau_c + \frac{L_w}{L_c + L_w} \tau_w, \quad (5.36)$$

respectivamente. Este modelo de comportamento proposto por Nix e Gibeling consegue prever os seguintes fenómenos e comportamentos: (i) encruamento atérmico; (ii) restauração estática através de fenómenos de difusão; (iii) restauração dinâmica e (iv) movimento das deslocações activado mecanicamente. O presente modelo foi determinado e validado, pelos seus autores, com ensaios de torção a baixas velocidades de deformação às temperaturas de 295 K e 573 K. Nesses ensaios também foi utilizada uma liga Ni-Co.

5.3.2 Modelo de Prinz e Argon

O modelo constitutivo proposto por Prinz e Argon em 1984 [Prinz e Argon 84], inspirado em observações mecânicas, é semelhante ao modelo de Nix e Gibeling e aplica-se a materiais de fase única. Este também apresenta duas variáveis internas que representam densidades de deslocações da estrutura celular cristalográfica e um conjunto de onze parâmetros de significado físico bem definido. Dos mecanismos mencionados no modelo constitutivo encontram-se os mecanismos de (i) encruamento atérmico; (ii) restauração estática e dinâmica através dos mecanismos de difusão e de escorregamento, respectivamente; (iii) estrutura celular cristalográfica composta pelo interior e pelas paredes permitindo o cálculo de tensões internas à célula; (v) movimento das deslocações activado mecanicamente. Embora os fenómenos de restauração estática e dinâmica sejam modelados, a restauração dinâmica activada por processos térmicos não é tida em conta neste modelo. A forma matemática encontrada por Prinz e Argon para a velocidade de deformação plástica de corte, $\dot{\gamma}$, é dada por

$$\dot{\gamma} = b\rho_1\nu_0 \exp\left(-\frac{F_j}{kT}\right) x \exp\left[\frac{2\varepsilon\delta}{kT} \left(s - \frac{\sqrt{3/2}}{2\pi} x^{1/2}\right)^{2/3}\right], \quad (5.37)$$

com

$$s = (\sigma/\tau_{01}) - 0.85\mu b\rho^{1/2} \quad (5.38)$$

e

$$x = \left[\frac{24\pi^2}{(2\varepsilon\delta/kT)^2}\right] s^{2/3}. \quad (5.39)$$

Os autores definem os parâmetros ν_0 e F_j como a frequência de escorregamento e a energia de activação, respectivamente. μ é o módulo de rigidez ou de corte, T a temperatura e k tem o valor da constante dos gases perfeitos. ε define a tensão nas linhas de deslocações e δ a largura dos planos de escorregamento. A tensão de Orowan [Prinz e Argon 84] é dada por τ_{01} . As equações matemáticas da evolução das variáveis internas escalares ρ_1 e ρ_2 , que

definem a densidade de deslocações no interior da célula e a densidade de deslocações nas paredes da estrutura celular, respectivamente, são dadas por

$$\frac{d\rho_1}{d\gamma} = \left(\frac{2\pi\alpha}{bK^2} \right) \rho_1^{1/2} - \frac{L_a}{K^2 b} \rho_1 \quad (5.40)$$

e

$$\frac{d\rho_2}{d\gamma} = \sqrt{2/3} \left(\frac{a}{h} \frac{1}{b} \right) x^{1/2} \rho_1^{1/2} - \frac{2}{\dot{\gamma}} K \rho_2, \quad (5.41)$$

onde $\alpha = 0.5$. K denomina-se como factor de espaçamento para regiões impenetráveis e L_a é o comprimento de deslocação eliminada por acontecimento de restauração dinâmica. h é a espessura das paredes da célula cristalográfica e a define o espaçamento médio entre as paredes da célula. A equação da evolução das deslocações nas paredes da célula deriva da análise de populações de deslocações móveis. Este modelo, validado pelos autores utilizando uma liga de alumínio Al-6%Ni com ensaios uniaxiais à temperatura de 300 K, apresenta-se complexo e de difícil implementação. Os parâmetros característicos, por terem um significado físico bem definido, devem ser encontrados por análises microscópicas, muitas vezes, morosas.

5.3.3 Modelo de Miller e Sherby

A lei empírica proposta por Miller e Sherby [Miller e Sherby 78] constitui uma simplificação à lei anteriormente apresentada por Miller [Miller 76]. No modelo constitutivo mais geral, a velocidade de deformação plástica \mathbf{D}^P , depende, além da tensão equivalente $\bar{\sigma}$ e da temperatura T , de duas variáveis internas, denominadas por \mathbf{R} e F_{def} , que representam o encruamento anisotrópico e isotrópico, respectivamente. No entanto, no modelo simplificado, uma única variável escalar interna, F_{def} , que representa o estado corrente do encruamento, é apresentada. Embora torne o modelo bastante menos complexo e consiga considerar os mais importantes mecanismos de deformação, esta simplificação limita a sua utilização a deformação monótona. Note-se que, sob solicitações cíclicas, este modelo não consegue caracterizar o efeito de Bauschinger.

A forma matemática da velocidade de deformação plástica baseada na função seno hiperbólico foi inicialmente introduzida por Miller. Esta toma a seguinte expressão:

$$\dot{\varepsilon}^P = B\theta' \left\{ \sinh \left[\left(\frac{\bar{\sigma}/E}{\sqrt{F_{\text{def}}}} \right)^2 \right] \right\}^n, \quad (5.42)$$

onde B e n são parâmetros característicos e $E = E(T)$ é o módulo de elasticidade do material. O modelo de Miller e Sherby toma em consideração a dependência da energia de activação relativamente à temperatura. Deste modo, o factor dependente da temperatura, θ' , que, por sua vez, depende da energia de activação, é dado por:

$$\theta' = \begin{cases} \exp\left(-\frac{Q^*}{kT}\right) & \text{para } T > T_t \\ \exp\left\{-\frac{Q^*}{kT_t} + \left[\ln\left(\frac{T_t}{T}\right) + 1\right]\right\} & \text{para } T \leq T_t \end{cases} \quad (5.43)$$

onde Q^* é a energia de activação do material à temperatura de transição T_t e k é a constante dos gases perfeitos. A evolução da variável interna, F_{def} , é dada na sua forma diferencial por

$$\dot{F}_{\text{def}} = H\dot{\varepsilon} - HB\theta' \left[\sinh(A^2 F_{\text{def}}) \right]^n. \quad (5.44)$$

em que B, Q^*, H, n, A, T_t são parâmetros que devem ser determinados para cada material. O termo

$$\dot{\epsilon} = -HB\theta' [\sinh(A^2 F_{\text{def}})]^n \quad (5.45)$$

da equação (5.44) toma em consideração os fenómenos da restauração estática.

O principal objectivo de Miller e Sherby foi a obtenção de um modelo cujos parâmetros do material fossem de determinação simples. Para este modelo, contrariamente a outros modelos apresentados nesta secção, bastam alguns ensaios mecânicos correntes para encontrar os seis parâmetros constitutivos e o valor inicial da variável interna escalar F_{def}^0 . Outra vantagem deste modelo é permitir modelar fenómenos como (i) o efeito da adição de solutos no encruamento, na energia de activação e na sensibilidade à velocidade de deformação; (ii) o efeito do encruamento isotrópico na sensibilidade à velocidade de deformação; (iii) o comportamento viscoplástico; (iv) o efeito da temperatura na tensão limite de elasticidade; (v) restauração estática; (v) a variação da energia de activação com a temperatura com um conjunto relativamente simples e pequeno de equações. No entanto, este modelo apresenta a desvantagem de poder ser unicamente aplicado em deformação uniaxial não-cíclica.

5.3.4 Modelo de Brown e Anand

Desde o final dos anos 80 Anand e a sua equipa (Brown, Lush e Weber, entre outros) têm apresentado constantes progressos em modelos constitutivos para processos de deformação e, particularmente, para processos de deformação a temperaturas elevadas. Estes progressos podem ser constatados a partir de publicações como, por exemplo, [Anand *et al.* 85, Anand 85, Lush e Anand 86, Brown 87, Lush *et al.* 89, Brown *et al.* 89, Anand 91].

Brown [Brown 87], baseado no trabalho apresentado por Anand [Anand *et al.* 85], apresentou um modelo de comportamento termoelástico-viscoplástico com restauração do tipo de variável interna desenvolvido para a deformação de metais a altas temperaturas e velocidades de deformação moderadas. Este modelo, preparado para grandes deformações tridimensionais no regime de trabalho a quente, foi pensado de forma a representar os aspectos mais significantes do estado microestrutural dos metais e a sua evolução durante a deformação. Outro objectivo dos autores era que a determinação dos parâmetros intrínsecos do modelo de comportamento fosse imediata e requeresse o mínimo de ensaios experimentais. O parâmetro escalar interno s , de dimensões de tensão, contém informações sobre a estrutura das deslocações, subgrão e efeitos de tamanho de grão, endurecimento de solução sólida, etc. Nos materiais de fase única o parâmetro s é correlacionado com a densidade das deslocações que, para este modelo, toma-se como a contribuição primária para a resistência à deformação a temperaturas elevadas.

As equações constitutivas para o tensor da velocidade de deformação plástica, \mathbf{D}^P , e para a velocidade de deformação plástica equivalente, $\dot{\epsilon}^P$, são semelhantes às do modelo adoptado no presente trabalho e são dadas pelas equações (5.17) e (5.22). No entanto, a equação evolutiva para a variável interna s , dada por

$$\dot{s} = \left\{ h_0 \left| \left(1 - \frac{s}{s^*} \right) \right|^a \text{sgn} \left(1 - \frac{s}{s^*} \right) \right\} \dot{\epsilon}^P, \quad (5.46)$$

não contempla os fenómenos de restauração estática. Este tem em conta processos dinâmicos como o encruamento e restauração dinâmica. Através de vários ensaios de carga-descarga com diferentes tempos de descarga, Brown considera que as taxas de restauração,

tanto para uma liga de alumínio 1100 como para uma liga Fe2%Si, são bastantes baixas e, conseqüentemente, qualquer termo que represente fenômenos de restauração estática pode ser desprezado.

Na expressão (5.46), h_0 representa a variação de encruamento atérmico constante e s^* representa um valor de saturação de s . Segundo Brown e Anand, este é dado por:

$$s^* = \bar{s} \left[\frac{\dot{\tilde{\epsilon}}^p}{A} \exp \left(\frac{Q}{R_g T} \right) \right]^n. \quad (5.47)$$

Na expressão anterior os parâmetros empíricos do material são h_0 , a , \bar{s} e n . Contrariamente ao modelo adoptado neste trabalho, a energia de activação Q é constante e a mesma da equação da lei do escoamento.

O processo de determinação dos parâmetros materiais deste modelo constitutivo é composto por ensaios uniaxiais de compressão e ensaios de carga-descarga a diferentes velocidades de deformação e temperaturas. Os autores também aconselham utilizarem-se testes de sensibilidade à velocidade de deformação, de forma a encontrar os valores dos parâmetros característicos com maior exactidão.

Capítulo 6

Comportamento Termomecânico

Descreve-se o comportamento térmico dos materiais metálicos e a sua interdependência com o comportamento mecânico. Apresenta-se ainda o modelo termoplástico associado ao comportamento termomecânico destes materiais. Descrevem-se matematicamente os efeitos da temperatura sobre a resposta mecânica e de geração de calor por deformação plástica.

6.1 Introdução

Num grande número de processos tecnológicos, a importância da análise do comportamento térmico tem sido reconhecida desde meados do século XX. Porém, a generalidade das técnicas desenvolvidas para analisar estes processos desprezam todas as variações heterogêneas do campo de temperatura e consideram que a temperatura do material deformado permanece constante. Este procedimento, comumente conhecido por modelação isotérmica, despreza todo o calor gerado durante o processo de deformação plástica bem como o calor trocado pelo sólido e o ambiente que o rodeia [Rodrigues e Martins 98]. Em processos de deformação à temperatura ambiente, em que as velocidades e níveis de deformação são reduzidas, esta simplificação é aceitável. Todavia, em processos de trabalho a quente ou que envolvam grandes velocidades de deformação, o factor térmico é de extrema importância. Por exemplo, o trabalho a quente de metais é frequentemente realizado com ferramentas frias e à temperatura ambiente. O contacto do material a deformar, a uma temperatura elevada, com a ferramenta fria e com o ar ambiente induz processos de troca de calor significativos. Consequentemente, na análise de processos de deformação não-isotérmicos deve considerar-se, em adição com a posição do ponto material \mathbf{x} , a temperatura, T , como variável independente do processo [Doltsinis 04].

Em processos termomecanicamente acoplados, a resposta mecânica do material depende do comportamento térmico e o comportamento térmico depende da resposta mecânica.

A capacidade de resolver com sucesso os problemas de acoplamento termomecânico está directamente associada à estratégia de modelação da interdependência termomecânica [Vaz Jr. 98]. Dependendo do grau de interacção entre os sistemas, este acoplamento pode ser classificado como fraco ou forte. De um modo geral, na análise numérica do comportamento dos metais, estes problemas são resolvidos separadamente com trocas de informação em intervalos de tempo predeterminados. Esta é a estratégia adoptada neste trabalho e é denominada por solução *staggered* ou passo-a-passo.

O modelo termomecânico pode ser subdividido no (i) efeito da temperatura sobre a resposta mecânica e no (ii) efeito térmico da deformação plástica. O efeito térmico provocado pela deformação plástica, que inclui a geração de calor por deformação plástica, pode assumir formas matemáticas bastantes distintas, dependendo do modelo termoplástico adoptado. Em 1980, Rebelo e Kobayashi [Rebelo e Kobayashi 80a] apresentaram um modelo termoplástico baseado na teoria termodinâmica das deformações. Posteriormente têm sido desenvolvidos outros modelos termoplásticos [Simo e Miehe 92, Perzyna 93, Szabo e Varga 95]. Estes tentam representar os fenómenos de interacção entre os sistemas mecânico e térmico na deformação de materiais metálicos. No entanto, alguns aspectos importantes não foram ainda explorados, nomeadamente os associados a algumas ligas de alumínio em grandes deformações.

As estratégias de acoplamento termomecânico, em problemas que envolvem grandes deformações elastoplásticas, dividem-se na utilização de algoritmos de solução geral e adiabáticos. Nos primeiros, é necessário determinar a solução completa do problema de transmissão de calor. Nos segundos, a solução é obtida localmente pela aproximação adiabática, desprezando a troca de calor por condução no sólido [Vaz Jr. 00]. Neste trabalho utilizou-se unicamente a solução geral do problema acoplado por esta ser mais exacta, apesar de computacionalmente mais dispendiosa.

6.2 Comportamento Térmico

Em meios sólidos, os modos básicos de transferência de calor são: (i) a condução no interior do sólido e (ii) as trocas de calor na fronteira. Porém, no caso em estudo, embora haja movimentação de material, o problema pode ser encarado como de condução simples, negligenciando todos os termos advectivos. Consequentemente, é possível recorrer a uma formulação lagrangeana reactualizada para determinar a solução térmica em cada configuração geométrica e em cada incremento de deformação [Andrade-Campos *et al.* 04b].

A primeira e segunda leis da termodinâmica (lei da conservação da energia e da termodinâmica irreversível, respectivamente) governam a evolução do campo de temperatura. A aplicação destes princípios da termodinâmica, conjuntamente com as condições de equilíbrio e de conservação da massa, a um corpo sujeito a deformação plástica resulta na seguinte equação geral¹:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{q}_k) = q_i + q_t \quad (6.1)$$

em que ρ e c representam a densidade e o calor específicos, respectivamente. \mathbf{q}_k é o fluxo de calor por condução por unidade de tempo e área e q_i e q_t representam o calor provocado

¹Ver apêndice C para mais detalhes.

por deformação plástica e qualquer outra fonte de calor à excepção das causadas por efeito mecânico, respectivamente.

A condução de calor é definida pela lei da condutividade de Fourier, isto é,

$$\mathbf{q}_k = -\mathbf{k} \text{grad}(T), \quad (6.2)$$

onde \mathbf{k} é o tensor da condutividade térmica do sólido. Substituindo \mathbf{q}_k , dado na equação (6.2), na relação (6.1) obtém-se

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} [\mathbf{k} \text{grad}(T)] + Q, \quad (6.3)$$

onde $Q = q_i + q_t$ é o termo geração de calor.

As trocas de calor nas fronteiras dão-se por convecção, radiação e condução por contacto térmico, como se mostra na figura 6.1.

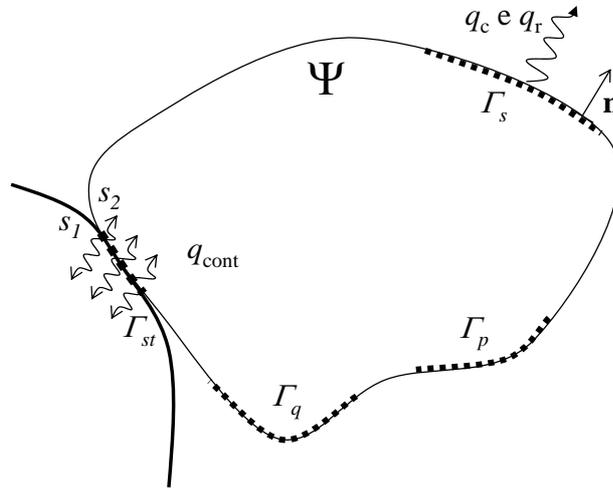


Figura 6.1: Representação esquemática genérica das condições de fronteira num meio sólido Ω .

As trocas por convecção são definidas pelo coeficiente de convecção, h_c , e pela temperatura do meio exterior, T_∞ , conforme a expressão

$$q_c = h_c(T - T_\infty) \quad \text{em} \quad \Gamma_s. \quad (6.4)$$

A condição de radiação é dada pela expressão seguinte:

$$q_r = \kappa_r(T - T_r) \quad \text{em} \quad \Gamma_s, \quad (6.5)$$

onde o coeficiente de transferência de calor por radiação é

$$\kappa_r = r_r(T^2 + T_r^2)(T + T_r) \quad (6.6)$$

e pode ser determinado a partir da temperatura absoluta da superfície da fonte de radiação, T_r , e da temperatura da superfície Γ_s . O coeficiente r_r é determinado a partir da constante

de Stephan-Boltzman, da emissividade da superfície exterior do sólido e dos factores de forma geométricos das superfícies [Incropera e DeWitt 80, Bathe 96].

O contacto térmico entre dois corpos nem sempre é perfeito. A condição de contacto térmico caracteriza casos como a existência de impurezas entre as duas superfícies, o uso de lubrificantes, a resistência térmica devido a rugosidades, etc. Esta condição de contacto térmico depende da diferença de temperatura entre os dois corpos em contacto e da área efectiva de contacto. O contacto térmico e as eventuais perdas de calor podem ser definidos por

$$q_{\text{cont}} = \frac{Q_{\text{cont}}}{A_{\text{cont}}} = h_{\text{cont}}(T_{s_1} - T_{s_2}) \quad \text{em} \quad \Gamma_{st}. \quad (6.7)$$

A_{cont} é a área da superfície onde existem defeitos no contacto perfeito, h_{cont} é o coeficiente de transferência de calor por contacto, e T_{s_1} e T_{s_2} são as temperaturas das superfícies de contacto.

Adicionalmente, a solução do problema térmico pode incluir condições de fronteira de temperatura e de fluxos de calor prescritas definidos, respectivamente, por

$$T = T_p \quad \text{em} \quad \Gamma_p \quad \text{e} \quad (6.8)$$

$$q = -q_p \quad \text{em} \quad \Gamma_q. \quad (6.9)$$

A modelação dos efeitos de calor causados por atrito e fricção depende directamente da lei de atrito adoptada. Uma vez que a solução mecânica não leva em conta o contacto com atrito, pois não é do âmbito deste trabalho, os efeitos de calor causados por este fenómeno não são incluídos nas presentes formulações.

6.2.1 O efeito da temperatura sobre a resposta mecânica

O efeito da temperatura sobre a resposta mecânica pode ser subdividido no (i) efeito mecânico da variação de temperatura e na (ii) dependência térmica das propriedades dos materiais. A dependência térmica das propriedades justifica o facto das propriedades utilizadas nas equações da conservação de quantidade de movimento e relações constitutivas serem funções da temperatura. O efeito mecânico da variação de temperatura caracteriza os efeitos de expansão e contracção do material devido às variações de temperatura. Este é directamente proporcional à função coeficiente de expansão térmica do material, α , e é representado pela parte térmica do tensor velocidade de deformação, \mathbf{D}^t , dado por

$$\mathbf{D}^t = \alpha^* \dot{T} \mathbf{1}. \quad (6.10)$$

Na expressão anterior

$$\alpha^* = \alpha + \frac{d\alpha}{dT} (T - T_0), \quad (6.11)$$

onde T_0 é uma temperatura de referência e $\alpha = \alpha(T)$.

6.2.2 O efeito térmico da deformação plástica

A influência exercida pelo sistema mecânico no problema térmico é dada pela posição e deslocamento do sólido. Adicionalmente, esta também é manifestada pela geração de calor no interior do sólido como consequência da deformação plástica. O calor gerado por

deformação plástica é representado pela taxa de geração de calor por deformação plástica, q_i . Esta pode assumir formas bastantes distintas, dependendo do modelo termoplástico adoptado [Vaz Jr. 00]. De uma forma geral, q_i é dado por:

$$q_i = \xi \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{\text{vp}} + \mathcal{H}(\mathbf{D}, \mathbf{s}, \alpha, \gamma, \nu, \boldsymbol{\sigma}, \hat{\psi}, \hat{\phi}, T, \dot{T}, \dots), \quad (6.12)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões de Cauchy, \mathbf{D}^{vp} é o tensor velocidade de deformação viscoplástica e \mathcal{H} é um termo dependente do modelo termoplástico adoptado². ξ é o factor de dissipação e representa a parcela da energia de deformação plástica que é dissipada sob a forma de calor. Para a generalidade dos materiais metálicos, $\xi \in [0.7, 0.95]$.

Para processos de deformação lentos, onde $\mathbf{D}^{\text{vp}} \approx 0$, a dissipação de calor por deformação plástica pode ser desprezada.

A complexidade na obtenção de modelos termoplásticos fica patente pela quantidade de modelos distintos apresentados nas últimas décadas. Alguns são baseados na termodinâmica da deformação [Rebello e Kobayashi 80a], outros nos conceitos da termodinâmica irreversível [Argyris e Doltsinis 81]. Na secção seguinte apresenta-se o modelo termoplástico utilizado, baseado quer em conceitos termodinâmicos quer empíricos.

6.3 Modelo Termoplástico

O calor gerado pela deformação termoelástica, definido pelo segundo termo da equação (6.12), é geralmente pequeno quando comparado com o calor gerado pelo trabalho de deformação plástica, representado pelo termo $\xi \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{\text{vp}}$. Este facto é de tal maneira evidente que muito autores como, por exemplo, Vaz Jr. [Vaz Jr. 98] e Rodrigues e Martins [Rodrigues e Martins 98], desprezam o termo \mathcal{H} quando procuram avaliar a geração de calor por deformação plástica, q_i . Adicionalmente, este procedimento conduz a uma maior simplicidade do modelo termoplástico e rapidez de computação.

O factor de dissipação ξ representa a fracção do trabalho plástico efectivamente transformada em calor e exerce uma função importante como ajuste do modelo termoplástico ao problema e ao material a modelar. Este é utilizado pela generalidade dos modelos termoplásticos, mostrando que na termoplasticidade haverá sempre uma componente empírica.

Pelo exposto nos parágrafos anteriores, e de forma a obter um equilíbrio entre a fenomenologia termodinâmica e a simplicidade da formulação, o modelo termoplástico adoptado é o seguinte:

$$q_i = \xi (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{\text{vp}}) + \psi(T). \quad (6.13)$$

O segundo termo da expressão (6.13), $\psi(T)$, é uma função quadrática da temperatura que procura substituir, de forma simples, o termo de geração de calor por deformação termoelástica. Este denomina-se por factor de correcção da dissipação. Com a adição desta função de correcção pretende-se substituir alguns efeitos da temperatura nas tensões e na taxa de variação das variáveis internas. Desta forma, a equação geral de calor num corpo sujeito a deformação plástica, equação (6.1), pode ser reescrita como

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - [\xi (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{\text{vp}}) + \psi(T)] - q_t + \text{div}(\mathbf{q}_k) = 0. \quad (6.14)$$

²Ver anexo C para mais detalhes

6.4 Outros Modelos Termoplásticos

Vários têm sido os modelos termoplásticos desenvolvidos e propostos nas últimas décadas. Estes modelos podem ser divididos em três categorias distintas em função de um conjunto de análises termodinâmicas e observações fenomenológicas [Vaz Jr. 98]. Estas são: a termodinâmica baseada em variáveis internas, a teoria clássica dos processos irreversíveis e a termodinâmica racional. Nas secções seguintes apresentam-se alguns modelos termoplásticos que se inserem em cada uma destas categorias. Não se pretende com este texto realizar um estudo exaustivo sobre os modelos desenvolvidos. Pretende-se tão somente apresentar uma reflexão sobre as diferentes estratégias de abordagem ao problema da geração de calor por deformação plástica.

6.4.1 Modelos baseados em variáveis de estado internas

De entre os modelos termoplásticos baseados em variáveis internas os mais divulgados são os de Rebelo e Kobayashi [Rebelo e Kobayashi 80a] e de Perzyna [Perzyna 93].

Em 1980, Rebelo e Kobayashi [Rebelo e Kobayashi 80a] propuseram uma formulação baseada na teoria termodinâmica das deformações e recorrendo a duas variáveis internas: o tensor de deformação plástica e a densidade de deslocações. O modelo mecânico utilizado é um modelo rígido-viscoplástico. No estudo efectuado por estes autores, a geração de calor por deformação plástica é dada por

$$q_i = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} - \nu A \dot{\bar{\epsilon}} + \nu B \alpha e^{-D/kT}, \quad (6.15)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ e $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}$ são o tensor das tensões e o tensor velocidade de deformação viscoplástica, respectivamente. T é a temperatura, A e B são constantes do material, k é o coeficiente de condutividade térmica e D é a energia da auto-difusão do material. As variáveis internas do modelo são a velocidade de deformação plástica equivalente, $\dot{\bar{\epsilon}}$, e a densidade das deslocações, α . As duas últimas parcelas da equação (6.15) representam o efeito das deslocações na dissipação do trabalho viscoplástico. A primeira parcela, $\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}$, define a taxa de trabalho viscoplástico.

Também Perzyna [Perzyna 93] propôs uma formulação baseada na termodinâmica das deformações recorrendo a variáveis internas. Nesta, a evolução do problema térmico é governado pelos parâmetros internos. Segundo Perzyna, a escolha dos parâmetros internos depende directamente do problema e, conseqüentemente, leva ao desenvolvimento de diversos modelos termoplásticos. Em problemas com amaciamento térmico em deformação de corte localizada, a geração de calor por deformação plástica é dada por

$$q_i = \xi \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^p + \frac{\rho}{\rho_{\text{ref}}} T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial T} : \mathbf{d} + \frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial T \boldsymbol{\mu}} \left[\frac{1}{\boldsymbol{\mu}} \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial T} \right]^{-1} : \mathbf{d}^p \right). \quad (6.16)$$

$\boldsymbol{\tau}$ é o tensor das tensões de Kirchhoff e ξ é o coeficiente de dissipação que representa a parcela da energia de deformação plástica dissipada sob a forma de calor. \mathbf{d} e \mathbf{d}^p são a velocidade de deformação total e plástica, respectivamente. $\hat{\varphi}$ e $\hat{\psi}$ representam a energia livre de Helmholtz e a sua complementar³ e ρ e ρ_{ref} são a massa específica corrente e de

³Ver anexo C.

referência, respectivamente. $\boldsymbol{\mu}$ é o vector das variáveis internas deste modelo termoplástico. O termo $\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^P$ representa a taxa de dissipação do trabalho plástico.

Contrariamente à generalidade dos modelo propostos, o modelo sugerido por Kamlah e Haupt [Kamlah e Haupt 97] não utiliza o factor de dissipação. Este é determinado para quando as leis de encruamento isotrópico e cinemático não são representadas por uma função escalar única. A formulação apresentada, restrita a pequenas deformações elastoplásticas, é dada por

$$q_i = \mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^P - T \frac{\partial^2 \tilde{g}_e}{\partial T \partial \mathbf{T}} - \sum_{k=1}^n \left[Q_k \left(\frac{\partial \tilde{g}_p}{\partial Q_k} \right) + T \frac{\partial^2 \tilde{g}_p}{\partial T \partial Q_k} \dot{Q}_k \right]. \quad (6.17)$$

Q_k representa as variáveis internas enquanto que \tilde{g}_e e \tilde{g}_p são as componentes elástica e plástica da energia livre, respectivamente. \mathbf{T} é o tensor das tensões e $\dot{\mathbf{E}}^P$ é a velocidade de deformação plástica. A formulação apresentada fundamenta-se no pressuposto que nem todo o trabalho plástico é dissipado sob a forma de calor. Parte do trabalho plástico é armazenado por fenómenos de mudança estrutural do material.

6.4.2 Modelos baseados na teoria clássica dos processos irreversíveis

No início da década de 80, Argyris e Doltsinis [Argyris e Doltsinis 81, Argyris *et al.* 82] propuseram um modelo baseado em conceitos da termodinâmica do não-equilíbrio. Neste modelo, a geração de calor por deformação plástica é dada por

$$q_i = \xi \boldsymbol{\sigma} : \dot{\mathbf{e}}^P - 3K \alpha_L \dot{J}_1 T. \quad (6.18)$$

ξ é, mais uma vez, o coeficiente de dissipação, K é o módulo de elasticidade e α_L e \dot{J}_1 são o coeficiente de expansão térmica e a taxa do primeiro invariante do tensor de deformação plástica, respectivamente. A última parcela da equação (6.18) representa a taxa de entropia específica a temperatura constante, devida à dissipação térmica.

Szabo e Vargas [Szabo e Varga 95, Vaz Jr. 98] também recorreram aos conceitos da termodinâmica irreversível para obter o termo de acoplamento termoplástico. Este termo, baseado na abordagem adoptada por Služalec [Služalec 88], é dado por

$$q_i = \xi \boldsymbol{\sigma} : \dot{\mathbf{e}}^P + T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \dot{\mathbf{e}}^e, \quad (6.19)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões de Cauchy, $\dot{\mathbf{e}}^P$ e $\dot{\mathbf{e}}^e$ são os tensores velocidade de deformação plástica e elástica, respectivamente. O segundo termo da equação (6.19), denominado por factor de acoplamento termoelástico, é função da temperatura, da velocidade de deformação e dos módulos elástico e elastoplástico. O primeiro termo representa a parcela da dissipação térmica por trabalho plástico. Em 1992, Simo e Miehe [Simo e Miehe 92] apresentaram um modelo limitado a processos a frio cuja formulação é aplicada à plasticidade associativa. Este modelo, baseado em conceitos de aumento de entropia devido ao movimento de deslocações, é definido por

$$q_i = \xi \sqrt{\frac{2}{3}} y \lambda + T \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{M}}}{\partial J \partial T} : \mathbf{J}, \quad (6.20)$$

onde \mathbf{J} é o tensor transformação de Piola e $\hat{\mathbf{M}}$ é a função de expansão térmica. y define a lei de encruamento isotrópica e λ é o multiplicador de Lagrange. Neste modelo, o primeiro

termo da equação (6.20) representa a dissipação plástica enquanto que o segundo está associado ao aquecimento termoelástico.

Casey discute alguns aspectos básicos da existência e desempenho da entropia em materiais termoelásticos e termoplásticos [Casey 98]. A formulação apresentada, preparada para problemas elastoplásticos de grandes deformações, é derivada em termos do tensor de deformação de Lagrange, \mathbf{E} , e do tensor das tensões de Piola-Kirchoff, \mathbf{S} . A expressão apresentada por Casey não define explicitamente a geração de calor por deformação plástica q_i . Esta é dada pela evolução da entropia específica, η , isto é,

$$\rho_0 \dot{\eta} T = \rho_0 r - \text{div}(q_k) - \rho_0 \left(\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathbf{E}^P} : \dot{\mathbf{E}}^P + \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial k} \dot{k} + \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \boldsymbol{\alpha}_R} : \dot{\boldsymbol{\alpha}}_R \right). \quad (6.21)$$

Na expressão anterior, k é uma medida escalar do encruamento e $\boldsymbol{\alpha}_R$ é uma medida vectorial do encruamento. $\hat{\psi} = \hat{\psi}(\mathbf{E}, T)$ é a energia livre de Helmholtz. A transformação da formulação apresentada por Casey para grandes deformações baseia-se na decomposição aditiva do tensor deformação e no trabalho apresentado anteriormente por Green-Naghdi [Vaz Jr. 98].

6.4.3 Outros modelos termoplásticos

Nesta secção expõem-se alguns modelos que não se inserem nas secções anteriores. A maioria deles têm como grandes vantagens a simplicidade de implementação e rapidez de computação.

O modelo termoplástico proposto por Srikanth e Zabarar [Srikanth e Zabarar 99] pretende acoplar as grandes deformações com dano contínuo do material. Considerando apenas pequenas deformações elásticas, parte-se da decomposição multiplicativa do tensor gradiente de transformação nas suas componentes elástica, plástica e térmica. Deste modo, a geração de calor por deformação plástica é dado por

$$q_i = \xi \bar{\mathbf{T}} : \bar{\mathbf{D}}^P, \quad (6.22)$$

em que $\bar{\mathbf{T}}$ e $\bar{\mathbf{D}}^P$ são o tensor das tensões rodado e a velocidade de deformação plástica, respectivamente. Nos estudos apresentados por Srikanth e Zabarar, o efeito termoelástico é desprezado e os problemas mecânico e térmico são resolvidos independentemente.

Em 1998, Vaz Junior [Vaz Jr. 98] discute o efeito do termo de aquecimento termoelástico e compara-o com a componente plástica. Mostrando que os problemas de termoplasticidade envolvem uma componente empírica e um certo grau de incerteza, Vaz Junior atribui uma elevada importância ao factor de dissipação, na medida em que este serve como parâmetro de ajuste do modelo a problemas reais de engenharia. Por conseguinte, toma a seguinte formulação para o termo termoplástico:

$$q_i = \xi \mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^P, \quad (6.23)$$

onde \mathbf{T} é o tensor das tensões e $\dot{\mathbf{E}}^P$ é o tensor velocidade de deformação plástica. Considerando encruamento isotrópico, o autor propõe que o termo dissipativo pode ser simplificado e a equação (6.23) rescreve-se como

$$q_i = \xi T_y \dot{\epsilon}^P. \quad (6.24)$$

T_y é a tensão limite de elasticidade e $\dot{\bar{\epsilon}}^P$ é a velocidade de deformação plástica equivalente. A formulação apresentada por Vaz Junior é utilizada em problemas de conformação de metais.

O modelo termoplástico usado por Rodrigues e Martins [Rodrigues e Martins 98], e utilizado em problemas de forjamento, considera que a taxa de geração de calor no interior da peça tem apenas origem na deformação plástica do material. Desprezando a influência da deformação elástica, o termo da dissipação térmica por trabalho plástico é dado por

$$q_i = \beta \bar{\sigma} \dot{\bar{\epsilon}}^P, \quad (6.25)$$

onde β é o factor de dissipação, representando a parcela da energia de deformação plástica que é dissipada sob a forma de calor, $\bar{\sigma}$ é a tensão equivalente e $\dot{\bar{\epsilon}}^P$ é a velocidade de deformação plástica equivalente.

Capítulo 7

Discretização e Integração Temporal do Modelo Constitutivo

Descreve-se o método de integração temporal aplicado ao modelo constitutivo adoptado. Apresenta-se o método do gradiente progressivo a aplicar na integração temporal do problema mecânico. Determina-se o módulo elastoviscoplastico secante e o problema mecânico é discretizado pelo método dos elementos finitos.

7.1 Introdução

A complexidade de um problema com acoplamento termomecânico é relativamente elevada. Esta é devida às fortes não-linearidades do comportamento do material, das grandes deformações e dos efeitos térmicos. A dificuldade da modelação da interdependência entre o comportamento mecânico e térmico também contribui para este facto.

Na generalidade das análises pelo método dos elementos finitos, e para problemas não-lineares simples ou fracamente acoplados, utilizam-se algoritmos estáticos-implícitos. Estes servem-se de esquemas iterativos, baseados no método de Newton-Raphson ou de Newton-Raphson modificado, para tratar as equações que governam o comportamento mecânico, como sistemas de equações não-lineares. O esquema iterativo resolve as equações recorrendo às forças não-equilibradas. Calcula os incrementos de deslocação correspondentes e itera até que o afastamento do estado de equilíbrio seja menor do que um valor determinado. Uma desvantagem deste tipo de métodos é que as iterações podem oscilar e mesmo não convergir, particularmente no caso de comportamento fortemente não-linear [Xing and Makinouchi 02].

Além dos métodos implícitos, existem outros dois tipos de métodos de integração temporal que podem ser aplicados a leis constitutivas dependentes da velocidade: (i) os métodos explícitos e (ii) os métodos semi-implícitos, também denominados por métodos do

gradiente progressivo. Os métodos explícitos, apesar de serem de implementação relativamente simples, necessitam que o tamanho dos incrementos de tempo seja muito reduzido. Só desta forma é possível garantir a estabilidade numérica do processo.

Por outro lado, com os métodos semi-implícitos consegue garantir-se estabilidade com incrementos de tempo significativamente maiores. Embora não sejam incondicionalmente estáveis, como os métodos totalmente implícitos, estes são mais simples de implementar e podem levar a custos de computação inferiores.

O custo dos métodos implícitos é contrabalançado pela possibilidade de se poderem utilizar grandes incrementos com resultados precisos. Deste modo, compensam o custo despendido pela tarefa da actualização constante das tensões. Contudo, no caso de instabilidade material ou geométrica, os algoritmos semi-implícitos podem mostrar-se economicamente mais eficientes [Ortiz 87]. Nesta circunstância, os incrementos de tensão são drasticamente reduzidos para não haver perda de exactidão dos resultados.

De acordo com o modelo mecânico utilizado no presente trabalho, o estado do material é caracterizado pela tensão de Cauchy, $\boldsymbol{\sigma}$, por uma variável escalar interna, s , e pela temperatura T . Assume-se que estas variáveis de estado são conhecidas no instante corrente t e pretende-se determinar o seu valor no instante de tempo final do incremento, $t + \Delta t$.

Visto que, no presente trabalho, se consideram grandes transformações, então a lei de comportamento mecânico deve ser integrada no referencial corrotacional, coincidente com o referencial de ortotropia plástica do material. Este referencial é definido pelo tensor de rotação elástica \mathbf{R} . Todas as equações associadas ao modelo constitutivo mecânico devem ser nele formuladas.

7.2 Integração Temporal do Modelo Mecânico

Nesta secção determinam-se as aproximações para os valores constitutivos do modelo mecânico no final do incremento de tempo $t + \Delta t$. Para isso, utiliza-se um método semi-implícito que recorre a uma expansão em série de Taylor em torno do instante t .

7.2.1 Referencial de ortotropia

Como referido na secção 7.1, para que o modelo de comportamento se encontre preparado para grandes transformações é necessário que as equações associadas sejam formuladas no referencial de ortotropia (corrotacional). Assim, as grandezas tensoriais que intervêm nas equações constitutivas deverão sofrer uma rotação elástica. Por conseguinte, toda a formulação associada à integração do modelo de comportamento é feita no referencial de ortotropia. De realçar que, tomando a simplificação de que o comportamento elástico do material é isotrópico e inalterado com a deformação, o tensor das constantes elásticas, quando transformado para o referencial corrotacional, permanece inalterado, isto é,

$$\hat{\mathbf{C}}^e = \mathbf{R}^T (\mathbf{R}^T \mathbf{C}^e \mathbf{R}) \mathbf{R} = \mathbf{C}^e. \quad (7.1)$$

Desta forma, a equação (5.16) pode reescrever-se, na configuração rodada da seguinte forma:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = 2\mu \left(\hat{\mathbf{D}} - \hat{\mathbf{D}}^{vp} \right) + \left[\left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr}(\hat{\mathbf{D}}) - 3\kappa\alpha^* \dot{T} \right] \mathbf{1}, \quad (7.2)$$

em que

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{R}^T \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{R}, \quad \hat{\mathbf{D}} = \mathbf{R}^T \mathbf{D} \mathbf{R} \quad \text{e} \quad \hat{\mathbf{D}}^{\text{vp}} = \mathbf{R}^T \mathbf{D}^{\text{vp}} \mathbf{R} \quad (7.3)$$

são os tensores das tensões, velocidade de deformação e velocidade de deformação viscoplástica na configuração ortotrópica, respectivamente.

7.2.2 Determinação do incremento de deformação e rotação

Da integração temporal dos tensores de velocidade de deformação, $\hat{\mathbf{D}}$ e $\hat{\mathbf{D}}^{\text{vp}}$, ao longo do incremento de tempo Δt , resulta o incremento de deformação,

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \int_t^{t+\Delta t} \hat{\mathbf{D}} dt \quad (7.4)$$

e o incremento de deformação plástica

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{p}} = \int_t^{t+\Delta t} \hat{\mathbf{D}}^{\text{vp}} dt. \quad (7.5)$$

Para determinar o integral (7.4) deve utilizar-se o método do ponto médio de Hughes [Hughes e Winget 80]. Neste, supõe-se que as coordenadas dos pontos materiais variam linearmente durante o intervalo de tempo $[t, t + \Delta t]$. Assim, tem-se

$$\mathbf{x}_{t+\gamma\Delta t} = (1 - \gamma)\mathbf{x}_t + \gamma\mathbf{x}_{t+\Delta t} \quad \text{com} \quad \gamma \in [0, 1]. \quad (7.6)$$

Designando os deslocamentos incrementais \mathbf{u} por

$$\mathbf{u} = \mathbf{x}_{t+\Delta t} - \mathbf{x}_t, \quad (7.7)$$

pode definir-se o gradiente dos deslocamentos por [Menezes 94]

$$\mathbf{G}_\gamma = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}_{t+\gamma\Delta t}}. \quad (7.8)$$

Deste modo, o incremento de deformação é dado por [Hughes e Winget 80]

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{G}_\gamma + \mathbf{G}_\gamma^T). \quad (7.9)$$

Tomando $\gamma = 1/2$, proposto por Hughes, desenvolvendo em série de Taylor e desprezando os termos de ordem superior a 2 em $|\mathbf{G}_1|$, obtém-se o incremento de deformação [Menezes 94, Alves 03]:

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{1} + \frac{1}{2} (\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_1^T) + \frac{1}{4} [\mathbf{G}_1^2 - \mathbf{G}_1 \mathbf{G}_1^T + (\mathbf{G}_1^T)^2 + \mathbf{G}_1^T \mathbf{G}_1]. \quad (7.10)$$

Posteriormente deve recorrer-se ao tensor de rotação no início do incremento (\mathbf{R}_t), definir $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ na configuração corrotacional, isto é

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{R}_t^T \Delta \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{R}_t. \quad (7.11)$$

A determinação do tensor rotação pode ser realizada por um dos seguintes métodos:

- i) o método da decomposição polar, onde $\mathbf{R} = \mathbf{F}\mathbf{U}^{-1}$;
- ii) o método do tensor de rotação incremental, onde $\mathbf{R} = \mathbf{r}\mathbf{R}_t$ e \mathbf{r} é a rotação incremental associada à velocidade de rotação \mathbf{W} .

O primeiro método obriga ao cálculo do gradiente de transformação \mathbf{F} e do tensor rotação nas configurações intermédia ($t + 1/2\Delta t$) e de chegada ($t + \Delta t$), isto é,

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_{t+\Delta t}\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{-1}, \quad (7.12)$$

$$\mathbf{R}_{t+1/2\Delta t} = \mathbf{F}_{t+1/2\Delta t}\mathbf{U}_{t+1/2\Delta t}^{-1}. \quad (7.13)$$

Substituindo \mathbf{R}_t na equação (7.11), $\mathbf{R}_{t+1/2\Delta t}$ é utilizado para actualizar o incremento de deformação para a configuração corrotacional. Por outro lado, o tensor de rotação na configuração final, $\mathbf{R}_{t+\Delta t}$, actualiza o tensor das tensões ortotrópico para o tensor das tensões de Cauchy no final do incremento,

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t} = \mathbf{R}_{t+\Delta t}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{R}_{t+\Delta t}^T. \quad (7.14)$$

O método do tensor de rotação incremental, associado ao tensor velocidade de rotação \mathbf{W} , baseia-se na integração da equação diferencial $\dot{\mathbf{r}}\mathbf{r}^T = \mathbf{W}$. Utilizando o método do ponto médio generalizado, e com a condição inicial de $\mathbf{r} = \mathbf{1}$ no instante t , obtém-se

$$\mathbf{r} = \mathbf{1} + (\mathbf{1} - \gamma\mathbf{W}_\gamma)^{-1}\mathbf{W}_\gamma, \quad \text{com} \quad \mathbf{W}_\gamma = \frac{1}{2}(\mathbf{G}_\gamma - \mathbf{G}_\gamma^T). \quad (7.15)$$

Analogamente à expressão (7.10), o tensor incremento de rotação resulta

$$\mathbf{r} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_1^T) + \frac{1}{8}[3\mathbf{G}_1^2 - \mathbf{G}_1\mathbf{G}_1^T - (\mathbf{G}_1^T)^2 - \mathbf{G}_1^T\mathbf{G}_1]. \quad (7.16)$$

Logo, o tensor rotação na configuração de chegada no final do incremento, utilizado na equação (7.14), é dado por

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t} = \mathbf{r}\mathbf{R}_t. \quad (7.17)$$

A vantagem em utilizar o método da rotação incremental em comparação com o método da decomposição polar prende-se com o esforço de cálculo. O método da decomposição polar, quando utilizado com o método do ponto médio, obriga à realização de duas operações de decomposição polar $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}^{-1}$ na fase da actualização das tensões para cada ponto de integração. Porém, ambos os métodos levam a bons resultados no que respeita a grande deformações [Andrade-Campos *et al.* 03].

7.2.3 Determinação do incremento de deformação plástica

Para calcular o incremento de deformação plástica, utilizar-se-á um método de integração temporal semi-implícito ou do gradiente progressivo.

Método semi-implícito ou do gradiente progressivo

No início do incremento, as variáveis de estado, $\bar{\sigma}_t$, s_t e T_t , são conhecidas. Pretende-se determinar os valores correspondentes no final do incremento: $\bar{\sigma}_{t+\Delta t}$, $s_{t+\Delta t}$ e $T_{t+\Delta t}$. O integral da expressão (7.5) pode ser aproximado pela seguinte relação:

$$\Delta \hat{\epsilon}^P = \hat{\mathbf{D}}_{\zeta}^{\text{VP}} \Delta t, \quad \zeta \in [t, t + \Delta t]. \quad (7.18)$$

Se $\zeta = t$, o incremento de deformação plástica é calculado unicamente em função do tensor velocidade de deformação viscoplástica no instante de partida t , correspondendo ao método de integração explícito. Caso $\zeta = t + \Delta t$, a expressão (7.18) define o método implícito. Neste caso, o incremento de deformação plástica é avaliado em função do tensor velocidade de deformação viscoplástica no final do incremento $t + \Delta t$. Se $t < \zeta < t + \Delta t$, então o tensor velocidade de deformação viscoplástica será um tensor ponderado entre os tensores velocidade de deformação viscoplástica no início e no final do incremento, ou seja,

$$\hat{\mathbf{D}}_{\zeta}^{\text{VP}} = (1 - \Phi) \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{VP}} + \Phi \hat{\mathbf{D}}_{t+\Delta t}^{\text{VP}}, \quad \text{com } \Phi \in [0, 1]. \quad (7.19)$$

O parâmetro Φ representa o factor de ponderação para a integração. A expressão (7.19)

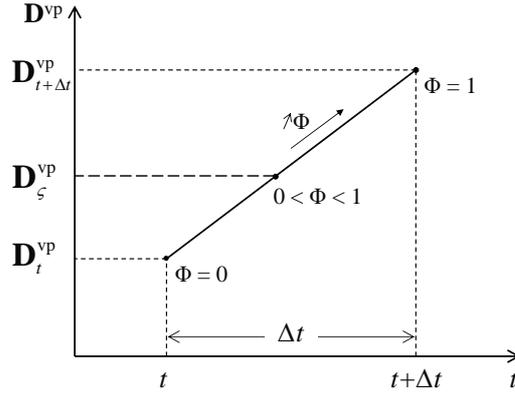


Figura 7.1: Ponderação da avaliação do tensor velocidade de deformação viscoplástica relativamente aos instantes de partida t e de chegada $t + \Delta t$.

está graficamente representada na figura 7.1. A escolha criteriosa do valor de Φ é de importância fulcral para a convergência do método [Teixeira-Dias 99]. O tensor deformação plástica, toma assim, a seguinte expressão:

$$\hat{\epsilon}_{t+\Delta t}^P = \hat{\epsilon}_t^P + \Delta t \left[(1 - \Phi) \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{VP}} + \Phi \hat{\mathbf{D}}_{t+\Delta t}^{\text{VP}} \right]. \quad (7.20)$$

Com o método explícito utiliza-se um módulo elastoplástico tangente. Porém, com o um método de integração semi-implícito utiliza-se um módulo elastoviscoplástico secante. Com o módulo elastoviscoplástico secante garante-se, à partida, uma melhor aproximação à evolução das leis constitutivas [Teixeira-Dias 99, Ortiz 87, Xing and Makinouchi 02]. A figura 7.2 ilustra a utilização dos módulos tangente e secante.

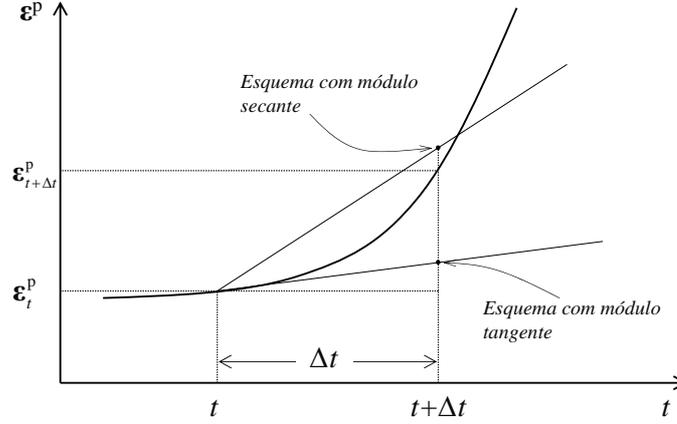


Figura 7.2: Interpretação gráfica dos módulos elastoviscoplasticos tangente e secante.

Incremento de deformação plástica

Recordando a definição do tensor velocidade de deformação viscoplastica,

$$\hat{\mathbf{D}}^{\text{vp}} = \frac{3f}{2\bar{\sigma}} \hat{\boldsymbol{\sigma}}', \quad (7.21)$$

em que $f = f(\bar{\sigma}, s, T) = \hat{\varepsilon}^{\text{p}}$, procede-se ao desenvolvimento de $\mathbf{D}_{t+\Delta t}^{\text{vp}}$ em série de Taylor, truncada à primeira ordem [Teixeira-Dias 99], resultando em

$$\hat{\mathbf{D}}_{t+\Delta t}^{\text{vp}} = \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{vp}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{vp}}}{\partial f} \Delta f + \frac{\partial \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{vp}}}{\partial \bar{\sigma}} \Delta \bar{\sigma} + \frac{\partial \hat{\mathbf{D}}_t^{\text{vp}}}{\partial \hat{\boldsymbol{\sigma}}'} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}'. \quad (7.22)$$

Efectuando as derivadas parciais do tensor $\hat{\mathbf{D}}_t^{\text{vp}}$, tendo em conta a expressão (7.21), chega-se a

$$\hat{\mathbf{D}}_{t+\Delta t}^{\text{vp}} = \frac{3f_t}{2\bar{\sigma}_t} \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t + \frac{3\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \Delta f + \frac{3}{2} f_t \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \left(-\frac{1}{\bar{\sigma}_t^2} \right) \Delta \bar{\sigma} + \frac{3f_t}{2\bar{\sigma}_t} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}'. \quad (7.23)$$

Combinando as expressões (7.23), (7.19) e (7.18) é possível determinar o incremento de deformação plástica, chegando à seguinte expressão:

$$\Delta \hat{\varepsilon}^{\text{p}} = \left[\frac{3f_t}{2\bar{\sigma}_t} \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t + \Phi \left(\frac{3\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \Delta f + \frac{3f_t}{2\bar{\sigma}_t} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}' - \frac{3f_t}{2\bar{\sigma}_t^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \Delta \bar{\sigma} \right) \right] \Delta t. \quad (7.24)$$

Para obter o incremento de deformação unicamente a partir de propriedades da configuração inicial t , é necessário calcular Δf , $\Delta \bar{\sigma}$ e $\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}'$:

1. CÁLCULO DE Δf

O incremento de $f(\bar{\sigma}, s, T)$ é dado por

$$\Delta f = \frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}} \Delta \bar{\sigma} + \frac{\partial f_t}{\partial s} \Delta s + \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T. \quad (7.25)$$

O cálculo das derivadas parciais da função f pode ser encontrado com detalhe em [Teixeira-Dias 99, Haddadi 96].

2. CÁLCULO DE $\Delta\bar{\sigma}$

O cálculo do incremento da tensão equivalente $\Delta\bar{\sigma}$ pode ser realizado através de

$$\Delta\bar{\sigma} = \frac{\partial\bar{\sigma}}{\partial\hat{\sigma}'} : \Delta\hat{\sigma}'. \quad (7.26)$$

Em que

$$\frac{\partial\bar{\sigma}}{\partial\hat{\sigma}'} = \frac{\partial}{\partial\hat{\sigma}'} \left(\sqrt{\frac{3}{2}\hat{\sigma}'_t : \hat{\sigma}'_t} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2}\hat{\sigma}'_t : \hat{\sigma}'_t \right)^{-\frac{1}{2}} (3\hat{\sigma}'_t) = \frac{3}{2\bar{\sigma}_t} \hat{\sigma}'_t. \quad (7.27)$$

Substituindo a expressão anterior em (7.26) resulta:

$$\Delta\bar{\sigma} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\sigma}'. \quad (7.28)$$

3. CÁLCULO DE $\Delta\hat{\sigma}'$

O cálculo do incremento do tensor desviador das tensões na configuração corrotacional, $\Delta\hat{\sigma}'$, é feito a partir da parte desviadora do tensor velocidade de tensão $\dot{\hat{\sigma}}$. Por definição tem-se que

$$\dot{\hat{\sigma}}' = \dot{\hat{\sigma}} - \frac{1}{3}\text{tr}(\dot{\hat{\sigma}})\mathbb{1}. \quad (7.29)$$

Introduzindo o tensor $\dot{\hat{\sigma}}$ na forma da equação (7.2) resulta

$$\dot{\hat{\sigma}}' = 2\mu \left(\hat{\mathbf{D}}' - \hat{\mathbf{D}}^{\text{VP}} \right). \quad (7.30)$$

$\hat{\mathbf{D}}'$ é a parte desviadora do tensor velocidade de deformação total na configuração corrotacional. Integrando a equação (7.30) em todo o intervalo de tempo Δt , obtém-se o incremento do tensor desviador das tensões. Isto é,

$$\Delta\hat{\sigma}' = 2\mu \left(\Delta\hat{\varepsilon}' - \Delta\hat{\varepsilon}^{\text{P}} \right), \quad (7.31)$$

onde $\Delta\hat{\varepsilon}' = \Delta\hat{\varepsilon} - 1/3\text{tr}(\Delta\hat{\varepsilon})$ é a parte desviadora do incremento de deformação $\Delta\hat{\varepsilon}$ (definido na relação (7.4)).

Substituindo os incrementos de tensão equivalente $\Delta\bar{\sigma}$ e da velocidade de deformação plástica equivalente Δf na relação do incremento de deformação (equação (7.24)) resulta:

$$\Delta\hat{\varepsilon}^{\text{P}} = \Delta\bar{\varepsilon}^{\text{P}} \left(\frac{3\hat{\sigma}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \right) + \frac{3}{2h_1} \left[\Delta\hat{\sigma}' - (\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\sigma}') \frac{3\hat{\sigma}'_t}{2\bar{\sigma}_t^2} \right], \quad (7.32)$$

em que

$$h_1 = \frac{\bar{\sigma}_t}{\Phi f_t \Delta t}. \quad (7.33)$$

Por outro lado, o incremento de deformação plástica equivalente é dado por

$$\Delta\bar{\varepsilon}^{\text{P}} = \left[f_t + \Phi \left(\frac{\partial f_t}{\partial\bar{\sigma}} \Delta\bar{\sigma} + \frac{\partial f_t}{\partial s} \Delta s + \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T \right) \right] \Delta t. \quad (7.34)$$

Porém, deve notar-se que efectuando o produto entre o tensor desviador das tensões $\hat{\sigma}'_t$ e o incremento de deformação plástica $\Delta\hat{\varepsilon}^P$, dado pela expressão (7.32), resulta

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}^P &= \Delta\bar{\varepsilon}^P \left(\frac{3\hat{\sigma}'_t : \hat{\sigma}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \right) \\ &+ \frac{3}{2h_1} \left[\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\sigma}' - (\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\sigma}') \frac{3\hat{\sigma}'_t : \hat{\sigma}'_t}{2\bar{\sigma}_t^2} \right], \end{aligned} \quad (7.35)$$

que, simplificando e introduzindo a definição de tensão equivalente, leva a

$$\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}^P = \bar{\sigma}_t \Delta\bar{\varepsilon}^P. \quad (7.36)$$

Combinando as relações (7.28) e (7.31) chega-se à seguinte expressão para o incremento de tensão equivalente:

$$\Delta\bar{\sigma} = \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}' - \frac{3\mu}{\bar{\sigma}} \hat{\sigma}' : \Delta\hat{\varepsilon}^P. \quad (7.37)$$

Depois de substituído o tensor desviador das tensões $\hat{\sigma}'_t$ resulta em:

$$\Delta\bar{\sigma} = \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \hat{\sigma}' : \Delta\hat{\varepsilon}' - 3\mu \Delta\bar{\varepsilon}^P. \quad (7.38)$$

Efectuando o produto escalar

$$\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}' = \left[\hat{\sigma}_t - \frac{1}{3} \text{tr}(\hat{\sigma}) \mathbf{1} \right] : \left[\Delta\hat{\varepsilon} - \frac{1}{3} \text{tr}(\Delta\hat{\varepsilon}) \mathbf{1} \right], \quad (7.39)$$

e após alguma simplificação, obtém-se

$$\hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}' = \hat{\sigma}_t : \Delta\hat{\varepsilon} - \frac{1}{3} \text{tr}(\hat{\sigma}_t) \mathbf{1} : \Delta\hat{\varepsilon} = \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon}. \quad (7.40)$$

Desta forma, o incremento de tensão equivalente (equação (7.38)) é dado finalmente por

$$\Delta\bar{\sigma} = \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon} - 3\mu \Delta\bar{\varepsilon}^P. \quad (7.41)$$

Substituindo o incremento de tensão equivalente $\Delta\bar{\sigma}$ na expressão do incremento de deformação plástica equivalente (equação (7.34)), e recordando que

$$\Delta s = \Delta\bar{\varepsilon}^P h, \quad (7.42)$$

então

$$\begin{aligned} \Delta\bar{\varepsilon}^P &= \left\{ f_t + \Phi \left[\frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}_t} \left(\frac{3\mu}{\bar{\sigma}} \hat{\sigma}'_t : \Delta\hat{\varepsilon} - 3\mu \Delta\bar{\varepsilon}^P \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\partial f_t}{\partial s} h_t \Delta\bar{\varepsilon}^P + \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T \right] \right\} \Delta t. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Reorganizando a expressão anterior e após alguma simplificação algébrica, chega-se a [Haddadi 96, Teixeira-Dias 99]:

$$\Delta\bar{\varepsilon}^P = \frac{\Delta t}{1 + \vartheta_t} \left(f_t + \Phi \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}} \hat{\sigma}' : \Delta\hat{\varepsilon} + \Phi \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T \right), \quad (7.44)$$

onde o escalar ϑ_t é dado por:

$$\vartheta_t = \Phi \frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}} G_t \Delta T, \quad (7.45)$$

com

$$G_t = 3\mu - h_t \left(\frac{\partial f_t}{\partial s} / \frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}} \right). \quad (7.46)$$

Substituindo o incremento do tensor desviador das tensões $\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}'$, dado em (7.31), na equação (7.32), obtém-se o incremento de deformação plástica

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^P = \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^P \left(\frac{3\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \right) + \frac{3}{2h_1} \left[2\mu (\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^P) - \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t : \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}') \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \right]. \quad (7.47)$$

Por fim, a forma final do incremento de deformação plástica na configuração ortotrópica é obtida após a substituição de $\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$ na equação (7.47). Após algum rearranjo algébrico, o incremento de deformação plástica é dado por:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^P &= \frac{3\bar{\mu}}{\mu} \left(1 + \frac{3\mu}{h_1} \right) \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{2\bar{\sigma}_t} \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^P + \frac{3\bar{\mu}}{h_1} \left[\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \right] \\ &\quad - \frac{9\bar{\mu}}{h_1 \bar{\sigma}_t^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t : \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t, \end{aligned} \quad (7.48)$$

em que

$$\bar{\mu}_t = \frac{\mu h_1}{h_1 + 3\mu}. \quad (7.49)$$

7.2.4 Módulo elastoviscoplastico secante

Nesta secção procede-se à integração do modelo de comportamento ao longo do incremento de tempo Δt . O modelo constitutivo, anteriormente definido pela expressão (7.2) no referencial corrotacional é dado por

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = 2\mu \left(\hat{\mathbf{D}} - \hat{\mathbf{D}}^{\text{vp}} \right) + \left[\left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr}(\hat{\mathbf{D}}) - 3\kappa\alpha^* \dot{T} \right] \mathbf{1}. \quad (7.50)$$

Linearizando a equação anterior ao longo do intervalo Δt e recorrendo às definições (7.4) e (7.5), obtém-se:

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu (\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^P) + \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr}(\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \mathbf{1} - 3\kappa\alpha^* (\Delta T) \mathbf{1}. \quad (7.51)$$

Ora substituindo o incremento de deformação plástica $\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^P$, dado pela equação (7.48), obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= 2\mu \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - 2\bar{\mu} \left(\frac{3\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{2\bar{\sigma}_t} + \frac{9\bar{\mu}_t}{2h_1} \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t}{\bar{\sigma}_t} \right) \\ &\quad + \left[f_t + \Phi \left(\frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t : \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \right) \frac{\partial f_t}{\partial \bar{\sigma}} + \Phi \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T \right] \frac{\Delta t}{1 + \vartheta_t} \\ &\quad - 2\bar{\mu}_t \frac{3\mu}{h_1} \left[\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \right] + 2\bar{\mu} \frac{9\mu}{2h_1 \bar{\sigma}_t^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t : \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \\ &\quad + \left(\kappa + \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr}(\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \mathbf{1} - 3\kappa\alpha^* (\Delta T) \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

É possível reescrever o incremento de tensão na forma simplificada seguinte:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= 2\mu \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\lambda} \text{tr}(\Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \mathbf{1} - K_1 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t : \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \\ &\quad - K_2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t - 3\kappa \alpha^*(\Delta T) \mathbf{1} \end{aligned} \quad (7.53)$$

em que

$$K_1 = \frac{3}{\bar{\sigma}_t^2} \left[\frac{\vartheta_t}{1 + \vartheta_t} \frac{3\mu^2}{G_t} - (\mu - \bar{\mu}_t) \right], \quad (7.54)$$

$$K_2 = \frac{3\mu}{\bar{\sigma}_t} \left(f_t + \Phi \frac{\partial f_t}{\partial T} \Delta T \right) \frac{\Delta t}{1 + \vartheta_t} \quad (7.55)$$

e

$$\bar{\lambda} = \kappa - \frac{2}{3} \bar{\mu}_t. \quad (7.56)$$

O módulo elastoviscoplastico secante $\hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}}$ obtém-se a partir de um rearranjo da equação (7.53) para a seguinte forma final:

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} : \Delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - K_2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t - 3\kappa \alpha^*(\Delta T) \mathbf{1}, \quad (7.57)$$

em que

$$\hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} = \hat{\mathbf{C}}_t^{\text{mod}} - K_1 \hat{\boldsymbol{\Theta}}'_t. \quad (7.58)$$

O tensor $\hat{\mathbf{C}}_t^{\text{mod}}$ é o tensor dos coeficientes de Lamé modificados, no instante de tempo t . $\hat{\boldsymbol{\Theta}}'_t$ é o tensor que resulta do produto cruzado do tensor desviador das tensões, ou seja,

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}}'_t = \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \otimes (\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t)^{\text{T}}. \quad (7.59)$$

Em notação indicial, o módulo elastoviscoplastico secante é dado por

$$\hat{C}_{ijkl}^{\text{sec}} = \bar{\lambda}_t \delta_{ij} \delta_{kl} + \bar{\mu}_t (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) - k_1 \hat{\sigma}'_{ij} \hat{\sigma}'_{kl}. \quad (7.60)$$

Na expressão anterior, δ é o símbolo de Kronecker. No referencial global, o módulo elastoviscoplastico secante é expresso através de

$$\mathbf{C}^{\text{sec}} = \mathbf{R} \left(\mathbf{R} \hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \mathbf{R}^{\text{T}} \right) \mathbf{R}^{\text{T}}. \quad (7.61)$$

7.3 Equações de Equilíbrio e Condições de Fronteira

Supondo que, num determinado instante t , um sólido deformável, submetido a forças exteriores volúmicas e/ou de superfície, ocupa um domínio Ω de fronteira Σ . As equações de equilíbrio correspondentes, que conduzem à formulação geral do problema, são:

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \rho \mathbf{a} \quad \text{em } \Omega. \quad (7.62)$$

\mathbf{f} é o vector das forças volúmicas por unidade de massa (gravidade) e ρ a densidade. Na expressão (7.62), \mathbf{a} é o vector aceleração e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões.

Ao considerar as forças volúmicas e de inércia na equação de equilíbrio conduz a uma formulação dinâmica do problema [Alves 03]. No entanto, uma vez que neste trabalho

se referem unicamente processos considerados quase-estáticos, as forças volúmicas \mathbf{f} e os termos de inércia $\rho\mathbf{a}$ podem ser desprezados em relação à divergência de $\boldsymbol{\sigma}$. Logo, as equações de equilíbrio podem reduzir-se a :

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega. \quad (7.63)$$

No instante t , a superfície Σ do sólido deformável Ω pode ser decomposta em três partes, de tal forma que

$$\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_3. \quad (7.64)$$

Sobre a fronteira Σ_1 são conhecidos os vectores de tensão \mathbf{t} , sobre Σ_2 são conhecidos os vectores velocidade de \mathbf{v} e sobre a fronteira Σ_3 são conhecidos quer os vectores velocidade quer os vectores de tensão. Matematicamente as condições de fronteira aplicadas na superfície do sólido deformável Ω escrevem-se da seguinte forma:

$$\mathbf{t} = \mathbf{t}^* \quad \text{sobre } \Sigma_1, \quad (7.65)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* \quad \text{sobre } \Sigma_2, \quad (7.66)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* \wedge \mathbf{t} = \mathbf{t}^* \quad \text{sobre } \Sigma_3. \quad (7.67)$$

\mathbf{t}^* e \mathbf{v}^* referem-se ao vector de tensão de Cauchy prescrito e aos campos de velocidade prescrita, respectivamente. Sendo \mathbf{n} o vector unitário da normal exterior a Σ em qualquer ponto, tem-se que:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}. \quad (7.68)$$

Num problema termomecânico em grandes deformações, a fronteira Σ , bem como as suas partições Σ_1 , Σ_2 e Σ_3 , poderão variar com o tempo.

7.4 Formulação Variacional do Problema

A formulação variacional do problema anteriormente colocado permite interligar este último com o método dos elementos finitos, que o resolve de forma aproximada. Este problema é satisfeito se e só se o princípio das potências virtuais for verificado.

7.4.1 Princípio das potências virtuais

Tomando em consideração o equilíbrio do corpo deformável Ω , bem como as condições de fronteira definidas nas expressões (7.63) a (7.65), o princípio das potências virtuais escreve-se como

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta\mathbf{D} \, d\Omega = \int_{\Sigma_1} \mathbf{t}^* \delta\mathbf{v} \, d\Sigma + \int_{\Sigma_3} \mathbf{t}^* \delta\mathbf{v} \, d\Sigma \quad (7.69)$$

qualquer que seja o campo de velocidades virtuais $\delta\mathbf{v}$ definido sobre Ω . Deve ainda verificar-se que

$$\delta\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad \text{sobre } \Sigma_2 \cup \Sigma_3. \quad (7.70)$$

O tensor velocidade de deformação virtual $\delta\mathbf{D}$ representa a parte simétrica do gradiente campo de velocidades virtuais $\delta\mathbf{v}$, isto é,

$$\delta\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\delta\mathbf{L} + (\delta\mathbf{L})^T] \quad \text{com} \quad \delta\mathbf{L} = \frac{\partial(\delta\mathbf{v})}{\partial\mathbf{x}}. \quad (7.71)$$

A formulação do princípio (7.69) designa-se por forma fraca uma vez que se diminui o grau de diferenciabilidade imposto ao campo de velocidades \mathbf{v} exigido na formulação diferencial do problema [Alves 03].

Uma vez que as integrações em (7.69) são realizadas para um instante corrente t , a equação anterior representa a forma euleriana do princípio das potências virtuais. De um modo geral, a forma euleriana utiliza-se em problemas estacionários, em que o material ocupa um domínio espacial fixo. Contudo, em grandes transformações, o princípio das potências virtuais pode ser escrito de duas outras formas descritas nos parágrafos seguintes:

1. Formulação lagrangeana total: o princípio variacional é definido em relação à configuração inicial C_0 , que corresponde ao instante inicial do processo, $t = t_0$. Todas as variáveis estáticas e cinemáticas são referentes à configuração inicial, ou seja, são respeitantes a coordenadas lagrangeanas. Geralmente, esta formulação aplica-se a problemas não-estacionários e nos casos em que as condições de fronteira se mantêm inalteradas.
2. Formulação lagrangeana reactualizada: neste caso a configuração de referência C_t corresponde à configuração no instante t para o intervalo de tempo $[t, t + \Delta t]$. Nesta configuração, todas as variáveis são referentes à última configuração calculada e respeitantes a coordenadas eulerianas. Geralmente, a forma lagrangeana reactualizada é aplicada aos problemas não-estacionários com evolução continuada de condições de fronteira.

Mesmo tratando-se de formulações sempre aplicáveis e formalmente equivalentes, o tipo de problema condicionará as dificuldades inerentes a cada uma. A formulação lagrangeana reactualizada implica, naturalmente, um custo computacional mais elevado do que a formulação lagrangeana total. No entanto, a formulação utilizada será a primeira, pois esta permite que as condições de fronteira evoluam ao longo do cálculo.

Através da formulação lagrangeana reactualizada, se os incrementos de tempo considerados forem suficientemente pequenos, o modelo constitutivo pode ser linearizado de uma forma simples [Cao 90, Menezes 94]. Adicionalmente, resulta ainda provável que, no decorrer desse mesmo incremento, as condições de fronteira se mantenham inalteráveis.

7.4.2 Formulação lagrangeana reactualizada

Para problemas fortemente não-lineares, e na utilização de formulação lagrangeana reactualizada, é aconselhável a utilização dos tensores de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ e de deformação $\boldsymbol{\varepsilon}$ em preterimento do tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e do tensor de deformação de Green-Lagrange [Bathe 96]. Porém, estes últimos são correcta e vulgarmente utilizados na definição do princípio das potências virtuais. O segundo tensor de tensão de Piola-kirchhoff não possui significado físico bem definido [Bathe 96]. Assim, deve calcular-se o tensor das tensões de Cauchy. No entanto, o tensor escolhido tem de permanecer invariante com a translação e/ou rotação do corpo rígido. Esta condição é naturalmente satisfeita pelo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e pelo tensor de deformação de Green-Lagrange.

Na forma lagrangeana reactualizada, a configuração da estrutura no instante t é considerada como configuração de referência para o intervalo de tempo $[t, t + \Delta t]$. Posteriormente, no final do incremento Δt , a configuração corrente é reactualizada e tomada como configuração de referência para o incremento seguinte. Em cada incremento de tempo o princípio

variacional (equação (7.62)) é reescrito na configuração de referência C_t , considerando que as condições de fronteira permanecem inalteradas, ou seja:

$$\int_{\Omega(C_t)} \boldsymbol{\sigma}_t : \delta \mathbf{D} \, d\Omega = \int_{\Sigma_1(C_t)} \mathbf{t}_t^* \delta \mathbf{v} \, d\Sigma + \int_{\Sigma_3(C_t)} \mathbf{t}_t^* \delta \mathbf{v} \, d\Sigma, \quad (7.72)$$

sendo $\Omega(C_t)$ e $\Sigma_i(C_t)$, o domínio espacial e fronteira ocupados pelo corpo na configuração C_t , respectivamente. Na expressão anterior, \mathbf{t}_t^* designa o vector de tensão nominal prescrito e $\boldsymbol{\sigma}_t$ é o tensor das tensões de Cauchy determinados no início do incremento de tempo corrente.

7.4.3 Discretização do princípio das potências virtuais

A linearização do princípio das potências virtuais, definido pela equação (7.72), pode ser feita de forma simples. Se os efeitos das rotações forem eliminados nas grandezas tensoriais, pode recorrer-se ao procedimento de linearização das pequenas deformações (ver capítulo 4). Desta forma, linearizando o princípio (7.72) entre os instantes de tempo t e $t + \Delta t$ e considerando que Δt é muito pequeno, obtém-se a seguinte expressão:

$$\int_{\Omega} \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}_t : \delta \mathbf{D} \, d\Omega = \int_{\Sigma_1 \cup \Sigma_3} \mathbf{s}_t^* \delta \mathbf{v} \, d\Sigma, \quad (7.73)$$

em que $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_t$ representa o tensor das tensões após a eliminação dos efeitos de rotação, ou seja, na configuração corrotacional. \mathbf{s}_t^* é o vector tensão nominal prescrito. O campo virtual de velocidades de deformação $\delta \mathbf{D}$, é definido da seguinte forma:

$$\delta \mathbf{D} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial(\delta \mathbf{v})}{\partial \mathbf{x}_0} + \left[\frac{\partial(\delta \mathbf{v})}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \right\}, \quad (7.74)$$

ou de forma mais compacta:

$$\delta \mathbf{D} = [\text{grad}(\delta \mathbf{v})]^S. \quad (7.75)$$

Sendo o corpo deformável Ω discretizado num número finito de elementos sólidos — a malha de elementos finitos — o campo de velocidades virtuais $\delta \mathbf{v}$ é discretizado de acordo com

$$\delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \sum_{A=1}^{NN} \mathbf{N}_A(\mathbf{x}) \delta \mathbf{v}_A(t), \quad (7.76)$$

em que NN é o número total de nós, $\mathbf{N}_A(\mathbf{x})$ são as funções de forma ou de interpolação e $\delta \mathbf{v}_A$ são as velocidades virtuais $\delta \mathbf{v}$ calculadas nos nós da malha. Substituindo o campo de velocidades virtuais na relação (7.75) obtém-se

$$\delta \mathbf{D} = \left\{ \text{grad} \left[\sum_{A=1}^{NN} \mathbf{N}_A(\mathbf{x}) \delta \mathbf{v}_A(t) \right] \right\}^S. \quad (7.77)$$

Aplicando as propriedades matemáticas do operador vectorial gradiente às funções de forma $\mathbf{N}_A(\mathbf{x})$ temos

$$\delta \mathbf{D} = \sum_{A=1}^{NN} \mathbf{B}_A(\mathbf{x}) \delta \mathbf{v}_A(t), \quad (7.78)$$

em que $\mathbf{B}_A(\mathbf{x})$ é a matriz das derivadas das funções de forma para um determinado elemento. Substituindo o campo de velocidades virtuais $\delta\mathbf{v}$ e o campo virtual de velocidades de deformação $\delta\mathbf{D}$ na expressão do princípio das potências virtuais (equação (7.73)), resulta

$$\sum_{A=1}^{NN} \delta\mathbf{v}_A^T \int_{\Omega} \mathbf{B}_A^T \Delta\hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\Omega = \sum_{A=1}^{NN} \delta\mathbf{v}_A^T \int_{\Sigma_1 \cup \Sigma_3} \mathbf{N}_A^T \dot{\mathbf{s}}_t^* \, d\Sigma. \quad (7.79)$$

Tomando como válido o princípio das potências virtuais para qualquer que seja o campo de velocidades virtuais $\delta\mathbf{v}_A$, e simplificando a escrita, teremos:

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}_A^T \Delta\hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\Omega = \int_{\Sigma^*} \mathbf{N}_A^T \Delta\mathbf{f} \, d\Sigma + \mathbf{T}_s \quad \text{com } A = 1, \dots, NN. \quad (7.80)$$

\mathbf{f} representa o vector das forças e $\Sigma^* = \Sigma_1 \cup \Sigma_3$. \mathbf{T}_s é uma carga pontual. Este caso dá-se quando a área da superfície de aplicação e integração se resume a um único nó.

7.5 Cálculos Elementares

Após a subdivisão do domínio deformável Ω num número finito de elementos, avaliam-se as equações ao nível dos subdomínios elementares. Nesta secção apresentam-se as equações elementares que resultam da discretização espacial da forma linearizada do princípio das potências virtuais ao nível elementar Ω^e .

Sabendo que o incremento de tensão na configuração corrotacional, anteriormente definido pela expressão (7.57), é dado por

$$\Delta\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \Delta\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - K_2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t - 3\kappa\alpha^*(\Delta T)\mathbf{1}, \quad (7.81)$$

e introduzido no princípio das potências virtuais linearizado (equação (7.80)), obtém-se

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \left[\hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \Delta\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - K_2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t - 3\kappa\alpha^*(\Delta T)\mathbf{1} \right] \, d\Omega = \int_{\Sigma^e} \mathbf{N}_a^T \Delta\mathbf{f} \, d\Sigma + \mathbf{T}_s. \quad (7.82)$$

Ora, por definição, o incremento de deformação é

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \text{grad}(\Delta\mathbf{u}). \quad (7.83)$$

Discretizando o campo incremental de deformações resulta em

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{b=1}^{NE} \mathbf{B}_b \Delta\mathbf{u}_b, \quad (7.84)$$

onde NE designa o número de nós por elemento. Após a rotação das deformações incrementais do referencial global para o referencial corrotacional (livre dos efeitos de rotações), os incrementos de deformação elementares podem ser substituídos na equação (7.82), resultando em

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \left[\hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \left(\sum_{b=1}^{NE} \mathbf{B}_b \Delta\mathbf{u}_b \right) - K_2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t - 3\kappa\alpha^*(\Delta T)\mathbf{1} \right] \, d\Omega = \int_{\Sigma^e} \mathbf{N}_a^T \Delta\mathbf{f} \, d\Sigma + \mathbf{T}_s. \quad (7.85)$$

Após algum desenvolvimento matemático, a expressão (7.85), pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \sum_{b=1}^{NE} \left(\int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \mathbf{B}_b \, d\Omega \right) \Delta \mathbf{u}_b - K_2 \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \, d\Omega - 3\kappa\alpha^*(\Delta T) \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \mathbf{1} \, d\Omega = \quad (7.86) \\ = \int_{\Sigma^e} \mathbf{N}_a^T \Delta \mathbf{f} \, d\Sigma + \mathbf{T}_s. \end{aligned}$$

A equação anterior pode ainda ser rescrita na forma matricial clássica do método dos elementos finitos, ou seja,

$$\sum_{b=1}^{NE} \mathbf{k}_{ab}^e \Delta \mathbf{u}_b = \Delta \mathbf{f}_a^e, \quad (7.87)$$

onde \mathbf{k}_{ab}^e é a matriz rigidez elementar definida como

$$\mathbf{k}_{ab}^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} \mathbf{B}_b \, d\Omega. \quad (7.88)$$

$\Delta \mathbf{f}^e$ é o vector de forças nodais do elemento, dado por:

$$\Delta \mathbf{f}_a^e = K_2 \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_t \, d\Omega + 3\kappa\alpha^*(\Delta T) \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_a^T \mathbf{1} \, d\Omega + \int_{\Sigma^e} \mathbf{N}_a^T \Delta \mathbf{f} \, d\Sigma + \mathbf{T}_s. \quad (7.89)$$

7.5.1 Sistema global de equações

O sistema global de equações é constituído pela agregação ou *assemblagem* de todas as equações elementares, definidas na forma da expressão matricial (7.87). Este sistema pode ser definido na forma matricial seguinte:

$$\sum_{B=1}^{NN} \mathbf{K}_{AB} \Delta \mathbf{u}_B = \Delta \mathbf{F}_A, \quad (7.90)$$

em que $\Delta \mathbf{u}_B$ e $\Delta \mathbf{F}_A$ são os vectores dos deslocamentos incrementais nodais e das forças incrementais nodais correspondentes ao incremento de tempo Δt . \mathbf{K}_{AB} é a matriz rigidez global. A e B traduzem a numeração global dos nós e NN é o número total dos nós.

Capítulo 8

Problema Térmico - Discretização e Integração Temporal

Apresentam-se as relações matemáticas discretizadas e os métodos de integração temporal para o problema térmico. Descreve-se pormenorizadamente o algoritmo global térmico do tipo previsão-correcção. Enquanto que a etapa de previsão utiliza a integração semi-implícita, a fase de correcção utiliza um esquema implícito baseado no método de Newton-Raphson. Discutem-se a convergência e estabilidade dos algoritmos desenvolvidos.

8.1 Introdução

Em muitos problemas de engenharia é necessário realizar análises que envolvem transferência de calor. Na maioria desses problemas não é exequível recorrer a abordagens analíticas devido às não-linearidades de comportamento, às complexidades quer geométricas quer resultantes das condições de fronteira. O desenvolvimento da simulação, aliada à crescente evolução da velocidade de computação, torna estes problemas resolúveis numericamente. Na verdade, o método dos elementos finitos, com a sua flexibilidade em lidar com geometrias complexas, constitui a abordagem ideal para determinar a solução de problemas complexos de transmissão de calor.

Contrariamente ao caso mecânico, analisado no capítulo anterior, é necessário que o modelo térmico tenha em conta os efeitos inerciais devido às propriedades capacitivas dos materiais. Consequentemente, o problema térmico é inerentemente dinâmico. Apesar dos métodos explícitos serem mais utilizados em modelos dinâmicos e conduzirem a algoritmos rápidos, os métodos implícitos garantem o equilíbrio do sistema em qualquer instante do cálculo [Menezes 94]. Nos esquemas implícitos, o equilíbrio é assegurado por um algoritmo iterativo próprio, tendo em conta a configuração de chegada $t + \Delta t$.

No caso de acoplamento termomecânico, o problema térmico apresenta-se menos exigente do que o problema mecânico¹. As não-linearidades presentes no problema são mais simples de analisar e modelar. Não obstante, os métodos numéricos utilizados devem ser suficientemente robustos, para suportar as não-linearidades existentes, e eficientes, para que conduzam a uma relação qualidade/preço aceitável. Deste modo, o algoritmo implícito parece o mais adequado para a simulação de problemas térmicos.

Os algoritmos implícitos não estão garantidos contra eventuais instabilidades numéricas, podendo mesmo ocorrer divergência no esquema iterativo. Geralmente, esta aparece associada a grandes modificações nas condições de fronteira que podem ocorrer num determinado incremento. No problema térmico este inconveniente é minimizado, reforçando a escolha de um esquema implícito.

Tendo em conta a estabilidade numérica do problema térmico, o tamanho do incremento de tempo deve ser bem ponderado. A maioria dos programas de simulação de cálculo implícito utiliza um incremento de tamanho fixo, determinado no início do cálculo. Este incremento, definido pelo utilizador, poderá ser demasiadamente grande e responsável pela divergência do resultado. Porém, também poderá ser excessivamente pequeno não assegurando um tempo de cálculo razoável. A utilização de um ciclo prévio, chamado de *Previsão*, poderá seleccionar um tamanho de incremento óptimo e oferecer uma solução aproximada ao ciclo iterativo implícito. Desta forma, a convergência deste último torna-se muito mais rápida.

Os benefícios de tempo de cálculo acontecem quando o tempo ganho na diminuição de iterações for superior ao tempo gasto na *Previsão*. Para que o ciclo de *previsão* seja computacionalmente económico, este deverá ser explícito ou semi-implícito.

No capítulo 6 a equação geral da condução de calor e a equação da evolução da temperatura foram determinadas com base nos princípios da termodinâmica. Neste capítulo, introduz-se a formulação variacional do problema e discretizam-se as equações pelo método dos elementos finitos. O método das diferenças finitas será utilizado para resolver o problema transiente. Os diversos algoritmos e esquemas de integração temporal serão discutidos, bem como a estabilidade numérica e a convergência associada a cada um deles.

8.2 Determinação da Equação Discretizada

A equação geral de calor do problema térmico, definida na secção 6.2, é dada por

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \text{div} [\mathbf{k} \text{grad}(T)] - Q = 0 \quad (8.1)$$

onde \mathbf{k} é o tensor condutividade térmica do sólido, ρ e c representam a massa e o calor específicos, respectivamente. $\text{grad}(T)$ é o gradiente do campo de temperatura. $Q = q_i + q_t$ é o termo geração de calor. q_i e q_t representam a geração de calor por deformação plástica e qualquer outra fonte de calor, respectivamente.

As trocas de calor nas fronteiras dão-se por convecção, radiação e/ou contacto térmico.

¹Não existem modificações abruptas das condições de fronteira num determinado incremento.

Estes termos são dados por

$$q_c = -\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h_c(T - T_\infty) \quad \text{em } \Gamma_s, \quad (8.2)$$

$$q_r = -\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \kappa_r(T - T_r) \quad \text{em } \Gamma_s, \quad (8.3)$$

$$q_{\text{cont}} = -\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h_{\text{cont}}(T_{s_1} - T_{s_2}) \quad \text{em } \Gamma_{st}, \quad (8.4)$$

respectivamente. Adicionalmente, a solução do problema térmico pode incluir condições de fronteira de temperatura e fluxos de calor prescritos, definidos por

$$T = T_p \quad \text{em } \Gamma_p, \quad (8.5)$$

$$q = -\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = -q_p \quad \text{em } \Gamma_q. \quad (8.6)$$

Par resolver o problema pelo método dos elementos finitos, é necessário discretizar a equação (8.1). A equação discretizada pode ser obtida por um método variacional ou por um método de resíduos ponderados. De entre estes, destacam-se o método de Galerkin e o método dos mínimos quadrados [Vaz Jr. 00]. Para a equação geral de calor, os métodos citados anteriormente são quase equivalentes. Neste trabalho, utiliza-se o método dos resíduos ponderados de Galerkin para determinar a equação discretizada.

Para aplicar o método clássico de Galerkin é necessária a forma integral ou forma fraca da equação geral de calor (equação (8.1)). Este método estabelece que o integral desta equação sobre o domínio Ω é nulo. Por sua vez, este integral é aproximado pelo integral no domínio de cada elemento, isto é,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} \delta T \left\{ \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \text{div} [\mathbf{k} \text{grad}(T)] - Q \right\} d\Omega + \int_{\Gamma_q} \overline{\delta T} \left(\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} - q_p \right) d\Gamma_q \\ + \int_{\Gamma_s} \overline{\delta T} \left[\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + h_c(T - T_\infty) + \kappa_r(T - T_r) \right] d\Gamma_s = 0. \end{aligned} \quad (8.7)$$

δT e $\overline{\delta T}$ são incrementos de temperatura arbitrários de modo que a equação (8.7) é satisfeita em todo o domínio.

O primeiro termo da equação (8.7) deve ser integrado por partes recorrendo ao teorema de Green, de onde

$$\int_{\Omega^e} \delta T \text{div} [\mathbf{k} \text{grad}(T)] d\Omega = - \int_{\Omega^e} \text{grad}(\delta T) \mathbf{k} \text{grad}(T) d\Omega + \oint \delta T \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma. \quad (8.8)$$

um vez que a fronteira total de Ω é dada por $\Gamma = \Gamma_q + \Gamma_s + \Gamma_p$, tem-se

$$\oint \delta T \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma = \int_{\Gamma_q} \delta T \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \delta T \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma + \int_{\Gamma_p} \delta T \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma. \quad (8.9)$$

Pelo método de Galerkin, e sem perda de generalidade, é possível considerar que $\delta T \equiv -\overline{\delta T}$.

Substituindo a equação (8.8) na equação (8.7) resulta:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} \delta T \rho c \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega^e} \text{grad}(\delta T) \mathbf{k} \text{grad}(\delta T) d\Omega \\ & - \int_{\Omega^e} \delta T Q d\Omega + \int_{\Gamma_s} \delta T [h_c(T - T_\infty) + \kappa_r(T - T_r)] d\Gamma \\ & - \int_{\Gamma_q} \delta T q_p d\Gamma = 0. \end{aligned} \quad (8.10)$$

Reorganizando a equação anterior algebricamente, chega-se a

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} \delta T \rho c \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega^e} \text{grad}(\delta T) \mathbf{k} \text{grad}(\delta T) d\Omega \\ & + \int_{\Gamma_s} \delta T h_c T d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \delta T \kappa_r T d\Gamma - \int_{\Gamma_q} \delta T q_p d\Gamma = \\ & = \int_{\Omega^e} \delta T Q d\Omega + \int_{\Gamma_s} \delta T h_c T_\infty d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \delta T \kappa_r T_r d\Gamma. \end{aligned} \quad (8.11)$$

A discretização da equação anterior é realizada quando se assume que

$$\delta T = N_i \quad \text{com} \quad i = 1, \dots, NE, \quad (8.12)$$

onde N_i são as funções de forma ou de interpolação do elemento e NE é o número de nós do elemento. Deste modo, na forma matricial, a discretização da equação (8.11) resulta em

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + (\mathbf{k}_k + \mathbf{k}_c) \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{f}. \quad (8.13)$$

\mathbf{C} é a matriz capacitância, \mathbf{k}_k é a matriz de condutividade térmica e \mathbf{k}_c é a matriz rigidez de convecção/radiação. \mathbf{Q} e \mathbf{f} são os vectores associados aos termos fonte de calor, a fluxos e aos termos conhecidos de radiação/convecção, associados às temperaturas exteriores. Estas matrizes são dadas por:

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \rho c \mathbf{N} d\Omega; \quad (8.14)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_k + \mathbf{k}_c = \int_{\Omega^e} \mathbf{M}^T \mathbf{k} \mathbf{M} d\Omega + \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T h_c \mathbf{N} d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T \kappa \mathbf{N} d\Gamma; \quad (8.15)$$

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T Q d\Omega = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T q_i d\Omega + \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T q_t d\Omega + \sum_i \mathbf{P}; \quad (8.16)$$

$$\mathbf{f} = \int_{\Gamma_q} \mathbf{N}^T q d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T h_c T_\infty d\Gamma + \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T \kappa T_r d\Gamma. \quad (8.17)$$

\mathbf{M} é a matriz das derivadas das funções de forma do elemento, isto é,

$$\mathbf{M} = \text{grad} \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (8.18)$$

O vector \mathbf{Q} contém o vector das cargas pontuais \mathbf{P} e engloba as perdas e ganhos de calor por contacto térmico. \mathbf{Q} é definido detalhadamente na expressão seguinte:

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T [\xi (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p) + \psi (T)] d\Omega + \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T q_t d\Omega + \int_{\Gamma_{st}} \mathbf{N}^T h_{cont} (T_{s_1} - T_{s_2}) d\Gamma + \sum_i \mathbf{P}, \quad (8.19)$$

onde o primeiro termo representa a contribuição do calor gerado por deformação plástica e o terceiro termo a troca de calor por contacto térmico com outro sólido à temperatura T_{s_1} .

A matriz capacitância, \mathbf{C} , pode ser discretizada na forma consistente ou diagonalizada. A diagonalização de \mathbf{C} é necessária para garantir a estabilidade numérica e não violar a realidade física do problema em determinados esquemas de integração temporal.

8.3 Integração Temporal do Problema Térmico

Na análise da transmissão de calor em regime transiente, assim como em problemas com acoplamento termomecânico, os efeitos capacitivos do calor assumem grande importância. O termo capacitivo da equação (8.13) deve ser integrado temporalmente. O sucesso da análise numérica dos efeitos capacitivos dependem da integração temporal definida. Existem diversos métodos de integração temporal baseados num ou mais incrementos/passos de tempo [Zienkiewicz e Taylor 91]. Neste trabalho, adoptam-se métodos baseados num só passo de tempo. A solução numérica gerada para problemas dinâmicos, onde se inserem os problemas térmicos transientes, utiliza, geralmente, uma aproximação de diferenças finitas no domínio temporal.

Seguindo o mesmo procedimento adoptado no problema mecânico, aplica-se, como primeira aproximação, um método de integração temporal semi-implícito. A solução semi-implícita pode ser obtida pelo método dos resíduos ponderados.

8.3.1 Método semi-implícito

De acordo com o método dos resíduos ponderados, uma temperatura entre os instantes de tempo t e $t + \Delta t$ é obtida através de uma interpolação linear, ou seja

$$\mathbf{T}(\tau) \approx \mathbf{T}_t + \frac{\tau}{\Delta t} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t), \quad (8.20)$$

onde τ representa um incremento de tempo genérico, tal que $\tau \leq \Delta t$ e $0 \leq \tau/\Delta t \leq 1$. $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ é o termo desconhecido. Aplicando o método dos resíduos ponderados à equação (8.13), tem-se

$$\int_t^{t+\Delta t} W (\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{Q} - \mathbf{f}) d\tau = 0. \quad (8.21)$$

O parâmetro de peso ou ponderação de avanço da integração temporal, Λ , é definido por:

$$\Lambda = \frac{1}{\Delta t} \frac{\int_t^{t+\Delta t} W \tau d\tau}{\int_t^{t+\Delta t} W d\tau} = 0. \quad (8.22)$$

Desta forma, de acordo com as equações (8.20) e (8.22), a evolução da temperatura pode ser descrita por

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{T}_t + \Delta t \left[(1 - \Lambda) \dot{\mathbf{T}}_t + \Lambda \dot{\mathbf{T}}_{t+\Delta t} \right]. \quad (8.23)$$

Substituindo a equação (8.23) na relação (8.13), obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \frac{(\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t)}{\Delta t} + \mathbf{K} [\mathbf{T}_t + \Lambda (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t)] &= \\ = [\mathbf{Q}_t - \Lambda (\mathbf{Q}_t - \mathbf{Q}_{t+\Delta t})] + [\mathbf{f}_t - \Lambda (\mathbf{f}_t - \mathbf{f}_{t+\Delta t})], \end{aligned} \quad (8.24)$$

ou, rearranjando algebricamente,

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \Lambda \mathbf{K} \right) \mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left[\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} - (1 - \Lambda) \mathbf{K} \right] \mathbf{T}_t \\ - (1 - \Lambda) \mathbf{Q}_t - (1 - \Lambda) \mathbf{f}_t - \Lambda \mathbf{Q}_{t+\Delta t} - \Lambda \mathbf{f}_{t+\Delta t} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

O peso de avanço da integração temporal, Λ , deve ser $\Lambda \in [0, 1]$. Para determinados valores de Λ , o método de integração toma a forma de métodos conhecidos como, por exemplo, o método de Cranck-Nicholson ($\Lambda = 1/2$). Na tabela 8.1 apresentam-se os valores de Λ para os métodos de integração temporal mais utilizados.

Tabela 8.1: Valores de Λ para cada método de integração temporal.

Λ	Método de integração temporal
0	Método explícito (<i>forward difference method</i>)
1/2	Método de Cranck-Nicholson (<i>central difference method</i>)
2/3	Método de Galerkin (<i>Galerkin's method</i>)
1	Método implícito (<i>backward difference method</i>)

Embora a única solução incondicionalmente estável seja a solução obtida pelo método implícito, ou seja, quando $\Lambda = 1$ [Vaz Jr. 00, Andrade-Campos *et al.* 04b], com o método explícito chega-se à solução de forma mais simples e imediata. Veja-se que, a partir da equação (8.25), se for tomada a integração temporal explícita ($\Lambda = 0$) a equação toma a forma

$$\mathbf{C} \mathbf{T}_{t+\Delta t} = (\mathbf{C} - \Delta t \mathbf{K}) \mathbf{T}_t + \Delta t (\mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t). \quad (8.26)$$

Com esta equação demonstra-se a simplicidade de cálculo do método explícito. Embora este permita unicamente incrementos de tempo reduzidos, o cálculo da temperatura é imediato. Este facto ainda é reforçado pela diagonalização da matriz \mathbf{C} , procedimento comum na maioria dos programas de cálculo explícito. Este método, embora computacionalmente económico, possui como desvantagem o facto de a solução poder afastar-se da solução real por acumulação de erro.

8.3.2 Método implícito

O método implícito é incondicionalmente estável uma vez que há garantia de equilíbrio do sistema em qualquer instante. A configuração de chegada é atingida através de um ciclo iterativo decorrente no incremento. Este ciclo iterativo, realizado na vizinhança do instante

$t+\Delta t$, assegura a convergência e o equilíbrio do sistema. Neste trabalho adopta-se o método de Newton-Raphson, que garante convergência quadrática sempre que a formulação seja consistente.

Método de Newton-Raphson

O princípio do método de Newton-Raphson tem por objectivo minimizar o resíduo, ou forças não-equilibradas, das equações de equilíbrio. Tomando o resíduo como função não-linear de uma variável vectorial genérica \mathbf{g} , este deve ser tal que

$$\mathbf{R}(\mathbf{g}) = \mathbf{0}. \quad (8.27)$$

Na iteração de equilíbrio j obtém-se uma aproximação da solução, \mathbf{g}^j , que corresponde a um resíduo não-nulo, isto é,

$$\mathbf{R}(\mathbf{g}^j) \neq \mathbf{0}. \quad (8.28)$$

Na iteração seguinte, $j+1$, procura-se obter uma melhor aproximação à solução, de forma a que:

$$\mathbf{R}(\mathbf{g}^{j+1}) = \mathbf{0} \quad \text{com} \quad \mathbf{g}^{j+1} = \mathbf{g}^j + \Delta\mathbf{g}^{j+1}. \quad (8.29)$$

Desenvolvendo o resíduo em série de Taylor na vizinhança de \mathbf{g}^j e desprezando os termos de ordem superior a 1, obtém-se

$$\mathbf{R}(\mathbf{g}^{j+1}) = \mathbf{R}(\mathbf{g}^j) + \left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial (\mathbf{g})} \right|_{\mathbf{g}^j} (\Delta\mathbf{g}^{j+1}) = 0. \quad (8.30)$$

Desta forma, em cada iteração de equilíbrio resolve-se um sistema de equações lineares, cuja solução $\Delta\mathbf{g}^{j+1}$ é uma correcção do campo de \mathbf{g} .

Equação geral implícita

O método de Newton-Raphson pode ser aplicado ao problema térmico, partido da equação (8.25) e considerando $\Lambda = 1$. Deste modo,

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \mathbf{K} \right) \mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right) \mathbf{T}_t - \mathbf{Q}_{t+\Delta t} - \mathbf{f}_{t+\Delta t} = 0. \quad (8.31)$$

A partir da equação (8.31) pode-se definir a seguinte equação geral:

$$\mathbf{K}_{CT} \mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{F}_{t+\Delta t} = 0 \quad (8.32)$$

onde

$$\mathbf{K}_{CT} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \mathbf{k} \quad (8.33)$$

é a matriz rigidez combinada e

$$\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right) \mathbf{T}_t + \mathbf{Q}_{t+\Delta t} + \mathbf{f}_{t+\Delta t} \quad (8.34)$$

é o vector de forças equivalente.

Tanto \mathbf{K}_{CT} como $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ dependem da temperatura, pois são constituídas por propriedades como, por exemplo, a condutividade térmica e o calor específico, dependentes da temperatura. Deste modo, a equação geral (8.32) é não-linear.

No processo iterativo e, nomeadamente na actualização da temperatura $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$, quando se recalculam as matrizes \mathbf{K}_{CT} e $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ e são substituídas na equação (8.32), a mesma não será zero. Afinal, \mathbf{K}_{CT} e $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ alteraram-se com a nova temperatura, dando origem a um resíduo, $\mathbf{R}_{t+\Delta t}$. Pelo método de Newton-Raphson, representado esquematicamente na

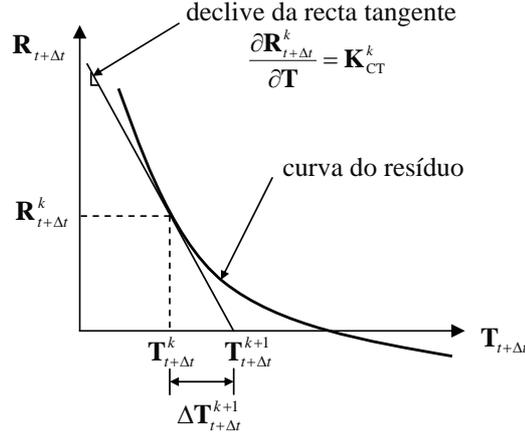


Figura 8.1: Método de Newton-Raphson para eliminação do resíduo.

figura 8.1, define-se o seguinte processo iterativo, baseado na diminuição do resíduo:

$$\mathbf{K}_{CT}^k \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} - \mathbf{F}_{t+\Delta t}^k = \mathbf{R}_{t+\Delta t}^k. \quad (8.35)$$

O superíndice k designa o número de iteração. Derivando a equação (8.35) em ordem a \mathbf{T} , de forma a encontrar o declive da recta tangente ao resíduo no instante $t + \Delta t$ (ver figura 8.1), obtém-se:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{t+\Delta t}^k}{\partial \mathbf{T}} = \mathbf{K}_{CT}^k. \quad (8.36)$$

Adicionalmente, e com o auxílio da figura 8.1, a matriz tangente é dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{t+\Delta t}^k}{\partial \mathbf{T}} = \frac{\mathbf{R}_{t+\Delta t}^k - 0}{\mathbf{T}_{t+\Delta t}^k - \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}}. \quad (8.37)$$

Neste processo iterativo, a variável temperatura é corrigida sucessivamente de acordo com a expressão seguinte:

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^k + \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}. \quad (8.38)$$

Igualando as relações (8.36) e (8.37), substituindo (8.38) e resolvendo para $\Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}$, obtém-se:

$$\mathbf{K}_{CT}^k \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} = -\mathbf{R}_{t+\Delta t}^k. \quad (8.39)$$

Assim, definido um valor inicial da temperatura para a iteração inicial no passo de tempo $t + \Delta t$, calcula-se o resíduo (ver equação (8.35)). Posteriormente, determina-se a variação de

temperatura recorrendo à equação (8.39), corrigindo o valor da temperatura no incremento corrente. Este procedimento, esquematizado na figura 8.2, é repetido até que se atinja a convergência. O algoritmo de resolução é mostrado no quadro 8.2.

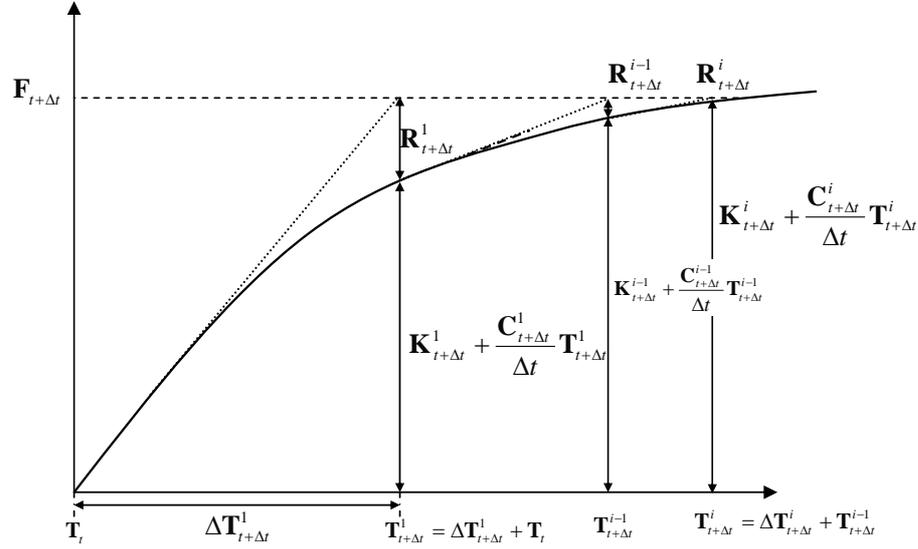


Figura 8.2: Cálculo iterativo do problema térmico pelo método de Newton-Raphson.

Tabela 8.2: Algoritmo da solução implícita pelo método de Newton-Raphson.

- | |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. REPETIR - Ciclo iterativo $k = 1, \dots, N_{max}$: <ol style="list-style-type: none"> 1.1. Cálculo de $\Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}$ por $\mathbf{K}_{CT}^k \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} = -\mathbf{R}_{t+\Delta t}^k$; 1.2. Atualização da temperatura: $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^k + \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}$; 1.3. Recalcular \mathbf{K}_{CT} e $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ para a nova temperatura $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}$; 1.4. Cálculo do novo resíduo, $\mathbf{K}_{CT}^k \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1} - \mathbf{F}_{t+\Delta t}^k \Rightarrow \mathbf{R}_{t+\Delta t}^k$; 1.5. Atualização, $k - 1 \rightarrow k$; ATÉ convergência, $\ \mathbf{R}_{t+\Delta t}^{k+1}\ \leq \varepsilon_{tol}$, ou $k \geq N_{max}$. |
|---|

8.3.3 Regime estacionário

O regime estacionário ou permanente é uma simplificação por vezes assumida em mecânica dos meios contínuos [Esparragoza *et al.* 03, Koráb *et al.* 02]. Este é utilizado quando se considera que as condições de fronteira evoluem quase-estaticamente e, conseqüentemente, os efeitos de inércia podem ser desprezados. Nesta situação, a equação (8.1) toma a seguinte forma:

$$\text{div} [\mathbf{k} \text{grad}(T)] + Q = 0, \quad (8.40)$$

ou, considerando que k_x , k_y e k_z representam a condutividade térmica na direcção dos eixos principais Ox , Oy e Oz ,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) - Q = 0. \quad (8.41)$$

Desta forma, considerando que os materiais obedecem à lei da condução de calor de Fourier e que as condições de fronteira são dadas pelas expressões (8.2) e (8.5), é possível utilizar o princípio das temperaturas virtuais para determinar a solução. Após linearização e discretização em elementos finitos, a equação (8.41) fica

$$(\mathbf{K}_k + \mathbf{K}_c) \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{f}. \quad (8.42)$$

onde \mathbf{K}_k , \mathbf{K}_c , \mathbf{Q} e \mathbf{f} são definidas pelas expressões (8.14) a (8.19). No caso estacionário, não faz sentido falar em integração temporal, uma vez que se considera que as variáveis permanecem inalteradas com o tempo. Embora o tempo não seja uma variável do problema em regime estacionário (ver equação (8.41)), a não linearidade das propriedades do material obriga a um cálculo iterativo de convergência. Desta forma, a equação da correcção iterativa da temperatura, em regime estacionário não-linear, é dada por

$$(\mathbf{k}_k^k + \mathbf{k}_c^k) \Delta \mathbf{T}^{k+1} = \mathbf{Q}^{k+1} + \mathbf{f}^{k+1} - \mathbf{K} \mathbf{T}^k. \quad (8.43)$$

As temperaturas nos nós são actualizadas no final de cada iteração da seguinte forma:

$$\mathbf{T}^{k+1} = \mathbf{T}^k + \Delta \mathbf{T}^{k+1}. \quad (8.44)$$

Este cálculo iterativo termina quando $\Delta \mathbf{T}^{k+1}$ for menor do que uma determinada tolerância.

8.4 Convergência e Estabilidade

Um esquema iterativo de convergência, baseado ou não no método de Newton-Raphson, necessita de critérios de convergência e paragem. Estes critérios devem ser seleccionado com extremo cuidado, pois deles depende o equilíbrio do sistema e a precisão do resultado. Os critérios de convergência são, essencialmente, de três tipos [Alves 03]:

1. Critérios baseados na magnitude do resíduo;
2. Critérios baseados na magnitude das correcções da variável de controlo (deslocamentos incrementais, temperatura, etc.);
3. Critérios baseados no erro da energia do sistema.

Os critérios de convergência utilizados no algoritmo apresentado na subsecção 8.3.2 são dos tipos 1 e 2. Estes são:

1. $\|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^k\| \leq \delta_1 \|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^1\|$;
2. $\|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^k\| \leq \delta_2 \|\mathbf{F}_{t+\Delta t}\|$;

$$3. \max \left[\left(|\delta T_{t+\Delta t}^k| \right)_n \right] \leq \delta_3 \|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^1\| \quad \text{com } n = 1, \dots, NN.$$

O primeiro e o terceiro critérios são baseados na magnitude das correcções do incremento de temperatura. O segundo critério baseia-se na magnitude do resíduo. δ_i , $i = 1, 2, 3$, são tolerâncias, definidas em valores percentuais. Estas tolerâncias podem ser reunidos num só valor predefinido, designado por $U_{\text{user-tol}}^2$:

$$\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \left(\frac{U_{\text{user-tol}}}{100} \right). \quad (8.45)$$

Consequentemente, os critérios 1 a 3 tomam a seguinte forma mais simples:

1. $\|\Delta \mathbf{T}^k\| \leq \left(\frac{U_{\text{user-tol}}}{100} \right) \|\Delta \mathbf{T}^1\|;$
2. $\|\mathbf{R}^k\| \leq \left(\frac{U_{\text{user-tol}}}{100} \right) \|\mathbf{F}\|;$
3. $\max [\text{abs}(\Delta T_N^k)] \leq \left(\frac{U_{\text{user-tol}}}{100} \right) \|\Delta \mathbf{T}^1\|.$

$\|\Delta \mathbf{T}^k\|$ e $\|\Delta \mathbf{T}^1\|$ representam as normas euclidianas do vector de temperaturas incrementais das iterações k e 1, respectivamente. $\max [\text{abs}(\Delta T_N^k)]$ define o máximo valor absoluto dos componentes do vector de temperatura na iteração k . $\|\mathbf{R}^k\|$ e $\|\mathbf{F}\|$ são as normas euclidianas do vector resíduo na iteração k e do vector de força equivalente (definidos em (8.32)), respectivamente. O valor de $U_{\text{user-tol}}$ utilizado por defeito é de 0.01%. Os critérios apresentados podem ser utilizados de forma independente ou simultânea.

8.4.1 Violação da realidade física

Alguns procedimentos, assim como as dificuldades emergentes na resolução numérica dos problemas térmicos em regime transiente, são ilustrados nas subsecções seguintes. A análise dessas dificuldades fundamenta a escolha do algoritmo utilizado neste trabalho.

Um dos problemas existentes na solução de problemas térmicos pelo método dos elementos finitos é a incapacidade dos valores calculados satisfazerem a realidade física. Este problema é ilustrado pelo exemplo de transferência de calor numa vara isolada unidimensional³ [Segerlind 84]. Neste, a adição de calor a uma extremidade da vara causa uma inesperada diminuição de temperatura num nó.

A forma geral da solução de diferenças finitas para o sistema de equações diferenciais, equação (8.25), pode ser dada por:

$$\mathbf{K}^* \mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{Q}^* \mathbf{T}_t + \mathbf{F}^*, \quad (8.46)$$

onde

$$\mathbf{K}^* = 1/\Delta t \mathbf{C} + \Lambda \mathbf{K} \quad (8.47)$$

$$\mathbf{Q}^* = 1/\Delta t \mathbf{C} - (1 - \Lambda) \mathbf{K} \quad (8.48)$$

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t + \Lambda (\mathbf{Q}_{t+\Delta t} - \mathbf{Q}_t) + \Lambda (\mathbf{f}_{t+\Delta t} - \mathbf{f}_t). \quad (8.49)$$

²Do Inglês *User tolerance* (tolerância do utilizador).

³Demonstrado no apêndice D.

Multiplicando ambos os membros da equação (8.46) por $(\mathbf{K}^*)^{-1}$ obtém-se:

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t} = (\mathbf{K}^*)^{-1}\mathbf{Q}^*\mathbf{T}_t + (\mathbf{K}^*)^{-1}\mathbf{F}^*. \quad (8.50)$$

Pretende-se conhecer as condições impostas a \mathbf{K}^* e \mathbf{Q}^* de forma a que a realidade física do problema seja satisfeita. Uma vez que \mathbf{T}_t pode ser assumido como nulo no primeiro incremento, as condições impostas a \mathbf{K}^* e \mathbf{Q}^* são determinadas pelo termo $(\mathbf{K}^*)^{-1}\mathbf{F}^*$. Para o caso de adição de fluxo de calor, ou aumento de temperatura num dos nós da malha de elementos, espera-se que a temperatura de todos os outros nós aumentem ou permaneçam iguais. Analisando a equação i do produto $(\mathbf{K}^*)^{-1}\mathbf{F}^*$, dada por:

$$T_i = (K_{i1}^*)^{-1}F_1^* + (K_{i2}^*)^{-1}F_2^* + \dots + (K_{ip}^*)^{-1}F_p^*, \quad (8.51)$$

e uma vez que pelo menos um termo de \mathbf{F}^* é positivo, conclui-se que o único modo de assegurar que $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ aumente é exigir que todos os coeficientes de $(\mathbf{K}^*)^{-1}$ sejam positivos. Note-se que esta exigência assegura também que T_i decresce se um ou mais coeficientes de F^* forem negativos.

O facto da necessidade da positividade em $(\mathbf{K}^*)^{-1}$ não significa necessidade de positividade nos coeficientes de \mathbf{K}^* . Para que os coeficientes de $(\mathbf{K}^*)^{-1}$ sejam positivos, \mathbf{K}^* requer os coeficientes da diagonal positivos e todos os outros negativos (ou nulos). Então, a matriz \mathbf{K}^* deverá apresentar os sinais da seguinte forma:

$$\mathbf{K}^* = \begin{bmatrix} + & - & - & \dots & - \\ - & + & - & \dots & - \\ - & - & + & \dots & - \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ - & - & - & \dots & + \end{bmatrix} \quad (8.52)$$

Deste modo, o requisito necessário para que não haja violação da realidade física é que \mathbf{K}^* (definida por (8.47)) tenha a forma da matriz (8.52).

Este resultado é importante na escolha do tipo de integração temporal e do tipo de formulação. Este último pode ser consistente ou reduzida (diagonalizada). A formulação reduzida, em que a matriz capacitância é diagonalizada, obedece ao requisito exigido independentemente do método de integração adoptado.

8.4.2 Oscilações numéricas

No cálculo de $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ podem ocorrer oscilações numéricas. Estas são relacionadas com os valores próprios da matriz $\mathbf{H} = (\mathbf{K}^*)^{-1}\mathbf{Q}^*$, da (equação (8.50)) [Myers 71]. As hipóteses possíveis são:

1. Todos os valores próprios de \mathbf{H} são positivos \Rightarrow não há oscilações; cálculo estável;
2. Alguns valores próprios de \mathbf{H} são negativos mas superiores a -1 \Rightarrow algumas oscilações; cálculo estável;
3. Um ou mais valores próprios de \mathbf{H} são inferiores a -1 \Rightarrow cálculos instáveis.

Assim, a condição necessária para garantir que não há oscilações numéricas é que todos os valores próprios de \mathbf{H} sejam positivos. Prova-se que tal se verifica se \mathbf{K}^* e \mathbf{Q}^* forem definidas positivas [Seegerlind 84, Pina 95]. Recordar-se que \mathbf{K}^* e \mathbf{Q}^* estão relacionadas com \mathbf{C} e \mathbf{K} por

$$\mathbf{K}^* = \mathbf{C} + \Lambda \Delta t \mathbf{K}, \quad (8.53)$$

$$\mathbf{Q}^* = \mathbf{C} - (1 - \Lambda) \Delta t \mathbf{K} = \mathbf{C} - \alpha \mathbf{K}. \quad (8.54)$$

A matriz \mathbf{K}^* , definida na expressão (8.53), é definida positiva uma vez que \mathbf{C} (matriz capacitância) é definida positiva e \mathbf{K} é, na pior situação, singular [Myers 71, Seegerlind 84]. A adição de uma parte de \mathbf{K} a \mathbf{C} não altera a característica da matriz \mathbf{C} , fazendo com que \mathbf{K}^* seja definida positiva.

No caso da matriz \mathbf{Q}^* , é necessário conhecer os valores de \mathbf{K} que podem ser subtraídos a \mathbf{C} sem que \mathbf{Q}^* resulte singular. Ou seja, conhecer o valor de $\alpha = (1 - \Lambda) \Delta t$ que torna \mathbf{Q}^* singular, *i.e.*, que o seu menor valor próprio seja nulo.

Sabe-se que o mínimo valor próprio da matriz global \mathbf{Q}^* é maior que o mínimo valor próprio para todas as suas matrizes elementares [Pina 95], isto é,

$$\min_e \left(\beta_{\min}^{\mathbf{Q}^{*(e)}} \right) < \beta_{\min}^{\mathbf{Q}^*}. \quad (8.55)$$

Se o menor dos valor próprios de $\mathbf{Q}^{*(e)}$ for zero,

$$\min_e \left(\beta_{\min}^{\mathbf{Q}^{*(e)}} \right) = 0, \quad (8.56)$$

então,

$$\beta_{\min}^{\mathbf{Q}^*} > 0 \Rightarrow \mathbf{Q}^* \text{ é definida positiva.} \quad (8.57)$$

O valor de $\beta_{\min}^{\mathbf{Q}^{*(e)}}$ é o valor de β que satisfaz

$$\det \left(\mathbf{Q}^{*(e)} - \beta \mathbf{1} \right) = 0. \quad (8.58)$$

Ora, uma vez que se procura a matriz singular ($\beta = 0$), a equação (8.58) transforma-se em

$$\det \left(\mathbf{C}^{(e)} - \alpha \mathbf{K}^{(e)} \right) = 0. \quad (8.59)$$

O menor valor que satisfaz a equação anterior é denominado por α_{\min} . Assim, a matriz \mathbf{Q}^* tem valores próprios positivos e, conseqüentemente, é definida positiva sempre que $\alpha > \alpha_{\min}$. Logo, as oscilações numéricas são evitadas sempre que

$$\Delta t < \frac{\alpha_{\min}}{1 - \Lambda}, \quad (8.60)$$

O menor valor de α , α_{\min} , ocorre no elemento mais pequeno da malha de elementos finitos [Seegerlind 84, Tamma *et al.* 00]. Apesar da estimativa dada pela expressão (8.60) ser conservativa, esta constitui uma boa orientação para a selecção do valor para o incremento de tempo.

8.4.3 Diagonalização da matriz capacitância

Em problemas dinâmicos existem dois tipos de formulação da matriz de massa ou matriz capacitância: (i) a formulação consistente e (ii) a formulação reduzida⁴ (diagonalizada). A formulação consistente utiliza funções de interpolação da relação $\partial T/\partial t$ ao longo do elemento. Em oposição, a formulação reduzida assume que a variação de $\partial T/\partial t$ ao longo do elemento é constante entre pontos intermédios de elementos adjacentes [Segerlind 84]. Daqui resulta uma matriz capacitância diagonal. A generalidade dos algoritmos discutidos nas secções anteriores tornam-se mais eficientes (e com um maior universo de aplicação) com a diagonalização da matriz capacitância.

Um dos procedimentos para obter a formulação reduzida é a utilização de funções de interpolação diferentes para aproximar cada termo na discretização de elementos finitos [Zienkiewicz e Taylor 91]. Outra alternativa é a utilização de métodos de diagonalização. Estes métodos, através de manipulações algébricas, preservam e concentram as componentes de \mathbf{C} nos elementos. Em mecânica estrutural, isto denomina-se por conservação de massa ao nível do elemento [Fenner 87]. Os métodos utilizados neste trabalho foram o método das somas de rectângulos e o método por massa equivalente.

No método das somas de rectângulos, a matriz capacitância é dada por:

$$\mathbf{C}_{ij} = \begin{cases} \sum_k c_{ik} & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (8.61)$$

O método da massa equivalente faz um escalonamento das diagonais da matriz consistente de forma a satisfazer o princípio da conservação de massa ao nível do elemento. Este pode ser dado por

$$\mathbf{C}_{ij} = \begin{cases} c_{ii} [\sum_k \rho c \det(\mathbf{J})] / \sum_k c_{kk} & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (8.62)$$

onde \mathbf{J} é a matriz Jacobiana de \mathbf{C} . Ambos os métodos apresentam resultados satisfatórios e respeitam o princípio de conservação de massa ao nível do elemento.

8.4.4 Universo de utilização dos métodos de integração

A resolução do problema térmico leva a instabilidades e dificuldades numéricas quando o método de integração e o incremento de tempo são seleccionados sem critério. As expressões (8.52) e (8.60) constituem dois critérios válidos para a selecção do incremento de tempo. O primeiro assegura que a realidade física é satisfeita, enquanto que o segundo garante que o cálculo evolui sem oscilação. Pela figura 8.3, que representa esquematicamente a região de operação das formulações consistente e diagonalizada relativamente ao parâmetro Λ que define o método de integração, pode ver-se que a região que permite incrementos de tempo maiores para ambas as formulações é a de $\Lambda > 2/3$. A região de operação da formulação diagonalizada é bastante mais extensa que a da formulação consistente. Tal se deve à impossibilidade de existirem resultados que violem a realidade física por parte da formulação diagonalizada, como se demonstrou na secção 8.4.1.

⁴Lumped.

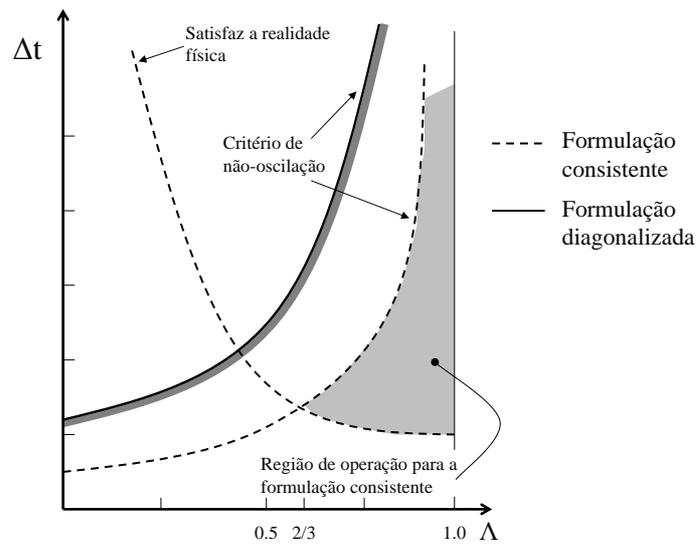


Figura 8.3: Regiões de operação para as formulações de elementos finitos consistente e diagonalizada.

A formulação consistente é acompanhada por restrições no incremento de tempo. Esta formulação não pode ser utilizada com o método explícito ou com o método das diferenças centrais sem violar a realidade física e levar a oscilações numéricas. Apesar disso, quando aliada ao método implícito, a formulação consistente permite que se utilize uma gama extensa de incrementos de tempo. Por outro lado, a formulação diagonalizada pode ser utilizada com qualquer valor de Λ e permite o uso de passos de tempo maiores. Esta é a única escolha possível se a solução tiver que ser com $\Lambda \leq 2/3$.

8.5 Algoritmo de Previsão/Correcção - Interesse na Previsão

As vantagens dos algoritmos explícitos/semi-implícitos assentam, essencialmente, na velocidade de cálculo, demonstrada pela equação (8.26), face a uma solução não asseguradamente exacta. Os algoritmos implícitos, apesar de necessitarem de tempos de cálculo mais elevados, podem apresentar uma garantia de equilíbrio em qualquer instante do cálculo, levando a uma maior precisão de resultados. Assim, o algoritmo ideal para o cálculo térmico seria aquele que combinasse a qualidade de resultados do cálculo implícito com a velocidade de cálculo do algoritmo explícito.

Uma forma de obter um algoritmo com tais vantagens será diminuir o tempo de cálculo requerido pelo algoritmo implícito mantendo a estabilidade, convergência e precisão de resultados dado por este algoritmo. Sabendo que o tempo gasto pelo algoritmo implícito é consumido no ciclo iterativo, uma forma de minimizar este tempo será reduzir o número de iterações. Para tal, a melhor solução será conseguir determinar uma boa estimativa para a solução inicial do ciclo iterativo. Para se conseguir uma diminuição do tempo total, o tempo despendido na busca da estimativa deve ser muito inferior ao tempo de redução do número de ciclos do método implícito.

Na figura 8.4 apresenta-se a estrutura geral do algoritmo de cálculo térmico utilizado.

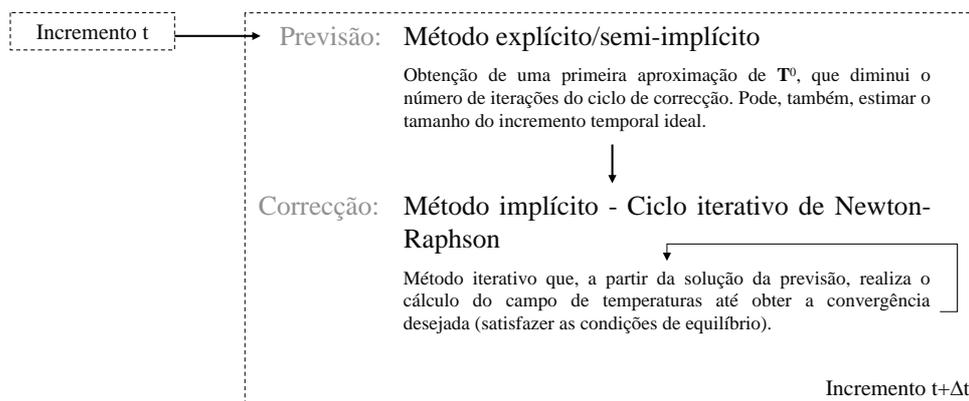


Figura 8.4: Esquema de integração temporal.

Este algoritmo apresenta as seguintes características principais: (i) utiliza um só ciclo iterativo para resolver todas as não-linearidades do problema e (ii) a estratégia do cálculo é do tipo *Previsão-Correção*. Esta estratégia *Previsão-Correção* consiste em realizar o incremento de cálculo térmico nas seguintes fases [Menezes 94, Oliveira e Menezes 04]:

1. PREVISÃO:

O objectivo é fornecer uma primeira estimativa ao campo de temperatura da configuração de chegada e, se necessário⁵, calcular o incremento de tempo ideal. A fase de previsão deverá depender menos de 5% do tempo total de cálculo. Para isso pode utilizar-se quer um método explícito quer um método semi-implícito (ver secção 8.3.1). Ambos os métodos devem utilizar formulação reduzida ou diagonalizada.

2. CORRECÇÃO:

Através de um método de integração implícito melhora-se iterativamente a aproximação inicial fornecida pela fase de *previsão* até encontrar a configuração de chegada satisfatória. O algoritmo implícito recorre ao método de Newton-Raphson, com convergência quadrática (ver secção 8.3.2).

Com os algoritmos semi-implícitos é possível recorrer-se a incrementos de tempo superiores aos dos métodos explícitos. Consequentemente, para passos de tempo maiores, a solução aproximada calculada pelo método semi-implícito apresenta maior qualidade que a solução obtida pelo método explícito, embora para tempos de cálculo superiores. Uma vez que o ganho de tempo depende da qualidade da estimativa inicial, é aconselhável, na fase de *previsão*, utilizar o método semi-implícito com $\Lambda > 2/3$.

A determinação do tamanho ideal para o incremento de tempo, após a fase de *previsão*, baseia-se no cálculo de um parâmetro de redução adimensional, r_{\min} , que considera a limitação de diferentes critérios. Estes critérios baseiam-se na variação relativa do campo de temperatura, na variação dos fluxos de calor em cada elemento e nas alterações das condições de fronteira. Estes critérios são:

⁵No caso de acoplamento termomecânico, o incremento de tempo do cálculo térmico terá de ser o mesmo do cálculo mecânico. Nesse caso, não se calcula o incremento de tempo ótimo.

1. Limitação dos incrementos de temperatura

Supondo conhecido o incremento de temperatura ΔT num determinado nó, define-se o coeficiente r_T através da equação

$$r_T = \frac{\Delta T_{\max}}{|\Delta T|}. \quad (8.63)$$

ΔT_{\max} representa o incremento máximo admissível de temperatura. Este último parâmetro é fixado pelo utilizador e, em geral, toma o valor entre 0.1 e 10 °C.

2. Limitação dos fluxos de calor

Supondo conhecidos os fluxos de calor em cada elemento, o coeficiente de redução r_q é dado por

$$r_q = \frac{\Delta q_{\max}^{(e)}}{|q_{\max}^{(e)} - q_{\min}^{(e)}|}. \quad (8.64)$$

$\Delta q_{\max}^{(e)}$ é um parâmetro máximo admissível para a variação do fluxo de calor em cada elemento. $q_{\max}^{(e)}$ e $q_{\min}^{(e)}$ são os valores máximo e mínimo dos fluxos de calor no elemento, respectivamente.

3. Limitação das condições fronteira

No que diz respeito às condições fronteira, independentemente de serem de convecção/radiação, temperatura imposta ou fluxo imposto, o coeficiente r_{cond} é dado por:

$$r_{\text{cond}} = \frac{\delta q_{\max}}{q_{\text{cond}}/\Delta t}, \quad (8.65)$$

em que q_{cond} é o fluxo de calor devido a condições de fronteira e δq_{\max} é um parâmetro máximo admissível para este critério.

O parâmetro r_{\min} , que limita o valor inicial do incremento de tempo imposto pelo utilizador (Δt_{imp}), é dado por:

$$r_{\min} = \max \{ \min \{ r_T, r_q, r_{\text{cond}}, r_{\text{sup}} \}, r_{\text{inf}} \}. \quad (8.66)$$

Os coeficientes r_{inf} e r_{sup} limitam inferior e superiormente o parâmetro r_{\min} , respectivamente. O incremento final é então corrigido pela expressão seguinte:

$$\Delta t = r_{\min} \Delta t_{\text{imp}} \quad (8.67)$$

Detalhes sobre o cálculo do incremento de tempo óptimo podem ser encontrado nos trabalhos de [Ladreyt 92, Menezes 94, Haddadi 96, Teixeira-Dias 99, Xing and Makinouchi 02, Alves 03, Oliveira e Menezes 04].

Capítulo 9

O Programa NOSTRADAMUS

Apresenta-se o programa desenvolvido no decurso deste trabalho. Descreve-se o algoritmo de acoplamento termomecânico global e detalham-se os algoritmos de cálculo mais relevantes. Introduzem-se as técnicas de discretização espacial e os métodos de integração elementar. Descreve-se o programa na perspectiva do utilizador dando ênfase especial às fases de pré- e pós-processamento.

9.1 Introdução

O programa NOSTRADAMUS¹ é um programa de cálculo numérico que recorre ao método dos elementos finitos. Foi desenvolvido especificamente para simular problemas tridimensionais que envolvam fenómenos de acoplamento termomecânico em ligas de alumínio. Este programa, desenvolvido em FORTRAN 90, contém toda a implementação numérica da formulação analítica apresentada nos capítulos anteriores. O programa comporta mais de 8800 linhas de programação (11 zonas comuns e 125 sub-rotinas) e foi concebido de forma modular. Deste modo torna-se possível introduzir outros elementos finitos e modelos de comportamento, bem como outras estruturas algorítmicas. Adicionalmente, foram desenvolvidos programas de interface, em linguagem TCL-TK e FORTRAN 90, essenciais para as tarefas de pré- e pós-processamento de dados e resultados. Todos estes programas foram integrados no programa GiD[®]. Torna-se assim possível, de forma relativamente simples,

¹O nome do programa tem origem no pseudónimo do médico e astrólogo francês Michel de Notredame (1503-1566). De origem judaica, Notredame foi médico da corte e conselheiro de Henrique II, Francisco II e Carlos IX, Reis de França. Este profeta ganhou renome com as suas profecias em quadra (*As Centúrias*, 1555), onde previu acontecimentos naturais e inevitáveis como tremores de terra e actos de sucesso da espécie humana como, por exemplo, a chegada do homem à lua. Desta forma associa-se o nome de um profeta ao programa desenvolvido, visto este ser um programa de previsão e simulação.

realizar a (i) definição do modelo geométrico; (ii) discretizar em elementos finitos; (iii) atribuir condições fronteira; (iv) inicializar o cálculo; (v) acompanhar a evolução do cálculo e (vi) visualizar graficamente os resultados.

A biblioteca de elementos finitos do programa NOSTRADAMUS contém 2 tipos de elementos tridimensionais trilineares sólidos. Estes são o tetraedro e o hexaedro. Os elementos tetraédricos (4 nós), que permitem discretizar com facilidade geometrias complexas, contêm 1 ou 4 pontos de integração. Os elementos hexaédricos utilizados no programa são isoparamétricos, com 8 nós e 8 pontos de integração para a integração completa e um para a integração reduzida selectiva.

9.2 Elementos Finitos

A escolha correcta dos elementos finitos a utilizar na simulação de processos que envolvam acoplamento termomecânico, bem como na generalidade dos processos, é fundamental. Nesta escolha devem ter-se em conta aspectos como a incompressibilidade plástica, a geometria do sólido, o comportamento do material, as condições de fronteira e o tempo de cálculo. Neste trabalho, e devido aos aspectos enunciados, utilizam-se elementos sólidos tridimensionais. O elemento hexaédrico, associado ao método de integração reduzida selectiva, é aquele que apresenta o melhor compromisso entre a qualidade de resultados e o tempo de cálculo. Por essa razão, ele será o mais utilizado nas simulações apresentadas neste trabalho. Porém, o programa desenvolvido ainda permite a utilização de elementos tetraédricos para os casos de sólidos com geometrias complexas, malhas não-estruturadas e de difícil discretização com elementos hexaédricos.

9.2.1 Tipo de elementos

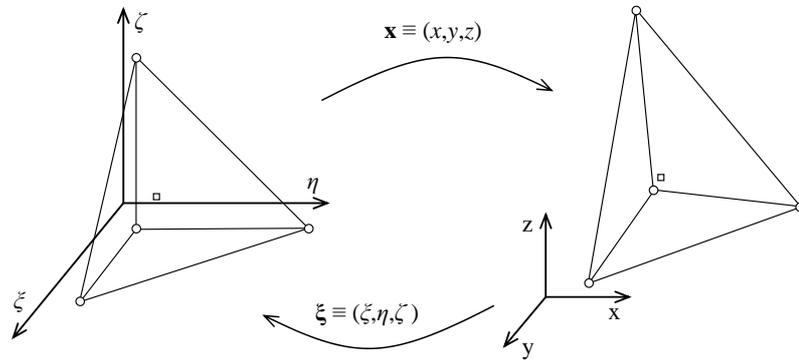
A aplicação do método dos elementos finitos passa pela discretização do corpo sólido deformável num conjunto de elementos finitos. No programa desenvolvido estão disponíveis os seguintes elementos:

- (i) O elemento hexaédrico com 8 nós, funções de interpolação trilineares e 8 pontos de Gauss para integração completa e um para a integração reduzida (ver figura 9.1(c));
- (ii) O elemento tetraédrico com 4 nós, funções de interpolação trilineares e 1 só ponto de integração (ver figura 9.1(a));
- (iii) O elemento tetraédrico com 4 nós, funções de interpolação trilineares e 4 pontos de integração (figura 9.1(b)).

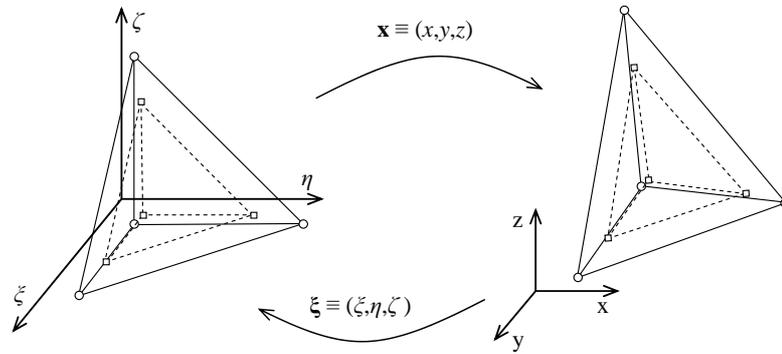
Estes elementos são descritos em mais detalhe por Dhatt e Touzout [Dhatt e Touzout 84], Hughes [Hughes 80] e Oñate [Oñate 95], por exemplo.

9.2.2 Interpolação isoparamétrica

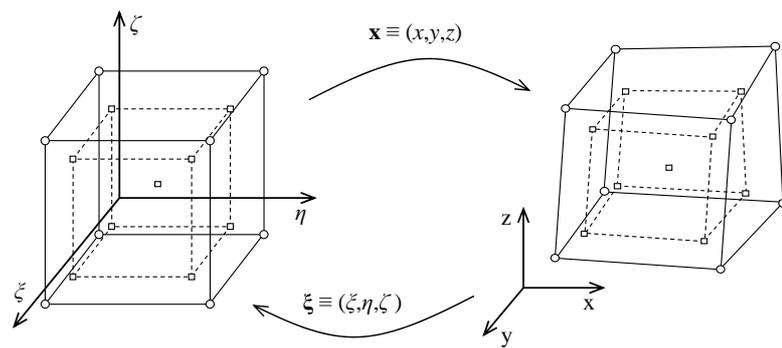
O conceito de interpolação isoparamétrica é interdependente do conceito de elemento canónico definido para cada elemento. A interpolação das variáveis cinemáticas no interior do



(a)



(b)



(c)

Figura 9.1: Representação dos elementos finitos tetraédricos, de um e quatro pontos de integração, e hexaédrico, respectivamente, no sistema de coordenadas canónicas $\boldsymbol{\xi} \equiv (\xi, \eta, \zeta)$ e no sistema de coordenadas globais cartesianas $\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$. Os nós são indicados pelo símbolo \circ e os pontos de Gauss pelo símbolo \square .

elemento finito faz-se recorrendo às funções de interpolação (funções de forma) do elemento. Deste modo, o vector de posição é dado pela expressão

$$\mathbf{x}^e = \sum_{a=1}^{NE} \tilde{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{x}_a^e, \quad a \in \{1, \dots, NE\}, \quad (9.1)$$

onde NE representa o número de nós do elemento, (ξ, η, ζ) é o sistema de coordenadas canónicas e $\tilde{\mathbf{N}}_a^e$ são as funções de forma do elemento e associadas ao nó a . De forma análoga, o campo de deslocamentos incrementais $\Delta \mathbf{u}$ é obtido a partir da expressão

$$\Delta \mathbf{u}^e(\mathbf{x}, t) = \sum_{a=1}^{NE} \check{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta) \Delta \mathbf{u}_a^e(t). \quad (9.2)$$

O elemento diz-se isoparamétrico se $\tilde{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta)$ e $\check{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta)$ forem iguais em todos os nós do elemento, isto é,

$$\tilde{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta) = \check{\mathbf{N}}_a^e(\xi, \eta, \zeta) = \mathbf{N}_a^e(\xi, \eta, \zeta). \quad (9.3)$$

A partir das expressões (9.1) e (9.2) podem deduzir-se novas expressões que permitem calcular o vector posição e o campo de deslocamentos incrementais de um ponto qualquer do sólido discretizado. Aquelas expressões podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\mathbf{x} = \sum_{a=1}^{NN} \mathbf{N}_a(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{x}_a, \quad (9.4)$$

$$\Delta \mathbf{u} = \sum_{a=1}^{NN} \mathbf{N}_a(\xi, \eta, \zeta) \Delta \mathbf{x}_a, \quad (9.5)$$

onde NN é o número total de nós. As funções de forma \mathbf{N}_a não são definidas no exterior do elemento [Zienkiewicz e Taylor 91].

9.2.3 Integração volúmica

A integração numérica pode ser dividido em duas etapas. A primeira consiste na transformação do integral sobre o elemento e , de domínio espacial Ω^e , a um integral sobre o elemento canónico correspondente. A segunda consiste na aplicação do método da quadratura de Gauss-Legendre, que aproxima o integral por um conjunto de somatórios.

A primeira etapa de todo este processo pode ser dada por

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{G}(x, y, z) dx dy dz = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}) \det [\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi})] d\xi d\eta d\zeta, \quad (9.6)$$

onde

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}) \quad (9.7)$$

representa a matriz jacobiana da transformação entre o referencial canónico $\boldsymbol{\xi}$ e o referencial cartesiano global \mathbf{x} . A segunda etapa, que se baseia na aplicação da quadratura de Gauss-Legendre, é dada pela expressão

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}) \det [\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi})] d\xi d\eta d\zeta = \sum_{m=1}^{n_\xi} \sum_{j=1}^{n_\eta} \sum_{i=1}^{n_\zeta} \omega_i \omega_j \omega_m \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}_g) \det [\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi}_g)], \quad (9.8)$$

em que n_ξ , n_η e n_ζ são os números de pontos de integração de Gauss do elemento e em cada coordenada canónica. $\boldsymbol{\xi}_g$ é o vector posição do ponto de Gauss g , em coordenadas canónicas, e ω_i , ω_j e ω_m representam os pesos de integração. Considerando que,

$$\omega_i \omega_j \omega_m \det [\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi}_g)] = \text{Peso}, \quad (9.9)$$

a integração numérica pode ser reescrita, de forma simplificada, como

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{G}(x, y, z) dx dy dz = \sum_{m=1}^{n_\xi} \sum_{j=1}^{n_\eta} \sum_{i=1}^{n_\zeta} \text{Peso} \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}_g). \quad (9.10)$$

9.2.4 Métodos de integração

Os elementos sólidos isoparamétricos apresentam um comportamento deficiente quando utilizados na resolução de problemas que envolvem deformação plástica [Nagtegaal *et al.* 74]. Este facto é devido ao caracter isocórico da deformação plástica. Tal se deve ao facto da integração completa conduzir a um aumento da rigidez do elemento. Consequentemente, os afastamentos à conservação de volume são compensados por uma deformação volúmica de origem elástica, de onde resultam tensões hidrostáticas artificialmente elevadas [Belytschko *et al.* 00]. Um processo para minimizar este problema é reduzir-se o número de pontos de integração do elemento. Porém, esta técnica pode conduzir ao aparecimento de modos de energia nulos ou deformação própria², deteriorando a solução do problema. Outros processos são a utilização de métodos de integração melhorada³ ou métodos de integração reduzida selectiva. Nos primeiros métodos, o tensor de deformações é decomposto numa parte compatível com o campo de deslocamentos do elemento e outra que é introduzida de forma a ultrapassar a excessiva rigidez do elemento, melhorando o seu comportamento [Alves 03, Simo e Hughes 98]. Os segundos métodos, que constituem o melhor compromisso entre a qualidade de resultados e o tempo de cálculo, combinam a integração completa para os termos desviadores e a integração reduzida uniforme para os termos volumétricos da matriz rigidez e do vector das forças internas [Malkus e Hughes 78, Hughes 80, Hughes 87].

Interpolação dos campos cinemáticos

A discretização dos campos de velocidade \mathbf{v} e de velocidade virtual $\delta\mathbf{v}$ são dadas pelas expressões

$$\mathbf{v} = \sum_{a=1}^{NE} \mathbf{N}_a^e \mathbf{v}_a^e, \quad (9.11)$$

$$\delta\mathbf{v} = \sum_{a=1}^{NE} \mathbf{N}_a^e \delta\mathbf{v}_a^e. \quad (9.12)$$

Nas expressões anteriores, \mathbf{v}_a^e e $\delta\mathbf{v}_a^e$ designam a velocidade nodal e a velocidade virtual nodal no nó a , respectivamente. Com as equações (9.11) e (9.12) é possível reescrever os

²Hourglass modes.

³Enhanced assumed strain methods.

tensores gradiente de velocidade \mathbf{L} e de velocidade virtual $\delta\mathbf{L}$ do seguinte modo:

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{a=1}^{NE} \frac{\partial \mathbf{N}_a^e}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{v}_a^e, \quad (9.13)$$

$$\delta\mathbf{L} = \frac{\partial(\delta\mathbf{v})}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{a=1}^{NE} \frac{\partial \mathbf{N}_a^e}{\partial \mathbf{x}} \delta\mathbf{v}_a^e. \quad (9.14)$$

Em integração completa, os tensores \mathbf{L} e $\delta\mathbf{L}$ são calculados na totalidade dos pontos de integração de Gauss do elemento.

Integração reduzida selectiva

No processo da integração reduzida selectiva introduz-se uma correcção na componente hidrostática do gradiente da velocidade. Esta correcção consiste na substituição da componente hidrostática do gradiente da velocidade calculado em cada ponto de integração do elemento por outra calculada no centro do elemento. Assim, assume-se que as componentes hidrostáticas dos gradientes da velocidade e da velocidade virtual constantes em todo o elemento.

Analiticamente, decompõe-se o tensor \mathbf{L} nas partes desviadora \mathbf{L}' e hidrostática \mathbf{L}^h , ou seja,

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}' + \mathbf{L}^h, \quad (9.15)$$

em que

$$\mathbf{L}^h = \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{L}). \quad (9.16)$$

Na formulação utilizada deve substituir-se o tensor gradiente de velocidade, \mathbf{L} , por um novo tensor $\bar{\mathbf{L}}$ definido de acordo com:

$$\bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L} + \bar{\mathbf{L}}^h - \mathbf{L}^h, \quad (9.17)$$

em que $\bar{\mathbf{L}}^h$ é a componente hidrostática corrigida do tensor gradiente de velocidade. Comummente, $\bar{\mathbf{L}}^h$ é avaliado unicamente no ponto de integração central.

Numericamente, a integração reduzida selectiva influencia o cálculo da matriz das derivadas das funções de forma do elemento. Por essa razão, este método é, muitas vezes, denominado por método \bar{B} . Desta forma, a matriz das derivadas das funções de forma, \mathbf{B}_a , é substituída por uma matriz corrigida, $\bar{\mathbf{B}}_a$. \mathbf{B}_a é definida do seguinte modo:

$$\mathbf{B}_a \stackrel{def}{=} \begin{bmatrix} B_1 & 0 & 0 \\ 0 & B_2 & 0 \\ 0 & 0 & B_3 \\ B_2 & B_1 & 0 \\ 0 & B_3 & B_2 \\ B_3 & 0 & B_1 \end{bmatrix}, \quad (9.18)$$

em que

$$B_i = \frac{\partial N_a}{\partial x_i} \quad \text{com} \quad i = 1, \dots, 3 \quad \text{e} \quad x_i = (x, y, z). \quad (9.19)$$

Seja $\mathbf{B}_a^{\text{dil}}$ a parte de \mathbf{B}_a correspondente à dilatação, dada por:

$$\mathbf{B}_a^{\text{dil}} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (9.20)$$

e \mathbf{B}'_a a respectiva parte desviadora, isto é

$$\mathbf{B}'_a = \mathbf{B}_a - \mathbf{B}_a^{\text{dil}}. \quad (9.21)$$

Define-se a matriz $\bar{\mathbf{B}}_a$ pela seguinte expressão:

$$\bar{\mathbf{B}}_a = \mathbf{B}'_a + \bar{\mathbf{B}}_a^{\text{dil}} \quad (9.22)$$

em que

$$\bar{\mathbf{B}}_a^{\text{dil}} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (9.23)$$

A matriz $\bar{\mathbf{B}}_a$ pode assim ser escrita de forma explícita como

$$\bar{\mathbf{B}}_a = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2B_1 + \bar{B}_1 & \bar{B}_2 - B_2 & \bar{B}_3 - B_3 \\ \bar{B}_1 - B_1 & 2B_2 + \bar{B}_2 & \bar{B}_3 - B_3 \\ \bar{B}_1 - B_1 & \bar{B}_2 - B_2 & 2B_3 + \bar{B}_3 \\ 3B_2 & 3B_1 & 0 \\ 0 & 3B_3 & 3B_2 \\ 3B_3 & 0 & 3B_1 \end{bmatrix}. \quad (9.24)$$

O procedimento $\bar{\mathbf{B}}$ reduz-se às definições apropriadas dos termos \bar{B}_i da matriz anterior [Hughes 87]. Diversas propostas têm sido apresentadas. A proposta mais simples prende-se com o cálculo das derivadas parciais de \bar{B}_i , com $i = 1, \dots, 3$, unicamente no ponto central de integração.

Formulação da dilatação média

Outro método, proposto por Nagtegaal [Nagtegaal *et al.* 74, Hughes 87] e que conduz a melhores resultados, é o método da formulação da dilatação média generalizado. Neste método, adoptado neste trabalho, calcula-se uma matriz $\tilde{\mathbf{B}}$ de média volúmica, tal que

$$\tilde{\mathbf{B}} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \mathbf{B} dV, \quad (9.25)$$

de forma a que $\bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}}$, dada pela relação (9.22), seja constituída pela parte dilatacional de $\bar{\mathbf{B}}$. Apenas três termos de $\bar{\mathbf{B}}$ são necessários para calcular $\bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}}$, são eles

$$\bar{B}_1 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial x} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial x} dV, \quad (9.26)$$

$$\bar{B}_2 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial y} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial y} dV, \quad (9.27)$$

$$\bar{B}_3 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial z} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial z} dV. \quad (9.28)$$

Este método permite controlar o volume e incompressibilidade do elemento. O volume do elemento é calculado através do determinante da matriz Jacobiana, isto é,

$$V^e = \sum_{i=1}^{NE} \det(\mathbf{J}_i). \quad (9.29)$$

Estabilização dos modos de energia nulos - Método de Nakamura

O método \bar{B} , que impõe uma pressão constante ao longo do elemento, pode introduzir modos espúrios de energia nulos⁴. Este facto pode ser demonstrado simulando a compressão de um bloco em deformação plana, onde a extremidade é restringida, impedindo a expansão lateral. As diferenças entre as deformadas com e sem a modificação \bar{B} são consideravelmente significativas [Gullerud *et al.* 02].

Este comportamento pode ser corrigido recorrendo a um procedimento simples de estabilização, sugerido por Nakamura [Nakamura *et al.* 86]. Este método substitui uma fracção de $\bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}}$ pela fracção equivalente de \mathbf{B}^{dil} . Desta forma,

$$\bar{\mathbf{B}} = \mathbf{B}' + \bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}} + \chi \left[\mathbf{B}^{\text{dil}} - \bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}} \right]. \quad (9.30)$$

Na expressão (9.30), quando $\chi = 0$, obtém-se a forma completa de $\bar{\mathbf{B}}$. Quando $\chi = 1$, obtém-se a matriz \mathbf{B} convencional. Este método, implementado no programa desenvolvido neste trabalho, não acarreta custos computacionais adicionais àqueles necessários ao método \bar{B} .

9.2.5 Gradientes de temperatura em elementos lineares

Sempre que é necessário prescrever temperaturas em nós do modelo geométrico (temperaturas prescritas), podem ocorrer gradientes de temperatura elevados no elemento. Elementos com aproximações lineares dos deslocamentos comportam-se deficientemente sob estas condições (*i.e.*, exibem fenómenos de retenção de corte⁵). De forma a suavizar este comportamento, no cálculo elementar mecânico e das deformações elementares, as temperaturas nos nós do elemento podem ser homogeneizadas. Neste caso, calcula-se a temperatura média em cada elemento. Posteriormente, esta temperatura é considerada como a temperatura nos nós do elemento. Este procedimento é realizado unicamente para o cálculo elementar mecânico. Desta forma, e opcionalmente, a mudança de temperatura ao longo do elemento passa a ser uniforme.

⁴Do inglês *spurious hourglass modes*

⁵Do inglês *shear locking*.

9.3 Algoritmos Mais Relevantes

Nesta secção descreve-se o algoritmo global do programa NOSTRADAMUS bem como os algoritmos específicos mais relevantes. Destes, destacam-se os algoritmos das fases de cálculo mecânico e térmico, o algoritmo de rotação do referencial de ortotropia e de cálculo do tensor rotação, o algoritmo da resolução do sistema global de equações e da aplicação das condições de fronteira.

9.3.1 Visão global do programa

O núcleo central do programa desenvolvido pode ser dividido em cinco módulos distintos: (i) leitura dos dados, definições do problema e gestão de variáveis; (ii) controlo do processo incremental; (iii) cálculo térmico; (iv) cálculo mecânico e (v) preparação e escrita de resultados.

Este programa, devido à sua modularidade, possibilita adicionar ou modificar qualquer um dos módulos (ou submódulos) que o compõem sem alterar a sua estrutura global. Deste modo, é possível, de forma simples, evoluir e estender o programa aqui proposto em diversos pontos, nomeadamente nos modelos de comportamento mecânico e térmico dos materiais, nos elementos finitos e seus métodos de integração e métodos de resolução do sistema global de equações.

O algoritmo global do programa apresentado encontra-se descrito de forma sintética no quadro 9.1. A primeira fase neste algoritmo é dedicada às definições de variáveis, à leitura e verificação dos dados de entrada e à definição dos ficheiros de saída. Nesta fase define-se todo o estudo termomecânico a efectuar, bem como todas as variáveis de controlo do cálculo.

A fase de cálculo, descrita na subsecção 9.3.2, encontra-se no interior do ciclo dos incrementos de tempo. A solução termomecânica é determinada a partir de um algoritmo *staggered*. Isto significa que a solução térmica é calculada em primeiro lugar e só depois se calcula a solução mecânica. A utilização de tamanhos de incrementos de tempo razoáveis pode obrigar a um ciclo iterativo de convergência do acoplamento termomecânico. Neste, a convergência é atingida quando a correcção das temperaturas ou dos deslocamentos é menor do que uma tolerância predeterminada. Para incrementos temporais pequenos, este ciclo torna-se desnecessário.

Nas fases de cálculo térmico e mecânico existem saídas intermédias de resultados que permitem ao utilizador acompanhar o cálculo. Após o fim das fases de cálculo, constroem-se os ficheiros de saída de resultados. Estes ficheiros contêm toda a informação respeitante à geometria actualizada, temperatura, campos de deformação e tensão, etc. e poderão ser utilizados na fase de pós-processamento.

9.3.2 Algoritmo da fase de cálculo

A fase de cálculo é dividida nos módulos de cálculo térmico e cálculo mecânico. O algoritmo de cálculo térmico encontra-se descrito sucintamente no quadro 9.2. Este algoritmo goza de uma estratégia de cálculo do tipo *Previsão-Correcção* (ver secção 8.5). A primeira parte da fase do cálculo térmico diz respeito à inicialização de variáveis e alocação de memória. Na fase de *Previsão* calcula-se uma primeira estimativa do campo de temperaturas e o tamanho de incremento óptimo. Na fase de *Correcção* determina-se, a partir da solução

Tabela 9.1: Descrição sintética do algoritmo global do programa NOSTRADAMUS.

<p>NOSTRADAMUS</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Definições, dimensionamentos e gestão de memória 2. Leitura e verificação dos dados de entrada <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Leitura dos ficheiros de dados de entrada 2.2. Definição do modelo (geometria e malha) 2.3. Condições de fronteira do problema mecânico 2.4. Condições de fronteira do problema térmico 2.5. Definição do processo, materiais e parâmetros de cálculo 4. Inicialização de variáveis 5. REPETIR - Ciclo dos incrementos de tempo <ol style="list-style-type: none"> 5.1. Controlo de Δt, $\Delta \mathbf{T}$ e $\Delta \mathbf{u}$ 5.2. REPETIR - Ciclo de acoplamento: <ol style="list-style-type: none"> 5.2.1. Controlo de convergência 5.2.2. Cálculo térmico (subsecção 9.3.2) 5.2.2. Cálculo mecânico (subsecção 9.3.2) ATÉ convergência 5.3. Actualizar condições de fronteira e propriedades dos materiais ATÉ fim do processo 6. Saída de resultados: <ol style="list-style-type: none"> 6.1. Geometria e temperatura final 6.2. Campos (tensões, deformações, fluxos, etc.)

encontrada da fase de *Previsão*, a solução exacta de temperaturas e fluxos de calor. A fase de *Correcção* utiliza uma estratégia implícita baseada no método de Newton-Raphson (ver subsecção 8.3.2). Após o módulo de cálculo térmico, as temperaturas são actualizadas e, conjuntamente com os parâmetros de convergência, são escritas em ficheiros de saída.

O algoritmo da fase de cálculo mecânico, onde se apresentam as várias fases envolvidas na determinação do estado do material num incremento de tempo, encontra-se representado no quadro 9.3. Neste algoritmo realiza-se de um conjunto de cálculos elementares que levam à construção do sistema de equações global (ponto 3.2 do quadro 9.3). Da resolução do sistema de equações obtém-se os incrementos de deslocamento. Estes, posteriormente, dão origem aos incrementos de deformação. Após o cálculo das funções constitutivas, determinam-se os incrementos de tensão no referencial ortotrópico.

O cálculo mecânico, apresentado no quadro 9.3, poderá ter um algoritmo complementar de controlo automático do tamanho do incremento de tempo. Este algoritmo, baseado na medição das alterações da velocidade de deformação plástica, poderá otimizar o incremento. Para mais detalhes sobre o assunto ver [Teixeira-Dias 99, Teixeira-Dias e Menezes 01b].

O sistema global é construído a partir dos cálculos elementares, esquematizados no quadro 9.4. Estes cálculos iniciam-se com a determinação da matriz de dilatação média, descrita na secção 9.2.4. Dentro do ciclo para cada ponto de integração de Gauss do elemento calcula-se a matriz módulo elastoviscoplastico secante e a matriz $\bar{\mathbf{B}}$ para a

Tabela 9.2: Descrição sintética do algoritmo da fase de cálculo térmico.

<p>CÁLCULO TÉRMICO</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Inicialização de variáveis 2. Fase de <i>Previsão</i> <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Cálculo de \mathbf{C}, \mathbf{K}, \mathbf{Q} e \mathbf{f} para \mathbf{T}_t 2.2. Cálculo de $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^0$ 2.3. Controlo do incremento. Se não aceitável voltar a 2 3. Fase de <i>Correcção</i> (utilizando $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^0$ como estimativa inicial) <ol style="list-style-type: none"> 3.1 REPETIR - Ciclo iterativo $k = 1, \dots, N_{\max}$ <ol style="list-style-type: none"> 3.1.1. Cálculo da correcção de temperatura $\Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^k$ 3.1.2. $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^k + \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^k \rightarrow \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{k+1}$ 3.1.3. Recalcular \mathbf{K}_{CT} e $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ 3.1.4. Cálculo do resíduo ATÉ convergência ou $k = N_{\max}$ 4. Actualização do campo de temperatura e saída de resultados
--

integração reduzida selectiva. Após estes cálculos, constrói-se a matriz rigidez e segundo membro elementar.

9.3.3 Cálculo do tensor rotação

De forma a que a lei de comportamento esteja preparada para grandes transformações, é necessário efectuar uma mudança de referencial nas grandezas tensoriais (ver subsecção 7.2.1). Esta transformação ilustra-se esquematicamente na figura 9.2. Nesta figura, $\hat{\mathbf{A}}$ e \mathbf{A} são grandezas tensoriais arbitrárias nos referenciais ortotrópico e global, respectivamente. \mathbf{R}_t e $\mathbf{R}_{t+1/2\Delta t}$ são o tensor rotação na configuração inicial e intermédia do incremento, respectivamente.

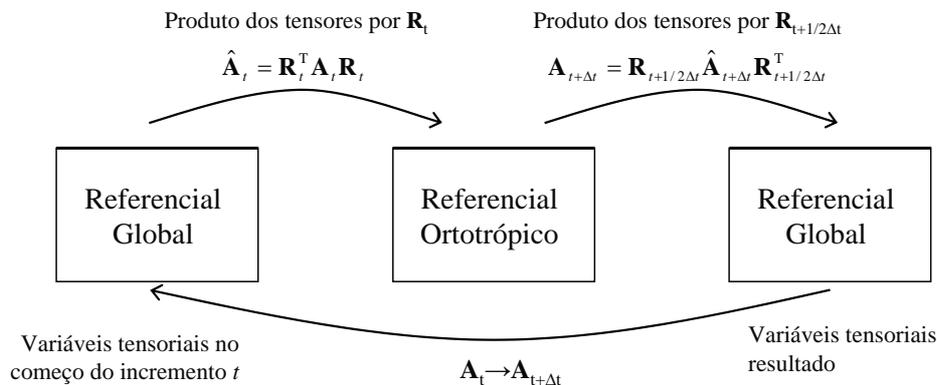


Figura 9.2: Representação esquemática da mudança de referencial ao longo do cálculo tensorial.

Tabela 9.3: Descrição sintética do algoritmo da fase de cálculo mecânico do programa.

<p>CÁLCULO MECÂNICO</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Reinicialização de variáveis e tabelas para o incremento 2. Cálculo dos parâmetros dependentes da temperatura 3. REPETIR - Ciclo de optimização do incremento <ol style="list-style-type: none"> 3.1 REPETIR - Ciclo para todos os elementos <ol style="list-style-type: none"> 3.1.1. Localização de temperaturas e coordenadas do elemento 3.1.1. Atribuição de propriedades ao elemento 3.1.2. Inicialização de \mathbf{k}_{ab}^e e $\Delta \mathbf{f}_a^e$ 3.1.3. Cálculos elementares mecânicos (quadro 9.4) 3.1.4. Agregação para o sistema global. Matrizes \mathbf{K}_{AB} e $\Delta \mathbf{F}_A$ ATÉ fim dos elementos 3.2. Resolução do sistema global $\sum_{B=1}^{NN} [\mathbf{K}_{AB}] \{\Delta \mathbf{u}_B\} = \{\Delta \mathbf{F}_A\}$ 3.3. Cálculo dos incrementos de deformação $\Delta \hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ <ol style="list-style-type: none"> 3.3.1. Cálculo do gradiente dos deslocamentos 3.3.2. Determinação das deformações incrementais 3.3.3. Cálculo do gradiente de transformação \mathbf{F} ou \mathbf{r} 3.3.4. Cálculo do tensor rotação \mathbf{R} 3.3.5. Determinação dos ângulos do referencial de ortotropia 3.4. Cálculo das funções constitutivas e dos incrementos de tensão $\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 3.5. Eventual optimização do tamanho do incremento Δt ATÉ optimização atingida 4. Actualização do estado do material <ol style="list-style-type: none"> 4.1. Cálculo do incremento das tensões 4.2. Actualização das tensões e das variáveis constitutivas 4.3. Cálculo da tensão equivalente 4.4. Cálculo da deformação total efectiva 4.5. Voltar ao referencial global no final do incremento 5. Saída de ficheiros de resultados

Tabela 9.4: Descrição sintética do algoritmo dos cálculos elementares mecânicos.

<p>CÁLCULOS ELEMENTARES MECÂNICOS</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Cálculo de $\bar{\mathbf{B}}$ para a formulação da dilatação média 2. REPETIR - Ciclo para os pontos de integração do elemento <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Construção do módulo elastoviscoplastico secante \mathbf{C}^{sec} <ol style="list-style-type: none"> 2.1.1. Cálculo do tensor desviador das tensões $\boldsymbol{\sigma}'$ 2.1.2. Rotação para o referencial ortotrópico 2.1.3. Construção da matriz $\hat{\mathbf{C}}_t^{\text{mod}}$ 2.1.4. Cálculo da matriz $\hat{\mathbf{C}}^{\text{sec}} = \hat{\mathbf{C}}_t^{\text{mod}} - K_1 \hat{\boldsymbol{\theta}}_t'$ 2.1.5. Rotação para o referencial global 2.2. Cálculo da matriz \mathbf{B} 2.3. Cálculo da matriz $\bar{\mathbf{B}}$ (integração reduzida selectiva) 2.4. Construção da matriz rigidez elementar \mathbf{k}_{ab} 2.5. Construção do segundo membro elementar $\Delta \mathbf{f}_a$ <ol style="list-style-type: none"> 2.5.1. Adição da contribuição da dilatação térmica 2.5.2. Adição das forças e pressões impostas ATÉ todos pontos de integração do elemento
--

A determinação do tensor rotação pode ser realizada pelo (i) método da decomposição polar $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ ou pelo (ii) método da rotação incremental, onde $\mathbf{R} = \mathbf{r}\mathbf{R}_t$ e \mathbf{r} é a rotação incremental associada ao tensor velocidade de rotação \mathbf{W} . Ambos os métodos utilizam o esquema do ponto médio generalizado. O esforço computacional requerido para levar a cabo a decomposição polar deve ser insignificante quando comparado com o esforço da resolução do sistema de equações. Contudo, este deve ser maior que o esforço necessário pelo segundo método. O algoritmo correspondente ao método da decomposição polar, sucintamente descrito no quadro 9.5, é composto por cinco etapas. A primeira etapa consiste, partindo do tensor gradiente de transformação, na computação do tensor direito de Cauchy-Green \mathbf{C} e do seu quadrado. Para extrair os valores próprios de \mathbf{C} utiliza-se um procedimento baseado na transformação de Jacobi, para matrizes 3×3 . Os valores próprios do tensor direito de Cauchy-Green são utilizados para calcular os invariantes de \mathbf{U} e o determinante do tensor gradiente da transformação. Posteriormente, com os invariantes de \mathbf{U} , calcula-se a matriz inversa \mathbf{U}^{-1} . Finalmente, o tensor rotação é calculado a partir do produto do tensor gradiente de transformação com a inversa de \mathbf{U} .

9.3.4 Resolução do sistema global

Mais de 30% do custo total de computação na simulação por elementos finitos é dispendido na resolução dos sistemas de equações. A implementação de algoritmos de resolução robustos, económicos e eficientes é assim de importância fundamental [Alves e Menezes 02]. A eficácia de um dado método de resolução, seja ele directo ou iterativo, depende do tipo de problema, da dimensão do problema e do padrão de zeros da matriz.

Tabela 9.5: Algoritmo do cálculo do tensor rotação pelo método da decomposição polar.

<p>MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO POLAR — CÁLCULO DE \mathbf{R}</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Computação do tensor de deformação (direito) de Cauchy-Green \mathbf{C} e do seu quadrado, \mathbf{C}^2 $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ $\mathbf{C}^2 = \mathbf{C}^T \mathbf{C} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ 2. Determinação dos valores próprios de \mathbf{C}: λ_1^2, λ_2^2 e λ_3^2 3. Cálculo dos invariantes de \mathbf{U} e o determinante de \mathbf{F} $I_U = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$ $II_U = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_1 \lambda_3$ $III_U = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = \det(\mathbf{F})$ 4. Cálculo da inversa de \mathbf{U} $\mathbf{U}^{-1} = \gamma_1 (\gamma_2 \mathbf{1} + \gamma_3 \mathbf{C} + \gamma_4 \mathbf{C}^2)$ <p>com $\gamma_i, \forall i = 1, \dots, 4$ definidos da seguinte forma</p> $\gamma_1 = \frac{1}{III_U(I_U II_U - III_U)}$ $\gamma_2 = \frac{I_U II_U^2 - III_U (I_U^2 - II_U)}{III_U(I_U II_U - III_U)}$ $\gamma_3 = -III_U - I_U (I_U^2 - 2II_U)$ $\gamma_4 = I_U$ 5. Determinação de \mathbf{R} pelo seguinte produto $\mathbf{R} = \mathbf{F} \mathbf{U}^{-1}$
--

Sistema termomecânico global

Em problemas acoplados, como é o caso dos problemas de acoplamento termomecânico analisados neste trabalho, é necessário o cálculo de mais de uma grandeza-base. No caso específico do trabalho que aqui se descreve, este cálculo refere-se aos deslocamentos e às temperaturas provenientes do cálculo mecânico e do cálculo térmico, respectivamente. Ambos os problemas exigem que se resolva, no mínimo, um sistema de equações lineares por incremento.

A resolução dos sistemas de equações térmico e mecânico pode ser simultânea, correspondendo à resolução do sistema de equações

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_M & \mathbf{K}_{MT} \\ \mathbf{K}_{TM} & \mathbf{K}_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \mathbf{T} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{F} \\ \mathbf{Q} \end{Bmatrix}, \quad (9.31)$$

ou independente, correspondente à resolução das equações (9.32).

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_M \Delta \mathbf{u}^{(i)} &= \Delta \mathbf{F} - \mathbf{K}_{MT} \mathbf{T}^{(i-1)} \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T}^{(i)} &= \mathbf{Q} - \mathbf{K}_{TM} \Delta \mathbf{u}^{(k)}, \quad k = i - 1 \quad \text{ou} \quad i \end{aligned} \quad (9.32)$$

\mathbf{K}_M e \mathbf{K}_T representam as matrizes rigidez dos sistemas mecânico e térmico, respectivamente. \mathbf{K}_{MT} e \mathbf{K}_{TM} representam as matrizes do acoplamento mecânico e térmico, respectivamente.

Neste trabalho adoptou-se uma solução de acoplamento *staggered* descrita pelas expressões (9.32), obrigando à resolução independente de cada sistema de equações. Tal

abordagem leva a uma solução mais eficiente em termos de tempo de computação. De facto, se o sistema de equações térmico tiver a dimensão $(n \times n)$, o sistema mecânico é de ordem $(3n \times 3n)$ e o sistema de equações totalmente acoplado terá dimensão $(4n \times 4n)$. O tempo necessário para resolver o sistema totalmente acoplado é superior à soma do tempo necessário para resolver os sistemas de equações térmico e mecânico. Desta forma, a solução *staggered* leva a um custo computacional inferior à solução totalmente acoplada.

Como no presente trabalho não se consideram condições de fronteira de atrito, a matriz global \mathbf{K} dos sistemas de equações mecânico e térmico é simétrica e em banda. Devido a esta propriedade, adoptou-se um método de armazenamento do tipo *skyline*, no qual, a matriz rigidez é armazenada por colunas, começando pelo primeiro coeficiente não-nulo e terminando no termo da diagonal. Este esquema de armazenamento é de implementação simples e eficiente no que respeita à gestão de memória.

Métodos de resolução do sistema de equações

Os métodos de resolução de sistemas de equações lineares podem dividir-se em dois grupos: (i) os métodos directos e (ii) os métodos iterativos. O custo computacional dos métodos iterativos é inferior ao dos métodos directos, apesar da conhecida robustez destes últimos. Em problemas de pequena dimensão, onde o custo computacional e a memória não são questões essenciais, é preferível adoptar um método directo. Todavia, em problemas de grande dimensão, os métodos de resolução directa não são competitivos face aos métodos directos. Nestes problemas, a opção pende para os métodos iterativos.

O programa NOSTRADAMUS possui, em opção, um método de resolução directa, do tipo de eliminação de Gauss, e um método iterativo, baseado no gradiente conjugado.

9.3.5 Aplicação e atribuição das condições de fronteira

No programa NOSTRADAMUS, as condições de fronteira mecânicas são: (i) deslocamentos prescritos e (ii) carregamentos pontuais ou de superfície. No problema térmico as condições de fronteira são: (i) temperatura prescrita; (ii) imposição de fluxos de calor e (iii) condições de convecção e radiação.

As condições de deslocamento prescrito podem ser aplicadas de diferentes formas. Os métodos mais comuns são o método da eliminação da equação e o método da multiplicação do coeficiente da diagonal [Rice 98, Carroll 00]. Além destes métodos, destaca-se o método da resolução do sistema de equações lineares global $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$, com incógnitas quer em \mathbf{u} quer em \mathbf{f} . Os referidos métodos foram implementados no programa que aqui se apresenta.

Método da eliminação da equação

Num grau de liberdade do tipo deslocamento prescrito, o valor do vector dos deslocamentos \mathbf{u} na equação i é já conhecido e toma o valor de α_i , isto é, $u_i = \alpha_i$. Consequentemente, a equação correspondente ao grau de liberdade do deslocamento imposto pode ser eliminada. A eliminação da equação é acompanhada com a atribuição do seu peso relativo à outras equações dos sistema.

Este método é eficiente no que respeita à gestão de memória. Além de diminuir o número de equações do sistema linear a resolver, este não afecta as propriedades da matriz rigidez global \mathbf{K} . O método da eliminação da equação não permite conhecer o valor do

vector força no grau de liberdade prescrito, visto que a equação correspondente é eliminada do sistema linear.

Método da multiplicação do coeficiente da diagonal

Neste método, a imposição de deslocamento prescrito $u_i = \alpha_i$ consegue-se multiplicando o coeficiente K_{ii} da matriz rigidez do sistema $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ por um valor H muito elevado⁶ e substituindo a componente de força f_i por $\alpha_i K_{ii} H$. Assim, a equação i , inicialmente da forma

$$\cdots + K_{i(i-1)}u_{i-1} + K_{ii}u_i + K_{i(i+1)}u_{i+1} + \cdots = f_i, \quad (9.33)$$

é modificada, dando origem a

$$\cdots + K_{i(i-1)}u_{i-1} + K_{ii}Hu_i + K_{i(i+1)}u_{i+1} + \cdots = \alpha_i K_{ii}H \quad (9.34)$$

O termo $\alpha_i K_{ii}H$ domina todo o lado direito da equação, sendo a expressão (9.34) aproximadamente equivalente à condição requerida. Este método não afecta as propriedades de banda e simetria da matriz rigidez.

Método da resolução do sistema de equações com incógnitas em \mathbf{u} e \mathbf{f}

O problema dos deslocamentos prescritos pode ser formulado da seguinte forma: se o sistema de equações apresentar incógnitas tanto no vector \mathbf{u} como no vector \mathbf{f} e se for garantida a unicidade das soluções, este pode ser transformado num sistema de equações lineares e é possível de ser solucionado. No sistema de equações $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$, quando u é conhecido (deslocamento prescrito), desconhece-se f da mesma equação. E sempre que o deslocamento u não é conhecido (incógnita), conhece-se o valor de f . Assim, teremos um sistema de n_{eqn} equações lineares com n incógnitas, tal que $n_{\text{eqn}} = n$.

A resolução do sistema inicial $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ passa, primariamente, pela sua transformação num sistema de equações linear $\mathbf{K}'\mathbf{u}' = \mathbf{f}'$ cujos coeficientes de \mathbf{K}' e \mathbf{f}' são conhecidos. Esta transformação dá-se, sendo α um deslocamento previamente conhecido, por

$$\forall i, j \in [1, NN3], k' = (\exists \alpha_j : K'_{ii} = -1 \wedge K'_{ij}) \vee (\exists u_j \neq \alpha_j : K'_{ij} = K_{ij}); \quad (9.35)$$

$$\forall i, j \in [1, NN3], u' = (\exists \alpha_i : u'_i = f_i) \vee (\exists u_i \neq \alpha_i : u'_i = u_i); \quad (9.36)$$

$$\forall i, j \in [1, NN3], f' = (\exists \alpha_j : f'_i = f'_i - K_{ij}\alpha_j) \vee (\exists u_i \neq \alpha_i : f'_i = f'_i - f_i), \quad (9.37)$$

em que $NN3$ representa a dimensão máxima possível da matriz \mathbf{K} e dos vectores \mathbf{u} e \mathbf{f} . Posteriormente, dá-se a resolução do sistema de equações lineares $\mathbf{K}'\mathbf{u}' = \mathbf{f}'$.

A anterior transformação conduz a um sistema em que matriz \mathbf{K}' não goza das propriedades da matriz \mathbf{K} , perdendo a simetria. Por isso, este método tem um custo elevado de memória. Porém, apresenta a vantagem da total modularidade e de se calcular simultaneamente o vector força.

⁶ H é tipicamente da ordem de 10^{20} . Este valor corresponde a um valor elevado admitido por todos os compiladores e processadores.

9.4 Perspectiva do Utilizador

Nos dias de hoje, a interface gráfica toma um papel importante nos programas de simulação. Na figura 9.3 representa-se de forma esquemática o funcionamento da interface de utilizador do programa NOSTRADAMUS, desde os ficheiros intervenientes na interface gráfica de pré-processamento até aos ficheiros de entrada e saída. Desta figura, destaca-se a total interacção e integração com o programa GiD[®].

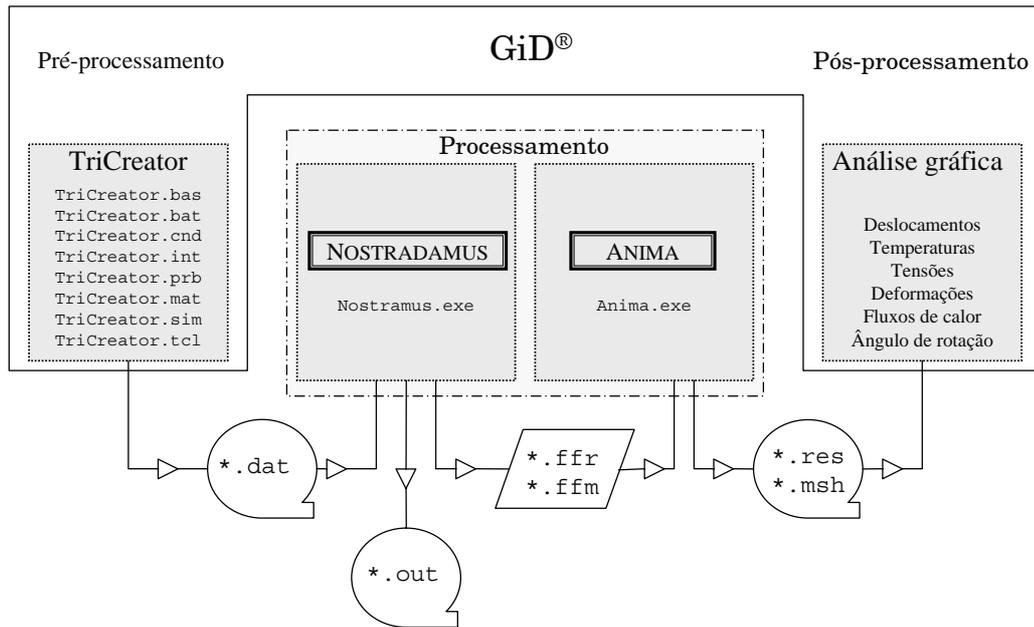


Figura 9.3: Representação esquemática do princípio de funcionamento do programa NOSTRADAMUS na perspectiva do utilizador. Destaca-se a total integração gráfica no programa GiD[®].

O programa GiD[®] pode ser adaptado pela criação de um *problema-tipo*⁸. Este *problema-tipo*, constituído por diversos ficheiros em linguagem de programação específica, fornece a informação de como são atribuídas as condições de fronteira, materiais e toda a informação necessária para a análise. A adaptação gráfica do programa GiD[®] é feita com recurso ao desenvolvimento de ficheiros adicionais, em linguagem TCL-TK.

Nas subsecções seguintes descrevem-se detalhadamente, com o auxílio do fluxograma da figura 9.3, as fases de pré-processamento e de pós-processamento ligadas ao programa NOSTRADAMUS. As referências a ficheiros de dados ou de resultados são feitas pelas extensões do próprio ficheiro, precedidas de um asterisco (*), como por exemplo o ficheiro de entrada *.dat. Este asterisco substitui o nome do problema, dado pelo utilizador.

⁷O nome GiD é uma marca registada do CIMNE - *International Center for Numerical Methods in Engineering*.

⁸Do inglês *problem-type*.

9.4.1 A fase de pré-processamento

Foi desenvolvida uma interface gráfica, com recurso a um *problema-tipo*, para os problemas termomecânicos retratados pelo programa NOSTRADAMUS. Esta interface, denominada por TriCreator (figura 9.4), permite: (1)criar a geometria do(s) sólido(s); (2)criar a malha de elementos finitos; (3)aplicar as condições de fronteira no sólido; (4) atribuir os parâmetros de cálculo; (5) seleccionar o tipo de material e (6) atribuir as propriedades do material.

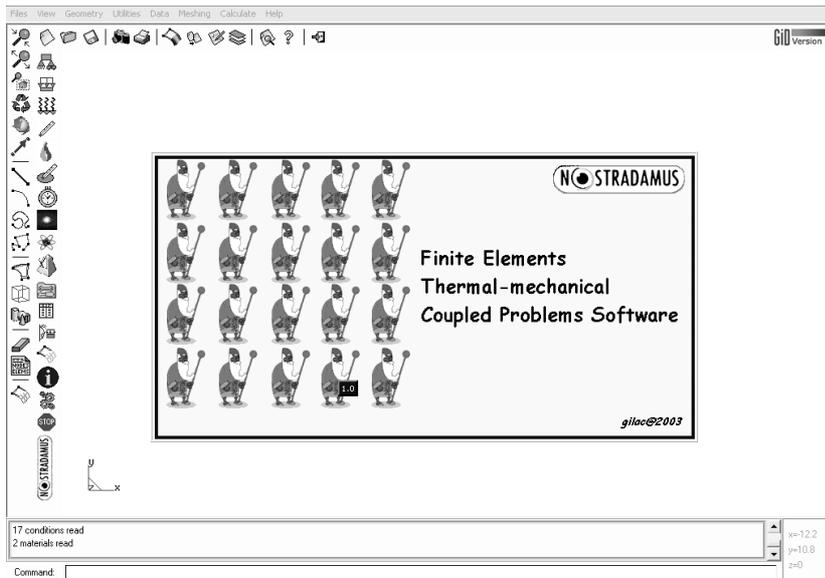
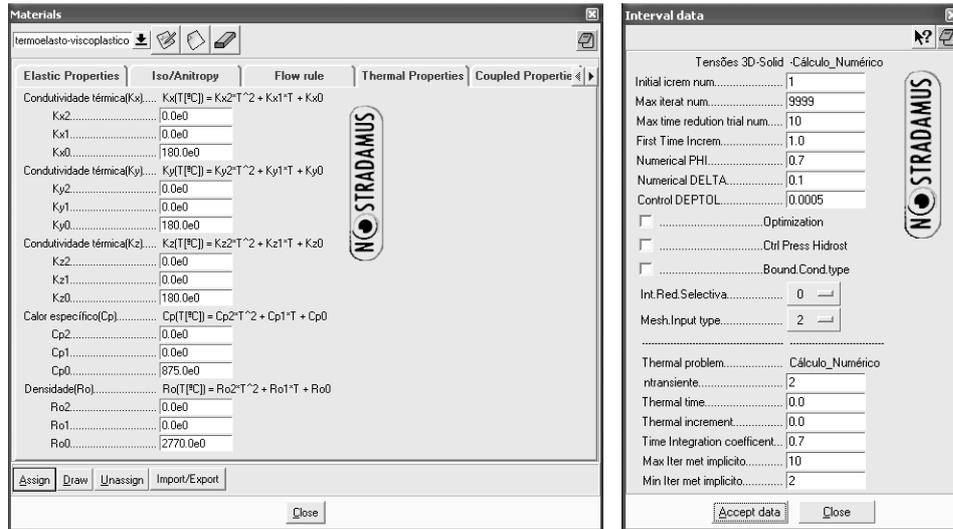


Figura 9.4: Janela de início da interface TriCreator no GiD®.

A interface TriCreator é constituída por 8 ficheiros, escritos nas linguagens GiD e TCL-TK. O ficheiro `TriCreator.mat` é responsável pela selecção do tipo de material e atribuição das suas propriedades (ver figura 9.5(a)). Os ficheiros `TriCreator.cnd` e `TriCreator.sim` são responsáveis pela atribuição e representação gráfica das condições fronteira e o ficheiro `TriCreator.bas` define a formatação do ficheiro de saída da interface e de entrada no programa NOSTRADAMUS (ficheiro `*.dat`). `TriCreator.int` define de forma gráfica todos os parâmetros de cálculo numérico (ver figura 9.5(b)). Estes parâmetros são todos os dados numéricos que não dizem respeito a questões geométricas nem à definição de malha. Definem questões como (i) o avanço numérico da integração temporal; (ii) a possibilidade e o controlo de optimização (iii) a definição do incremento de tempo inicial; (iv) o tipo de integração do elemento; (v) o número máximo de iterações em cada incremento; (vi) a periodicidade dos ficheiros de saída. O ficheiro `TriCreator.prb` define a configuração dos dados gerais do problema, como o tipo de processo tecnológico, o tempo total do processo, as temperaturas iniciais, etc. (ver figura 9.6). Por fim, `TriCreator.tcl` define a adaptação gráfica. Destacam-se os ícones de acesso rápido de atribuição das condições fronteira, de selecção dos parâmetros numéricos, de execução do programa, etc. (ver figura 9.4).

Após a definição do modelo geométrico, dos materiais e dos parâmetros de cálculo, a interface TriCreator cria um único ficheiro de extensão `dat` que contém todos os dados necessários ao cálculo. Este ficheiro `ascii` pode ser lido e modificado sem ser necessário recorrer ao pré-processor gráfico. Após a criação do ficheiro `*.dat`, a interface TriCreator



(a)

(b)

Figura 9.5: Interface TriCreator no programa GiD[®]: (a) janela atribuição das propriedades dos materiais e (b) janela de atribuição dos parâmetros de cálculo numéricos.

executa o programa NOSTRADAMUS.

9.4.2 A fase de pós-processamento

Pelo esquema da figura 9.3 pode ver-se que o programa Nostradamus cria três tipos de ficheiros: *.out, *.ffr e *.ffm. Os ficheiros de saída de extensão out contêm resultados da evolução do cálculo mecânico e do térmico. Estes permitem ao utilizador acompanhar o processo à medida que este é realizado e, de modo a analisar a evolução das variáveis, podem ser tratados numa folha de cálculo.

Os ficheiros de saída *.ffr e *.ffm contêm toda a informação sobre os resultados obtidos e sobre a malha inicial de elementos finitos, respectivamente. Estes ficheiros binários são criados periodicamente.

Após a execução do programa NOSTRADAMUS, os ficheiros *.ffr e *.ffm são lidos pelo programa ANIMA. Este programa transforma os ficheiros *.ffr e *.ffm em ficheiros pós-processamento *.res e *.msh (ou *.flavia.res e *.flavia.msh), respectivamente. Estes ficheiros sequenciais de formato específico são lidos pelo pós-processador GiD[®]. O programa ANIMA contém a possibilidade de leitura de vários ficheiros *.ffr criados ao longo do cálculo. Esta possibilidade permite criar um ficheiro de sequência de imagens de resultados (animação).

Através do programa GiD[®], o pós-processamento termina com a visualização e análise dos resultados obtidos e definidos nos ficheiros *.res e *.msh por meio de figuras de isovalores. Também é possível, neste programa, analisar por meio de gráficos a evolução das variáveis de estado em pontos pertencentes ao modelo geométrico.

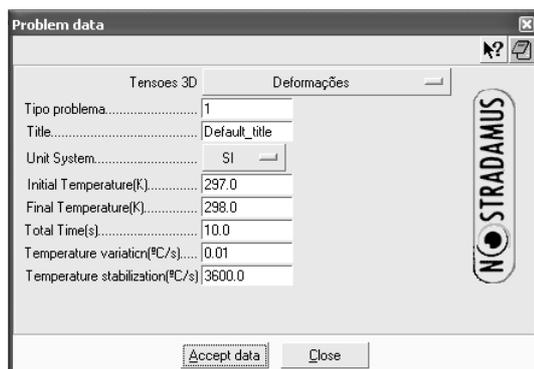


Figura 9.6: Janela de especificação do tipo de problema e dos parâmetros do processo tecnológico. Interface TriCreator no programa GiD®.

9.4.3 Integração gráfica

O uso de um programa de simulação por um utilizador não-conhecedor do código pode ser crítico se este for obrigado a preencher ou substituir linhas no código-fonte. A dificuldade também se manteria se for necessário o preenchimento de um ficheiro formatado com os dados de entrada. Para evitar todas as dificuldades de utilização do programa, este foi totalmente integrado graficamente.

Analisando mais uma vez o esquema da figura 9.3, realça-se que tanto o programa NOSTRADAMUS como o programa ANIMA estão integrados na interface TriCreator/GiD®. O ficheiro `TriCreator.bat` coordena a execução ordenada de cada um dos programas, escreve mensagens de erro e possibilita o acompanhamento da evolução do cálculo com o auxílio de janelas (criadas no programa GiD®). Também é possível a leitura dos ficheiros de saída a partir do conjunto TriCreator/GiD® sem recorrer a um editor de texto.

Desta forma, o programa NOSTRADAMUS, auxiliado pelas suas interfaces, pode ser utilizado por utilizadores menos experientes e desconhecedores da fase de cálculo.

Capítulo 10

Identificação de Parâmetros de Modelos Constitutivos

Apresenta-se a metodologia geral da determinação de parâmetros de modelos constitutivos. Descreve-se pormenorizadamente a utilização de métodos de optimização baseados no gradiente e em algoritmos evolucionários na determinação destes parâmetros. Introduce-se o programa desenvolvido para determinar os parâmetros do modelo de comportamento utilizado neste trabalho. Compara-se a eficiência do método de optimização implementado efectuando alguns testes genéricos.

10.1 Introdução

Presentemente, a simulação numérica assume uma parte relevante no desenvolvimento tecnológico de novos materiais e componentes. As comunidades industrial e científica, já habituadas à utilização de programas de simulação, tornam-se cada vez mais exigentes na precisão de resultados. Por este facto, nos últimos tempos, têm vindo a desenvolver-se técnicas cada vez mais complexas de forma a simular com maior exactidão o comportamento de diferentes materiais. Consequentemente, também têm sido apresentados diferentes modelos de comportamento para caracterizar os materiais num mais vasto campo de aplicações. Porém, muitas destas leis de comportamento exigem que se determine um número elevado de parâmetros ajustados ao material cujo comportamento se pretende simular.

O problema da identificação de parâmetros de modelos matemáticos, elaborados para descrever com precisão o comportamento de sistemas físicos, é bastante frequente na comunidade científica. De uma forma geral, quanto mais complexos são os sistemas físicos, mais complexos são os modelos e maior o número de parâmetros que é necessário determinar.

A identificação de parâmetros para um modelo de comportamento deve ser efectuada confrontando os resultados numéricos e/ou analíticos com resultados experimentais. A

partir do momento em que o número de ensaios experimentais aumenta e o número dos parâmetros passa de uma dezena, torna-se impraticável identificar os parâmetros de uma forma exploratória. Nestes casos, torna-se necessário abordar o problema recorrendo a uma formulação inversa que conduza à resolução de um problema de optimização não-linear [Cailletaud e Pilvin 94].

O modelo de comportamento utilizado neste trabalho é um modelo termoelástico-viscoplástico de variável interna com 15 parâmetros constitutivos. De forma a determinar os parâmetros constitutivos para diferentes materiais, utilizaram-se dois métodos de optimização distintos, a saber:

1. Método de optimização baseado no gradiente;
2. Método de optimização baseado em algoritmos evolutivos.

Os resultados obtidos pelos métodos de optimização baseados no gradiente são conhecidos por serem excessivamente dependentes dos parâmetros dados como iniciais [Polak 97]. Apesar destes métodos demonstrarem ser objectivos, devem ser utilizados repetidamente com diferentes conjuntos de parâmetros iniciais. Desta forma, minimiza-se a possibilidade de alcançar extremos locais. O algoritmo utilizado é uma combinação do método do maior declive [Polak 97] e do método de Levenberg-Marquardt [Marquardt 63]. Este último é uma evolução ao método clássico de Newton-Raphson e é frequentemente utilizado com a finalidade de aumentar a convergência do algoritmo [Cailletaud e Pilvin 94].

Os algoritmos evolucionários (AE) compreendem as estratégias evolucionárias, a programação evolucionária e os algoritmos genéticos (AG). Estes algoritmos são métodos de optimização muito robustos [Furukawa e Yagawa 97, Costa *et al.* 99]. Os algoritmos evolucionários são técnicas de busca e optimização propostas por John Holland e inspiradas no processo de evolução através de selecção natural sugerida por Darwin [Leal e Ramos 02]. Estas baseiam-se no processo colectivo de aprendizagem de uma população de indivíduos. Cada individuo representa um ponto de busca no espaço de potenciais soluções para um dado problema [Furukawa e Yagawa 97, Andrade-Campos *et al.* 04a]. Estes algoritmos evolucionários são muito utilizados e conduzem a bons resultados, por exemplo, na solução de problemas estruturais e de optimização de forma, etc. Os AE demonstram sucesso mesmo nos casos de problemas descontínuos, não-diferenciais e/ou multimodais.

Um método de optimização de inspiração genética foi utilizado de forma a determinar um conjunto de parâmetros de materiais adequados para o modelo constitutivo implementado. Este algoritmo contém diversos melhoramentos relativamente aos algoritmos genéticos clássicos, permitindo o uso de diversas técnicas de mutação, selecção, refinamento local, elitismo e cruzamento. Adicionalmente, este método não é influenciado pela selecção do conjunto inicial de parâmetros.

Neste capítulo apresentam-se os métodos de identificação e ajuste de parâmetros para modelos de comportamento de variável interna. Estes métodos de identificação de parâmetros são aplicáveis ao modelo termoelástico-viscoplástico utilizado neste trabalho.

10.2 Método de Identificação: Problema Inverso

O processo de determinação de parâmetros para o modelo de comportamento situa-se dentro da problemática denominada por *Identificação-Problemas Inversos*. Conhecendo a

resposta do problema físico, pretende-se fornecer informações à representação do comportamento desse sistema por um modelo matemático.

O estudo das observações experimentais permite, numa primeira abordagem, associar ao problema um modelo matemático. Posteriormente, essas experiências são utilizadas para identificar os diferentes parâmetros e coeficientes introduzidos nas equações do modelo. Esta identificação é efectuada resolvendo um *Problema Inverso*. Este consiste em procurar um conjunto de valores de parâmetros e coeficientes para o qual a comparação entre a realidade experimental e a da simulação do modelo se considera satisfatória. Esta metodologia está descrita esquematicamente na figura 10.1. De acordo com esta figura, a comparação entre os resultados da resposta do sistema físico e os resultados do modelo matemático traduz-se por um funcional de custo. Este funcional deverá ser avaliado posteriormente.

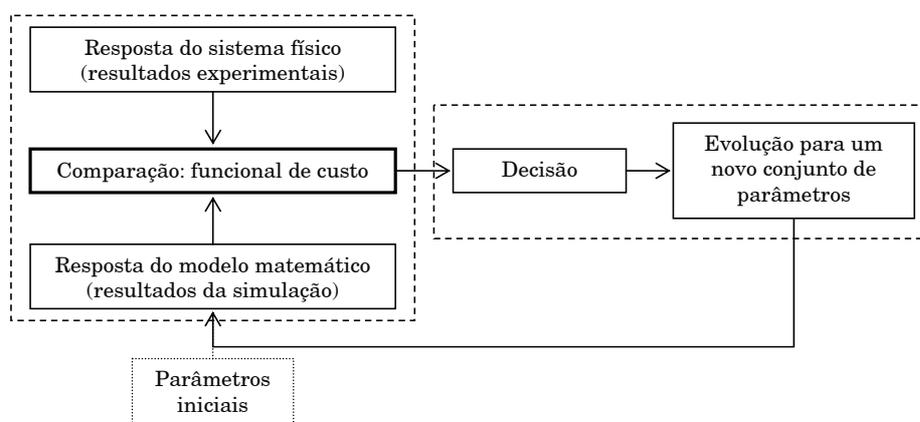


Figura 10.1: Metodologia do problema inverso na identificação de parâmetros.

Por vezes é possível obter conjuntos de parâmetros distintos, mas que tornam a comparação aceitável. Neste caso, cabe ao investigador julgar os resultados obtidos tendo em conta a definição e significado físico de cada parâmetro [Cailletaud e Pilvin 94].

A etapa da decisão e cálculo de um novo conjunto de parâmetros, com base no conjunto anterior e no valor do funcional de custo, deve ser alvo de optimização.

10.3 Metodologia de Identificação

A metodologia de identificação apoia-se no seguinte pressuposto, descrito na secção anterior: *o problema da determinação dos parâmetros do modelo de comportamento é colocado utilizando uma formulação inversa que, de forma geral, conduz à resolução de um problema de optimização não-linear.*

10.3.1 Formulação do problema de identificação

O processo de identificação opera, exclusivamente, com as variáveis que podem ser determinadas experimentalmente [Pilvin 90]. Frequentemente, a única informação disponível para este tipo de problemas são as observações experimentais. Geralmente, estas são o tempo, a deformação e a tensão. Consequentemente, torna-se necessário distinguir estas variáveis de outras variáveis no modelo.

Considere-se um sistema físico cujo comportamento pode ser descrito com o auxílio de um modelo matemático e sobre o qual é possível realizar experiências. Nestas experiências medem-se certas variáveis observáveis designadas por $\mathbf{Z}^T = [z_1, z_2, \dots, z_m]$. Em função do protocolo experimental, um certo número de variáveis são utilizadas de forma a comandar a experiência: elas definem o carregamento, ou entrada do sistema, e são definidas por \mathbf{Z}_e . A resposta do sistema a este carregamento é definida pela medida das variáveis observadas não-controladas \mathbf{Z}_s . Assim, e forma a manter a generalidade de todos os formalismos apresentados, o conjunto das relações matemáticas do modelo pode ser formalmente apresentado como

$$\Upsilon(\mathbf{Z}, \mathbf{A}, t) = 0, \quad (10.1)$$

onde $\mathbf{A} = [A_1, A_2, \dots, A_r]^T$ é o conjunto dos $r \in \mathbb{N}$ parâmetros do modelo intrínseco ao sistema estudado, onde o tempo t é introduzido como variável cronológica. As formas como a relação 10.1 se apresenta são muito diversas. Estas vão desde funcionais explícitos-implícitos, equações diferenciais/integrais, até sistemas de equações em derivadas parciais [Pilvin 90].

A resolução do problema de identificação consiste em minimizar o funcional que mede, para um conjunto de parâmetros \mathbf{A} dados, a diferença entre as previsões teóricas do modelo de comportamento, $\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}$, e a realidade física. Esta é representada pelas sequências de observações experimentais \mathbf{Z}_s^* [Cailletaud e Pilvin 94]. Este funcional, $\mathcal{L}(\mathbf{A})$, pode ser escrito na forma

$$\mathcal{L}(\mathbf{A}) = \sum_{q=1}^N \mathcal{L}_q(\mathbf{A}), \quad (10.2)$$

com

$$\mathcal{L}_q(\mathbf{A}) = \frac{1}{(t_1 - t_0)} \int_{t_0}^{t_1} [\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}(\mathbf{A}) - \mathbf{Z}_s^*]^T \mathbf{D}_q [\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}(\mathbf{A}) - \mathbf{Z}_s^*] dt. \quad (10.3)$$

N define o número de testes experimentais e (t_0, t_1) representa o intervalo de tempo do teste genérico q . \mathbf{D}_q é a matriz de peso associada ao teste q . A estimativa da diferença (desvio) entre a informação simulada e a experimental, $\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}(\mathbf{A}) - \mathbf{Z}_s^*$, considera, unicamente, as variáveis mesuráveis não-controladas durante os ensaios experimentais.

Numericamente, o integral na equação 10.3 pode ser aproximado por uma soma finita onde a diferença entre os valores do modelo e dos valores experimentais é unicamente avaliada em M_q instantes de observação, levando a

$$\mathcal{L}_q(\mathbf{A}) = \frac{1}{M_q} \sum_{i=1}^{M_q} [\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}(\mathbf{A}, t_i) - \mathbf{Z}_s^*(t_i)]^T \mathbf{D}_q [\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}(\mathbf{A}, t_i) - \mathbf{Z}_s^*(t_i)]. \quad (10.4)$$

A equação 10.4 representa o problema de optimização não-linear que deve ser resolvido. A matriz de peso \mathbf{D}_q é uma matriz diagonal cujos coeficientes são escolhidos tendo em conta o carácter incerto de algumas variáveis observáveis. Esta escolha permite definir um peso maior para as variáveis medidas experimentalmente e que se considera terem boa precisão.

10.3.2 Problema de optimização

A relação entre a formulação do modelo e a optimização associada pode tomar várias formas. Em muitos casos, apenas após o modelo estar formalmente completo, se estuda

o método para encontrar valores óptimos para os parâmetros. No entanto, a selecção do algoritmo sem considerar as particularidades do modelo leva, frequentemente, a falhas desnecessárias e/ou ineficiência grosseira [Espírito Santo 01].

Na generalidade dos casos, a resolução do problema de optimização não pode ser efectuada de forma analítica e é realizada com base em métodos numéricos iterativos. A utilização destes métodos traz dificuldades de ordem teórica e numérica, pois não existe unicidade de solução para um problema de identificação não-linear [Cailletaud e Pilvin 94]. Este facto coloca dificuldades de ordem prática e, em especial, ao nível da interpretação dos resultados obtidos.

A figura 10.2 mostra um problema típico de minimização não-linear de uma variável matricial \mathbf{A} . No espaço $\Omega = [\mathbf{a}, \mathbf{b}]$ da variável \mathbf{A} poderão existir diversos mínimos como \mathbf{A}_2 , \mathbf{A}_3 , \mathbf{A}_5 e \mathbf{A}_7 . Porém, a maioria deles são mínimos locais. O objectivo da optimização é encontrar um mínimo global.

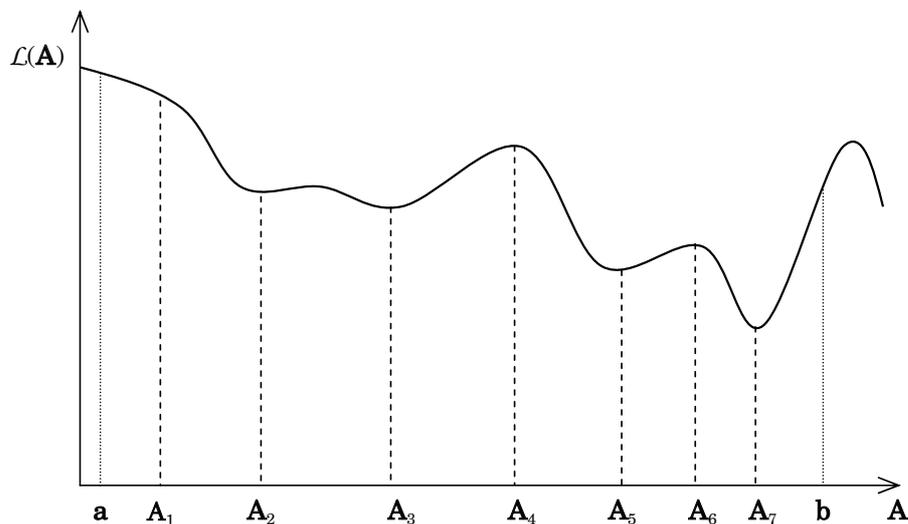


Figura 10.2: Mínimos locais do funcional não-linear $\mathcal{L}(\mathbf{A})$.

O carácter iterativo dos métodos de optimização não-linear, baseados no gradiente do funcional, e a necessidade de fornecer a esses métodos uma estimativa inicial para a solução permite encontrar mínimos locais. No entanto, muitas vezes, estes não são o mínimo absoluto. Na maioria das situações, a solução obtida depende da estimativa inicial de parâmetros fornecida, o que faz conduzir a diferentes resultados. Este problema atenua-se seleccionando um conjunto de resultados experimentais suficientemente abrangentes, de forma a discriminar as diferentes soluções obtidas.

A escolha da técnica de resolução do problema de optimização não-linear é de importância fulcral, visto ser esta que condiciona a eficácia do método de identificação [Cailletaud e Pilvin 94]. Estas técnicas podem ser divididas em duas classes: (i) os métodos exploratórios, que utilizam unicamente o valor da função/funcional a minimizar e (ii) os métodos do gradiente ou do declive, que utilizam, além do valor do funcional a minimizar, informação sobre os gradientes (nos métodos de primeira ordem) e sobre o hessiano do funcional (métodos de segunda ordem). Uma vez que necessitam de um número elevado de avaliações do funcional, os métodos exploratórios são utilizados quando o custo

de avaliação do valor da função/funcional é reduzido. Com o aumento de poder de cálculo esta abordagem, mais geral e mais fácil de implementar, ganhou novo fôlego.

Também é possível utilizar técnicas de otimização baseadas em algoritmos evolucionários. Estes baseiam-se na teoria da evolução de Darwin, a Selecção Natural [Coello 02].

Na natureza, os indivíduos têm de se adaptar ao seu meio para sobreviverem ao processo *evolutivo*. Neste processo, no qual as características que tornam um indivíduo mais bem preparado para sobreviver são preservadas na sua reprodução. Por outro lado, as características que o tornam mais fraco são eliminadas. Estas características são controladas por unidades designadas por *genes*, que formam conjuntos de *chromossomas*. Ao longo de subseqüentes gerações, não só sobrevivem os indivíduos mais capazes, como também os seus genes. Estes são transmitidos para os seus descendentes durante o processo de recombinação sexual, definido por *cruzamento* [Coello 02].

Foram as analogias entre os mecanismos denominados de *selecção natural* e o processo de aprendizagem (ou otimização) que levaram ao desenvolvimento das técnicas designadas por algoritmos evolucionários. O objectivo principal destes métodos é simular o processo evolucionário recorrendo ao cálculo computacional. Os algoritmos evolucionários não são mais do que técnicas de busca aleatória e direccionada, utilizadas para encontrar parâmetros que ofereçam uma boa solução para um determinado problema [Brierley 98]. Estes algoritmos são tentativas *educadas*, em que a educação provém do conhecimento do desempenho da solução do candidato anterior e a tentativa provém da combinação das tentativas anteriores, muitas vezes aleatória, de forma a obter uma evolução favorável para a solução.

No caso da figura 10.2, em que existe um grande número de mínimos locais, a maioria das técnicas tradicionais levam a uma solução local em vez de global. Exclui-se o caso de se fornecer um conjunto inicial de parâmetros suficientemente próximo do mínimo global. Por exemplo, o mínimo global \mathbf{A}_7 pode não ser identificado caso o vector inicial \mathbf{A}_i não esteja dentro do intervalo $[\mathbf{A}_6, \mathbf{b}]$. Adicionalmente, em muitos problemas de otimização em engenharia, o funcional objectivo pode não ser suave ou contínuo. Muitos dos métodos tradicionais de procura baseados no gradiente não são apropriados para resolver este tipo de problemas. Nestas circunstâncias, deve utilizar-se uma estratégia de procura adaptativa como, por exemplo, os algoritmos evolucionários.

Neste trabalho, na optimização do processo de identificação, utilizou-se um método clássico baseado no gradiente e um algoritmo evolucionário.

10.4 Método de Optimização Baseado no Gradiente

10.4.1 Método dos gradientes

Qualquer método de optimização baseado no gradiente do funcional tem que obedecer à condição de continuidade e de existência de derivada em qualquer ponto do seu universo e para qualquer direcção do funcional custo. Satisfeita esta condição é possível introduzir constrangimentos de optimização na equação 10.4, levando a um problema de penalidades [Cailletaud e Pilvin 94]. O problema consiste na minimização do funcional $\mathcal{L}^P(\mathbf{A})$, definido

por:

$$\mathcal{L}^P(\mathbf{A}) = \sum_{q=1}^N \mathcal{L}_q(\mathbf{A}) + \sum_{m=1}^M [\alpha_m \max\{0, g_m(\mathbf{A})\}]^2 \quad (10.5)$$

onde os termos de constrangimento são definidos pelas M desigualdades $g_m(\mathbf{A}) \leq 0$. Os coeficientes de penalidade, α_m , permitem que haja evolução da importância dos constrangimentos ao longo do processo [Pilvin 99].

Os métodos do gradiente são conhecidos por terem um desempenho elevado e assegurarem a convergência para pontos estacionários (mínimo local). Nos problemas da identificação de parâmetros, o acoplamento de vários métodos baseados no gradiente é frequentemente necessário. Tal se deve ao facto de o funcional ser mal-condicionado [Cailletaud e Pilvin 93]. Logo, o algoritmo de optimização utilizado combina duas técnicas clássicas de minimização:

1. O método do maior declive, que é utilizado no início do cálculo de forma a melhorar a estimativa inicial dos coeficientes;
2. O método de Levenberg-Marquardt (variante do método de Newton-Raphson), que tem a finalidade de acelerar a convergência na fase final do processo de optimização.

O algoritmo desenvolvido por Marquardt [Marquardt 63] apresenta-se como um método de máxima vizinhança¹ e é usualmente utilizado na estimativa por mínimos quadrados de parâmetros não-lineares. Assim como o método de Newton-Raphson, este apresenta convergência quadrática.

Seja a matriz \mathbf{J} a matriz jacobiana do funcional $\mathcal{L}(\mathbf{A})$. Os seus elementos são definidos por

$$\mathbf{J}_{i\alpha} = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \mathbf{A}_\alpha} = \frac{\partial \mathbf{Z}_{s,i}^{\text{sim}}}{\partial \mathbf{A}_\alpha} \quad \text{com } i = 1, \dots, M \text{ e } \alpha = 1, \dots, r. \quad (10.6)$$

$\mathbf{r} = \mathbf{Z}_s^{\text{sim}} - \mathbf{Z}_s^*$ é o vector dos resíduos. Para a iteração k , o tamanho do passo de Levenberg-Marquardt, $\boldsymbol{\delta}_k$, é determinado resolvendo o seguinte sistema [Zhao e Lee 04, Polak 97]:

$$(\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k + \mu_k \mathbf{I}) \boldsymbol{\delta}_k = -\mathbf{J}_k^T \mathbf{r}_k, \quad (10.7)$$

Pode demonstrar-se que existe sempre um $\mu_k > 0$, designado por parâmetro de Levenberg-Marquardt, de forma a que $\boldsymbol{\delta}_k$ se encontra numa direcção que leva à redução da magnitude de $\mathcal{L}(\mathbf{A})$. De modo a incluir o efeito das funções de penalidade, pode ser adicionada ao segundo membro da equação 10.7 um termo \mathbf{f} , contendo a primeira derivada da função peso de penalidade. Adicionalmente, a segunda derivada da função de penalidade, \mathbf{H} , deve ser acrescentada ao primeiro membro [Zhao e Lee 04], isto é,

$$(\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k + \mu_k \mathbf{I} + \mathbf{H}_k) \boldsymbol{\delta}_k = -\mathbf{J}_k^T \mathbf{r}_k + \mathbf{f}_k. \quad (10.8)$$

Sempre que a escolha inicial de parâmetros, \mathbf{A}_0 , não for a mais adequada, o método iterativo pode apresentar dificuldades de convergência. De forma a minimizar este problema, pode utilizar-se um método simples, como o método do maior declive, para determinar e

¹Do Inglês *maximum neighbourhood method*.

melhorar o conjunto inicial de parâmetros. Para este método é suficiente definir a direcção de busca, \mathbf{h}_i , dada por:

$$\mathbf{h}_i = -\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \mathbf{A}} = -\mathbf{J}_{ik}, \quad (10.9)$$

e o tamanho de incremento [Polak 97]

$$\lambda_i \in \lambda(\mathbf{A}) \triangleq \arg \left[\min_{\lambda \geq 0} \mathbf{r}(\mathbf{A}_i + \lambda \mathbf{h}_i) \right]. \quad (10.10)$$

A avaliação do gradiente do funcional a otimizar, $\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{A}}$, necessária para os dois métodos referidos, pode ser efectuada da forma analítica ou numérica. A estimativa numérica do gradiente do funcional pode ser realizada por diferenças finitas. Este método, que não necessita de um desenvolvimento numérico elaborado, permite utilizar os métodos de optimização referidos em diversas classes de modelos de comportamento. Também permite, de forma a avaliar a resposta de um modelo particular, utilizar um programa de simulação exterior (como um programa de elementos finitos) sem haver necessidade de se efectuar qualquer modificação [Cailletaud e Pilvin 94].

O algoritmo baseado na combinação dos métodos anteriormente descritos é descrito na tabela 10.1.

Tabela 10.1: Algoritmo de optimização baseado em métodos do gradiente.

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Escolha da tentativa inicial para os parâmetros do material, \mathbf{A}_0, e parâmetros iniciais do processo 2. Cálculo das previsões do modelo, $\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}$ 3. Avaliação do funcional de custo $\mathcal{L}^P(\mathbf{A})$ 4. Melhoria do conjunto inicial de parâmetros com o método do maior declive: <ol style="list-style-type: none"> 4.1 REPETIR <ol style="list-style-type: none"> 4.1.1. Cálculo da direcção de busca \mathbf{h}_i e do tamanho de incremento λ_i 4.1.2. Determinação de $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_0 + \lambda_i \mathbf{h}_i$ ATÉ até obtenção de \mathbf{h}_i ideal 5. Calcular as previsões do modelo, $\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}$ 6. Avaliação do funcional de custo $\mathcal{L}^P(\mathbf{A})$ 7. Escolha do parâmetro de Levenberg-Marquardt μ_0 8. Estimativa dos pesos, da função de penalidade e do funcional objectivo $\mathcal{L}^P(\mathbf{A})$ 9. Convergência pelo método de Levenberg-Marquardt: <ol style="list-style-type: none"> 9.1 REPETIR - Ciclo iterativo $k = 1, \dots, N_{\text{max}}$ <ol style="list-style-type: none"> 9.1.1. Cálculo da matriz jacobiana \mathbf{J} e das funções de penalidade \mathbf{H} e \mathbf{f} 9.1.2. Resolução do sistema de equações 10.8 para o incremento δ_k 9.1.3. Actualização do conjunto de parâmetros $\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \delta_k$ 9.1.4. Verificação de convergência 9.1.5. Actualização de μ_k e dos pesos das funções de penalidade ATÉ convergência ou $k = N_{\text{max}}$ 10. Saída de resultados |
|--|

10.4.2 Programa de optimização SiDoLo

Os métodos numéricos baseados no gradiente, referidos na subsecção 10.4.1, estão implementados no programa SiDoLo[®] (*Simulation et iDentification automatique de Lois de comportement*). O programa de optimização SiDoLo^{®2} é um programa de optimização de âmbito genérico e que pode ser utilizado em diversos campos científicos e de engenharia.

Embora o corpo do programa seja dedicado à optimização, ele contém sub-rotinas que permitem, em certo tipo de sistemas físicos, programar simplesmente as equações do modelo e obter as suas respostas para diferentes solicitações. Visto que este permite confrontar os resultados experimentais com aqueles obtidos numericamente, é utilizado para identificar e estimar os parâmetros de modelos constitutivos.

O programa SiDoLo[®] permite a escrita de modelos de comportamento que envolvam variáveis internas definidas numa forma diferencial. Deste modo, inseriram-se as sub-rotinas necessárias para definir o modelo de comportamento apresentado neste trabalho que, após compilação, foram implementadas no programa global SiDoLo[®]. Nestas sub-rotinas, que descrevem tridimensionalmente o modelo de comportamento, foi também implementado um algoritmo que tem em conta as grandes deformações. Este calcula o tensor gradiente das deformações \mathbf{F} e o tensor rotação \mathbf{R} pelo método da decomposição polar. Este último tensor realiza a mudança de referencial nas grandezas tensoriais, de forma a anular os erros de cálculo provenientes de grandes rotações.

Para modelos de comportamento formulados de forma diferencial, que é o caso do modelo de comportamento utilizado neste trabalho, o programa SiDoLo[®] utiliza métodos directos de integração numérica. A evolução das variáveis internas é definida por um sistema de equações da seguinte forma:

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}, t) \quad \text{com} \quad \mathbf{Y}(t_0) = \mathbf{Y}_0. \quad (10.11)$$

$\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ representa o conjunto de n variáveis internas, necessárias para avaliar as variáveis observáveis. Os métodos de integração numérica explícitos do tipo Runge-Kutta verificam-se suficientemente eficazes. A eficiência deste métodos ainda é mais notória se lhes for introduzido um algoritmo de passo adaptativo [Pilvin 90]. Os métodos de integração explícitos de Runge-Kutta de segundo (rk21), quarto (rk43) e quinto (rk54) grau são os métodos de integração utilizados pelo programa SiDoLo[®]. Estes três métodos implementados utilizam passos variáveis e adaptativos.

²O programa SiDoLo foi desenvolvido no *Laboratoire de Mécanique et Technologie de l'École Normale Supérieure de l'Enseignement Technique* (ENS Cachan) nos anos 80 no âmbito da tese de doutoramento de Philippe Pilvin [Pilvin 99]. O seu desenvolvimento foi continuado de 1989 a 1996 no *Centre des Matériaux de l'École de Mines de Paris*. Posteriormente, até 2001, o trabalho de desenvolvimento foi realizado no *Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux de l'École Centrale de Paris*. Actualmente o programa SiDoLo encontra-se em desenvolvimento no *Laboratoire de Génie Mécanique et Matériaux* (LG2M) da *Université de Bretagne-Sud*. O programa SiDoLo foi gentilmente cedido pelo Professor Doutor P. Pilvin.

10.5 Método de Optimização Baseado em Algoritmos Evolucionários

Os algoritmos evolucionários já demonstraram de forma indubitável a capacidade de criar boas soluções em problemas de optimização complexos. As vantagens deste tipo de algoritmos estão associadas às seguintes características:

1. Menor possibilidade de convergência para um mínimo local visto que a procura se inicia de diferentes potenciais soluções;
2. Capacidade de encontrar eficazmente uma solução num espaço de procura realizando apenas operações probabilísticas;
3. Robustez devido ser unicamente necessário a informação do valor da função objectivo. Não é necessário calcular a função derivada;
4. Operação com uma larga gama de funções: descontínuas, multimodais, fortemente não-lineares, etc.

Na tabela 10.2 apresenta-se a estrutura genérica dos algoritmos evolucionários.

A generalidade dos algoritmos evolucionários, que inclui os algoritmos genéticos, encontra uma solução óptima dentro do universo possível de soluções. Os algoritmos genéticos clássicos utilizam como universo de soluções um conjunto discreto e geralmente codificado em variáveis binárias. A transformação, recombinação e avaliação destas variáveis binárias conduz a uma solução que, posteriormente retransformada no universo inicial e decodificado, é tomada como óptima para o problema em causa. Porém, no problema da identificação de parâmetros, os parâmetros assumem, por definição, valores reais e o seu universo é um conjunto contínuo de números reais. Assim, torna-se necessário recorrer a um algoritmo evolucionário cuja optimização e procura são realizadas num espaço real.

Tabela 10.2: Estrutura básica de um algoritmo evolucionário.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Geração da população inicial de potenciais soluções (pode ser feita aleatoriamente) 2. Geração de novas populações: <ol style="list-style-type: none"> 2.1 REPETIR - Ciclo iterativo $k = 1, \dots, N_{\max}$ <ol style="list-style-type: none"> 2.1.1. Avaliação da aptidão (<i>fitness</i>) de cada solução 2.1.2. Selecção entre as potenciais soluções (em termos de aptidão) 2.1.3. Recombinação de soluções: <ol style="list-style-type: none"> 2.1.3.1. Cruzamento de soluções num ponto aleatório 2.1.3.2. Mutação de soluções 2.1.3.3. Aplicação de elitismo (conserva a melhor solução) ATÉ convergência ou $k = N_{\max}$ 3. Saída de resultados

10.5.1 Algoritmos evolucionários para um espaço de busca real

No algoritmo evolucionário implementado, a população inicial é parcialmente gerada de forma aleatória. Considere-se uma população de indivíduos, representados por uma matriz \mathbf{P} , em que m indivíduos são definidos deliberadamente e em que os restantes são gerados aleatoriamente, isto é,

$$\mathbf{P}^0 = \left\{ \mathbf{A}_1^0, \mathbf{A}_2^0, \dots, \mathbf{A}_m^0, \mathbf{A}_{m+1}^{0,r}, \dots, \mathbf{A}_\gamma^{0,r} \right\} \in S^\gamma \quad \text{e} \quad \mathbf{A}_k = [A_1, A_2, \dots, A_r]^T. \quad (10.12)$$

$\gamma \in \mathbb{N}$ é o número total de indivíduos da população e $S^\gamma \in \mathbb{R}$ é o universo dos indivíduos. A representação matemática da população em vectores de variáveis reais difere da representação dos algoritmos genéticos clássicos, e os seus cromossomas de definição binária. Nesta representação utiliza-se um ponto de busca real. Supõe-se que o uso directo de um ponto de busca real pode procurar de forma mais eficiente do que a representação codificada em variáveis binárias [Furukawa e Yagawa 97]. Em algoritmos genéticos clássicos, a codificação binária representa um cromossoma de DNA (representação genética de um ser humano). Porém, nesta representação, o vector de variáveis contínuas reais corresponde a um conjunto de informações macroscópicas ou fenomenológicas do ser humano [Furukawa e Yagawa 97].

Todos os elementos da população definida em 10.12 obedecem a um certo número de condições. As primeiras prendem-se com o universo de procura e suas fronteiras. Assim:

$$\mathbf{A}_{\min} \leq \mathbf{A}_k \leq \mathbf{A}_{\max} \Rightarrow A_{\min} \leq A_k \leq A_{\max} \quad (10.13)$$

onde \mathbf{A}_{\min} e \mathbf{A}_{\max} representam os vectores que contêm os termos limites dos indivíduos A_{\min} e A_{\max} , respectivamente. As outras condições dependem directamente das relações fenomenológicas entre os termos do vector do indivíduo \mathbf{A} da matriz de população \mathbf{P} . Considerando que, por definição, os termos genéricos k e $k+c$ do indivíduo A devem estar relacionados da seguinte forma:

$$\mathbf{A}_k \propto d\mathbf{A}_{k+c} + e, \quad \forall c \in \mathbb{N} \quad \text{e} \quad d, e \in \mathbb{R} \quad (10.14)$$

Este tipo de condição é frequente na identificação dos parâmetros para modelos constitutivos de base fenomenológica.

A exploração do espaço de busca real é feita através da aplicação sucessiva de operadores genéticos. Apesar do algoritmo evolucionário apresentado recorrer a um espaço de busca real, as operações de reprodução são similares às dos algoritmos genéticos clássicos. Os operadores mais usuais são a *selecção*, o *cruzamento* e a *mutação* [Costa *et al.* 99]. O algoritmo evolucionário desenvolvido neste trabalho também utiliza os operadores *elitismo* e *refinamento local*.

Selecção

A selecção de indivíduos, de forma a que os operadores genéticos possam ser aplicados, é realizada com base na robustez (valor do funcional de custo) de cada indivíduo. O mecanismo de selecção deve possibilitar que os melhores indivíduos se reproduzam mais vezes. Só desta forma se garante que a qualidade da população vai melhorando [Leal e Ramos 02].

No caso da selecção em que todos os indivíduos são substituídos, o processo designa-se por geracional. Caso contrário, se apenas um grupo de indivíduos for substituído, o

processo designa-se por estável. No presente trabalho, a selecção é executada por dois métodos de selecção geracional: (i) a roleta clássica e (ii) a roleta estocástica.

A selecção por roleta clássica ou selecção proporcional ao mérito, baseia-se no valor atribuído a cada indivíduo pela função de avaliação e na qualidade média da população. De acordo com a qualidade de um dado indivíduo atribui-se-lhe parte de uma roleta proporcional ao respectivo desempenho. A roleta é girada um número de vezes igual ao de indivíduos da população, r , seleccionando os elementos que irão participar na próxima geração [Leal e Ramos 02].

O processo de selecção por roleta estocástica difere da roleta clássica na medida em que a roleta é girada uma única vez com r ponteiros igualmente espaçados. Neste caso, é impossível seleccionar sempre o pior dos indivíduos.

Cruzamento

Se dois indivíduos (\mathbf{I}^2) são seleccionados para serem *progenitores*, a operação de cruzamento, $Cr : \mathbf{I}^2 \rightarrow \mathbf{I}$, pode ser definida por

$$Cr(\mathbf{A}_\varphi^p, \mathbf{A}_\zeta^p) = (1 - \chi_\varphi) \mathbf{A}_\varphi^p + \chi_\zeta \mathbf{A}_\zeta^p, \quad (10.15)$$

onde \mathbf{A}_φ^p e \mathbf{A}_ζ^p são os indivíduos progenitores na geração p e o coeficiente χ_i com $i \in \{\varphi, \zeta\}$ é definido em função do tipo de cruzamento. Note-se que \rightarrow representa a passagem de geração. No presente trabalho podem utilizar-se três tipos distintos de cruzamento:

1. Cruzamento baricêntrico: o parâmetro χ_φ é escolhido como peso de cruzamento. Consequentemente, o parâmetro χ_ζ toma o valor

$$\chi_\zeta = (1 - \chi_\varphi); \quad (10.16)$$

2. Cruzamento baricêntrico aleatório: é uma modificação do cruzamento baricêntrico. O parâmetro $\chi_\varphi \in [0, 1]$ é escolhido aleatoriamente;
3. Cruzamento definido por distribuição normal: é o cruzamento de maior eficiência. Utiliza os parâmetros χ_φ e χ_ζ que são definidos por uma distribuição normal com média 0 e desvio quadrático médio η^p , isto é,

$$\chi_i^p = N(0, \eta_i^{p2}), \quad \forall i \in \{\varphi, \zeta\}. \quad (10.17)$$

O desvio quadrático médio pode ser constante ou adaptativo com a evolução da geração p . Esta última hipótese traduz-se numa taxa de convergência mais elevada [Furukawa e Yagawa 97].

Mutação

A mutação consiste na alteração do valor de uma ou mais variáveis do vector real. Esta operação corresponde à alteração de uma ou mais informações fenomenológicas de um indivíduo (\mathbf{I}), gerando outro indivíduo (\mathbf{I}) que o substitui na população, isto é, $m : \mathbf{I} \rightarrow \mathbf{I}$. O operador mutação gera novos indivíduos muito diferentes dos anteriores e, como tal, destina-se a assegurar que são exploradas novas regiões do espaço de busca. Tal não é

garantido pelo operador cruzamento. Este operador previne a perda prematura de informação e, consequentemente, o alcançar de um mínimo local [Costa *et al.* 99]. Normalmente, este operador é utilizado com uma probabilidade muito baixa (tipicamente 0,1%) [Leal e Ramos 02]. O processo de mutação evolucionário utilizado neste trabalho e em que o coeficiente probabilidade de mutação evolui com o valor do funcional custo, é bastante eficaz.

Outros operadores genéticos

O operador elitismo consiste em manter os $j < \gamma$ indivíduos mais capazes. Este operador assegura que as melhores soluções são mantidas em gerações consecutivas ($p \rightarrow p + 1$). Assim, $El : \mathbf{I}_j^p \rightarrow \mathbf{I}_j^{p+1}$.

O refinamento local é um operador que controla o aumento e diminuição do universo de busca da população. Na geração $p + g$, após g gerações em que se verifica estagnação do resultado do funcional de custo, o universo real do indivíduo é reduzido numa fracção $1/F$, com $F > 0$ cujos limites têm como valor intermédio o valor do indivíduo mais capaz \mathbf{A}_c . Assim,

$$Rl : \mathbf{A}_{\min}^{p+g} \leq \mathbf{A}_k^{p+g} \leq \mathbf{A}_{\max}^{p+g} \rightarrow \mathbf{A}_{\min}^{p+g+1} \leq \mathbf{A}_k^{p+g+1} \leq \mathbf{A}_{\max}^{p+g+1} \quad (10.18)$$

com

$$\mathbf{A}_{\min}^{p+g+1} = \mathbf{A}_c - \frac{1}{F} \frac{(\mathbf{A}_{\max}^{p+g} - \mathbf{A}_{\min}^{p+g})}{2}, \quad (10.19)$$

$$\mathbf{A}_{\max}^{p+g+1} = \mathbf{A}_c + \frac{1}{F} \frac{(\mathbf{A}_{\max}^{p+g} - \mathbf{A}_{\min}^{p+g})}{2}. \quad (10.20)$$

Consequentemente,

$$A_{\min}^{p+g} \leq A_k^{p+g} \leq A_{\max}^{p+g} \rightarrow A_{\min}^{p+g+1} \leq A_k^{p+g+1} \leq A_{\max}^{p+g+1} \quad (10.21)$$

com

$$A_{\min}^{p+g+1} = A_c - \frac{1}{F} \frac{(A_{\max}^{p+g} - A_{\min}^{p+g})}{2}, \quad (10.22)$$

$$A_{\max}^{p+g+1} = A_c + \frac{1}{F} \frac{(A_{\max}^{p+g} - A_{\min}^{p+g})}{2} \quad (10.23)$$

No caso em que os novos valores limite da geração $p + g + 1$ ultrapassem os valores da geração anterior, estes últimos são mantidos. Embora este procedimento possa ser efectuado consecutivamente e tenha como vantagem uma maior precisão nos resultado, pode levar à convergência prematura para um mínimo local. Assim, este operador deve ser activado unicamente quando está garantida estagnação prolongada do cálculo.

No algoritmo evolucionário é necessário definir um critério de paragem. Para este fim poderão aplicar-se três procedimentos distintos: (i) definição do número máximo de gerações; (ii) definição de uma tolerância, abaixo da qual se considera que se atingiu a convergência do processo de optimização e (iii) definição de um número máximo de gerações

em estagnação, em que o valor do funcional custo permanece o mesmo. Estes três critérios de paragem podem funcionar em simultâneo, garantindo a paragem do algoritmo quando o primeiro se verificar.

O algoritmo evolucionário apresentado neste trabalho foi implementado no programa ADAPCO.

10.5.2 Comparação com AG clássicos

O algoritmo evolucionário apresentado pode ser utilizado em diversos tipos de problemas de optimização. Como não é possível prever teoricamente o comportamento de um algoritmo, adopta-se um conjunto de funcionais teste, tendo como espaço de procura um conjunto de números reais. Os resultados do algoritmo utilizado são comparados com outros algoritmos baseados na teoria evolucionária. Os funcionais de teste, cujo valor mínimo global é dado por $f(\mathbf{x}^*)$, são definidos por:

$$\begin{aligned} \text{Funcional I : } f_1(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^n x_i^2, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, n = 30 \\ &-5.12 \leq x_i \leq 5.12 \\ f_1(\mathbf{x}^*) &= 0, \mathbf{x}^* = [0, \dots, 0]^T; \end{aligned} \quad (10.24)$$

$$\begin{aligned} \text{Funcional II : } f_2(\mathbf{x}) &= 6n + \sum_{i=1}^n [x_i], \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, n = 5 \\ &-5.12 \leq x_i \leq 5.12 \\ f_2(\mathbf{x}^*) &= 0, \mathbf{x}^* = [-5.12, \dots, -5.12]^T; \end{aligned} \quad (10.25)$$

$$\begin{aligned} \text{Funcional III : } f_3(\mathbf{x}) &= nA + \sum_{i=1}^n x_i^2 - A \cos(\omega x_i), \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, n &= 20, A = 10, \omega = 2\pi \\ &-5.12 \leq x_i \leq 5.12 \\ f_3(\mathbf{x}^*) &= 0, \mathbf{x}^* = [0, \dots, 0]^T; \end{aligned} \quad (10.26)$$

$$\begin{aligned} \text{Funcional IV : } f_4(\mathbf{x}) &= nA + \sum_{i=1}^n x_i^2 - A \cos(\omega x_i), \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, n &= 20, A = 10, \omega = \frac{\pi}{2} \\ &-5.12 \leq x_i \leq 5.12 \\ f_4(\mathbf{x}^*) &= 0, \mathbf{x}^* = [0, \dots, 0]^T. \end{aligned} \quad (10.27)$$

O funcional I é uma função quadrática e portanto contínua, unimodal e convexa. Esta função é utilizada frequentemente como primeiro teste, visto que, na realidade, muitos funcionais objectivos não-lineares tomam esta forma [Furukawa e Yagawa 97]. O funcional II é uma função linear mas descontínua. Esta compreende um número de patamares pelo operador inteiro $[\]$. Os métodos de optimização baseados no gradiente têm dificuldades

com estes funcionais devido à sua descontinuidade. Os funcionais III e IV são funções contínuas e multimodais. Nas figuras 10.3, 10.4, 10.5, 10.6 mostram-se as representações gráficas destes funcionais.

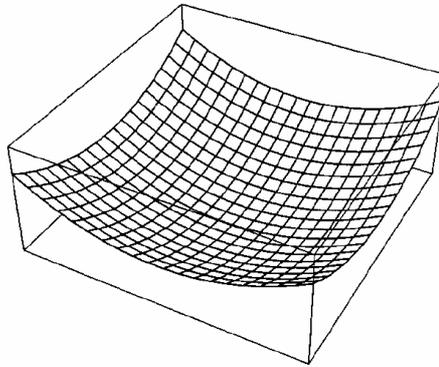


Figura 10.3: Representação tridimensional do funcional I.

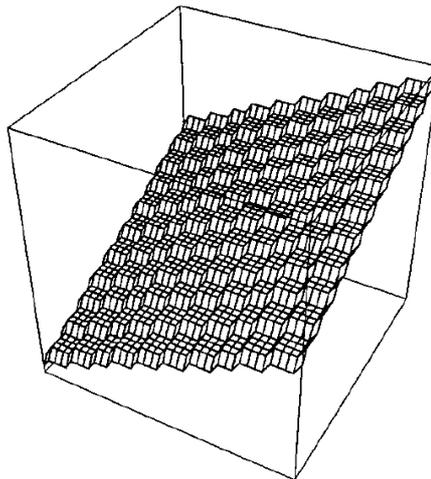


Figura 10.4: Representação tridimensional do funcional II.

Os resultados do algoritmo utilizado são comparados com dois algoritmos: (i) um algoritmo genético clássico e (ii) um outro algoritmo evolucionário. O primeiro algoritmo utiliza a codificação de variáveis em cromossomas binários e utiliza o operador cruzamento com um ponto de corte. Este algoritmo genético clássico encontra-se implementado no programa GENESIS [Grefenstette 84]. O segundo é um algoritmo evolucionário de busca real proposto por Furokawa e Yagawa em 1997 [Furukawa e Yagawa 97]. Este utiliza um operador cruzamento cuja probabilidade de cruzamento segue uma distribuição normal de desvio quadrático médio constante. Os parâmetros dos operadores genéticos seleccionados para os diferentes algoritmos encontram-se listados na tabela 10.3 [Leal e Ramos 02, Furukawa e Yagawa 97, Andrade-Campos *et al.* 04a].

Os resultados dos diferentes algoritmos para o conjunto dos funcionais de teste apresentam-se nas figuras 10.7 a 10.10. O valor médio do funcional objectivo corresponde à média

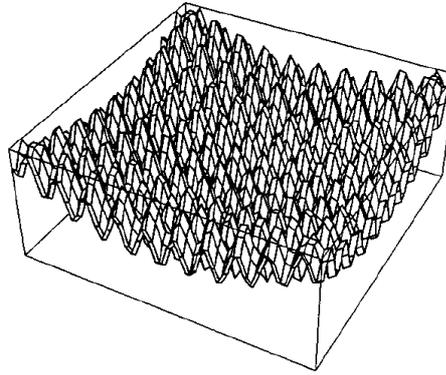


Figura 10.5: Representação tridimensional do funcional III.

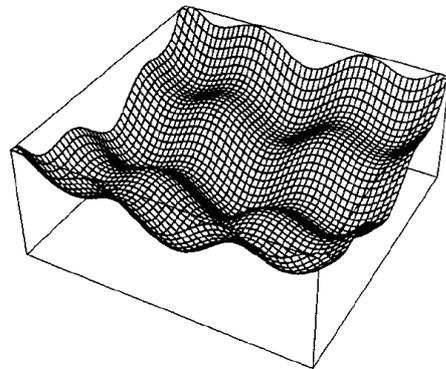


Figura 10.6: Representação tridimensional do funcional IV.

Tabela 10.3: Parâmetros internos para os diferentes algoritmos

	AG clássico	[Furukawa e Yagawa 97]	AE utilizado
População	50	50	50
Prob. de cruzamento	0.6	-	-
Prob. de Mutação	0.001	-	0.001
Desvio quadrático médio	-	0.5	0.5
Elitismo	1	1	1

dos resultados de 10 execuções para cada algoritmo. Os resultados para os diferentes funcionais reflectem a melhor eficiência dos algoritmos evolucionários de busca real relativamente ao algoritmo clássico de cromossomas binários. Os resultados do primeiro teste mostram um desempenho superior do algoritmo apresentado neste trabalho na minimização do funcional I. No teste de optimização do funcional descontínuo II, o algoritmo ADAPCO encontra o óptimo global, \mathbf{x}^* , após 200 gerações. Este resultado é inferior ao do algoritmo proposto por Furukawa e Yagawa. Porém, é superior ao do algoritmo genético clássico que, por sua vez, não consegue determinar o óptimo global. Para o funcional III, o resultado obtido pelo algoritmo utilizado é próximo do obtido por Furukawa e Yagawa. Contudo, não consegue atingir o mínimo global nas 2500 gerações efectuadas. Comparativamente

aos resultados dos outros algoritmos, o resultado do algoritmo utilizado na minimização do funcional IV é excelente. Analisando estes resultados pode concluir-se que o algoritmo apresentado demonstra um bom desempenho e pode ser utilizado com sucesso para uma larga gama de problemas de optimização.

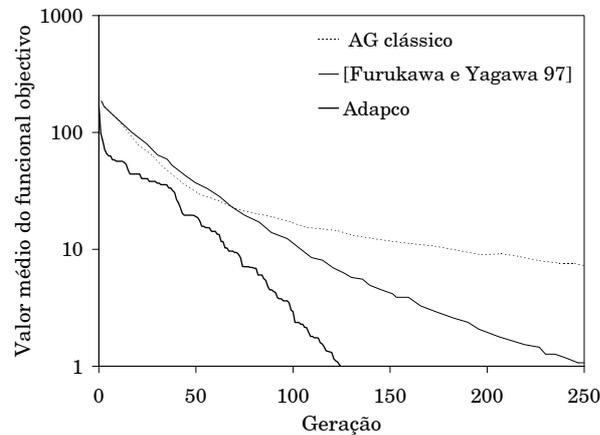


Figura 10.7: Evolução do valor médio do funcional objetivo para o funcional I com os diferentes algoritmos testados.

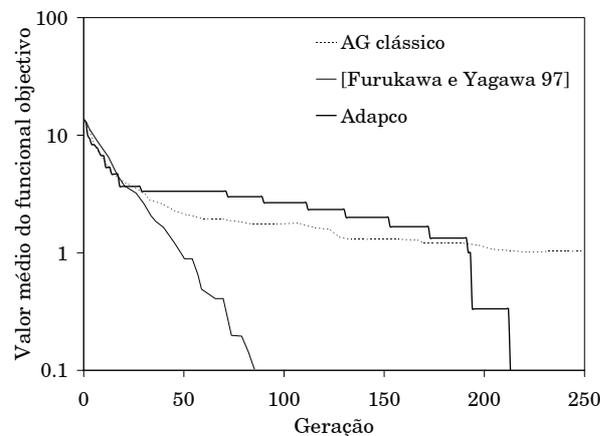


Figura 10.8: Evolução do valor médio do funcional objetivo para o funcional II com os diferentes algoritmos testado.

10.5.3 Programa ADAPCO

O algoritmo evolucionário descrito e testado nos parágrafos anteriores encontra-se implementado no programa ADAPCO - ADAPtação de Parâmetros de modelos de Comportamento. Este programa, totalmente desenvolvido em FORTRAN 90, permite identificar os parâmetros do modelo constitutivo descrito no capítulo 5 por um processo de optimização baseado em algoritmos evolucionários.

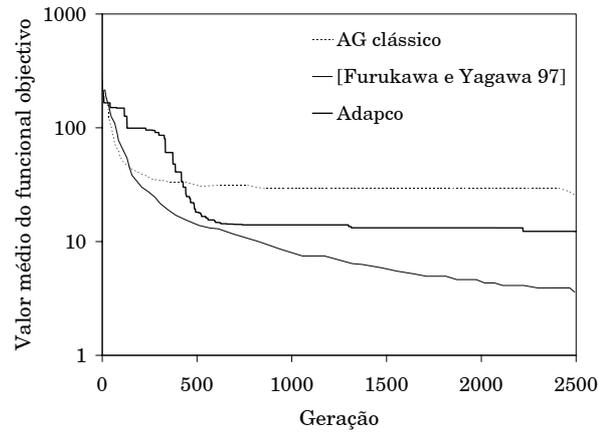


Figura 10.9: Evolução do valor médio do funcional objetivo para o funcional III com os diferentes algoritmos testados.

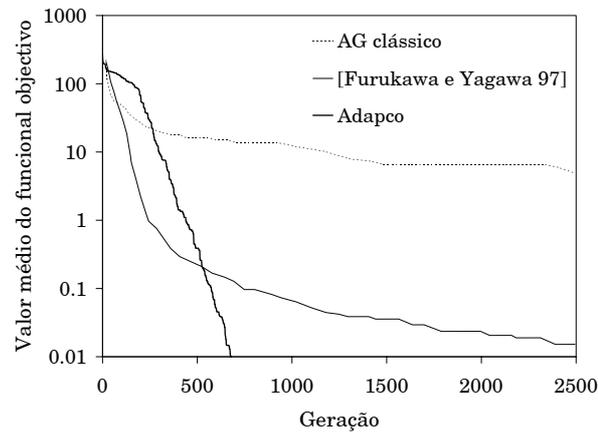


Figura 10.10: Evolução do valor médio do funcional objetivo para o funcional IV com os diferentes algoritmos testados.

O programa recorre ao método de integração proposto por Verner [Verner 94] para integrar o modelo constitutivo apresentado no capítulo 5. Este método é baseado no método explícito de Runge-Kutta, e utiliza dois métodos de ordem $p - 1$ e p , com $p \geq 6$, para resolver equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Neste trabalho, utiliza-se o par de métodos explícitos de Runge-Kutta de 5^a e 6^a ordem com passo adaptativo e controle de erro [Press *et al.* 92]. Para descrição mais aprofundada deste método ver [Verner 94].

Parte III

Resultados, Validação e Discussão

Capítulo 11

Identificação dos Parâmetros do Modelo de Comportamento

Descreve-se a base experimental utilizada na identificação de parâmetros do modelo constitutivo. Determinam-se os parâmetros para diversas ligas de alumínio baseados em ensaios experimentais e em resultados obtidos por outros autores. Comparam-se os métodos de otimização descritos no capítulo anterior.

11.1 Introdução

Nos capítulos anteriores discutiu-se a formulação subjacente aos problemas de identificação de parâmetros em modelos constitutivos. Consequentemente, neste capítulo, validam-se todas essas formulações, de forma a encontrar os parâmetros do modelo de comportamento utilizado neste trabalho que melhor se adequam aos diversos materiais. Estes parâmetros serão utilizados nas simulações numéricas apresentadas nos capítulos seguintes.

No entanto, antes da identificação de parâmetros, é necessário definir e caracterizar o universo de valores para cada parâmetro. Definição esta que deve ser efectuada de acordo com o significado físico e fenomenológico de cada parâmetro e de acordo com os valores típicos que pode tomar. A definição dos intervalos possíveis para os valores de cada parâmetro é uma tarefa de grande importância visto que eles são utilizados nos programas numéricos de identificação, como valores máximos e mínimos possíveis, influenciando o sucesso de todo o processo de identificação. Estes valores são denominados, no processo de otimização, por constrangimentos do processo.

11.2 Universo dos Parâmetros

O conjunto de parâmetros necessário à definição do modelo de comportamento é: A , ξ , m , h_0 , a , \bar{s} , Q_{ds} , n , Q , T_t , $s_{0,1}$, $s_{0,2}$, B , Q_r e p . Os valores-limite para cada parâmetro do modelo de comportamento devem ser encontrados de acordo com (i) o seu significado físico (se existir), (ii) a sua utilidade e (iii) os valores medidos por outros autores. Deve também adicionar-se uma tolerância a estes valores-limite.

Na tabela 11.1 mostram-se os valores limite tomados para cada parâmetro. Estes valores tomam em conta os valores medidos por [Miller e Sherby 78, Anand 85, Brown 87, Brown *et al.* 89, Haddadi 96].

Tabela 11.1: Valores-limite para os parâmetros do modelo de comportamento.

Parâmetro	Limite inferior	Limite superior
ξ	1.5	30
m	0	1
A [s ⁻¹]	10 ⁵	10 ¹²
h_0 [MPa]	500	4000
a	1	-
Q_0 [kJ/mol]	50	500
T_t [K]	600	1200
\bar{s} [MPa]	1	120
Q_{ds} [kJ/mol]	50	500
n	0	1
B [MPa/s]	10 ³⁰	-
Q_r [kJ/mol]	50	500
p	1	100
$s_{0,1}$	25	150
$s_{0,2}$	-0.08	0

Os valores expostos na tabela 11.1 foram encontrados tendo em conta as seguintes observações e considerações:

1. Na equação (5.22), $Q = Q(T)$ representa a energia de activação do material. Este valor deve estar compreendido entre os valores aceitáveis da energia de activação do material. Na literatura da especialidade encontramos os valores de 175 kJ/mol para a energia de activação da liga de alumínio AA1100 e de 245 kJ/mol para uma liga Fe2%Si por Brown e Anand [Brown 87]. Frost e Ashby [Brown *et al.* 89] apresentaram o valor de 142 kJ/mol como a energia de activação associada à auto-difusão para uma liga de alumínio. Enquanto que Wong e Jonas, em 1968, encontraram o valor de Q_0 igual a 156 kJ/mol [Brown *et al.* 89], Haddadi [Haddadi 96] encontrou o valor de 108 kJ/mol para um alumínio puro.
2. A é o factor pré-exponencial que, apesar de não ter qualquer significado físico, serve para escalonar a ordem de grandeza da velocidade de deformação plástica equivalente com a ordem de grandeza da expressão (5.22) [Brown 87]. Este parâmetro apresenta um intervalo de utilização apenas limitado inferiormente pelo valor nulo.

3. A variável interna s , com unidades de tensão, deve ter valores superiores à tensão equivalente $\bar{\sigma}$ de forma a que a relação $\frac{\bar{\sigma}}{s}$ seja sempre inferior à unidade. Deste modo, a relação da velocidade de deformação plástica equivalente pode tirar partido da concavidade da função $\sinh(\xi \frac{\bar{\sigma}}{s})$. ξ é um factor escalar adimensional que reforça e garante que $(\xi \frac{\bar{\sigma}}{s})$ seja sempre inferior à unidade. Logo, $\xi \geq 1$.
4. O parâmetro empírico $m \in]0, 1[$ representa a lei da potência e é denominado factor de sensibilidade à velocidade de deformação.
5. h_0 representa a variação atérmica constante do encruamento do material.
6. Na generalidade dos metais o amaciamento não é linear e a taxa de amaciamento altera-se quando se atinge o estado estacionário. Esta mudança é representada pelo parâmetro a . Assim, de forma a ilustrar o fenómeno de amaciamento, este parâmetro deve ser sempre superior à unidade.
7. O termo \dot{r} , que contém os parâmetros B , Q_r e p , influencia a equação da evolução da variável interna s quando o termo associado aos processos dinâmicos é nulo, isto é, $h(\bar{\sigma}, s, T)\dot{\epsilon}^P = 0$. Isto acontece quando $\dot{\epsilon}^P \approx 0$. Q_r representa a energia de activação de auto-difusão do material no processo de restauração estática. B , de valor elevado, equilibra o valor muito baixo do termo $(\frac{s}{\mu})^p$. B deve ser encontrado para que, na existência de processos dinâmicos, \dot{r} seja desprezável.
8. Q_{ds} deve ser o valor da energia de activação associada ao amaciamento. De forma a representar o estado de saturação, deve estar compreendido entre o valor da energia de activação de auto-difusão do material, Q , e os valores encontrados experimentalmente associados ao amaciamento.
9. A justificação da utilização da lei da potência na definição do valor de saturação s^* é dada pela forma das curvas de s^* versus velocidade de deformação [Brown *et al.* 89]. Deste modo, o parâmetro n toma o valor positivo e inferior à unidade mais adequado para caracterizar essas curvas.
10. O coeficiente \bar{s} é definido por Brown e Anand [Brown *et al.* 89] como o valor médio de escalonamento entre s e s^* . Este regulariza a ordem de grandeza do parâmetro adimensional interno $\frac{s}{s^*}$.

Os limites de cada parâmetro foram utilizados nos programas SIDOLO e ADAPCO como os valores mínimos e máximos possíveis durante a optimização do cálculo de identificação.

Neste trabalho, os fenómenos relacionados com a restauração estática não serão considerados. Assim, a função $\dot{r}(s, T)$ será desprezada e os parâmetros associados a esta não serão identificados. Para identificar os parâmetros intrínsecos aos fenómenos de restauração estática, seriam necessários resultados experimentais de ensaios de carga-descarga com diversos períodos de descarga. Esta simplificação não compromete o processo de identificação dos outros parâmetros.

11.3 Análise Experimental

O sucesso do processo de identificação de parâmetros do modelo de comportamento depende de uma boa base de informação experimental. A função a minimizar é a diferença entre os valores obtidos pelo modelo matemático e os valores observados. Deste modo, os valores das variáveis observados experimentalmente serão a referência durante todo o processo de identificação. Por conseguinte, é de grande importância o tipo e a qualidade de resultados experimentais para cada material.

Para este trabalho, foram seleccionadas duas ligas de alumínio, cujos parâmetros se deseja encontrar. A saber,

1. Liga de alumínio, AA1050-O, cujos ensaios experimentais foram realizados pelo autor e cuja composição se pode encontrar na tabela 11.2;
2. Alumínio puro (ensaios experimentais realizados por [Miller e Sherby 78]).

11.3.1 Liga de alumínio AA1050-O

A liga de alumínio AA1050-O (99.5% puro alumínio) foi seleccionada por não apresentar uma quantidade excessiva de solutos nem precipitados [Lopes *et al.* 03]. As propriedades deste material, cuja composição química se encontra na tabela 11.2, são dependentes da temperatura.

O módulo de elasticidade, o coeficiente de Poisson e o coeficiente de Lamé são dados, respectivamente, por [Teixeira-Dias e Menezes 01, Andrade-Campos *et al.* 03b]:

$$E(T) = 72474.0 - 43.48(T - 273) \text{ [MPa]}, \quad (11.1)$$

$$\nu(T) = \frac{18392.0 - 9.366(T - 273)}{54082.0 - 34.114(T - 273)}, \quad (11.2)$$

$$\mu(T) = 27000.0 - 17.057(T - 273) \text{ [MPa]}, \quad (11.3)$$

onde T define a temperatura em K.

Tabela 11.2: Composição química da liga de alumínio AA1050-O.

Al	Cu	Fe	Mg	Mn	Si	Ti	V	Zn	Ga	Cr
99.586	0.002	0.28	0.001	0.001	0.089	0.011	0.007	0.005	0.016	0.001

Realizaram-se ensaios de tracção uniaxial e de corte puro a diferentes temperaturas. O material foi recebido sob a forma de chapa com 1 mm de espessura e no estado H14. O material foi recozido a 618 K por 50 minutos de forma a recrystalizar a estrutura de grão e obter um tamanho de grão médio inferior a 30 μm .

Para os ensaios de tracção uniaxial, cortaram-se provetes na direcção de laminagem com 35×7.5 [mm²]. A pequena dimensão dos provetes é explicada pela pequena dimensão da câmara térmica e da montagem experimental. Esta montagem, realizada no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, é a que se mostra na figura 11.1.



Figura 11.1: Montagem experimental utilizada nos ensaios de tracção uniaxial e de corte puro a diferentes temperaturas. (a) Preparação e (b) ensaio.

Para os ensaios de tracção uniaxial, a velocidade da amarra foi de 2.1 mm/min o que resulta numa velocidade de deformação média $\dot{\epsilon} = 0.001 \text{ s}^{-1}$.

Os ensaios de corte puro foram realizados sobre provetes de dimensão de $60 \times 15 \text{ mm}^2$ a 0° com a direcção de laminagem. Para este ensaios, a velocidade da amarra foi de 3.6 mm/min. Esta velocidade foi definida de forma a obter uma velocidade de deformação de corte média de, aproximadamente, $\dot{\gamma} = 0.02 \text{ s}^{-1}$.

Ambos os ensaios foram realizados a temperaturas de 298, 313, 348, 383 e 423 K. Também foram efectuados ensaios de tracção uniaxial à temperatura de 473 K. Na figura 11.2 mostram-se os resultados experimentais dos ensaios de tracção uniaxial a diferentes temperaturas. Os resultados dos ensaios de corte puro são os que se mostram na figura 11.3.

Para identificar os parâmetros do modelo constitutivo é necessário determinar e conhecer a velocidade de deformação em função do tempo. Para este efeito mostra-se, na figura 11.4, a evolução da deformação em função do tempo para os ensaios experimentais de tracção uniaxial a diferente temperaturas.

11.3.2 Alumínio puro

O segundo material utilizado é alumínio puro. Os ensaios experimentais realizados sobre este segundo material foram efectuados por Miller e Sherby [Miller e Sherby 78]. Na figura 11.5 apresentam-se as curvas de tensão-deformação dos ensaios de tracção a velocidade de deformação constante ($\dot{\epsilon} = 0.167 \text{ s}^{-1}$) e às temperaturas de 292, 470 e 643 K.

11.4 Resultados do Método Baseado no Gradiente

Liga de alumínio AA1050-O

Para minimizar a dependência do conjunto inicial de parâmetros nos resultados do método baseado no gradiente recorreu-se a vários conjuntos de parâmetros como estimativa

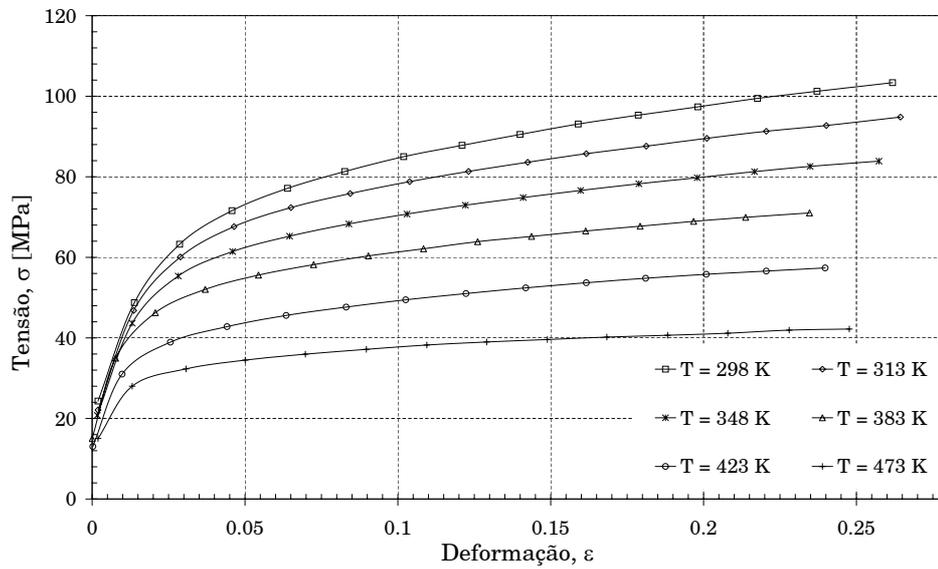


Figura 11.2: Curvas experimentais $\sigma - \varepsilon$ para os ensaios de tracção uniaxial a diferentes temperaturas.

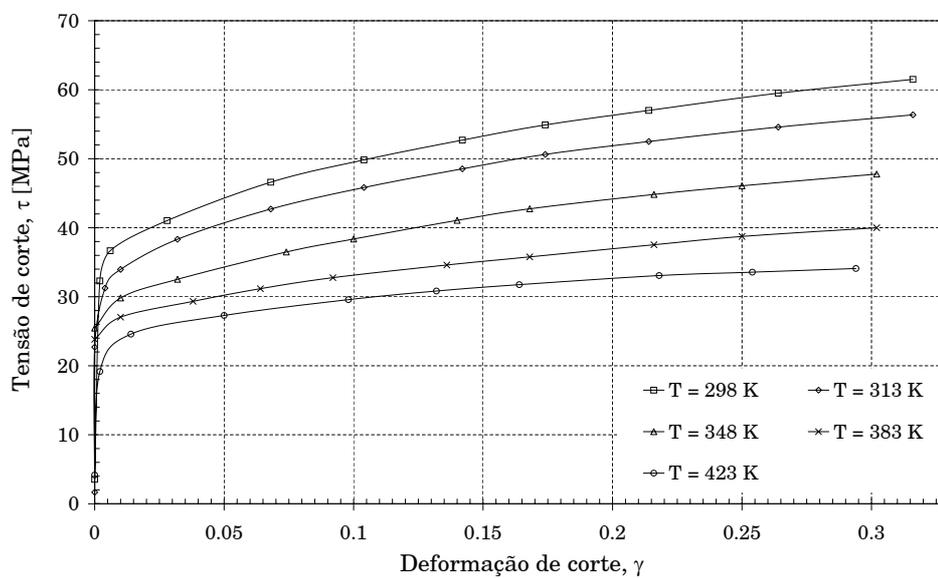


Figura 11.3: Curvas experimentais $\tau - \gamma$ para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas.

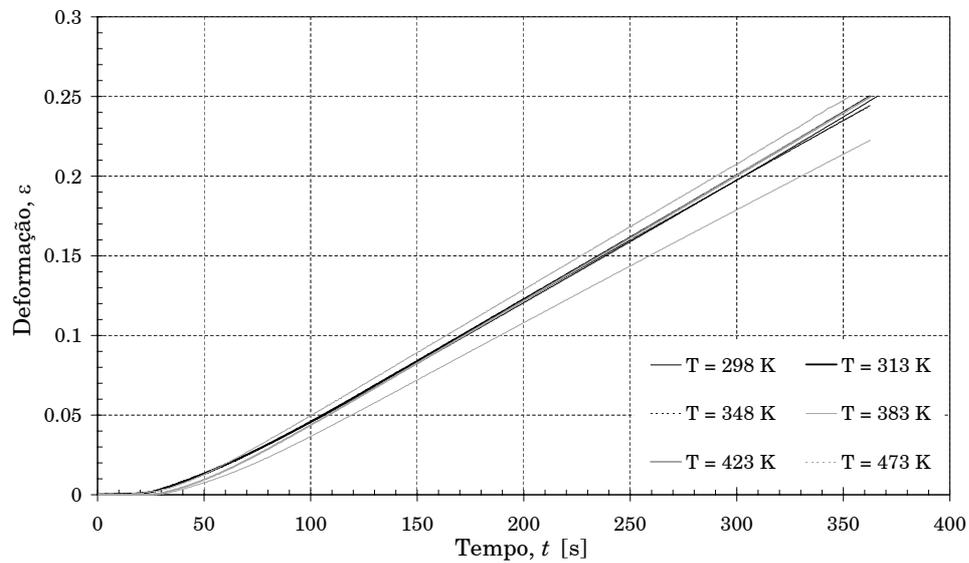


Figura 11.4: Evolução da deformação ao longo do tempo para os ensaios de tracção uniaxial e para os diferentes valores de temperatura.

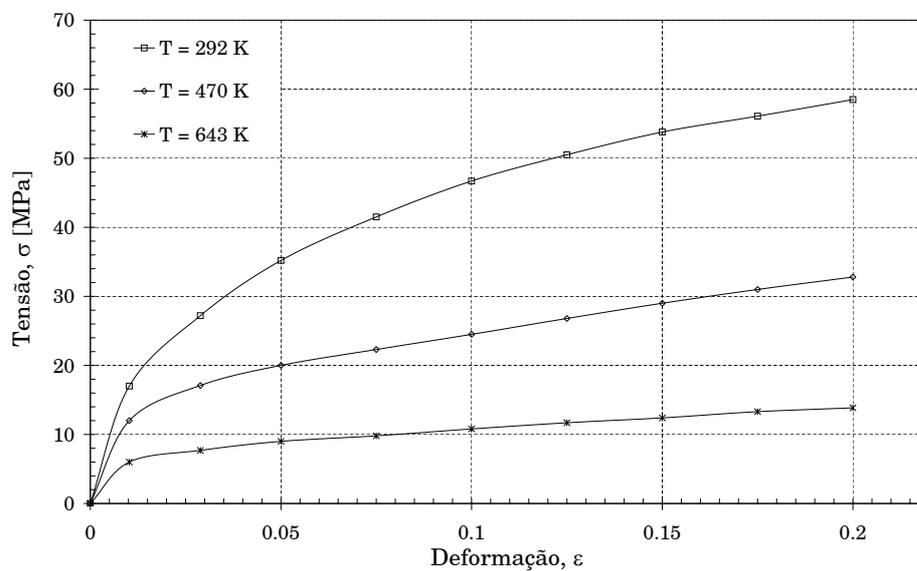


Figura 11.5: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção realizados a velocidade de deformação constante ($\dot{\epsilon} = 0.167 \text{ s}^{-1}$) e a três temperaturas [Miller e Sherby 78].

inicial. Estes foram seleccionados com base em parâmetros encontrados por outros autores [Brown 87, Brown *et al.* 89, Haddadi 96] e de forma a englobar a quase totalidade do universo possível de cada parâmetro. Para cada estimativa inicial pode obter-se um conjunto de resultados distinto.

Na tabela 11.3 apresentam-se quatro dos conjuntos de parâmetros utilizados como estimativa inicial. Estes apresentaram-se como os conjuntos iniciais que levaram aos melhores resultados.

Tabela 11.3: Parâmetros utilizados para estimativa inicial no método do gradiente.

Parâmetro	Conjunto inicial 1	Conjunto inicial 2	Conjunto inicial 3	Conjunto inicial 4
ξ	7.7	10.7	5.7	7.0
m	0.33348	0.13348	0.49	0.23348
A [s^{-1}]	1.91×10^7	1.91×10^6	1.91×10^8	1.91×10^7
h_0 [MPa]	2515.6	915.6	3015.6	1115.6
a	3.0	1.0	4.0	1.3
Q_0 [kJ/mol]	165.0	265.0	305.0	175.35
T_t [K]	600	700	600	600
\bar{s} [MPa]	9	30	30	18.9
Q_{ds} [kJ/mol]	165.0	165.0	305.0	175.35
n	0.045	0.085	0.19	0.07049
$s_{0,1}$	38.441	58.441	78.441	54.0
$s_{0,2}$	-0.047	-0.067	-0.069	-0.04

Uma vez atingida a estagnação do cálculo, obtiveram-se diferentes conjuntos de parâmetros para a liga de alumínio AA1050-O. Pelo programa SiDoLo, todos estes conjuntos são numericamente óptimos visto que este encontrou um mínimo local. Constatou-se, como esperado, que cada conjunto inicial de parâmetros levou a um resultado diferente. Consequentemente, torna-se necessário analisar cada um dos resultados. Esta análise deve ter em conta a diferença relativa entre as curvas simuladas pelos novos parâmetros e as curvas obtidas experimentalmente, e a consistência físico-fenomenológica de cada parâmetro. A diferença relativa entre as curvas simuladas pelos novos parâmetros e as curvas obtidas experimentalmente pode traduzir-se por um erro relativo global, dado por

$$\text{Error}_{\text{RG}} [\%] = \frac{100}{c} \sum_{i=1}^c \left(1 - \frac{A_i^{\text{sim}}}{A_i^{\text{exp}}} \right). \quad (11.4)$$

A_i^{sim} e A_i^{exp} são as área das curvas simulada e experimental, respectivamente, e c é o número de curvas.

Na tabela 11.4 apresenta-se o erro relativo global obtido no final do cálculo para cada conjunto inicial de parâmetros mostrado na tabela 11.3. Nesta tabela também é apresentado o número de iterações necessárias até estagnação do processo de minimização do erro. Os valores do erro relativo global final para os conjuntos 1, 2 e 4 são semelhantes e da ordem dos 3.4%. Embora a diferença do erro entre os conjuntos 1, 2 e 4 seja inferior a 0.1%, o conjunto 1 apresenta o valor de erro mais baixo. Por outro lado, o erro relativo global obtido com o conjunto de parâmetros 3 é de 11%. Este valor de erro é superior ao

obtido pelos outros conjuntos e é inadmissível. Desta forma, a utilização deste conjunto de parâmetros fica afastada.

Tabela 11.4: Erro relativo entre as curvas experimentais e as simuladas, obtido por cada conjunto de parâmetros após estagnação de cálculo.

	Conjunto de parâmetros 1	Conjunto de parâmetros 2	Conjunto de parâmetros 3	Conjunto de parâmetros 4
Erro _{RG} final [%]	3.402	3.423	11.069	3.421
Número de iterações	400	800	400	600

Após a análise de erro, analisa-se a consistência físico-fenomenológica de cada parâmetro final. Na tabela 11.5 apresentam-se os parâmetros finais obtidos com os conjuntos 1, 2 e 4. Estes parâmetros encontram-se dentro dos intervalos previamente estabelecidos como universo de utilização, demonstrando o sucesso das condições de constrangimento do processo de optimização. O valor obtido para a energia de activação Q_0 com os conjuntos 1 e 4 é superior aos valores apresentados por outros autores [Brown 87]. Geralmente estes valores encontram-se entre os 100 kJ/mol e os 200 kJ/mol. O valor de Q_0 encontrado com o conjunto 2 é semelhante ao valor utilizado por Brown e Anand. Com estas observações conclui-se que o conjunto de parâmetros 2 apresenta a melhor solução.

Tabela 11.5: Parâmetros obtidos pelo método do gradiente.

Parâmetro	Conjunto de parâmetros 1	Conjunto de parâmetros 2	Conjunto de parâmetros 3	Conjunto de parâmetros 4
ξ	7.35	1.70	6.93	7.58
m	0.25959	0.06388	0.13332	0.28873
A [s ⁻¹]	6.42×10^7	2.33×10^6	3.65×10^8	9.60×10^7
h_0 [MPa]	3627.2	3654.3	484.0	2931.1
a	4.68	4.89	2.16	4.18
Q_0 [kJ/mol]	231.48	185.33	177.50	253.75
T_t [K]	745.9	600.0	600.0	600.0
\bar{s} [MPa]	58.4	48.2	48.0	46.7
Q_{ds} [kJ/mol]	175.83	256.70	350.00	202.34
n	0.010	0.010	0.036	0.010
$s_{0,1}$	25.667	31.692	125.727	25.000
$s_{0,2}$	-0.009	-0.019	-0.071	-0.010

A melhor solução é a que se apresenta, juntamente com os resultados experimentais, na figura 11.6 para os ensaios de tracção uniaxial e na figura 11.7 para os ensaios de corte puro. Analisando estes resultados pode ver-se que, de um modo geral, há uma grande coerência na determinação dos parâmetros constitutivos. Contudo, nas primeiras fases do ensaio e em alguns ensaios a exactidão é menor. Este facto atribui-se à grande dificuldade na determinação dos parâmetros do material e evidencia a necessidade de desenvolvimento e utilização de métodos de identificação de parâmetros, como os desenvolvidos neste trabalho.

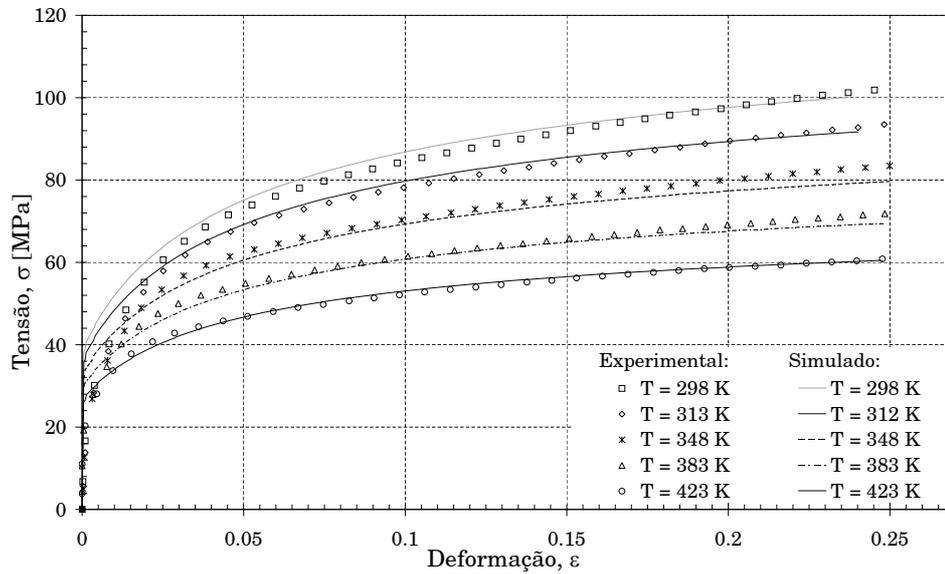


Figura 11.6: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tração uniaxial a diferentes temperaturas (AA1050-O). Comparação entre os resultados experimentais e os numéricos.

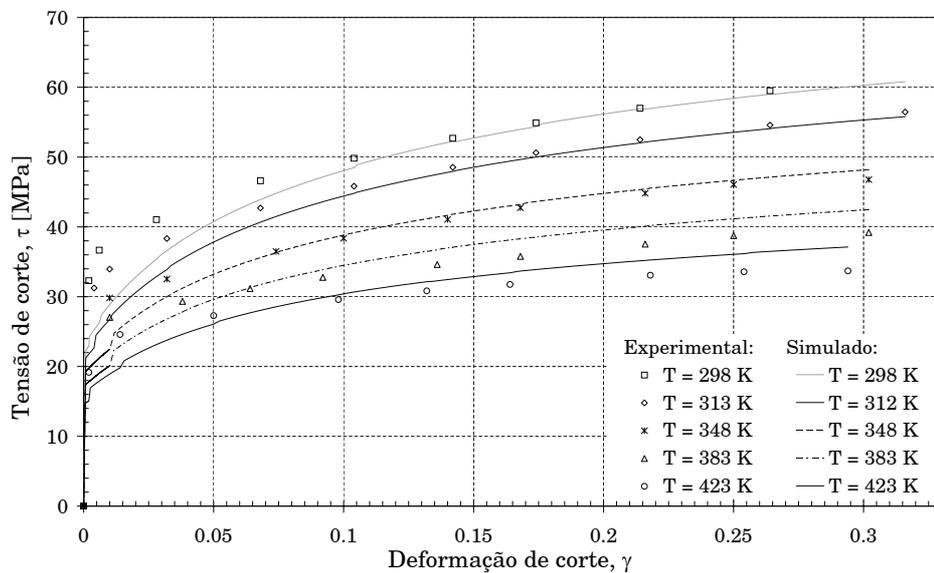


Figura 11.7: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas (AA1050-O). Comparação entre os resultados experimentais e os numéricos.

Os métodos de otimização e/ou de identificação de parâmetros, para serem eficientes, têm de conduzir a uma relação qualidade/custo computacional aceitável. O custo computacional pode ser avaliado pela evolução e convergência do cálculo. A evolução do erro relativo global é representada na figura 11.8. Desta figura, pode concluir-se que o método baseado no gradiente é muito rápido e que bastam poucas iterações para obter um mínimo local, com um erro relativo global de 3.4%. A convergência deste método é atingida em, aproximadamente, 400 iterações. Todavia, este método requer unicamente 50 iterações para se alcançar um nível de erro admissível (abaixo de 10%). Estas observações levam à conclusão de que este método de otimização/identificação de parâmetros demonstra uma eficiência elevada.

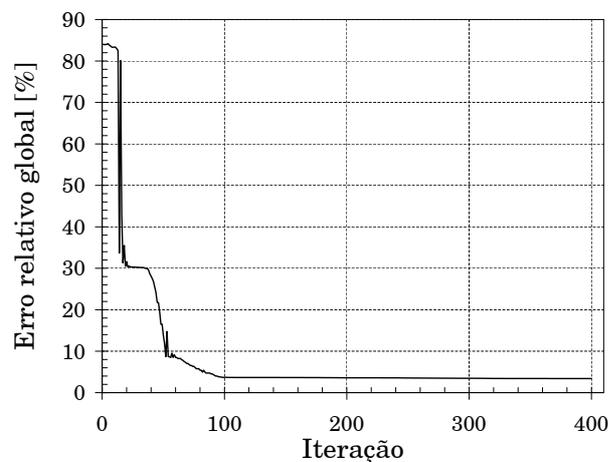


Figura 11.8: Evolução do erro entre os valores observados experimentalmente e os diferentes conjuntos de parâmetros ao longo da evolução do cálculo iterativo.

Alumínio puro

Os resultados experimentais utilizados para identificar os parâmetros constitutivos para o alumínio puro são os realizados por Miller e Sherby [Miller e Sherby 78]. Para este material utilizou-se unicamente o conjunto inicial de parâmetros que obteve sucesso com o material anterior.

Com este conjunto, e após 400 iterações, atingiu-se estagnação do cálculo com um erro relativo global de 3.7%. O conjunto de parâmetros encontrados como ótimos é apresentado na tabela 11.6. Estes encontram-se dentro dos limites possíveis para cada parâmetro. Os valores encontrados para as energias de activação, Q_0 e Q_{ds} , são idênticos e semelhantes aos encontrados por Frost e Ashby [Brown 87].

Os resultados experimentais e numéricos das curvas tensão-deformação para o ensaio de tracção uniaxial do alumínio puro são os que se apresentam na figura 11.9. De acordo com estes resultados, pode observar-se a grande precisão conseguida com os parâmetros determinados para este material.

Tabela 11.6: Conjunto de parâmetros do modelo de comportamento obtido para o alumínio puro.

Parâmetro	Coefficiente inicial
ξ	16.85
m	0.43046
A [s^{-1}]	3.98×10^7
h_0 [MPa]	1770.9
a	2.33
Q_0 [kJ/mol]	134.14
T_t [K]	899.9
\bar{s} [MPa]	133.2
Q_{ds} [kJ/mol]	139.00
n	0.010
$s_{0,1}$	25.000
$s_{0,2}$	-0.0002

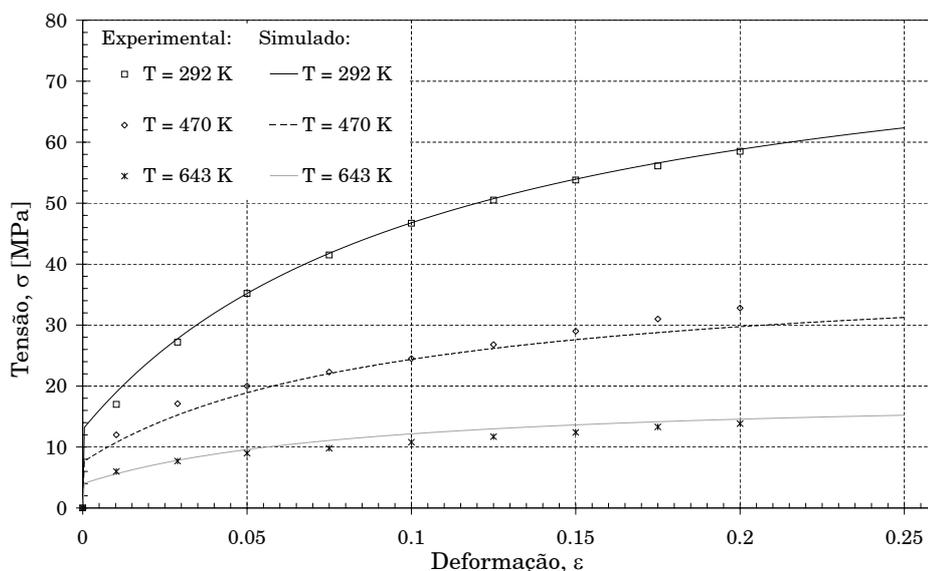


Figura 11.9: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tracção uniaxial. Comparação entre os resultados experimentais [Miller e Sherby 78] e numéricos com o conjunto de parâmetros encontrados para o alumínio puro.

11.5 Resultados do Método Baseado em Algoritmos Evolucionários

Com o método baseado em algoritmos evolucionários não é necessário utilizar vários conjuntos de parâmetros iniciais. Todavia, de forma a minimizar o custo computacional do processo de optimização, é essencial determinar a dimensão da população P ideal. Para esse fim, efectuaram-se diversos testes com tamanhos de população que variam entre 5

e 250 e 2500 gerações. Todos os testes foram efectuados considerando o mesmo tipo e probabilidades de cruzamento, mutação e elitismo.

A evolução do erro relativo global com o número de geração para as diferentes populações P é a que se apresenta na figura 11.10. A partir desta figura, pode concluir-se que o tamanho de população mais eficiente é o de $P = 15$ indivíduos. Esta conclusão considera, além do erro relativo global obtido no final das 2500 gerações, o tempo despendido por cada geração. Por exemplo, uma geração com um tamanho de população de 100 necessita de nove vezes mais tempo de CPU¹ que uma geração com uma população de 15. A dimensão da população ideal $P_{ideal} = 15$ será a utilizada no processo de identificação de parâmetros.

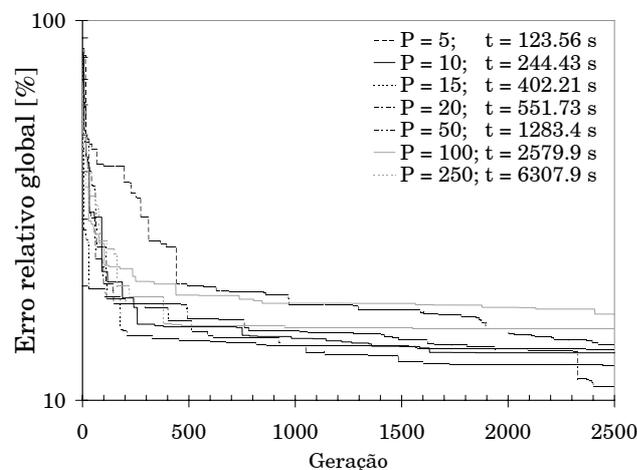


Figura 11.10: Evolução do erro relativo global para diferentes tamanhos de população. Tempo despendido por cada teste.

Uma vez determinado o tamanho de população ideal, procede-se ao cálculo dos parâmetros constitutivos para a liga de alumínio AA1050-O. As curvas de tensão-deformação para o ensaio de tracção uniaxial obtidas com os parâmetros encontrados como óptimos pelo método baseado em algoritmos evolucionários são as que se apresentam na figura 11.11. Na figura 11.12 representam-se os resultados numéricos e experimentais para o ensaio de corte puro. Os parâmetros constitutivos utilizados nestes ensaios encontram-se listados na tabela 11.7.

Quando comparados com resultados de outros autores, os resultados obtidos mostram-se mais precisos (erro relativo global $< 2\%$). Porém, observando os resultados apresentados na figura 11.11, é possível verificar uma menor precisão para valores de deformação $0.1 < \varepsilon < 0.15$ para temperaturas inferiores a 313 K. Os resultados numéricos dos ensaios de corte apresentam também precisão inferior nas fases iniciais dos ensaios ($\gamma < 0.05$).

¹Ensaio efectuado num computador pessoal Intel® Pentium® 4 a 1.7 GHz.

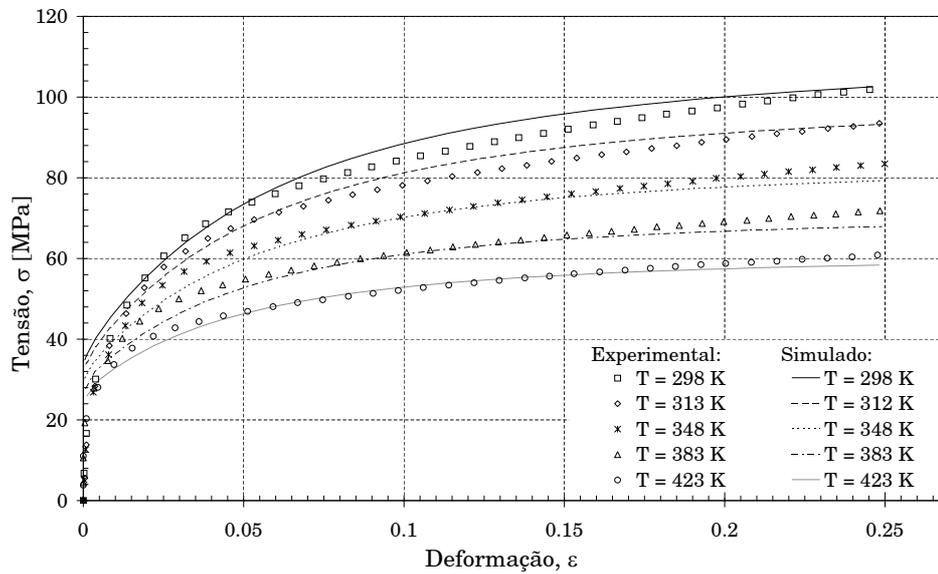


Figura 11.11: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de tração uniaxial a diferentes temperaturas. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos.

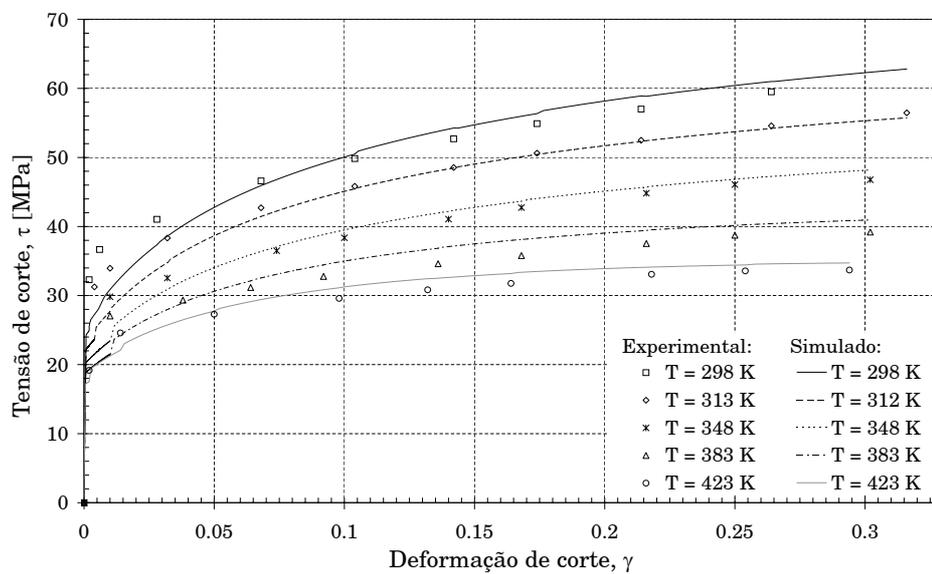


Figura 11.12: Curvas de tensão-deformação para os ensaios de corte puro a diferentes temperaturas. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos.

Tabela 11.7: Parâmetros constitutivos do material AA1050-O encontrados com o método baseado em algoritmos evolucionários.

Parâmetro	Conjunto final
ξ	8.96
m	0.15091
A [s^{-1}]	13.5×10^6
h_0 [MPa]	2469.4
a	1.44
Q_0 [kJ/mol]	148.56
T_t [K]	600.0
\bar{s} [MPa]	78.0
Q_{ds} [kJ/mol]	349.42
n	0.050
$s_{0,1}$	40.026
$s_{0,2}$	-0.00003

11.6 Análise Comparativa dos Métodos de Optimização

Os resultados obtidos com o método baseado no gradiente e o método baseado na teoria evolucionária são distintos. Na figura 11.13 mostra-se a evolução do erro relativo global com o número de gerações ou iterações necessárias para alcançar estagnação do processo. Analisando estes resultados pode observar-se que a convergência com o método baseado em algoritmos evolucionários é mais lenta do que com o método baseado no gradiente. Contudo, no final, o erro relativo do método baseado em algoritmos evolucionários é inferior. Adicionalmente, devido às características deste método de optimização, o resultado obtido contém uma maior probabilidade de ser mínimo global.

A partir da figura 11.13, conclui-se também que o método baseado no gradiente é muito rápido e que bastam poucas iterações para obter um erro relativo admissível. Para o método baseado em algoritmos evolucionários são necessárias mais de 1500 gerações para se alcançar um nível de erro inferior a 10%. Porém, o método baseado no gradiente requer unicamente 50 iterações para se atingir o mesmo nível de erro. A vantagem económica do método do gradiente é ainda reforçada pelo tempo de CPU despendido no cálculo de cada iteração, em comparação com o tempo necessário para cada geração. O tempo de CPU de cada iteração é cerca de 75% do tempo de cada geração (tamanho de população de 15 indivíduos).

Os parâmetros obtidos pelos dois métodos são bastante distintos e ambos conduzem a um valor de erro relativo satisfatório. Pela tabela 11.5, que apresenta o conjunto final dos coeficientes obtidos pelo método do gradiente, e pela tabela 11.7, que apresenta os coeficientes obtidos pelo método evolucionário, conclui-se que ambos os métodos apresentam valores que respeitam o significado fenomenológico de cada parâmetro, embora bastante diferentes. Este facto é explicado pelos múltiplos mínimos do funcional custo e pela complexidade do modelo de comportamento utilizado.

Ambos os métodos se revelaram capazes de determinar os conjuntos de parâmetros para o modelo de comportamento utilizado. O método baseado na teoria evolucionária oferece

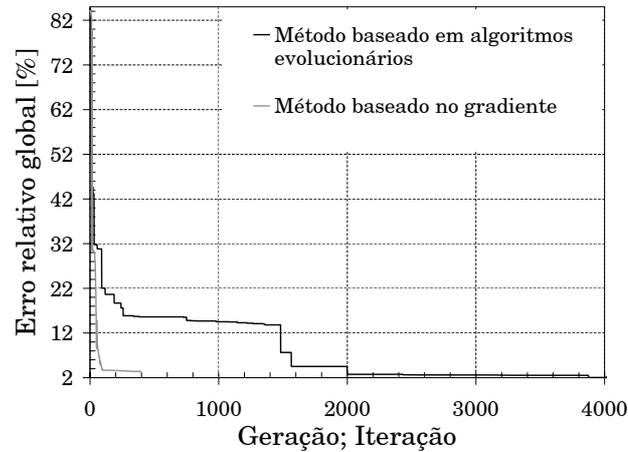


Figura 11.13: Comparação da convergência dos métodos baseados em algoritmos evolucionários e no gradiente.

uma maior probabilidade de encontrar o mínimo global, mas a um custo computacional superior ao método baseado no gradiente.

11.7 Conclusões

Para a modelação de processos termomecânicos, é necessário recorrer a modelos de comportamento complexos de forma a abranger a generalidade dos processos físicos que caracterizam o comportamento do material nessas condições. Estes, geralmente, apresentam um número elevado de parâmetros que devem ser adaptados ao material.

O modelo de comportamento utilizado neste trabalho apresenta cerca de 15 parâmetros que devem ser identificados para cada material. Muitos destes parâmetros apresentam um significado físico-fenomenológico bem definido que, por sua vez, aumenta a dificuldade da sua determinação.

Antes de passar ao problema de identificação de parâmetros importa colocar uma questão essencial. Poderá a forma matemática do modelo constitutivo modelar com exactidão os resultados experimentais? Só após resposta afirmativa a esta questão será possível prosseguir para o processo de identificação dos parâmetros. Porém, acontece que em muitos casos a resposta a esta questão só pode ser encontrada após o processo de identificação.

Os métodos de identificação baseiam-se na minimização do funcional que caracteriza o erro entre os valores simulados pelo modelo de comportamento e os valores observados experimentalmente. Neste trabalho, o processo de minimização é realizado por dois métodos: (i) o método baseado no gradiente do funcional custo e (ii) o método baseado em algoritmos evolucionários. O primeiro método foi desenvolvido a partir do método do maior declive e do método de Levenberg-Marquard. O segundo método utiliza um algoritmo evolucionário de espaço de busca real para encontrar o valor mínimo global do funcional custo. Ambos os métodos foram utilizados para a identificação dos parâmetros do modelo de comportamento para a liga de alumínio AA1050-O. O método do gradiente ainda foi utilizado para a determinação dos parâmetros do modelo para o alumínio puro.

Os dois métodos mostraram-se capazes de determinar, com sucesso, o conjunto de parâmetros para modelos constitutivos de variável interna, como o modelo utilizado. É possível concluir que o método baseado em algoritmos evolucionários leva a níveis de erro inferiores e tem uma maior probabilidade de encontrar o mínimo global, quando comparado com o método baseado no gradiente. Contudo, este facto é obtido com um custo computacional mais elevado. O método baseado no gradiente é computacionalmente muito económico.

Capítulo 12

Validação Numérica

Efectuam-se alguns ensaios numéricos com o objectivo de validar os modelos matemáticos implementados. Comparam-se as soluções obtidas com soluções analíticas, experimentais e numéricas de outros autores. Compara-se a eficácia dos diferentes elementos finitos, métodos de integração e algoritmos implementados.

12.1 Introdução

Apresentada a formulação e descritas as técnicas de implementação dos modelos matemáticos e métodos numéricos, interessa agora validá-los realizando ensaios.

O presente capítulo está dividido em três partes. Na primeira, efectua-se um estudo do problema mecânico sobre as grandes deformações e rotações, os algoritmos de cálculo do tensor rotação e os métodos de integração dos elementos. Com este estudo pretende-se também validar a formulação matemática e numérica descrita anteriormente. Na segunda parte apresentam-se vários estudos de validação do problema térmico. A validação da solução térmica é efectuada recorrendo a quatro exemplos de simulação de transferência de calor numa placa plana: três exemplos realizados em regime estacionário, e outro em regime transiente. Os resultados são comparados com resultados analíticos e com resultados de outros autores. Na terceira parte deste capítulo, apresentam-se três estudos de acoplamento termomecânico. As soluções desses estudos são comparadas quer com resultados experimentais quer com resultados obtidos por outros autores.

12.2 Problema Mecânico em Grandes Deformações

A realização de um ensaio mecânico em grandes deformações permite analisar o comportamento dos elementos finitos implementados e a influência dos algoritmos de cálculo do

tensor rotação. O ensaio mecânico seleccionado para este efeito foi o ensaio de flexão de uma viga encastrada com uma carga na borda livre. Se levado a deformar significativamente, este ensaio induz estados de deformação de tracção e de compressão, bem como grandes rotações.

12.2.1 Ensaio de flexão de uma viga

Geometria e discretização

O modelo geométrico utilizado, baseado nos trabalhos de [Menezes 94, Alves 03], encontra-se esquematizado na figura 12.1. O modelo geométrico do provete de flexão apresenta as

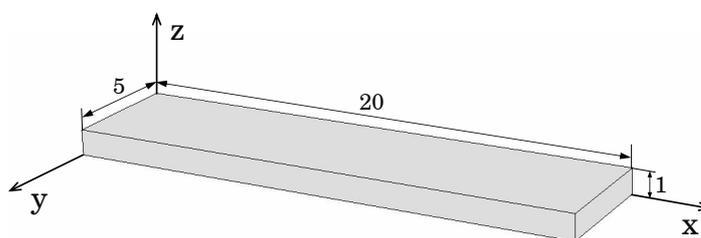


Figura 12.1: Dimensões do provete utilizado no ensaio de flexão.

dimensões $20 \times 5 \times 1$ [mm³].

A utilização de elementos finitos tetraédricos trilineares conduz à obtenção de resultados dependentes da orientação da malha, considerada anisotrópica [Menezes *et al.* 91, Belytschko *et al.* 00, Alves 03]. Estes elementos devem ser utilizado unicamente em geometrias complexas, que impossibilitem a utilização de elementos hexaédricos. Deve ainda recorrer-se a malhas refinadas. Por este motivo, no estudo que aqui se apresenta, apenas se considera o elemento hexaédrico com integração completa (H8FI) e com integração reduzida selectiva (H8SRI).

A malha de elementos finitos utilizada é estruturada e compreende $40 \times 10 \times 2$ elementos, 1353 nós e 6400 pontos de integração. Com esta malha os elementos têm uma relação de forma de 1.

Na tabela 12.1 listam-se todas as designações dos estudos efectuados com os diferentes métodos de integração e métodos de cálculo do tensor rotação.

Tabela 12.1: Designações dos estudos efectuados.

Tipo de Integração	Cálculo do Tensor Rotação	
	Decomposição polar	Rotação incremental
Integração completa	H8FI-PD	H8FI-IR
Integração reduzida selectiva	H8SRI-PD	H8SRI-IR

Condições fronteira e propriedades do material

No ensaio de flexão o provete representado na figura 12.1 é submetido ao seguinte conjunto de restrições:

1. condições de simetria nos planos $x = 0$, $y = 0$ e $y = 5$ mm;
2. imposição de deslocamento nulo na direcção Oz em todos os nós pertencentes simultaneamente aos planos $x = 0$ e $z = 0$ mm (eixo Oy);
3. imposição de um deslocamento na direcção $-Oz$ à linha superior de nós inicialmente localizados no plano $x = 20$ mm.

Impôs-se um deslocamento de 10 mm (50% do comprimento do provete) à velocidade de 0.04 mm/s. A temperatura é constante e igual 293.15 K.

O material considerado é isotrópico e os parâmetros do modelo constitutivo são os encontrados por [Brown *et al.* 89], adequados à liga de alumínio AA1100-O. Estes encontram-se representados na tabela 12.2. Uma vez que o ensaio decorre à temperatura ambiente, o módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson são constantes e dados por

$$E = 83.474 \text{ GPa} \quad e \quad \nu = 0.33, \quad (12.1)$$

respectivamente.

Tabela 12.2: Parâmetros do modelo constitutivo utilizados no ensaio de flexão.

Parâmetro	Conjunto final
ξ	7.00
m	0.23348
A [s^{-1}]	1.91×10^7
h_0 [MPa]	1115.6
a	1.3
Q_0 [kJ/mol]	175.35
T_t [K]	–
\bar{s} [MPa]	18.9
Q_{ds} [kJ/mol]	175.35
n	0.07049
$s_{0,1}$	63.86450
$s_{0,2}$	-0.04809

Resultados

Na tabela 12.3 apresentam-se os tempos de cálculo despendidos em cada simulação, normalizados relativamente ao tempo de cálculo da simulação mais rápida (H8FI-RI). O perfil inferior da secção $y = 0$ é mostrado na figura 12.2 para as simulações da tabela 12.1. Nesta figura, pode constatar-se que tanto o perfil (deformada) como a curva do ângulo do referencial do provete simulado com integração completa são bastante diferentes daqueles obtidos com o método de integração reduzida selectiva. A diferença entre os perfis, de

forma mais arqueada para o elemento H8FI, realça o facto deste elemento ser demasiado rígido quando submetido a solicitações de flexão. Esta conclusão confirma os resultados obtidos por [Menezes 94, Simo e Hughes 98, Belytschko *et al.* 00, Alves 03], entre outros. As diferenças no ângulo de rotação do referencial entre os dois métodos de integração é consequência da rigidez do elemento H8FI.

Tabela 12.3: Tempos de cálculo normalizados para os ensaios de flexão.

Tipo de estudo	H8FI-PD	H8FI-IR	H8SRI-PD	H8SRI-IR
Tempo de cálculo	1.26	1.00	1.71	1.32

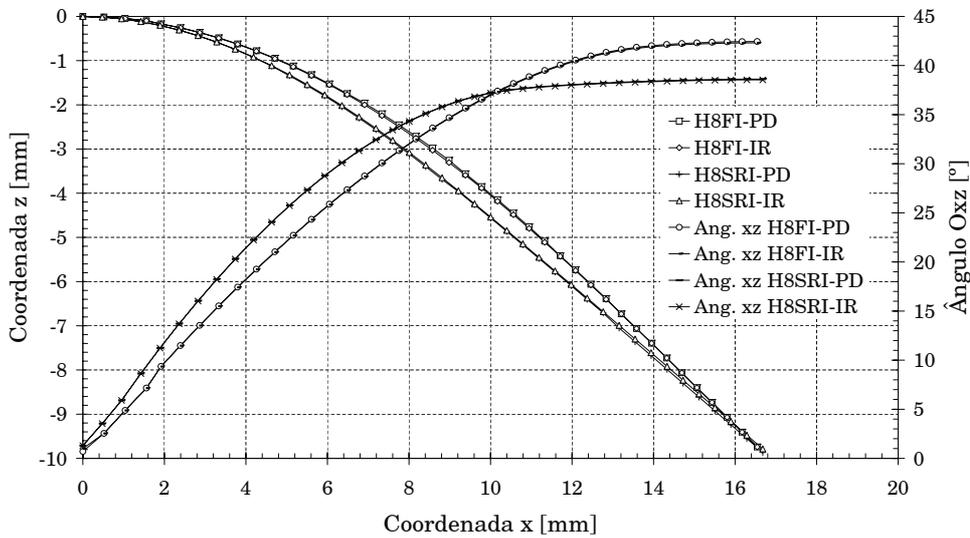


Figura 12.2: Perfil inferior da seção $y = 0$ e ângulo do referencial de rotação ao longo do provete utilizado no ensaio de flexão.

Na figura 12.2 mostra-se também o deslocamento transversal e o ângulo do referencial de rotação para os diferentes métodos de cálculo do tensor rotação. Os perfis H8SRI-IR e H8SRI-PD, assim como os perfis H8FI-IR e H8FI-PD, resultam praticamente sobrepostos. Este facto permite confirmar que ambos os métodos conduzem a resultados equivalentes e de boa precisão. Apesar do método da decomposição polar gozar de uma base matemática mais forte, o esforço computacional requerido neste cálculo é superior, como se mostra na tabela 12.3. Este facto é consequência do maior número de etapas exigidas pelo algoritmo do cálculo de \mathbf{R} pela decomposição polar. Outro motivo é a necessidade de se efectuar este cálculo duas vezes por cada ponto de integração sempre que se recorre ao esquema do ponto médio [Andrade-Campos *et al.* 03].

Na figura 12.3 apresentam-se os isovalores da componente σ_{xx} do tensor das tensões de Cauchy para os ensaios de flexão H8FI-IR e H8SRI-IR.

No caso do ensaio H8FI-IR, cujos resultados se mostram na figura 12.3(a), os valores apresentados da componente de tensão σ_{xx} são muito elevados. Esta circunstância é

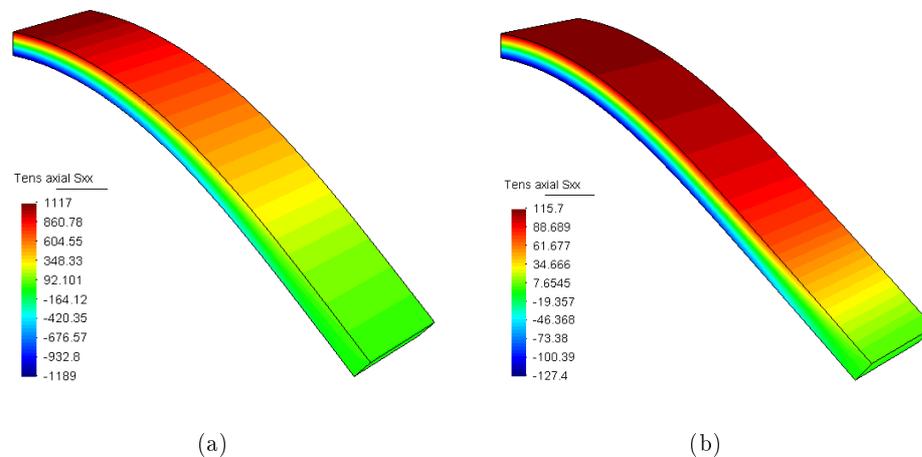


Figura 12.3: Isovalores da tensão σ_{xx} no final do ensaio de flexão para (a) integração completa e (b) integração reduzida selectiva (valores em MPa).

atribuída à existência de pressões hidrostáticas muito elevadas em elementos hexaédricos trilineares com integração completa.

Neste método de integração, os afastamentos à conservação de volume são compensados por uma deformação volumica elástica de que resultam tensões hidrostáticas artificialmente elevadas. Esta é a causa do mau desempenho do elemento H8FI quando solicitado em flexão. Porém, o elemento H8SRI apresenta-se como capaz de representar fidedignamente as tensões existentes no ensaio de flexão. Os isovalores da tensão σ_{xx} para este elemento são os representados na figura 12.3(b). Esta figura reflecte bem um estado de compressão na parte inferior do perfil do provete e um estado de tracção na parte superior do perfil do provete, como se previra.

Na figura 12.4 mostram-se os gradientes da deformação plástica equivalente, de tensão equivalente, da variável interna s e do ângulo do referencial ortotrópico ao longo do provete para o caso do elemento H8SRI-IR.

Pelos resultados da figura 12.4(d) constata-se que a zona superior do provete, zona com níveis de deformação plástica mais elevados, é submetida a uma maior solicitação e, conseqüentemente, oferece uma maior resistência isotrópica ao escoamento plástico (valores mais elevados de s). Como esperado, os gradientes de s são idênticos aos gradientes de deformação plástica equivalente, exibidos na figura 12.4(a). Tanto os gradientes da deformação plástica equivalente como os gradientes da tensão equivalente (figura 12.4(b)) estão qualitativamente de acordo com os resultados por outros autores [Haddadi 96, Alves 03].

A distribuição do ângulo de rotação do referencial corrotacional, figura 12.4(c), apresenta uma zona aproximadamente homogénea onde a sua variação é quase nula. Este facto está de acordo com a distribuição da deformação plástica equivalente, quase inexistente nesta zona (menos de 0.015 em metade do comprimento do provete). A deformação plástica concentra-se na zona do encastramento, que, ao flectir, contém perto da totalidade da variação do ângulo de rotação. Este acontecimento é conhecido pela mecânica das estruturas.

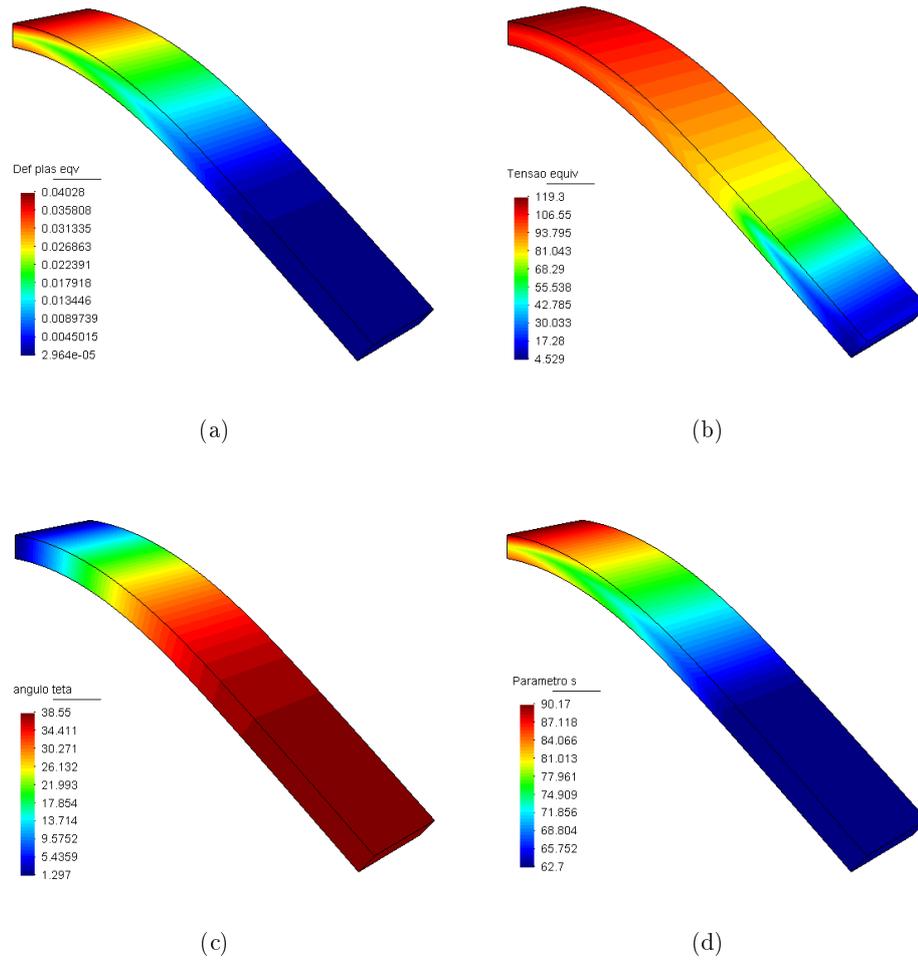


Figura 12.4: Isovalores de (a) deformação plástica equivalente, $\bar{\epsilon}^P$; (b) tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa]; (c) ângulo do referencial corrotacional, θ [°] e (d) variável interna s [MPa], para o ensaio de flexão H8SRI-IR.

O facto de existirem rotações superiores a 5° demonstra o enquadramento deste problema na problemática das grandes rotações.

12.3 Problema Térmico

A validação da solução térmica é feita através de quatro exemplos de transferência de calor. Com os três primeiros problemas em regime estacionário, pretende-se avaliar a precisão e eficiência dos algoritmos bem como o desempenho das condições de fronteira. Com o último estudo, avalia-se o algoritmo de integração temporal para o problema térmico. Para tal, efectua-se a simulação do arrefecimento de uma placa em regime transiente. Todas as soluções obtidas são comparadas com resultados analíticos ou com resultados obtidos por outros autores com abordagens diferentes.

12.3.1 Estudo de uma placa plana com temperatura prescrita

Este exemplo consiste na comparação entre as soluções analítica e numérica do problema de condução de calor numa placa plana com temperatura prescrita em todas as faces laterais.

Geometria e discretização

Na figura 12.5 mostra-se a geometria e malha de elementos finitos utilizadas neste estudo.

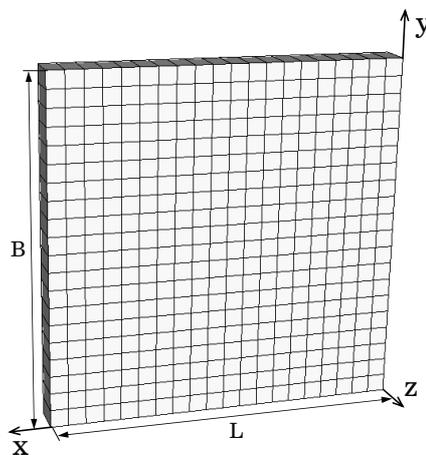


Figura 12.5: Geometria e malha de elementos finitos utilizadas no estudo de uma placa plana com temperatura prescrita.

O modelo geométrico é quadrangular unitário ($B = L = 1.0$ m). A malha de elementos finitos utilizada é estruturada e compreende $20 \times 20 \times 1$ elementos e 882 nós. Os elementos hexaédricos utilizados são trilineares com 8 pontos de integração de Gauss.

Condições fronteira e propriedades do material

As condições de fronteira, esquematizadas na figura 12.6, encontram-se indicadas na tabela 12.4. Na face superior da placa (plano $y = 1.0$ mm) a temperatura prescrita é dada pela

função

$$F(x) = T_a \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right) + T_a. \quad (12.2)$$

onde $T_a = 50^\circ\text{C}$ e L é o comprimento da face. Na tabela 12.4 indicam-se também as propriedades do material utilizado e alguns parâmetros de cálculo.

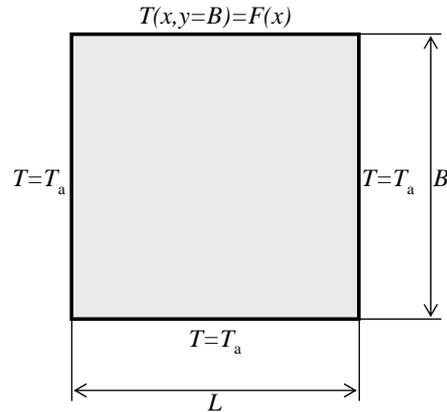


Figura 12.6: Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com temperatura prescrita.

Tabela 12.4: Propriedades do material e parâmetros de cálculo.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7800 kg m^{-3}
Calor específico	c_p	$452 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Condutividade térmica	k	$48 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Temperatura da face superior	$F(x)$	$T_a \sin(\pi x/L) + T_a$
Temperatura das outras faces	T_a	$50 \text{ }^\circ\text{C}$
Temperatura máxima	T_m	$100 \text{ }^\circ\text{C}$
Comprimento/altura	$L = B$	1.0 m

A solução analítica do problema apresentado pode ser obtida utilizando o método da separação das variáveis [Ozisik 80, Vaz Jr. 00]. Para a função de temperatura prescrita $F(x)$ indicada na equação 12.2, a solução é:

$$T(x, y) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sinh(n\pi y/L)}{\sinh(n\pi B/L)} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) x \int_0^L F(x) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx + T_a \quad (12.3)$$

$$= T_m \frac{\sinh(\pi y/L)}{\sinh(\pi B/L)} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + T_a. \quad (12.4)$$

Resultados

Na figura 12.7 mostra-se a distribuição de temperatura ao longo do eixo central $x = 0.5 \text{ m}$ da placa plana. Nesta figura confrontam-se-se as soluções numérica e analítica. A solução

numérica sobrepõe-se perfeitamente à solução analítica, validando os resultados numéricos. O valor mais elevado do erro acontece para $y = 0.6$ m, correspondendo a uma temperatura de 64°C , e é inferior a 0.2%. Uma vez que a temperatura é prescrita sobre toda a fronteira, os erros sobre esta região ($y = 0.0$ m e $y = 1.0$ m) são nulos.

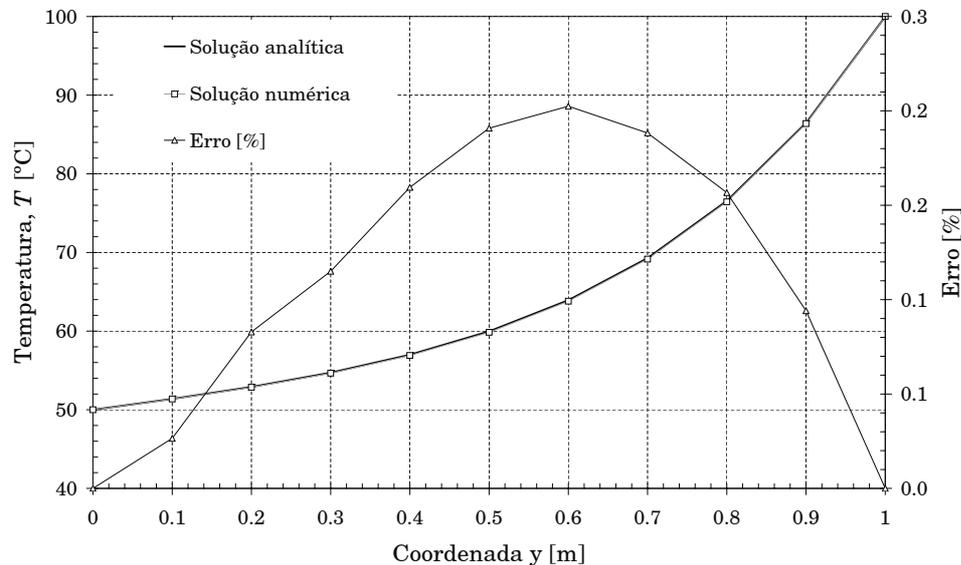


Figura 12.7: Distribuição de temperatura ao longo da placa plana.

Na figura 12.8 apresentam-se as figuras de isovalores da temperatura e fluxo de calor na direcção Ox . Analisando os resultados da figura 12.8(b) nota-se a simetria do campo dos fluxos de calor, que é consequência da simetria das condições de fronteira. Em valor absoluto, os fluxos de calor são mais elevados junto à fronteira $y = 1.0$ m. Recordando que o fluxo de calor é inversamente proporcional à distância entre as temperaturas (lei de Fourier), este facto é esperado e acontece nesta fronteira devido a uma menor distância entre a temperatura máxima e a temperatura mínima.

12.3.2 Estudo de uma placa plana com convecção

Na generalidade dos processos termomecânicos, a energia sob a forma de calor é conduzida pela peça até à sua fronteira, sendo perdida por convecção para o ambiente. De forma a validar a implementação numérica da condição de fronteira de convecção e geração de calor, é feito um estudo de transferência de calor numa placa plana com uma taxa de geração de calor e convecção na fronteira. Neste estudo, os resultados são comparados com uma solução obtida pelo método dos volumes finitos (MVF) [Patankar 80] e com a solução obtida por [Vaz Jr. 00].

Geometria e discretização

O modelo geométrico e a malha de elementos finitos utilizados são as mesmas do estudo anterior, representados na figura 12.5. Recorda-se que a malha de elementos finitos possui 400 elementos e 882 nós.

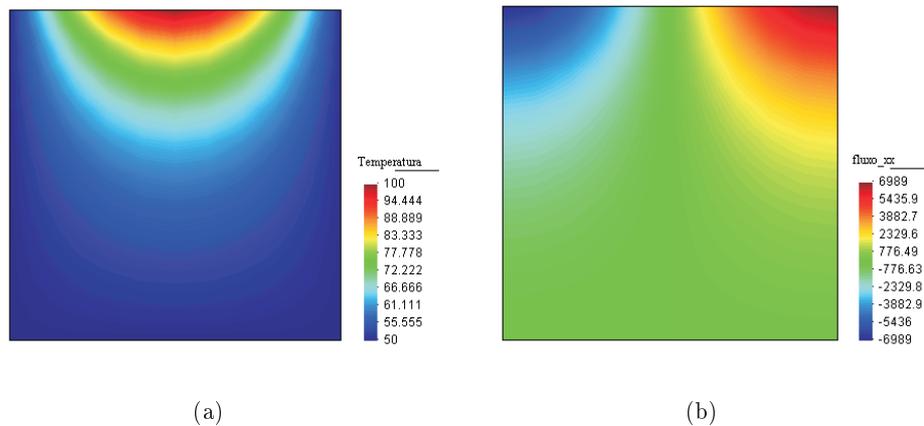


Figura 12.8: Isovalores (a) de temperatura (valores em $^{\circ}\text{C}$) e (b) do fluxo de calor na direcção Ox (valores em Wm^{-2}) da placa plana com temperatura prescrita.

Condições fronteira e propriedades do material

Na figura 12.9 e na tabela 12.5 apresentam-se as condições de fronteira e as propriedades do material, respectivamente. Considera-se uma taxa de geração interna de calor constante na placa. Esta está sujeita a perdas de calor por convecção nas suas fronteiras $x = 0$, $x = 1$, $y = 0$ e $y = 1$ m e. Em regime estacionário, o coeficiente de convecção e a taxa de geração interna de calor são dados do problema.

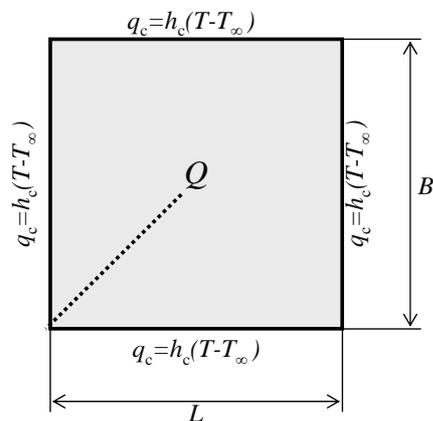


Figura 12.9: Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com condições de fronteira de convecção.

Resultados

Na figura 12.10 apresenta-se a distribuição de temperatura ao longo de um eixo diagonal, do canto inferior esquerdo até ao centro da placa, esquematicamente representado na fi-

Tabela 12.5: Propriedades do material e parâmetros do problema.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7800 kg m ⁻³
Calor específico	c_p	452 Jkg ⁻¹ K ⁻¹
Condutividade térmica	k	48 Wm ⁻¹ K ⁻¹
Coefficiente de convecção	h_c	150 Wm ⁻² K ⁻¹
Geração interna de Calor	Q	500 kWm ⁻³
Temperatura ambiente	T_∞	30 °C
Comprimento/altura	$L = B$	1.0 m

gura 12.9. Na figura 12.10 comparam-se as soluções numérica deste trabalho, numérica obtida por volumes finitos, analítica e a solução numérica obtida pelo método dos elementos finitos por [Vaz Jr. 00]. Como se pode verificar, a solução numérica está sobreposta à curva da solução do método dos volumes finitos. Embora inferior a 0.3%, a maior diferença percentual ocorre nos cantos da placa ($x = y = 0$ m). É de realçar que, na formulação matemática do método dos volumes finitos, estes pontos são singulares e tratados de forma diferenciada. A curva da distribuição de temperatura na diagonal da placa que se obtém numericamente também coincide com os resultados obtidos por [Vaz Jr. 00]. O erro máximo entre a solução numérica e a solução pelo método dos volumes finitos é de 0.302%.

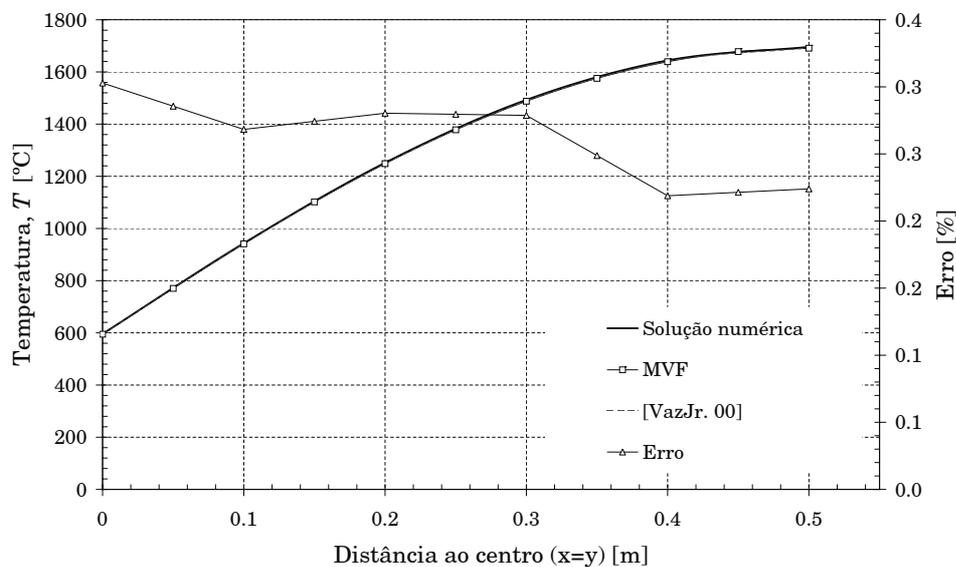


Figura 12.10: Distribuição de temperatura numa placa plana sujeita a convecção na fronteira.

A figura 12.11 apresenta os isovalores da temperatura e fluxo de calor na direcção Ox . A observação desta figura permite auferir que existe simetria axial no campo de temperaturas e simetria longitudinal do campo dos fluxos de calor na direcção Ox . O decréscimo radial de temperatura do centro da placa até à fronteira é devido à existência de perdas de calor

por convecção nas faces da placa plana.

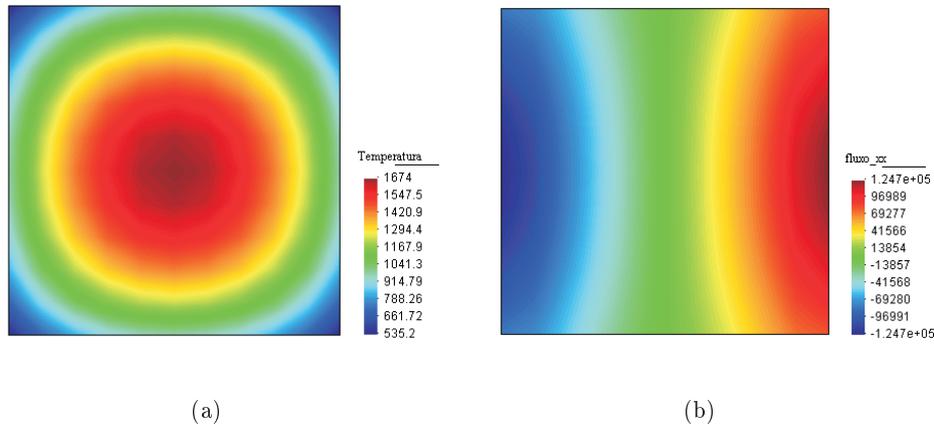


Figura 12.11: Isovalores (a) da temperatura (valores em $^{\circ}\text{C}$) e (b) do fluxo de calor na direcção Ox (valores em W/m^2) da placa plana com convecção.

Note-se que a condição de geração interna de calor é de grande importância pois é a base numérica para a simulação da energia gerada pela dissipação de trabalho plástico.

12.3.3 Estudo da condução de calor entre dois materiais

Em alguns processos tecnológicos como, por exemplo, o forjamento, a estampagem e o torneamento, parte da energia sob a forma de calor é transferida por condução da peça para a ferramenta. Por conseguinte, nestes processos existe transferência de calor entre dois materiais. O terceiro problema retrata o fenómeno da condução de calor ao longo e entre dois materiais com propriedades térmicas diferentes e unidos em contacto perfeito.

Geometria e discretização

A geometria deste problema é dada por um paralelepípedo de dimensões $1 \times 0.2 \times 0.1 \text{ m}^3$. Este modelo geométrico é discretizado por uma malha de elementos finitos estruturada com $20 \times 5 \times 2$ elementos hexaédricos (figura 12.12).

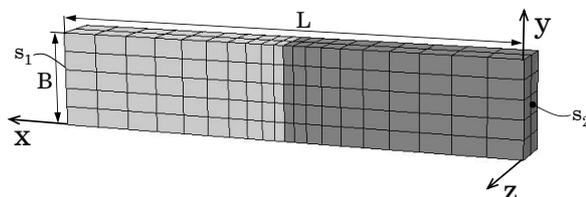


Figura 12.12: Geometria e malha de elementos finitos utilizadas no estudo da condição de calor entre dois materiais.

Condições fronteira e propriedades do material

Na figura 12.13 e na tabela 12.6 apresentam-se as condições de fronteira e as propriedades dos materiais, respectivamente.

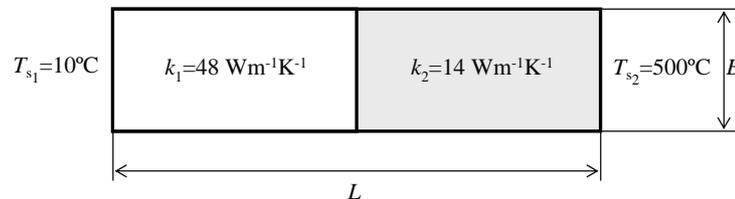


Figura 12.13: Condições de fronteira atribuídas no estudo da condução de calor entre dois materiais.

Tabela 12.6: Propriedades do material e parâmetros do problema.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7800 kgm^{-3}
Calor específico	c_p	$452 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Condutividade térmica do primeiro material	k_1	$48 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Condutividade térmica do segundo material	k_2	$14 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Temperatura da superfície 1	T_{s_1}	10°C
Temperatura da superfície 2	T_{s_2}	500°C
Comprimento	L	10 cm
Altura	B	2 cm

O domínio de análise é constituído por dois materiais não havendo qualquer perda de calor entre eles (contacto térmico perfeito). Estes materiais são de igual comprimento ($L_1 = L_2 = L/2 = 5 \text{ cm}$). O diferencial de temperatura existente entre as faces livres (s_1 e s_2) de cada material é de 490°C . A diferença entre as condutividades térmicas dos materiais é de $34 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

A solução analítica de um problema de um material composto, com temperatura prescrita nas faces, pode ser obtida recorrendo à equação de Fourier para 2 materiais, dada pela seguinte expressão [Incropera e DeWitt 80]:

$$q = U (T_{s_2} - T_{s_1}) \quad \text{com} \quad U = \frac{1}{\frac{L_1}{k_1} + \frac{L_2}{k_2}} \quad (12.5)$$

Resultados

Na figura 12.14 apresenta-se a distribuição de temperatura ao longo do provete. Nesta figura comparam-se as soluções numérica e analítica, e mostra-se o erro relativo entre estas. A solução numérica coincide com a solução analítica, validando os resultados numéricos obtidos. O erro entre a solução analítica e a solução numérica é, em valor absoluto, sempre inferior a 0.04% . O valor máximo do erro acontece na fronteira entre os dois materiais. O fluxo de calor é constante ao longo da direcção Ox ($q_{\text{numérico}} \approx q_{\text{analítico}} = 1062.2 \text{ Wm}^{-2}$).

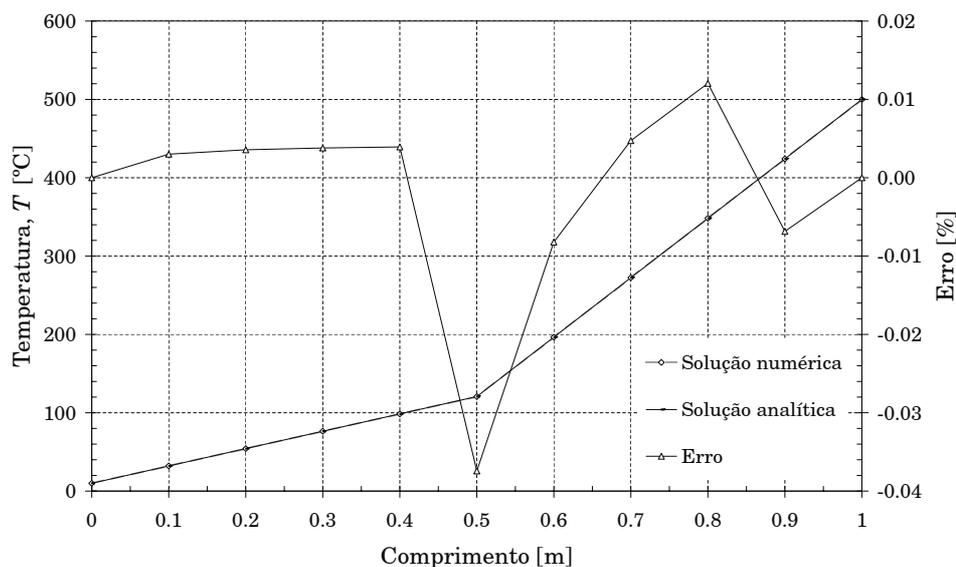


Figura 12.14: Distribuição de temperatura entre dois materiais. Erro entre a solução numérica e a solução analítica.

O declive da curva de temperatura é proporcional à condutividade térmica do material. Desta forma, e a partir da figura 12.14, conclui-se que a condutividade do material à esquerda do centro do provete é superior à condutividade térmica do material 2. Este facto confirma os dados iniciais.

A figura 12.15 apresenta os isovalores de temperatura ao longo do provete. Atenda-se ao facto de que, uma vez que a condutividade térmica do segundo material é inferior, o diferencial de temperatura é maior.

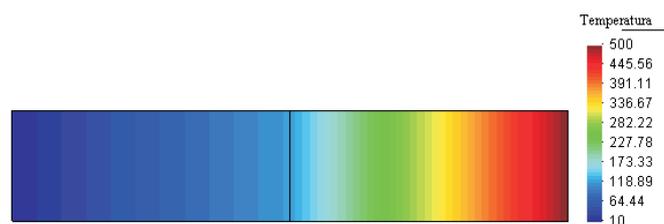


Figura 12.15: Isovalores de temperatura (valores em °C) ao longo dos dois materiais.

12.3.4 Estudo do arrefecimento de uma placa plana

Nesta secção realiza-se um estudo de validação do algoritmo de integração temporal e dos efeitos de inércia térmica. O problema proposto será resolvido em regime transiente, onde a solução é dependente do tempo. Consequentemente, o problema seleccionado para avaliar o algoritmo de integração no tempo é o arrefecimento de uma placa plana com resistência interna desprezável. Foi este o problema escolhido por ser possível calcular uma solução

analítica que, posteriormente, pode ser comparada com a solução numérica. Esta solução também é comparada com os resultados obtidos por outros autores.

Geometria e discretização

Para este problema, também se utilizou a placa plana, representada na figura 12.5. Esta compreende 400 elementos hexaédricos e 882 nós.

Condições fronteira e propriedades do material

Definem-se condições de fronteira de convecção nas faces $x = 0$, $x = 1$, $y = 0$ e $y = 1$ m da placa plana. Esta está, inicialmente, à temperatura uniforme T_0 , como se pode ver na figura 12.16.

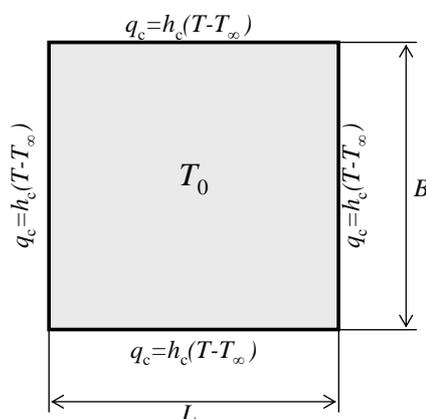


Figura 12.16: Condições de fronteira atribuídas no estudo de uma placa plana com condições de fronteira de convecção.

A condição de resistência térmica desprezável é alcançada definindo um valor de condutividade térmica muito elevado (infinito). Neste caso, espera-se que o campo de temperaturas na placa seja homogêneo e que seja possível descrever a evolução do estado térmico do corpo conhecendo apenas a temperatura num ponto. A tabela 12.7 apresenta os dados do presente estudo. Para este estudo utilizaram-se vários incrementos de tempo constantes (ver tabela 12.8). A título comparativo, foram ainda utilizados diferentes tipos de integração temporal, recorrendo a diferentes tamanhos do incremento de tempo.

Considerando que o campo de temperaturas é constante em toda a placa em cada instante de tempo, é possível obter uma solução analítica do presente problema. A solução analítica é dada pela expressão seguinte, baseada no método analítico da solução adiabática¹ [Incropera e DeWitt 80, Vaz Jr. 00]:

$$T(t) = (T_0 - T_\infty) \exp\left(-\frac{h_c A_s}{\rho V c_p}\right) + T_\infty \quad (12.6)$$

¹The lumped capacitance method.

Tabela 12.7: Propriedades do material e parâmetros do problema.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7800 kgm ⁻³
Calor específico	c_p	452 Jkg ⁻¹ K ⁻¹
Condutividade térmica	k	∞
Comprimento/altura	$L = B$	1.0 m
Coefficiente de convecção	h_c	2000 Wm ⁻² K ⁻¹
Temperatura inicial	T_0	100 °C
Temperatura exterior	T_∞	30 °C
Superfície de troca térmica	A_s	4 m ²
Volume do corpo	V	1 m ³

Tabela 12.8: Incrementos de tempo utilizados em cada estudo.

Integração temporal	Λ	Incremento de tempo
Explícito	0	dt=0.1 s
		dt=5.0 s
Implícito [Vaz Jr. 00]	1	dt=150s
		dt=5.0 s
Algoritmo implementado	0.7 e 1	dt=15.0 s
		dt=150.0 s
		dt=300.0 s

Resultados

Devido ao valor elevado definido para a condutividade térmica do material, a diferença entre as temperaturas obtidas numericamente no interior da placa é desprezável. Desta forma, observou-se uma total homogeneidade de valores de temperatura na placa em todos os estudos realizados.

A figura 12.17 mostra a evolução temporal de temperatura num ponto central da placa para soluções numéricas obtidas a partir de quatro valores distintos de incrementos de tempo dt . Esta figura também apresenta os resultados analíticos do problema calculado pela expressão (12.6).

Quanto à precisão dos resultados, observa-se que para incrementos de tempo menores, a precisão dos resultados obtidos numericamente é maior. Para o incremento de tempo $dt = 5.0$ s, o erro máximo ocorre para $t = 650$ s e é de 0.29%. No caso de um incremento de tempo três vezes superior, $dt = 15.0$ s, o erro obtido é de 0.865% em $t = 675$ s.

Nas soluções encontradas com incrementos de tempo superiores a $dt = 150.0$ s, embora sigam a forma natural da curva de arrefecimento e apresentem bons resultados qualitativos, os erros ultrapassam 3%. Estes níveis de acumulação de erro são esperados sempre que se utiliza passos de tempo demasiado grandes. Porém, apesar do erro evidenciado pelo tamanho excessivo do incremento de tempo, este erro é inferior ao erro demonstrado pela solução implícita de [Vaz Jr. 00] para $dt = 150.0$ s.

A solução obtida com o algoritmo explícito apresenta uma boa precisão unicamente quando o incremento de tempo é relativamente pequeno ($dt = 0.1$ s). Para incrementos

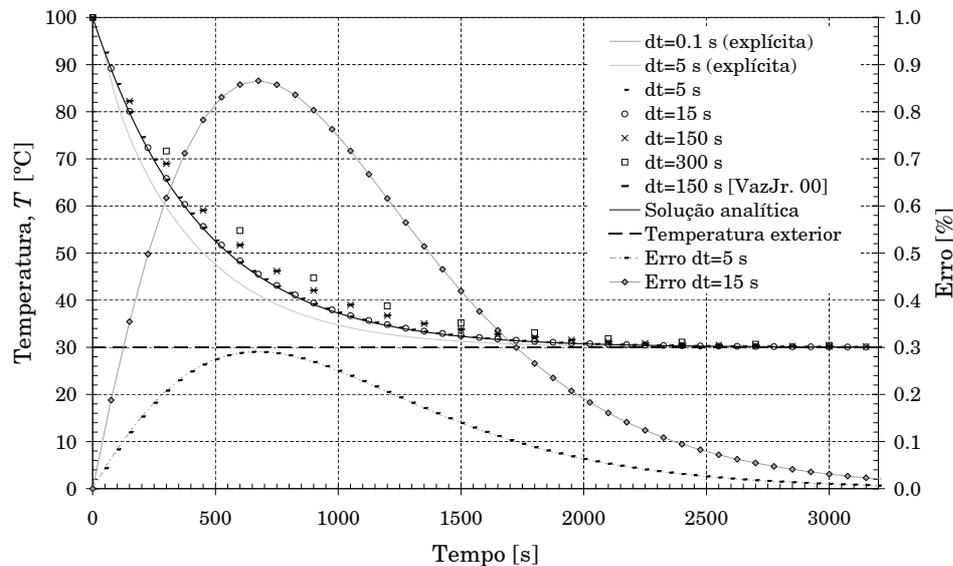


Figura 12.17: Evolução de temperatura no tempo para a placa plana de resistência interna desprezável. Erro entre as soluções numérica e analítica.

superiores como, por exemplo $dt = 5.0$ s, esta deteriora-se. O algoritmo implementado contém uma precisão igual ao algoritmo explícito com a possibilidade de utilização de passos de tempo cinquenta vezes superiores. Desta forma, o algoritmo utilizado apresenta-se significativamente mais eficaz em problemas térmicos em regime transiente.

12.4 Acoplamento Termomecânico

O acoplamento termomecânico manifesta-se através da interdependência entre os modelos de comportamento mecânico e térmico. O efeito da variação de temperatura sobre a resposta mecânica revela-se pela expansão (ou contracção) térmica do material. O campo de temperatura depende do campo de deslocamentos do sólido e da energia gerada por deformação plástica. Esta última dependência é denominada por efeito térmico da deformação plástica.

Nesta secção, pretende-se validar numericamente o efeito mecânico da variação de temperatura e o efeito térmico da deformação plástica. Devido à complexidade inerente a ambos os fenómenos, estes efeitos serão validados separadamente.

A validação do efeito variação de temperaturas sobre a resposta mecânica é realizado efectuando um ensaio de expansão térmica de uma barra. A esta barra, inicialmente a temperatura ambiente, prescreve-se a temperatura numa das suas extremidades, obrigando-a a dilatar-se.

Quanto à geração de calor por deformação plástica, realizam-se dois ensaios. O primeiro é a compressão de um cilindro sem atrito. Neste ensaio, e devido à inexistência de atrito entre a peça e a ferramenta, os valores obtidos serão homogêneos em todo sólido. Desta forma, pode avaliar-se a geração de calor e, conseqüentemente, a evolução do campo de temperatura com a tensão e deformação. O segundo exemplo é um ensaio de tracção de

um aço inox a diferentes velocidades de deformação à temperatura ambiente. Neste ensaio, o campo de temperaturas não será homogéneo devido ao fenómeno de convecção natural nas fronteiras do provete e à condução de calor entre o provete e as amarras da máquina de tracção.

12.4.1 Expansão de uma barra com temperatura prescrita

Com este problema torna-se possível avaliar a dilatação térmica de um material quando sujeito a um diferencial de temperatura.

Geometria e discretização

O modelo geométrico e a malha de elementos finitos encontram-se representado na figura 12.18. A barra possui as dimensões de $10 \times 1 \times 1$ [cm³] e é discretizada em $10 \times 2 \times 2$ elementos finitos hexaédricos de 8 nós. Apesar da malha de elementos finitos ser relativamente grosseira, verifica-se que é suficiente para não influenciar os resultados.

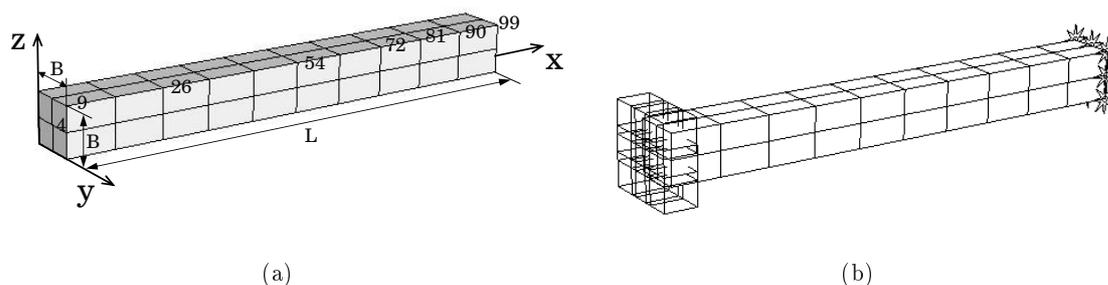


Figura 12.18: (a) Geometria e malha de elementos finitos e (b) representação gráfica das condições fronteira utilizadas no ensaio de expansão de uma barra.

Condições fronteira e propriedades do material

As condições de fronteira do ensaio são esquematicamente representadas na figura 12.18(b). No plano $x = 0$ cm é imposta a condição de deslocamento nulo em todas as direcções, correspondendo a um encastramento. Esta condição é representada graficamente por paralelepípedos com centro nos nós de atribuição. No plano $x = 10$ cm é prescrita uma temperatura $T_p = 393$ K. Esta condição é graficamente representada por uma estrela (figura 12.18(b)). Inicialmente ($t = 0$ s), a barra encontra-se à temperatura ambiente ($T_{amb} = 293$ K), como indicado na tabela 12.9 onde se apresentam as propriedades do material e alguns parâmetros do estudo.

Os parâmetros intrínsecos ao modelo de comportamento são apresentados na tabela 12.2. O algoritmo de integração temporal para o problema térmico utiliza o método semi-implícito com $\Lambda = 0.7$ (*previsão*) e o método implícito na fase de *correção*. No problema mecânico utiliza-se o método semi-implícito com $\Phi = 0.7$.

Tabela 12.9: Propriedades do material e parâmetros de cálculo.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	2770 kgm^{-3}
Calor específico	c_p	$875 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Condutividade térmica	k	$180 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Temperatura ambiente	T_{amb}	293 K
Temperatura prescrita	T_p	393 K
Módulo de elasticidade	E	$-43.4800(T - 293) + 84344.0 \text{ MPa}$
Coefficiente de Poisson	ν	$4.28457 \times 10^{-6}(T - 293) + 0.33703$
Coef. expansão térmica	α	$2.47 \times 10^{-8}(T - 293) + 2.87 \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$
Comprimento	L	10.0 cm
Altura	B	1.0 cm

Resultados

Na figura 12.19 mostra-se a evolução da temperatura para os nós indicados na figura 12.18(a). A distribuição de temperatura e a dilatação, ao longo da barra, para o instante $t = 100 \text{ s}$ são mostradas na figura 12.20. Nesta figura mostra-se, também, a malha de elementos finitos não-deformada, para referência.

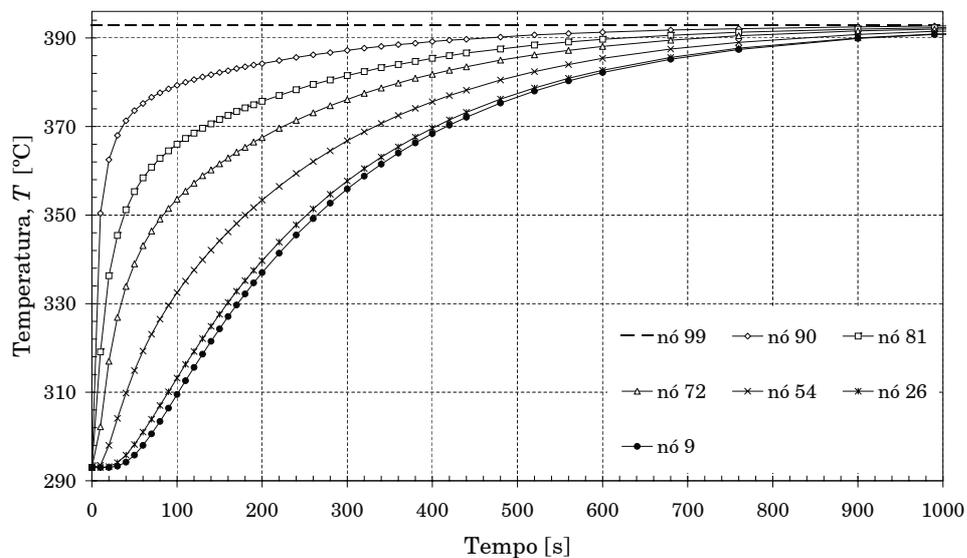


Figura 12.19: Evolução da temperatura no tempo em diferentes nós ao longo da barra.

De acordo com os isovalores de temperatura da figura 12.20, depreende-se que a distribuição e evolução de temperatura não é homogênea em toda a barra, sendo esta mais elevada na proximidade da extremidade não encastrada. Este resultado é devido à localização da fonte de calor (superfície $x = 10 \text{ cm}$) e ao fenômeno de condução de calor no material da barra. A forma das curvas da figura 12.19) é devida à não-linearidade da variação do fluxo de calor necessário para manter a temperatura prescrita no extremo da

barra. O nó 99, pertencente à superfície $x = 10$ cm, apresenta a temperatura constante e prescrita durante todo o ensaio. A estabilização do campo de temperatura ocorre, aproximadamente, após 1000 s, como se pode ver pelos resultados da figura 12.19.

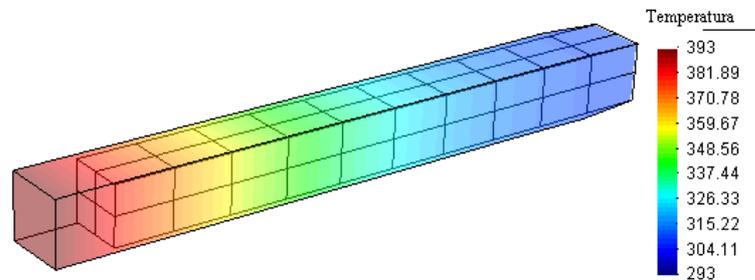


Figura 12.20: Isovalores de temperatura [K] para $t = 100$ s (ampliação $300\times$).

As figuras 12.21 e 12.22 apresentam a evolução temporal dos deslocamentos nas direcções Ox e Oy , respectivamente, para diversos nós da barra. Nestas comprova-se o efeito da variação de temperatura sobre o comportamento mecânico.

O deslocamento do nó 99 na direcção Ox (figura 12.21) representa a evolução da dilatação da barra. Como esperado, a expansão final de cada nó é proporcional à distância do plano de constrangimento na direcção Ox . A estacionaridade do ensaio, atingida aproximadamente para $t = 1000$ s, é demonstrada pelo declive nulo das curvas de deslocamento das figuras 12.21 e 12.22. As curvas de deslocamento na direcção Oy apresentam a mesma forma das curvas de evolução de temperatura (figura 12.19), mostrando a dependência directa entre a temperatura e a expansão térmica. Os deslocamentos na direcção Oz são idênticos aos na direcção y , apresentados na figura 12.22.

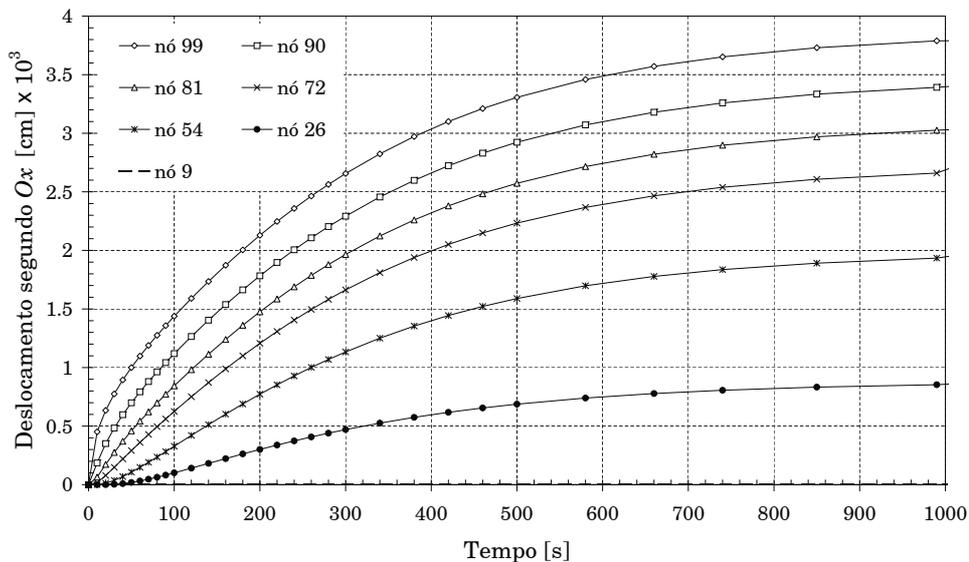


Figura 12.21: Evolução do deslocamento na direcção x no tempo em diferentes nós ao longo da barra.

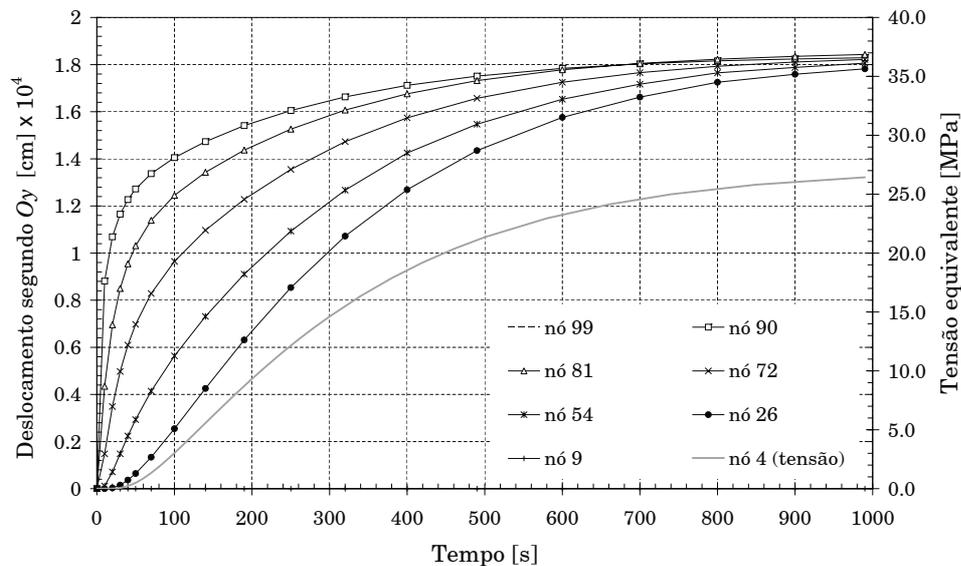


Figura 12.22: Evolução do deslocamento na direção y no tempo em diferentes nós ao longo da barra. Evolução da tensão equivalente num nó constrangido.

Na figura 12.22 mostra-se também a evolução da tensão equivalente num nó pertencente ao plano de constrangimento $x = 0$ cm. Nesta superfície, devido à impossibilidade de qualquer dilatação térmica, a tensão equivalente atinge valores superiores a 26 MPa. Este fenómeno é também resultado mecânico da variação temperatura em sólidos.

12.4.2 Ensaio de compressão de um cilindro sem atrito

O ensaio de compressão de um cilindro é um problema a que se recorre frequentemente para estudar o calor gerado por deformação plástica [Vaz Jr. 98, Rodrigues e Martins 98]. Este ensaio consiste na compressão de um cilindro metálico entre duas matrizes rígidas planas. O contacto é simulado pela aplicação de um deslocamento prescrito nas faces superior e inferior do provete. De forma a obter deformações homogêneas em todo o provete, e ser possível obter uma solução analítica aproximada do problema, não se considera a condição de atrito entre a peça e a matriz.

A solução numérica obtida é comparada com uma solução analítica aproximada e pela solução numérica encontrada por um programa de simulação pelo método de elementos finitos de referência [Rodrigues e Martins 98, Alves 04].

Geometria e discretização

A geometria do problema é a que se mostra na figura 12.23(a). Devido a condições de simetria do problema, apenas 1/8 do provete cilíndrico é modelado. O modelo geométrico possui 15 mm de altura e um raio de 10 mm. A malha de elementos finitos utilizada encontra-se representada na figura 12.23(b). Nesta figura pode ver-se que foram utilizados 555 elementos hexaédricos lineares com integração reduzida selectiva e 766 nós.

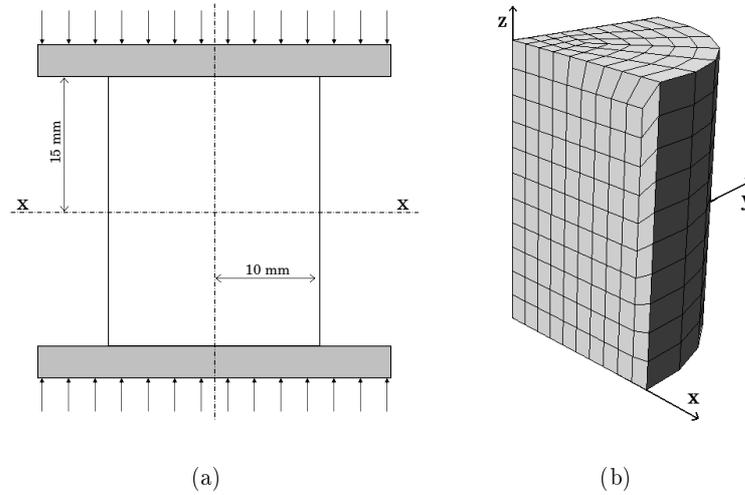


Figura 12.23: (a) Geometria do problema e (b) discretização em elementos finitos do modelo utilizado no ensaio de compressão de um cilindro.

Condições fronteira e propriedades do material

No ensaio de compressão o provete representado na figura 12.23 é submetido ao seguinte conjunto de condições fronteira:

1. Simetria mecânica e térmica nos planos $x = 0$, $y = 0$ e $z = 0$;
2. Isolamento térmico na superfície superior do provete (considera-se que não há transferência de calor entre a peça e a matriz);
3. Convecção para a superfície curva $r = 10$;
4. Deslocamento prescrito na direcção Oz nos nós localizados no plano superior do provete, inicialmente em $z = 10$.

A velocidade da matriz é 1.5 mms^{-1} , conduzindo a velocidades de deformação compreendidas entre 0.1 s^{-1} e 0.16 s^{-1} . Não se consideram quaisquer condições de atrito na superfície do provete em contacto com a matriz.

O material modelado neste problema é um aço AISI 1015. As referências disponíveis na literatura para este problema [Rebello e Kobayashi 80b, Boër *et al.* 86, Vaz Jr. 00] referem que pode ser correctamente modelado por uma lei plástica, dada por:

$$\sigma = C(\varepsilon^P + \varepsilon_0)^n \quad (12.7)$$

em que

$$C = 722.0, \quad \varepsilon_0 = 0.02512 \quad \text{e} \quad n = 0.262 \quad (12.8)$$

são parâmetros do material e σ e ε^P são a tensão e a deformação plástica, respectivamente. Os parâmetros do modelo de comportamento que melhor se adaptam à equação 12.7 são

os apresentados na tabela 12.10. O módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson à temperatura ambiente deste material são:

$$E = 200.0 \text{ GPa} \quad e \quad \nu = 0.3, \quad (12.9)$$

respectivamente. Outras propriedades do material e os parâmetros do processo são mostrados na tabela 12.11. O algoritmo de integração para o problema térmico utiliza um método semi-implícito com $\Lambda = 0.7$ (fase de *previsão*), e o método implícito (fase de *correção*). Para o problema mecânico recorre-se ao método semi-implícito com $\Phi = 0.7$. O acoplamento termomecânico dá-se por uma estratégia *staggered*.

Tabela 12.10: Parâmetros do material utilizados no ensaio de compressão de um cilindro.

Parâmetro	Conjunto final
ξ	5.84
m	0.215
A [s^{-1}]	4.23×10^9
h_0 [MPa]	833.0
a	1.98
Q_0 [kJ/mol]	225.0
T_t [K]	600.0
\bar{s} [MPa]	68.9
Q_{ds} [kJ/mol]	155.0
n	0.0643
$s_{0,1}$	111.9
$s_{0,2}$	-0.0168

Tabela 12.11: Propriedades do material e parâmetros do estudo.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7870.00 kgm^{-3}
Calor específico	c_p	479.00 $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Condutividade térmica	k	36.00 $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Temperatura ambiente	T_{amb}	293.150 K
Coefficiente de convecção	h_c	0.00295 $\text{Ns}^{-1}\text{mm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Factor de dissipação	ξ	0.850
Factor de correção de dissipação	ψ	0.00
Coefficiente de expansão térmica	α	11.90 $\mu\text{m m}^{-1}\text{K}^{-1}$
Altura do cilindro	L	15.0 mm
Raio do cilindro	r	10.0 mm

Resultados

Neste problema, comparam-se os resultados obtidos com uma solução analítica aproximada e com a solução encontrada por outro programa de simulação numérica.

A solução analítica para o incremento de temperatura, de um processo que segue uma lei plástica como a da equação 12.7 e desprezando quaisquer perdas de calor, pode ser dada por [Rebello e Kobayashi 80a]:

$$\Delta T = \frac{\int \sigma d\varepsilon}{\rho c_p}. \quad (12.10)$$

Esta solução não considera as perdas por convecção nem radiação e considera que toda a energia gerada por deformação plástica é convertida em calor. No entanto, assumindo que apenas parte da energia gerada por deformação plástica é transformada em calor, parte essa representada pelo factor de dissipação ξ , a expressão 12.10 pode ser reescrita como

$$\Delta T = \frac{\xi \int \sigma d\varepsilon}{\rho c_p}. \quad (12.11)$$

Considerando a expressão 12.7, que a deformação plástica é nula no início do ensaio e $\xi = 0.85$, a solução analítica pode ser dada por

$$\Delta T = 128.99 \varepsilon^{1.262} \quad (12.12)$$

A solução numérica também é comparada com a solução obtida pelo programa *I-form*².

Na figura 12.24 ilustra-se a geometria e malha de elementos finitos do provete cilíndrico após uma deformação de 40%. Mostra-se também a malha de elementos finitos original como referência. O facto de não existir atrito entre a peça e a ferramenta permite à geometria deformada conservar as orientações iniciais das faces cilíndricas e levando a tensões e deformações homogéneas em todo o provete.

A evolução da tensão equivalente com a deformação é representada na figura 12.25. Nesta figura também se apresentam as curvas tensão-deformação obtidas pela solução analítica (equação 12.12) e com o programa *I-form*. A diferença entre estas duas curvas, após o estágio elástico, é quase imperceptível. O modelo de comportamento do programa *I-form* não tem em conta as deformações elásticas, em processos de deformação na massa, por estas serem muito pequenas e desprezáveis quando comparadas com as deformações plásticas.

O erro entre a curva tensão-deformação analítica e a curva numérica é sempre inferior a 4%, realçando a boa adaptação do modelo utilizado ao comportamento do aço AISI 1015.

Os resultados da evolução do campo de temperaturas são apresentados sob a forma de curvas temperatura-deformação, representadas na figura 12.26. Na solução numérica, o incremento total de temperatura é $\Delta T \approx 35$ K para um nível de deformação de 40%. Nesta figura apresenta-se também a evolução analítica da temperatura. Esta solução apresenta um incremento de temperatura final $\Delta T = 38.19$ K. O facto de este incremento de temperatura ser superior à solução numérica é atribuído à não-contabilização das perdas de calor por convecção por parte da solução analítica, embora estas sejam pequenas. Apesar deste facto, o erro entre a solução numérica e a solução analítica é sempre inferior a 0.8%. Até níveis de deformação próximos de 0.25, a temperatura obtida numericamente é superior

²O programa *I-form* (Industrial Forming Technology) é um sistema de elementos finitos destinado à simulação numérica termomecânica de processos de deformação plástica na massa. Este programa, de referência na simulação de processos de deformação plástica na massa, é desenvolvido no seio da Secção de Tecnologia Mecânica do Instituto Superior Técnico [Rodrigues e Martins 98]. O programa *I-form* foi gentilmente cedido pelo Professor Doutor Paulo Martins.

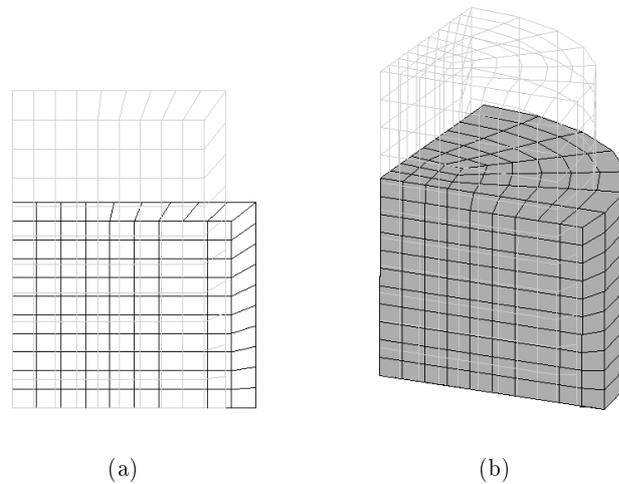


Figura 12.24: Representação da malha de elementos finitos original e deformada (a) no plano Oxy e (b) visão 3D.

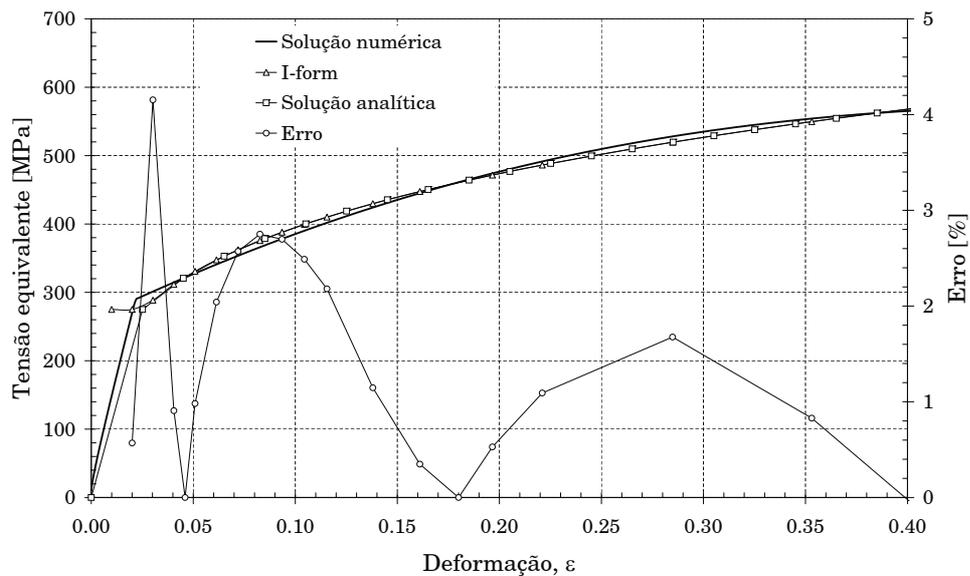


Figura 12.25: Curvas de tensão-deformação para o ensaio de compressão de um cilindro.

à indicada analiticamente. Tal deve-se ao nível ligeiramente superior da tensão limite de elasticidade do modelo numérico e ainda porque a solução analítica não considera os efeitos elásticos de forma semelhante ao modelo numérico, como se mostra na figura 12.25.

A solução apresentada pelo programa *I-form* conduz a níveis de temperatura mais baixos do que as soluções analítica e numérica já discutidas. Esta circunstância pode ser atribuída aos efeitos de transferência de calor entre a peça e a ferramenta e à adição combinada dos efeitos de radiação, tomados por este programa, aumentando as perdas de calor na fronteira. Ainda que a diferença de temperatura final entre as soluções numéricas

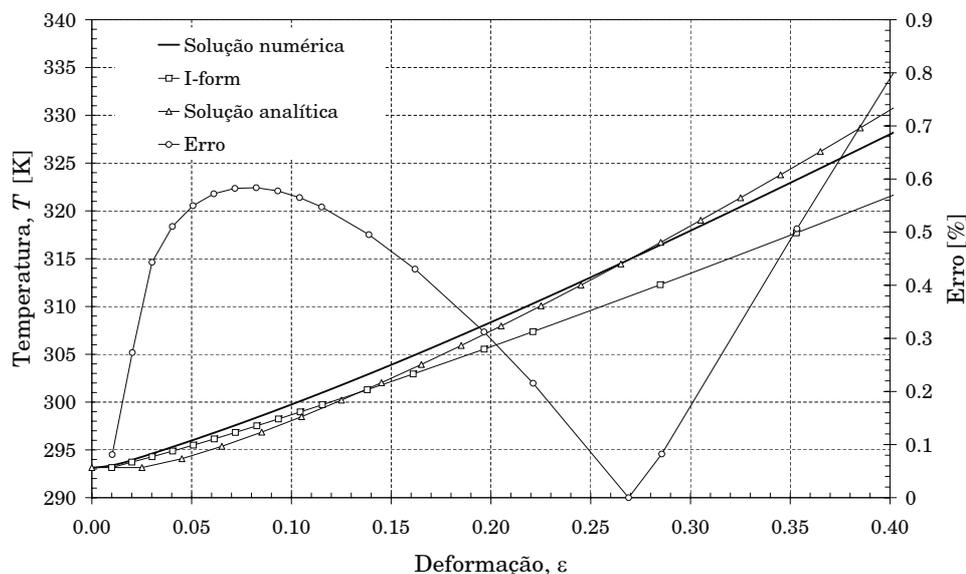


Figura 12.26: Curvas de temperatura-deformação para o ensaio de compressão de um cilindro.

seja de 6 K, esta corresponde a um erro inferior a 2%.

12.4.3 Ensaio de tracção do aço 304 — resultados experimentais e numéricos

A geração de calor por deformação plástica pode ser registada experimentalmente realizando-se ensaios de tracção com o auxílio de técnicas de medição de temperatura por termografia³. Nesta secção realiza-se a simulação de um ensaio de tracção de um aço 304 a diferentes velocidades de deformação. Os campos de deformação, de tensão e de temperatura obtidos numericamente são comparados com os resultados experimentais.

Geometria e discretização

O modelo geométrico utilizado nas simulações numéricas compreende unicamente a zona útil de um provete de tracção. Este modelo encontra-se esquematizado na figura 12.27.

Apenas um oitavo do provete de tracção, de dimensões $75 \times 12.5 \times 0.7$ [mm³], é discretizado com elementos hexaédricos de 8 nós e integração reduzida selectiva. É utilizada uma malha estruturada com 18×8 elementos no plano *Oxy* e duas camadas de elementos de espessura (ver figura 12.28).

Condições fronteira e propriedades do material

Na simulação do ensaio de tracção, o provete é submetido ao seguinte conjunto de condições fronteira:

³A termografia é uma técnica não-destrutiva que utiliza as radiações infravermelhas para medir os campos de temperatura ou observar padrões diferenciais de distribuição de temperatura.

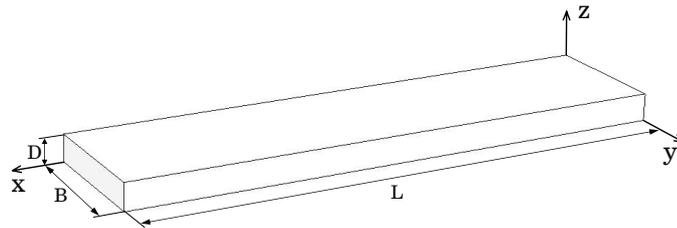


Figura 12.27: Dimensões do provete utilizado no ensaio de tracção do aço 304.

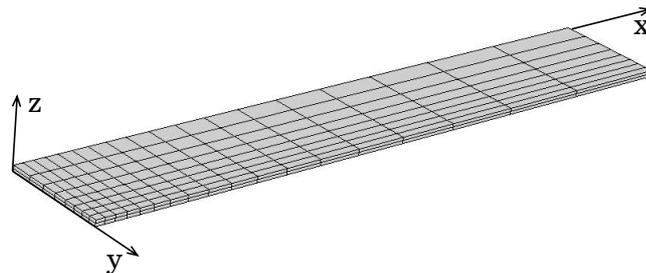


Figura 12.28: Malha de elementos finitos utilizada no ensaio de tracção do aço 304.

1. Simetria mecânica e térmica nos planos $x = 0$, $y = 0$ e $z = 0$ mm;
2. Perdas (fluxo) de calor por contacto no plano $x = 37.5$ mm (amarras da máquina de tracção);
3. Convecção nas superfícies dos planos $z = 0.35$ e $y = 6.25$ mm;
4. Deslocamento prescrito na direcção Ox nos nós localizados inicialmente no plano $x = 37.5$ mm.

As velocidades de deslocamento das amarras consideradas são 5, 50 e 500 mm min^{-1} .

O material modelado neste problema é um aço AISI 304. Este aço inox da série 300, que se apresenta no estado sólido para $T < 1400^\circ\text{C}$, pertence ao grupo dos aços resistentes ao calor [Harvey 82]. O módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson para este material são dados por [Harvey 82, MatWeb]:

$$E = 200.0 \text{ GPa} \quad \text{e} \quad \nu = 0.3, \quad (12.13)$$

respectivamente. Para este material, foi necessário determinar os parâmetros do modelo de comportamento. Desta forma, utilizaram-se, como referência, os resultados experimentais apresentados nas figuras 12.29 a 12.31. Recorrendo ao método inverso, apresentado na secção anterior, chegaram-se aos resultados indicados na tabela 12.12. As propriedades térmicas do material, bem como alguns parâmetros do processo, são apresentados na tabela 12.13. Os parâmetros mais sensíveis e de determinação mais complexa são os coeficientes de convecção e de transmissão de calor por contacto. Assumiu-se um valor médio para o coeficiente de convecção entre uma chapa de metal e um ambiente com escoamento de ar moderado [Incropera e DeWitt 80]. O coeficiente de transferência de calor por contacto,

necessário para caracterizar o fluxo de calor transmitido entre o provete e as amarras da máquina de tracção, considera o contacto imperfeito entre os dois sólidos e minimiza o efeito de aumento de temperatura das amarras. Foi utilizado o valor de $3.5 \times 10^4 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ que se apresenta como um valor capaz de caracterizar o fenómeno enunciado [Holman 81].

Considera-se que as amarras mantêm uma temperatura constante de $T_p = 293.15 \text{ K}$ durante todo o ensaio.

Tabela 12.12: Parâmetros do material utilizados no ensaio de tracção do aço AISI 304.

Parâmetro	Conjunto final
ξ	9.89210
m	0.38520
$A \text{ [s}^{-1}\text{]}$	2.536×10^8
$h_0 \text{ [MPa]}$	842.893
a	2.31330
$Q_0 \text{ [kJ/mol]}$	268.434
$T_t \text{ [K]}$	600.0
$\bar{s} \text{ [MPa]}$	47.3362
$Q_{ds} \text{ [kJ/mol]}$	209.346
n	0.06978
$s_{0,1}$	95.9689
$s_{0,2}$	-0.02172

Tabela 12.13: Propriedades do material e parâmetros do estudo.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	7800.0 Kgm^{-3}
Calor específico	c_p	$460.0 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Condutividade térmica	k	$24.9 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Temperatura ambiente	T_{amb}	293.15 K
Coefficiente combinado de convecção e radiação	h_c	$29.5 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$
Coefficiente de transmissão de calor por contacto	h_{cont}	$3.5 \times 10^4 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$
Factor de dissipação	ξ	0.850
Factor de correcção de dissipação	ψ	0.0
Coefficiente de expansão térmica	α	$9.90 \mu\text{m m}^{-1}\text{K}^{-1}$
Comprimento do provete	L	37.5 mm
Largura do provete	B	6.25 mm
Espessura do provete	D	0.35 mm

Resultados

Os resultados experimentais em curvas de tensão-deformação, assim como o valor da temperatura no centro do provete, foram obtidos por ensaios de tracção uniaxial no Departamento de Engenharia Mecânica e Gestão Industrial da Faculdade de Engenharia da Universida-

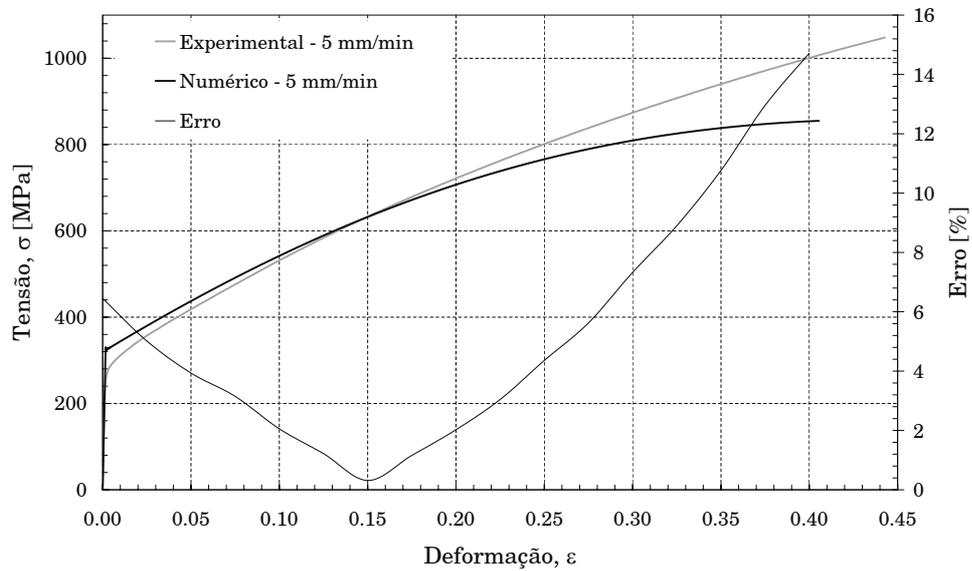


Figura 12.29: Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 5 mm min^{-1} .

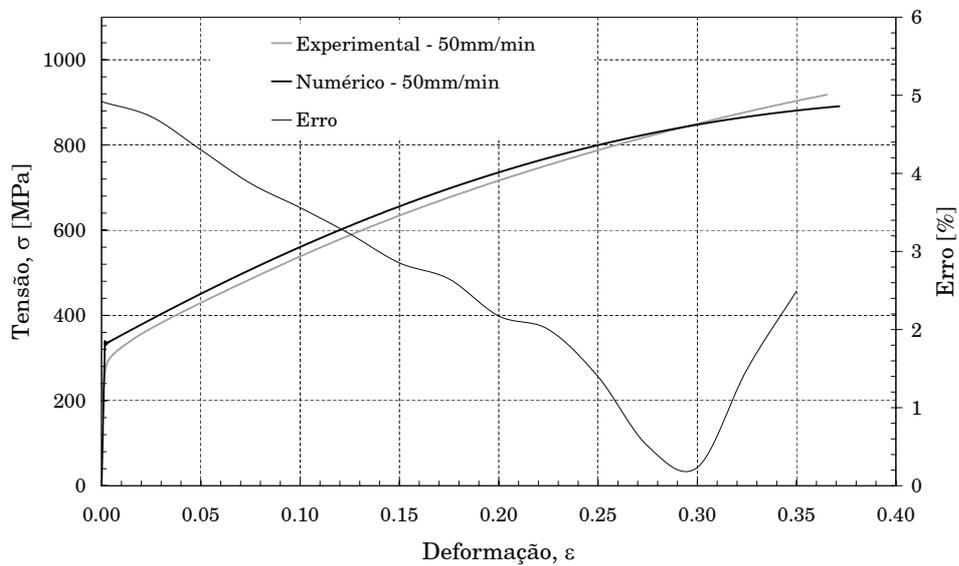


Figura 12.30: Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 50 mm min^{-1} .

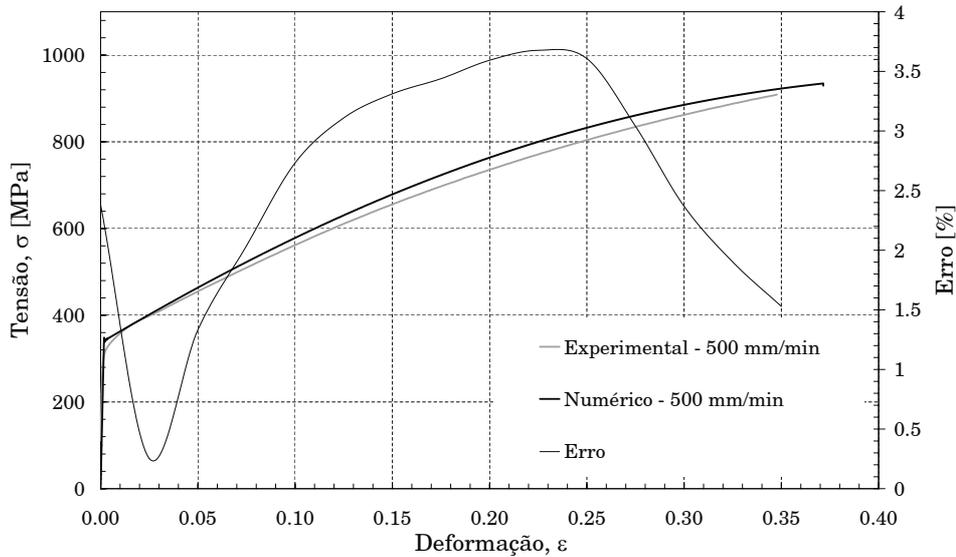


Figura 12.31: Evolução da tensão com a deformação no ensaio de tracção de um aço AISI 304 a 500 mm min^{-1} .

de do Porto⁴. A temperatura no centro do provete foi medida por pirometria óptica de infravermelho.

A evolução numérica da tensão σ_{xx} com a deformação é representada nas figuras 12.29 a 12.31 para todas as velocidades de deslocamento ensaiadas.

Nas mesmas figuras também se apresentam os resultados experimentais, bem como a estimativa de erro da solução numérica. De acordo com estas figuras, pode concluir-se que os resultados numéricos são satisfatórios para as velocidades de 50 e 500 mm min^{-1} (erro sempre inferior a 5%). Porém, são insuficientes para a velocidade de 5 mm min^{-1} . No ensaio a 5 mm min^{-1} o erro entre a solução numérica e a experimental chega a 6%, para deformações superiores a 30%. Este facto mostra que o modelo de comportamento utilizado, com os parâmetros expostos na tabela 12.12, não consegue caracterizar eficazmente um aço AISI 304. Apesar de o modelo de comportamento implementado ter sido desenvolvido especificamente para ligas de alumínio, este consegue modelar aços. Portanto, os erros para o ensaio a 5 mm min^{-1} são atribuídos a uma insuficiente identificação de parâmetros. Este facto realça a necessidade de ferramentas de identificação como a desenvolvida neste trabalho.

Na figura 12.32 apresenta-se a evolução da temperatura num ponto central do provete ao longo do ensaio de tracção para as diferentes velocidades de ensaio. De um modo geral, as soluções numéricas reproduzem bastante razoavelmente as soluções experimentais. Para as velocidades de 5 e 50 mm min^{-1} , as soluções numéricas revelam-se muito eficientes.

Porém, a evolução experimental da temperatura para a velocidade de 500 mm min^{-1} é dúbia. Espera-se que a temperatura aumente, por geração de calor por deformação plástica, desde o início do ensaio. Contudo, neste, a evolução da temperatura parece ter acção unicamente a partir de 0.1 de deformação. Adicionalmente, os valores de temperatura,

⁴Os resultados experimentais foram gentilmente cedidos pelo Professor Doutor J. Grácio.

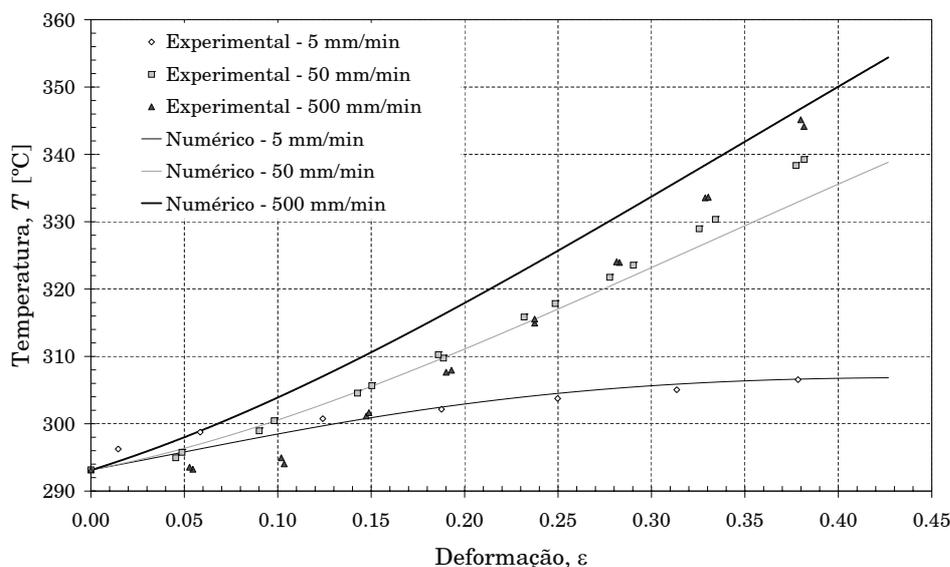


Figura 12.32: Evolução da temperatura com a deformação no ensaio de tracção de um aço inox 304 às velocidades de 5, 50 e 500 mm/min.

até 0.25 de deformação, são inferiores aos demonstrados pelo ensaio a 50 mm min⁻¹. Este facto, contrariando a termodinâmica da plasticidade, suscita dúvidas acerca da precisão dos resultados experimentais do ensaio a 500 mm min⁻¹. Desta forma, não é possível retirar qualquer conclusão sobre a reprodutibilidade da solução numérica à velocidade referida.

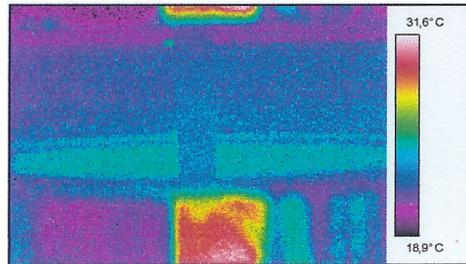
O trabalho experimental termográfico que se apresenta destinou-se à verificação da evolução térmica de provetes de aço AISI 304 idênticos e também sujeitos a tracção a velocidades de 5, 50 e 500 mm min⁻¹. As medições de temperatura pelo método de termografia, efectuadas no Instituto de Soldadura e Qualidade (ISQ), foram realizadas com tempo seco e limpo e temperatura ambiente $20 < T_{\text{amb}} < 22^{\circ}\text{C}$. De forma a minimizar quaisquer interferências de reflexos exteriores, uma das faces dos provetes foi pintada de negro.

O equipamento experimental utilizado para medir o campo de temperatura foi o sistema de detecção e medição de radiação infravermelha AGEMA[®] 550 Elite, com objectivas de 20°×20°. A distância da câmara termográfica ao provete foi de 80 cm e, ao longo de toda a recolha de resultados, foi usado um valor constante da emissividade e da humidade relativa de 0.9 e 60%, respectivamente. Efectuou-se uma recolha sequencial de imagens térmicas dos provetes. As gamas de temperatura foram predeterminadas de acordo com a solicitação, em função da temperatura final expectável.

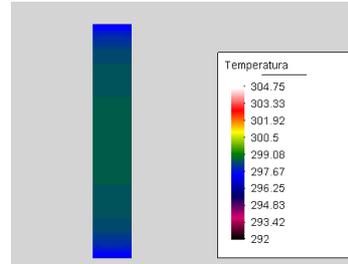
Nas figuras 12.33 e 12.34 apresentam-se os isovalores de temperatura, quer da solução numérica quer da solução experimental durante o ensaio de tracção à velocidade de 50 mm min⁻¹. De forma a facilitar a comparação entre as soluções numérica e experimental, as escalas das figuras possuem a mesma amplitude e a mesma sequência de cores.

A observação destas figuras permite constatar que:

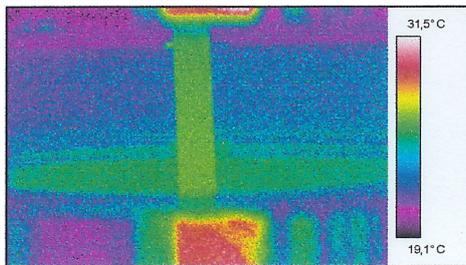
1. As soluções numéricas estão qualitativa e quantitativamente de acordo com as soluções termográficas, validando a implementação do fenómeno de geração de calor por



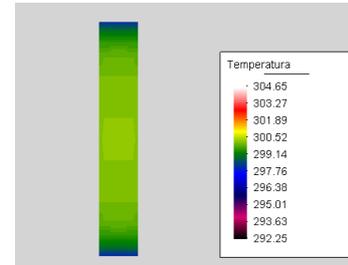
(a)



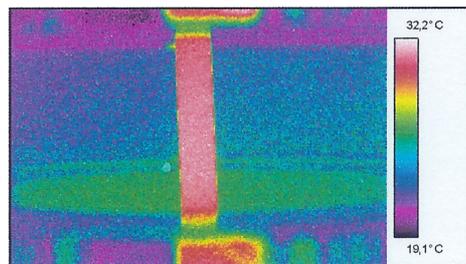
(b)



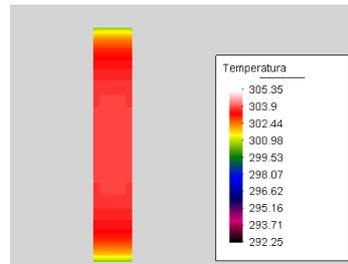
(c)



(d)

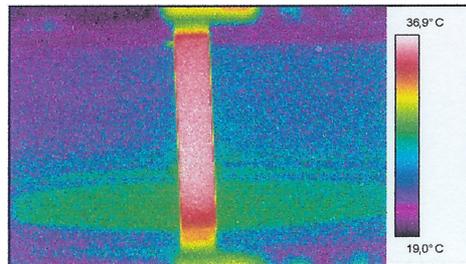


(e)

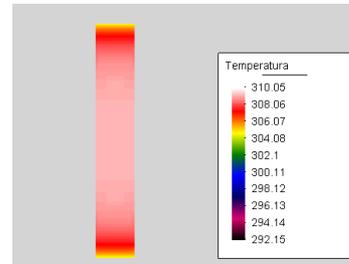


(f)

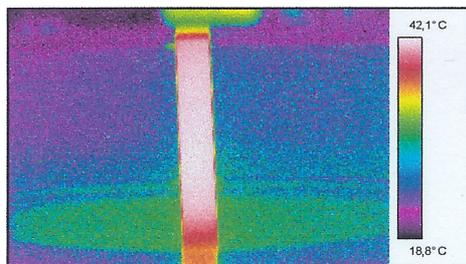
Figura 12.33: Ensaio de tracção do aço AISI 304 a 50 mm min^{-1} . Distribuições de temperatura obtidas por termografia e isovalores de temperatura obtidos numericamente para (a) e (b) $t = 6.7 \text{ s}$; (c) e (d) $t = 13.2 \text{ s}$; (e) e (f) $t = 20.0 \text{ s}$.



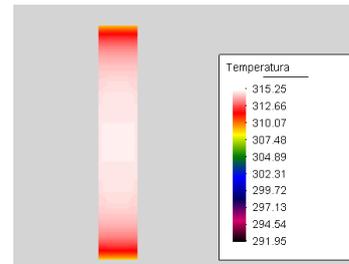
(a)



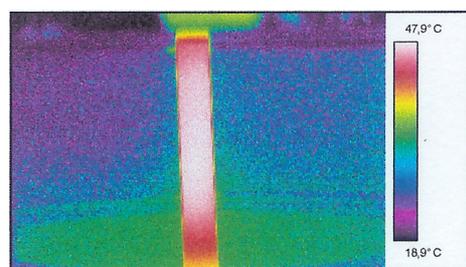
(b)



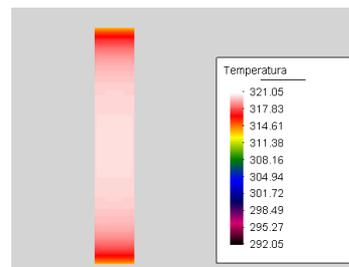
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 12.34: Ensaio de tracção do aço AISI 304 a 50 mm min^{-1} . Distribuições de temperatura obtidas por termografia e isovalores de temperatura obtidos numericamente para (a) e (b) $t = 26.7 \text{ s}$; (c) e (d) $t = 33.4 \text{ s}$; (e) e (f) $t = 40.12 \text{ s}$.

deformação plástica;

2. A maior perda de calor gerado por deformação plástica dá-se por contacto entre o provete e as amarras da máquina de tracção. Esta perda de calor origina um diferencial de temperaturas superior a 5°C ($\approx 10\%$) entre o provete e as amarras;
3. As perdas por convecção e por radiação, de pequena amplitude quando comparadas com as perdas por contacto, podem ser desprezadas;
4. As propriedades térmicas utilizadas no ensaio numérico mostram-se adequadas para caracterizar os fenómenos térmicos inerentes às condicionantes do material seleccionado e do ensaio.

Na figura 12.35 estão representados os gradientes da deformação plástica equivalente $\bar{\epsilon}^P$, da tensão equivalente $\bar{\sigma}$, da tensão de corte τ_{xy} e da variável interna s para $t = 46$ s do ensaio de tracção do aço AISI 304 (50 mm min^{-1}). Na figura 12.35(b) mostra-se, como se era de esperar, que a tensão equivalente é quase homogénea em toda a zona útil do provete. Existem pequenos gradientes da tensão equivalente nas zonas superiores e inferiores do provete, próximo da zona de contacto com as amarras, devido aos gradientes de temperatura nessas zonas. A tensão equivalente é superior nesses bordos devido a temperaturas inferiores.

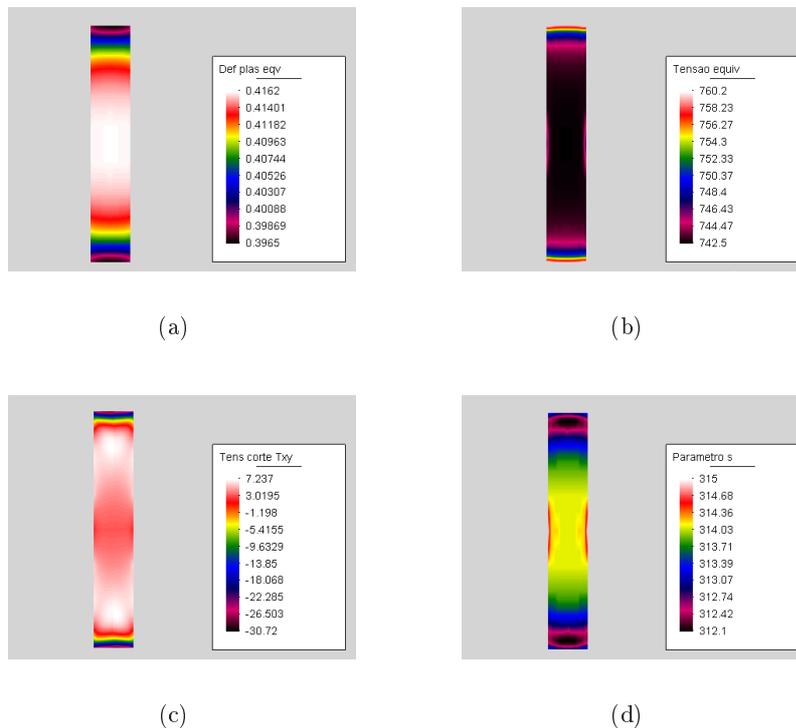


Figura 12.35: Ensaio de tracção do aço AISI 304. Isovalores da (a) deformação plástica equivalente $\bar{\epsilon}^P$; (b) tensão equivalente $\bar{\sigma}$ [MPa]; (c) tensão de corte τ_{xy} e (d) variável interna s [MPa] para $t = 46$ s.

A deformação plástica é responsável pela geração de calor e, conseqüente, aumento de temperatura do provete. Contudo, a temperatura também influencia a resistência do material à deformação. Logo, o facto da deformação plástica equivalente ser mais elevada no centro do provete, como comprova a figura 12.35(a), pode ser atribuída aos níveis superiores de temperatura nessa zona. Esta é uma das razões pelas quais, posteriormente, se dá estricção e rotura no centro do provete.

12.5 Conclusões

A simulação de processos tecnológicos que envolvam grandes deformações e gradientes de temperatura exige a solução de problemas de acoplamento termomecânico. Este problema pode ser resolvido por um algoritmo *staggered*, em que os problemas térmico e mecânico são resolvidos separadamente, existindo uma troca sucessiva de informação em intervalos predeterminados da simulação.

Na primeira parte, efectuou-se o estudo do problema mecânico e analisou-se o comportamento dos elementos implementados. Foram ainda avaliados os algoritmos de cálculo do tensor rotação e a sua influência na solução final. Este estudo permitiu concluir que o elemento hexaédrico trilinear com integração reduzida selectiva (H8SRI) apresenta-se como o mais eficaz, apesar de ser computacionalmente mais dispendioso que o elemento H8FI.

Na segunda parte do capítulo, validou-se a implementação dos algoritmos da parte térmica, comparando a solução numérica com soluções analíticas e/ou numéricas obtidas por outros autores. O algoritmo de integração temporal utilizado para o problema térmico em regime transiente mostrou-se bastante eficaz levando a níveis de erro insignificantes mesmo quando se recorre a incrementos de tempo elevados.

Na última parte, os problemas apresentados demonstraram a complexidade da simulação de fenómenos existentes em problemas com acoplamento termomecânico. O problema de uma barra com temperatura prescrita numa das suas extremidades exemplifica o efeito mecânico da variação de temperatura. Quer o ensaio de compressão de um cilindro quer o ensaio de tracção caracterizam o efeito da geração de calor por deformação plástica.

Os resultados das simulações efectuadas quando comparadas com os resultados analíticos, experimentais e com outros resultados numéricos, permitem verificar o muito bom comportamento dos algoritmos implementados neste trabalho. Desta forma, conclui-se que o modelo computacional desenvolvido é fiável e pode ser aplicado a problemas mais complexos.

Capítulo 13

Modelação de Tratamentos Térmicos

Apresenta-se um exemplo complexo que demonstra as potencialidades do código desenvolvido. Discutem-se as dificuldades demonstradas na modelação de tratamentos térmicos em ligas de alumínio e as possibilidades da simulação numérica neste domínio. Descreve-se a simulação da têmpera de um sólido de geometria complexa. Comparam-se as curvas de evolução do campo de temperatura e do estado de tensão em diferentes pontos no sólido.

13.1 Introdução

Um tratamento termomecânico não é mais do a acção combinada, simultânea ou não, de tratamentos térmicos com deformações plásticas [Boër *et al.* 86, Hatch 84]. O objectivo dos tratamentos térmicos, contidos nos tratamentos termomecânicos, é controlar as propriedades dos materiais de forma a melhorar a prestação do material para um objectivo determinado. Os tratamentos térmicos mais comuns são o recozimento, têmpera e revenido.

O tratamento térmico das ligas de alumínio consta, em geral, de têmpera e revenido com tratamento de solubilização devidamente controlada. A liga é aquecida à temperatura máxima praticável (723-823 K) e mantida a essa temperatura durante o tempo necessário para a solução completa. Após este tratamento, a liga é sujeita a têmpera em água, à temperatura ambiente. No final, a liga é endurecida por revenido à temperatura ambiente.

Nos processos de tratamento térmico, a evolução da temperatura e a conseqüente história de deformação podem variar de ponto para ponto na peça [Boër *et al.* 86]. Por isso, a modelação de tratamentos térmicos industriais requer a resolução de um problema de acoplamento termomecânico.

As dificuldades da modelação e simulação de processos de tratamento térmico não se prendem unicamente com o desenvolvimento de um modelo constitutivo capaz de caracterizar os fenómenos existentes ou com a geometria do provete mas também com as condições

de fronteira do processo. Uma correcta simulação destes processos necessita de coeficientes de transferência de calor e propriedades mecânicas realísticas, relativamente difíceis de determinar experimentalmente. Muitos destes coeficientes apresentam-se não-lineares, tornando o problema ainda mais complexo.

Este capítulo é dedicado à simulação de processos de tratamento térmicos e pretende demonstrar a capacidade dos métodos numéricos desenvolvidos e implementados em reproduzir alguns aspectos dos tratamentos referidos. Desta forma, não é do âmbito deste capítulo incidir e discutir os aspectos metalúrgicos inerentes a estes processos térmicos nem da escolha da sequência dos tratamentos que levam as propriedades desejadas para os materiais [Smith 96, Hatch 84, Seabra 81].

13.2 Têmpera de Sólidos Complexos

A têmpera é, em muitos aspectos, a etapa mais crítica na sequência das operações de tratamentos térmicos e é também o processo térmico mais complexo. As dificuldades de modelação encontradas noutros tratamentos térmicos apresentam-se como um subconjunto de dificuldades encontradas no processo de têmpera [Boër *et al.* 86].

O objectivo da têmpera é preservar a microestrutura sólida formada à temperatura do tratamento, através de um arrefecimento rápido.

Os processos de têmpera, que fazem parte dos tratamentos térmicos usuais das ligas de alumínio das séries 2000, 6000 e 7000, induzem gradientes térmicos severos durante o rápido arrefecimento do material desde cerca de 500°C até à temperatura ambiente. Durante este processo de arrefecimento, o material contrai de forma não-uniforme induzindo campos de tensões complexos. Estes estados de tensão consistem, geralmente, em tensões de compressão na superfície e de tensões de tracção no interior. Para ligas de alumínio, como a 7010, durante o tratamento térmico, estas tensões excedem, frequentemente, a tensão limite de elasticidade [Tanner e Robinson 00]. Tal pode induzir deformações permanentes que podem alterar a geometria em níveis inaceitáveis. Os campos de tensões e deformações residuais gerados também vão influenciar as características e propriedades mecânicas finais da peça, podendo comprometer a sua aplicação prática. O controlo destas deformações é baseado, quase exclusivamente, em experiência empírica [Boër *et al.* 86]. A redução da velocidade de arrefecimento durante o processo reduz as tensões residuais, mas também degrada as propriedades mecânicas e a resistência à corrosão. As técnicas actuais de optimização da velocidade de arrefecimento, de forma a diminuir as deformações residuais, incluem, por exemplo, a têmpera em água em ebulição e têmpera em *spray* [Robinson *et al.* 99].

Actualmente, excepção feita a geometrias de pequena espessura, a única maneira de avaliar indirectamente as tensões residuais, com alguma precisão e custos acessíveis, é realizando testes destrutivos.

13.3 Dificuldades na Simulação do Processo de Têmpera

A simulação de tratamentos térmicos e, em particular, do processo de têmpera, é uma tarefa extremamente complexa. A primeira dificuldade prende-se com os coeficientes de

transferência de calor através da superfície do sólido. A transferência de calor a partir da superfície temperada compõe-se em três modos: condução, convecção e radiação.

Durante a têmpera em água de um corpo metálico, a evolução do coeficiente de transferência de calor atravessa três regimes distintos, representados na figura 13.1. São eles a ebulição de película, a ebulição nucleada e a evaporação na superfície livre. Estes regimes e, conseqüentemente, o coeficiente de transferência de calor, dependem directamente do excesso de temperatura, $\Delta T_e = T_s - T_{sat}$, que é a diferença entre a temperatura da superfície, T_s , e a temperatura de saturação, T_{sat} , do fluido de têmpera.

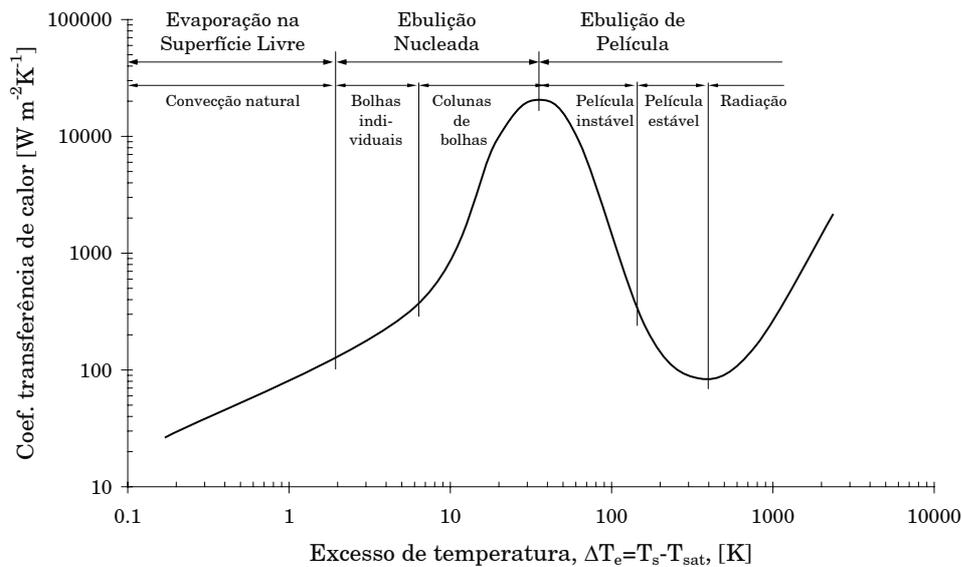


Figura 13.1: Evolução do coeficiente de transferência de calor de película com a temperatura.

Na fase de ebulição de película, forma-se uma película de vapor que cobre toda a superfície da peça e impede que o líquido, a uma temperatura inferior, banhe a superfície. A radiação é o fenómeno de transferência de calor preponderante nesta fase e a maior parte da energia perdida é dispendida para vaporizar a água. À medida que a temperatura da superfície diminui, a espessura desta película diminui, torna-se instável e o coeficiente de calor aumenta. Quando o excesso de temperatura atinge aproximadamente 30 K, inicia-se a fase de ebulição nucleada. A película transforma-se em bolhas individuais de vapor sobre a superfície da peça temperada, que se vão desprendendo. Neste regime, aumenta a transferência de calor para o líquido por convecção e diminui o calor utilizado para vaporizar a água. Na gama de temperatura abaixo da ebulição nucleada o calor é transferido por convecção natural. Nesta fase, evaporação na superfície livre, a transferência de calor entre a superfície e o líquido dá-se por convecção pura e o líquido sobreaquecido encontra-se na interface líquido-vapor (superfície líquido).

Porém, o coeficiente de transferência de calor num determinado fluido não é unicamente função da temperatura da superfície do sólido. Também depende da agitação, pressão e temperatura do fluido de têmpera e da rugosidade da superfície da peça. O coeficiente de transferência de calor depende também da geometria e orientação da superfície da

peça. Na figura 13.2 mostram-se valores do coeficiente de transferência de calor medidos experimentalmente para diferentes inclinações de uma superfície durante o arrefecimento de uma peça simples em água a 373 K (recipiente com 200 dm³) [Boër *et al.* 86] .

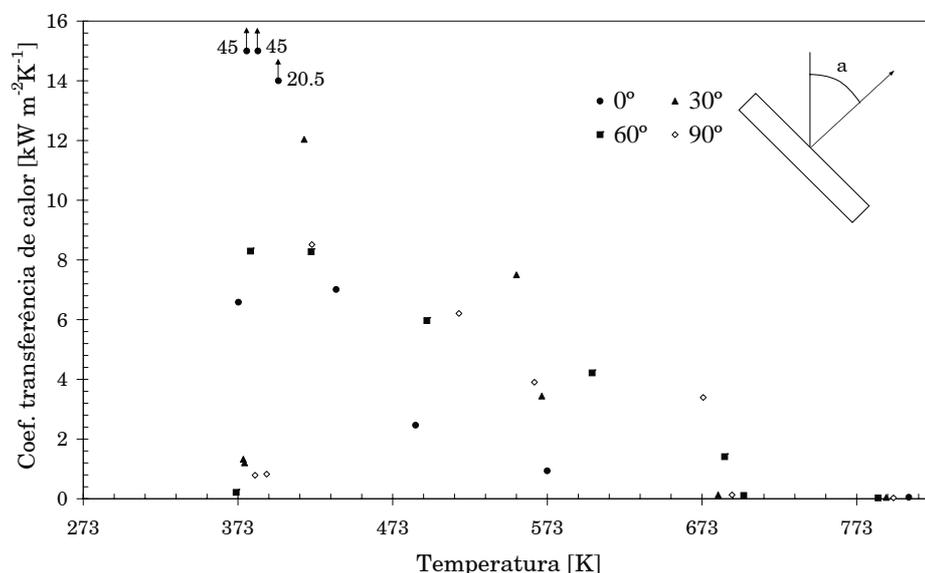


Figura 13.2: Coeficiente de transferência de calor para diferentes inclinações de uma superfície no arrefecimento em água a 373 K [Boër *et al.* 86].

A complexidade da modelação de um processo de têmpera também é inerente à não-linearidade do processo devido ao facto das propriedades térmicas e mecânicas serem função da temperatura. O modelo utilizado requer a informação da condutividade térmica, capacidade calorífica específica, densidade do material, módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, etc. Todos estes parâmetros variam durante a têmpera.

Conhecidas as velocidades de arrefecimento, é ainda necessário avaliar as deformações plásticas. O modelo de comportamento exige também que se conheçam o coeficiente de expansão térmica e a velocidade de arrefecimento em toda a gama de temperaturas que a peça atravessa. Realça-se que, na modelação de um processo de têmpera, o modelo constitutivo mecânico terá de ser termoelastoviscoelástico.

Os aspectos mencionados permitem auferir a elevada dificuldade inerente à modelação de um processo de têmpera.

13.4 Tempera de um Rotor de Alumínio Forjado

Nas figuras 13.3(a) e (b) mostram-se alguns exemplos de rotores de alumínio com aplicação, por exemplo, nas indústrias automóvel e aeronáutica. A aplicação mais frequente deste componente forjado prende-se com o fabrico de turbocompressores centrífugos, como o que se mostra na figura 13.3(c). Em algumas aplicações, estes componentes chegam a atingir velocidades de rotação da ordem de 150,000 r.p.m. e temperaturas superiores a 500 K. Estas condições de serviço torna-os componentes de elevado desempenho [Pfleiderer e Petermann 79].

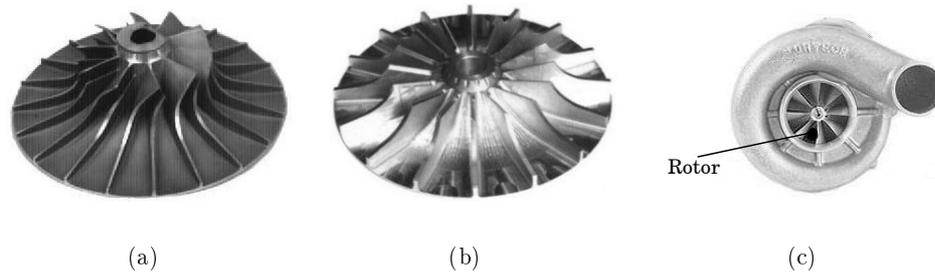


Figura 13.3: Exemplos de rotores forjados: Rotores de compressão (a) de pá curva e (b) de pá direita. (c) Turbocompressor centrífugo.

Durante o fabrico destes componentes é necessário passar por tratamentos térmicos. No caso dos rotores de alumínio forjados e após forjagem, os rotores são aquecidos até 803 K sofrendo depois uma têmpera em água em ebulição (373 K). Neste processo, devido à complexidade geométrica da peça, após têmpera observam-se algumas distorções.

Nesta secção simula-se a têmpera de um rotor de alumínio de forma a determinar a distribuição de temperatura durante o processo e calcular as tensões residuais.

13.4.1 Modelo geométrico e malha de elementos finitos

Com os exemplos apresentados na figura 13.3, pode ver-se que o problema não é axissimétrico devido à existência de alhetas. Consequentemente, as eventuais distorções não deverão ser axissimétricas. Como tal, não é possível resolver este problema bidimensionalmente, sendo necessário recorrer a um modelo tridimensional. O modelo geométrico baseia-se num rotor/compressor de pá direita, do tipo representado na figura 13.3(b). O modelo é o que se mostra na figura 13.4(a).

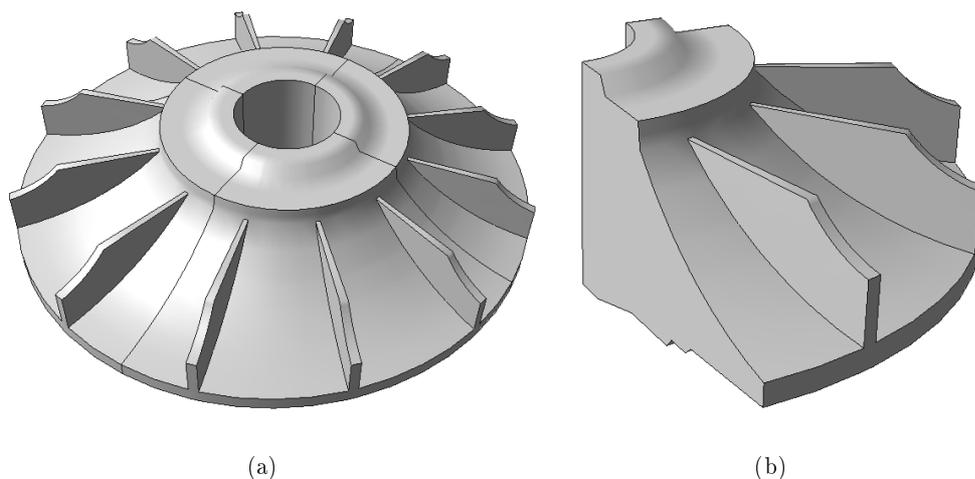


Figura 13.4: (a) Modelo geométrico do rotor de alumínio forjado e (b) 1/4 da peça.

A simetria geométrica da peça permite que se modele apenas um quarto da peça (figura 13.4(b)). O rotor tem 80 mm de altura máxima e de 300 mm de diâmetro. O raio interior do rotor é de 30 mm, fazendo com que a secção possua 120 mm. As alhetas são todas idênticas e com 2 mm de espessura.

Utilizou-se uma malha de elementos finitos estruturada (ver figura 13.5) com 1281 elementos hexaédricos isoparamétricos de oito nós com integração reduzida selectiva (SRI), 1812 nós e 5436 graus de liberdade.

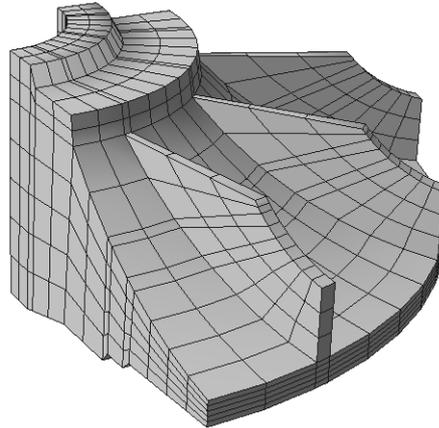


Figura 13.5: Malha elementos finitos utilizada no rotor de alumínio.

13.4.2 Condições fronteira e propriedades do material

Na simulação do tratamento térmico do rotor, as condições de fronteira mecânicas e térmicas têm que respeitar as condições de simetria. Consequentemente, restringem-se os graus de liberdade nas direcções Ox e Oz nos planos $x = 0$ e $z = 0$, respectivamente.

Nos nós pertencentes simultaneamente aos planos de simetria e à linha do plano superior de menor raio atribui-se o deslocamento nulo na direcção Oy . As condições de fronteira mecânicas são as que se apresenta esquematicamente na figura 13.6. As indicações 1 e 0 significam restrição ou não respectivamente em (x, y, z) .

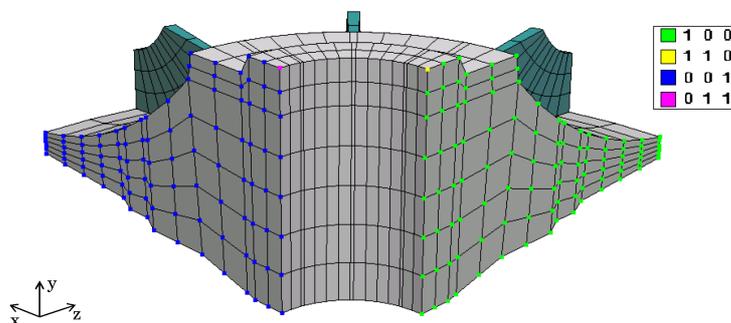


Figura 13.6: Condições de fronteira mecânicas: restrições ao deslocamento nos graus de liberdade dos nós.

As condições de fronteira térmicas dependem do fluido de t mpera. O fluido utilizado no ensaio descrito    gua em ebuli o. Este fluido   geralmente utilizado por evitar o excesso de gera o de deforma es residuais nas pe as temperadas. O coeficiente de transfer ncia de calor atrav s de uma superf cie da pe a em t mpera   fun o da temperatura. De acordo com os valores experimentais, apresentados na figura 13.2, e com base na teoria da transmiss o de calor por convec o com mudan a de fase, representada na figura 13.1, tomou-se um coeficiente de transfer ncia de calor m dio dado pela seguinte fun o:

$$\bar{h}(T) = \begin{cases} -48.55 T^2 + 13035.09 T - 8.21 \times 10^5 & \text{se } T < 413.15 \text{ K} \\ 2.9 \times 10^{13} T^{-4.074} & \text{se } T \geq 413.15 \text{ K.} \end{cases} \quad (13.1)$$

A evolu o do coeficiente de transfer ncia de calor m dio com a temperatura encontra-se representada na figura 13.7. Este coeficiente   aplicado como condi o fronteira de convec o/radia o nas superf cies exteriores   pe a, incluindo as superf cies das alhetas. Esta condi o de fronteira   respons vel pela evolu o e perdas de calor de todo o processo.

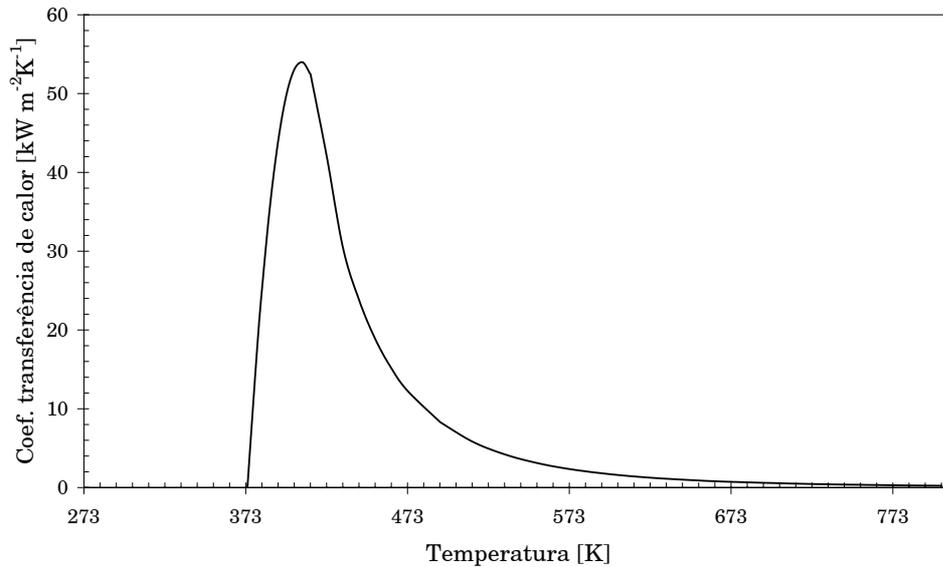


Figura 13.7: Coeficiente de transfer ncia de calor m dio, \bar{h} , em fun o da temperatura.

Inicialmente, toda a pe a est    temperatura $T_i = 803.15 \text{ K}$. Os planos $x = 0$ e $z = 0$ apresentam condi es de simetria t rmica, ou seja, s o planos adiab ticos.

O material do rotor   uma liga de alum nio da s rie 2000. A composi o desta liga de alum nio   a indicada pela tabela 13.1 [MatWeb]. A liga de alum nio 2618, cuja

Tabela 13.1: Composi o qu mica da liga de alum nio Al 2618.

Al [%]	Cu [%]	Mg [%]	Fe [%]	Ni [%]	Si [%]	Ti [%]	Zn [%]	Outros [%]
92.4-94.9	1.9-2.7	1.3-1.8	0.9-1.3	0.9-1.2	0.1-0.25	0.04-0.1	Max 0.1	Max 0.15

temperatura de fusão é $T_f = 911$ K, apresenta uma elevada condutividade térmica. Os coeficientes de condutividade térmica e calor específico são dados em função da temperatura por [Boër *et al.* 86, Incropera e DeWitt 80]

$$k = 0.0537 T + 122.86 \text{ [Wm}^{-1}\text{K}^{-1}] \quad (13.2)$$

$$c_p = 0.6197 T + 674.86 \text{ [Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}], \quad (13.3)$$

respectivamente. O módulo de elasticidade e o coeficiente de expansão térmica (CET) são [Boër *et al.* 86, MatWeb]

$$E = 0.2 T^2 - 369.26 T + 17.0 \times 10^3 \text{ [MPa]} \quad (13.4)$$

$$\text{CET} = 2.47 \times 10^{-8} T + 2.1953 \times 10^{-5} \text{ [K}^{-1}], \quad (13.5)$$

respectivamente. Na figura 13.8 mostra-se a dependência térmica das propriedades mecânicas do material.

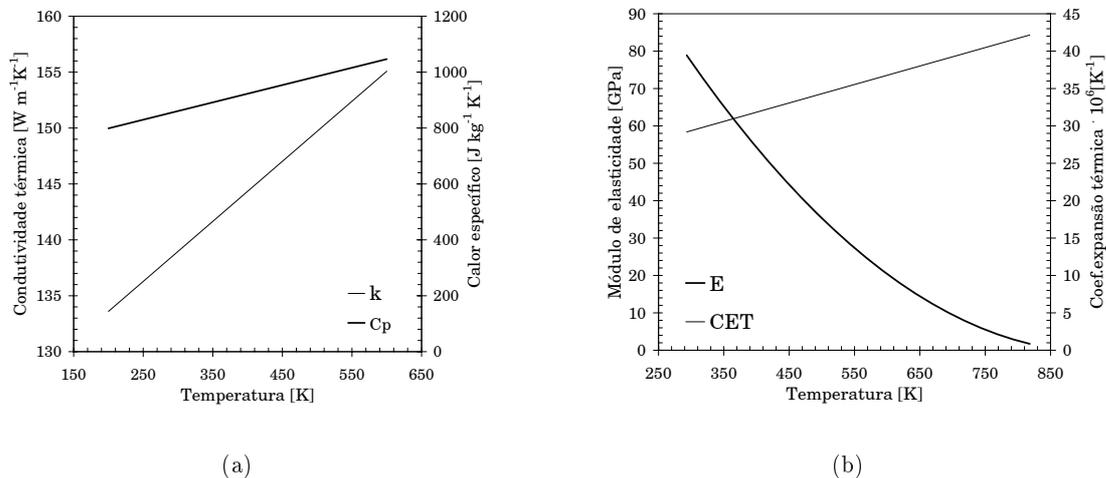


Figura 13.8: Dependência de (a) k , c_p , (b) E e CET da temperatura para a liga de alumínio 2618.

A liga de alumínio 2618 não sofre nenhuma mudança de fase durante o processo de têmpera. Desta forma, todas as tensões internas serão devidas a tensões residuais de origem térmica. Nas figuras 13.9(a) e 13.9(b) mostram-se a evolução da tensão limite de elasticidade com a temperatura e as curvas de tensão-deformação do material, respectivamente. Os parâmetros do modelo constitutivo que melhor caracterizam as curvas de temperatura-tensão-deformação são os que se apresentam na tabela 13.2. Estes parâmetros foram determinados pela metodologia inversa auxiliada pelo algoritmo evolucionário descrito no capítulo 10.

Algumas propriedades térmicas e mecânicas do material e alguns parâmetros do processo são apresentados na tabela 13.3. Assume-se $\Phi = 0.7$ para a integração temporal mecânica. O valor do peso de avanço da integração temporal para o algoritmo de previsão do problema térmico é $\Lambda = 0.7$. Utilizou-se um incremento de tempo constante de $\Delta t = 0.1$ s.

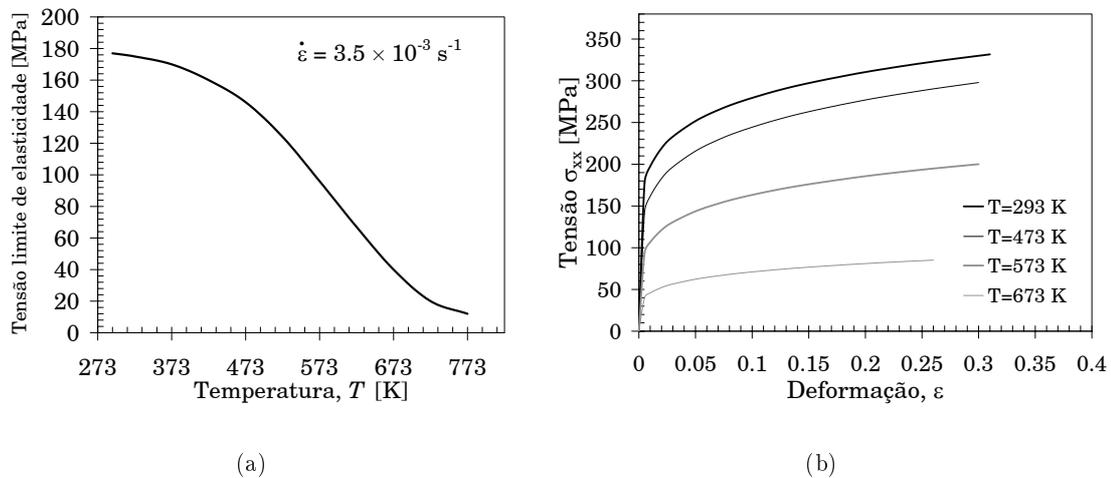


Figura 13.9: Liga de alumínio 2618: (a) Evolução da tensão limite de elasticidade e (b) curvas de tensão-deformação a diferentes temperaturas.

Tabela 13.2: Parâmetros do modelo constitutivo para a liga de alumínio 2618.

Parâmetro	Valor
ξ	4.008
m	0.3776
A [s^{-1}]	7.85×10^{11}
h_0 [MPa]	2643.53
a	1.86490
Q_0 [KJ/mol]	300.18
T_t [K]	680.00
\bar{s} [MPa]	70.0262
Q_{ds} [KJ/mol]	307.342
n	0.05334
$s_{0,1}$	58.8100
$s_{0,2}$	-0.06062

13.4.3 Resultados

Na figura 13.10 apresentam-se as curvas de arrefecimento de alguns pontos do rotor de alumínio. Estas curvas de arrefecimento resultam bastante próximas das curvas obtidas experimental e numericamente por outros autores [Mitsutsuka e Fukuda 79, Boër *et al.* 86, Robinson *et al.* 99, Tanner e Robinson 00]. As pequenas dissimelhanças evidenciadas prendem-se com a diversidade e dificuldade de previsão do coeficiente de transferência de calor correspondente a uma determinada configuração geométrica em água em ebulição.

Na figura 13.11 mostra-se a evolução da velocidade de arrefecimento nos mesmos pontos. Pode ver-se que estas velocidades atingem valores da ordem de 90 Ks^{-1} (nó 6). Para pontos no interior do rotor, o arrefecimento é tanto mais rápido quanto menor for a distância à superfície em contacto com o fluido de têmpera. Para os pontos na zona delgada e nas

Tabela 13.3: Propriedades do material e parâmetros do estudo.

Descrição	Símbolo	Valor
Massa específica	ρ	2903.0 Kg m^{-3}
Coefficiente de Poisson	ν	0.3
Temperatura do fluido de t�mpera	T_{fluido}	373.15 K
Temperatura inicial homog�nea	T_i	803.15 K
N�mero de superf�cies de perda de calor	N_c	812
Factor de dissipac�o	ξ	0.85
Factor de correc�o de dissipac�o	ψ	0.00
Incremento de tempo	Δt	0.1 s

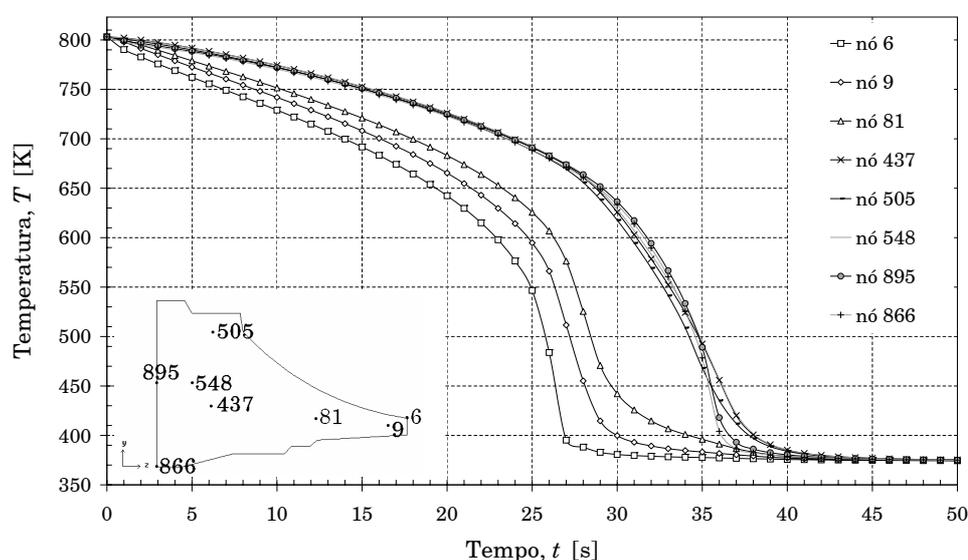


Figura 13.10: Curvas de arrefecimento calculadas de n s seleccionados.

superf cies da pe a, a velocidade de arrefecimento   tanto maior quanto maior for a  rea da superf cie aonde se encontra o ponto e menor for a dist ncia  s superf cies vizinhas.

As velocidades m ximas dos n s interiores acontecem desfasadas (com atraso) das dos n s exteriores na zona delgada do rotor. Como exemplo, a velocidade de arrefecimento m xima do n  437 (n  interior) atinge-se 10 s ap s da velocidade de arrefecimento m xima do n  6 (n  exterior). Este facto   atribuído   in rcia t rmica auxiliada pela condu o de calor.

Os pontos pertencentes a superf cies exteriores da zona delgada da pe a sofrem uma ac o reduzida dos efeitos de in rcia t rmica e uma influ ncia elevada dos fen menos relacionados com as condi oes de fronteira. As curvas de arrefecimento destes pontos possuem formas semelhantes   fun o do coeficiente de transfer ncia de calor entre a pe a e o fluido de t mpera. Este facto mostra a depend ncia directa do presente processo do coeficiente de transfer ncia de calor tomado e, conseq entemente, das propriedades do fluido.

Os perfis de evolu o da temperatura dos n s 866 e 895, apesar de serem pontos em

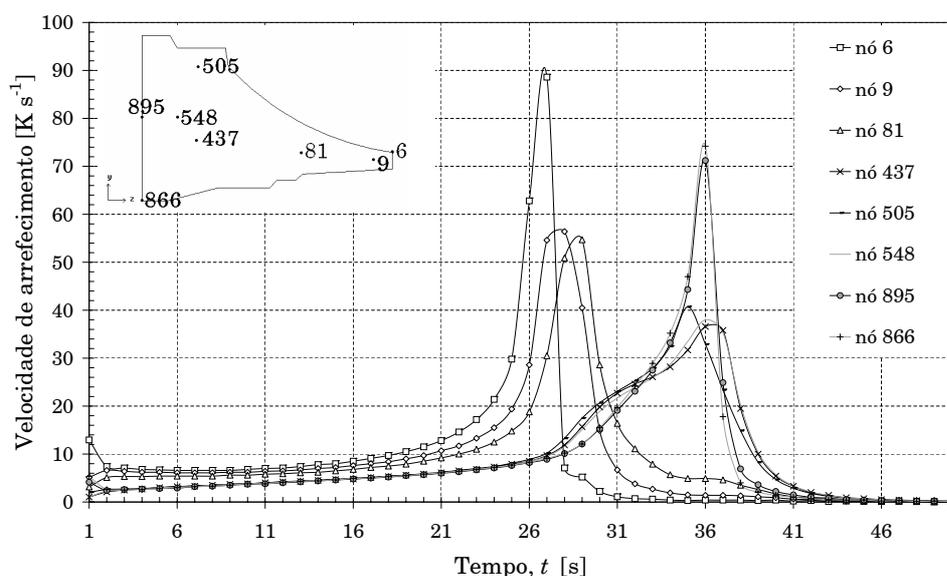


Figura 13.11: Velocidade de arrefecimento de nós seleccionados ao longo do processo de têmpera.

contacto com o exterior da peça, são bastante semelhantes aos dos nós interiores. Este facto pode ser explicado pela forte contribuição da condução através da peça. O fenómeno da condução é mais evidente nestes nós devido à proximidade com o núcleo da peça. Realça-se, também, que estes nós estão em superfícies de dimensões relativamente menores que os nós exteriores da zona delgada do rotor, atenuando os efeitos de convecção. Todavia, o valor máximo da velocidade de arrefecimento nestes nós é superior ao dos nós interiores, contribuindo para perfis de temperatura com maior declive (ver figura 13.10). O arrefecimento destes nós é confirmado pelos resultados obtidos por [Boër *et al.* 86].

O arrefecimento brusco dos nós 6, 9 e 81 nos instantes 25 – 30 s, e das superfícies às quais eles pertencem, tem consequência no arrefecimento do interior da peça. O efeito demonstrado é visível pela sobrelevação côncava das curvas de velocidade de arrefecimento dos nós do interior da peça (nós 437, 505 e 548) nos instantes 28 – 32 s. Este efeito não é visível nos nós 866, 895. O atraso na resposta térmica é devido, mais uma vez, aos efeitos de inércia.

O gradiente geométrico máximo de temperatura no interior da peça acontece 27 s após a imersão da peça na água em ebulição. Este gradiente, entre os nós 6 e 437, atinge os 280 K.

As figuras 13.12 mostram a distribuição de temperaturas na secção da peça, em diversos instantes. Analisando estes resultados é possível verificar que a zona exterior, mais delgada, é sujeita a gradientes temporais e geométricos de temperatura mais elevados. Pode ver-se também que a face do furo interior não possui uma superfície suficientemente grande para levar a um arrefecimento consideravelmente superior ao núcleo da peça.

Na figura 13.13 apresentam-se os isovalores de temperatura na secção sem alheta e na secção com alheta para $t = 27$ s. A partir desta figura é possível avaliar a influência das alhetas na perda de calor, e consequente distribuição de temperatura, ao longo de todo o

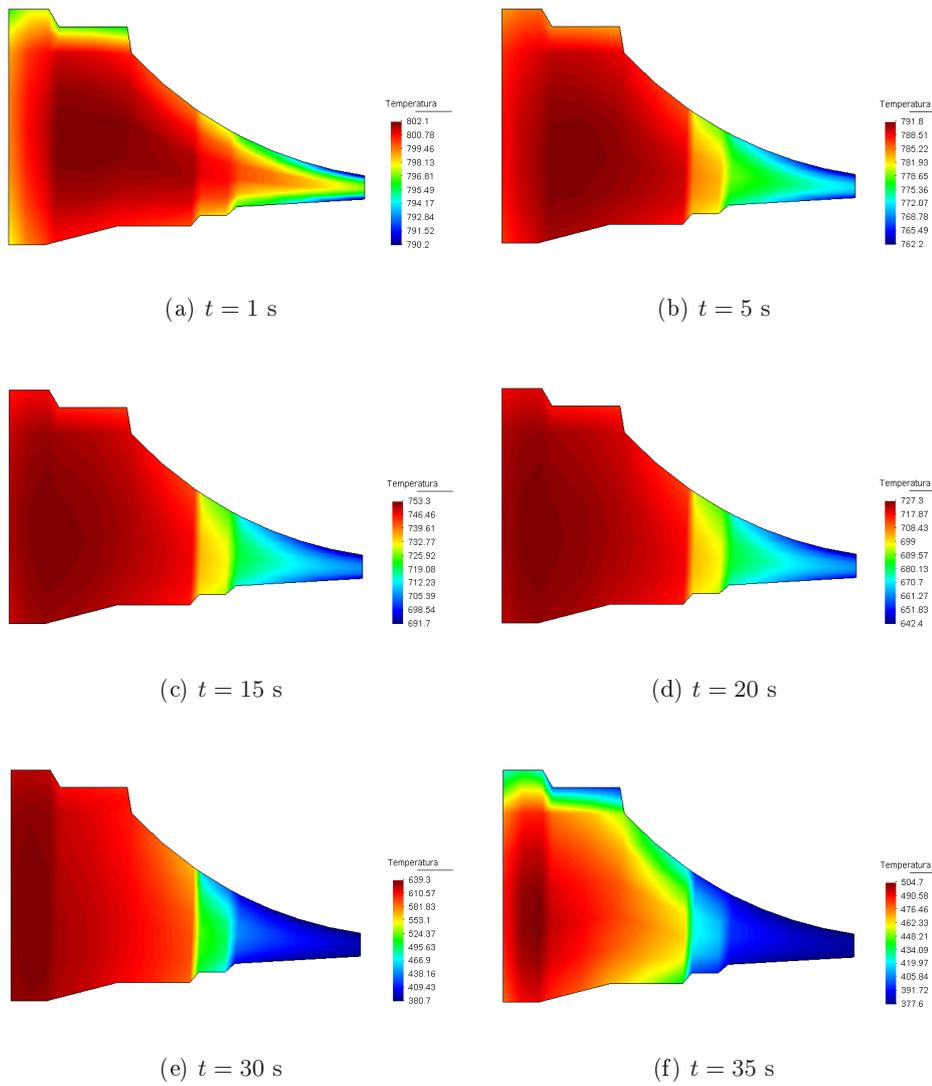


Figura 13.12: Distribuição de temperatura [K] na secção do rotor após imersão no fluido de têmpera.

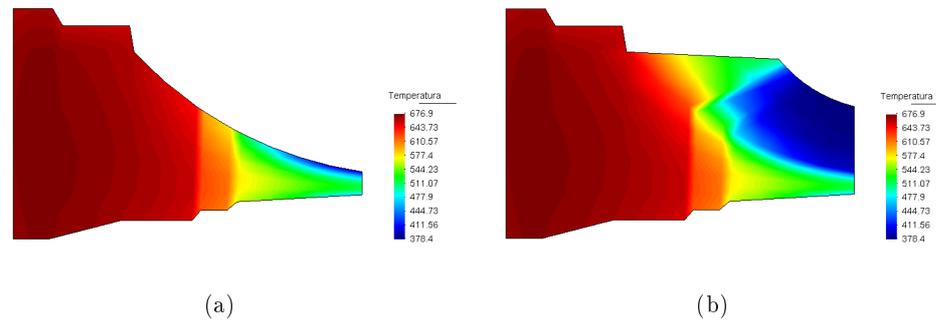


Figura 13.13: Distribuição de temperatura [K] (a) na secção sem alheta e (b) na secção da alheta ($t = 27$ s).

processo. As alhetas, por possuírem uma grande área de transferência de calor, fruem de níveis de temperatura mais baixos. Como seria de esperar, a influência da alheta é mais evidente na zona superior da secção da peça, a meio do seu comprimento. Comparando os resultados apresentados nas figuras 13.13(a) e (b), pode ver-se que, nessa zona, existe uma redução de temperatura superior a 5 K devido à existência da alheta e condução de calor resultante.

A influência das alhetas pode ver-se também na figura 13.14, onde se apresentam os isovalores de temperatura no modelo tridimensional do rotor de alumínio para o instante $t = 20$ s. A distribuição de temperatura na superfície superior do modelo geométrico não se apresenta axissimétrica. Na zona da superfície vizinha às alhetas verifica-se uma alteração na distribuição radial da temperatura.

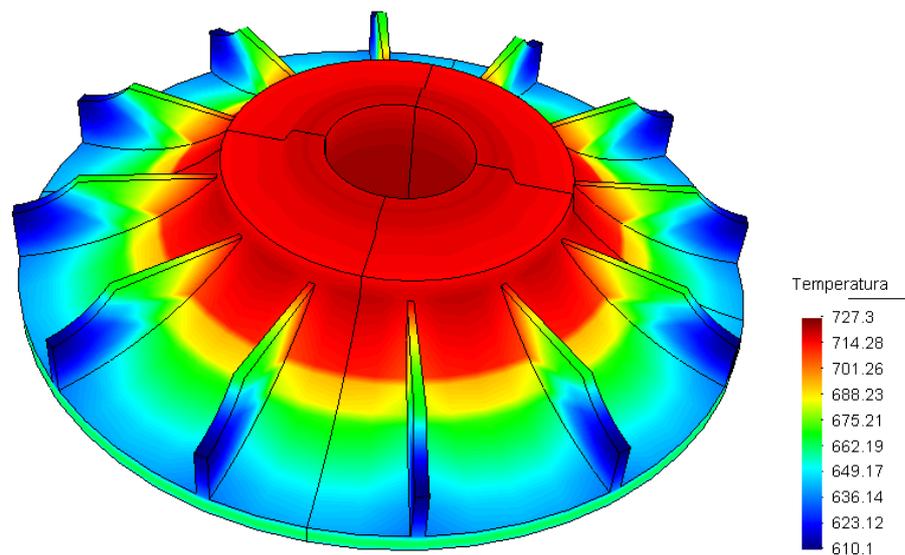


Figura 13.14: Isovalores de temperatura [K] no rotor de alumínio ($t = 20$ s).

Contrariamente aos resultados bidimensionais obtidos, por exemplo, por [Boër *et al.* 86], com o modelo tridimensional, apresentado neste trabalho, torna-se possível avaliar aspec-

tos relevantes como a influência das alhetas na distribuição de temperaturas no interior da peça. Porém, o tempo de cálculo é claramente superior ao exigido em cálculos bidimensionais. Note-se, ao nível numérico, que os gradientes térmicos e a existência de fortes não-linearidades no cálculo térmico obrigam, em determinados incrementos, à realização de um número de iterações de convergência superior a oito.

Na figura 13.15 mostra-se o modelo deformado do rotor (factor de escala $\times 3$). No perfil deformado (figura 13.15(a)), é possível ver as distorções e contracções causadas pela têmpera. As distorções alteram a geometria original do modelo e, conseqüentemente, da peça.

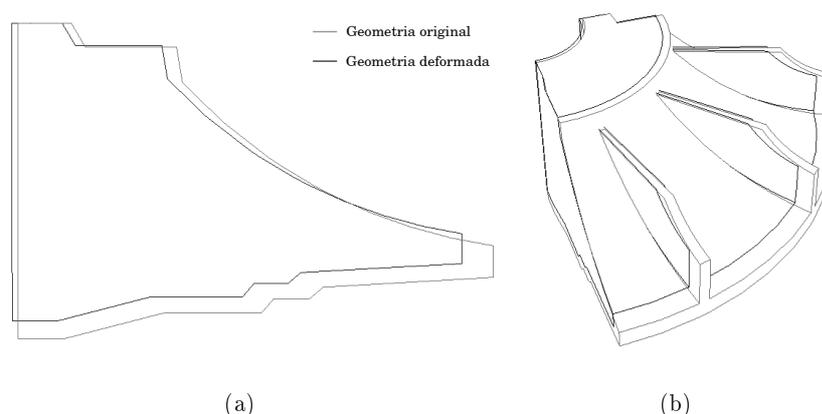


Figura 13.15: Modelo geométrico deformado após têmpera. (a) Perfil da secção deformada e (b) 1/4 do rotor deformado. Comparação com a geometria original (coeficiente de ampliação 3).

Na figura 13.16 apresenta-se o deslocamento da face interior do furo do rotor. Como se pode ver, o deslocamento perpendicular ao eixo do rotor (direcção Oz) não é uniforme. Após a subtracção do deslocamento uniforme e elástico, que representa mais de 95% da deformação e é representado pela média do deslocamento, permanecem distorções com amplitudes da ordem dos 0.08 mm. Apesar de pequenas, estas distorções produzem um efeito de abaulamento do eixo interior do rotor e não estão dentro das tolerâncias admissíveis para estes componentes. Portanto, as distorções produzidas durante o tratamento térmico de têmpera podem comprometer a utilização da peça, como comprova o trabalho aqui presente.

No caso do rotor, e para o seu normal funcionamento, as tensões σ_{yy} (axiais) e σ_{zz} (radiais) são menos importantes que as tensões σ_{xx} (tangenciais) [Boër *et al.* 86]. A figura 13.17 mostra a evolução da tensão σ_{xx} ao longo do processo de têmpera do rotor.

O ponto 866, situado na superfície do furo, apresentou o valor mais elevado de tensão na zona interior do rotor durante a têmpera ($\sigma_{xx} = 105$ MPa a $t = 37$ s). Este ponto, em compressão a meio do processo (26-33 s), transformou-se, posteriormente, num valor em tracção. O ponto 895 apresenta uma tensão final, em valor absoluto, elevada e a sua curva é qualitativamente semelhante à do ponto 866. Estes pontos, 866 e 895, apresentam variações de tensão superiores aos pontos interiores da secção (548 e 437). Porém, ambos seguem evoluções qualitativamente semelhantes.

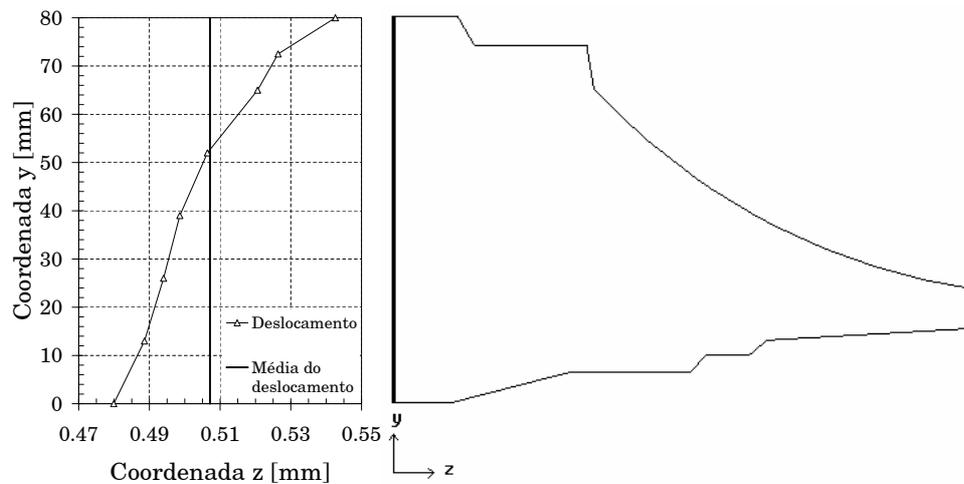


Figura 13.16: Deformação da face do furo interior do rotor de alumínio.

A tensão no ponto 6, assim como nos pontos 9 e 81, segue uma evolução complexa que culmina num valor absoluto elevado à compressão. O ponto 6 apresentou o valor de tensão à tracção, assim como à compressão, mais elevado em todo o processo.

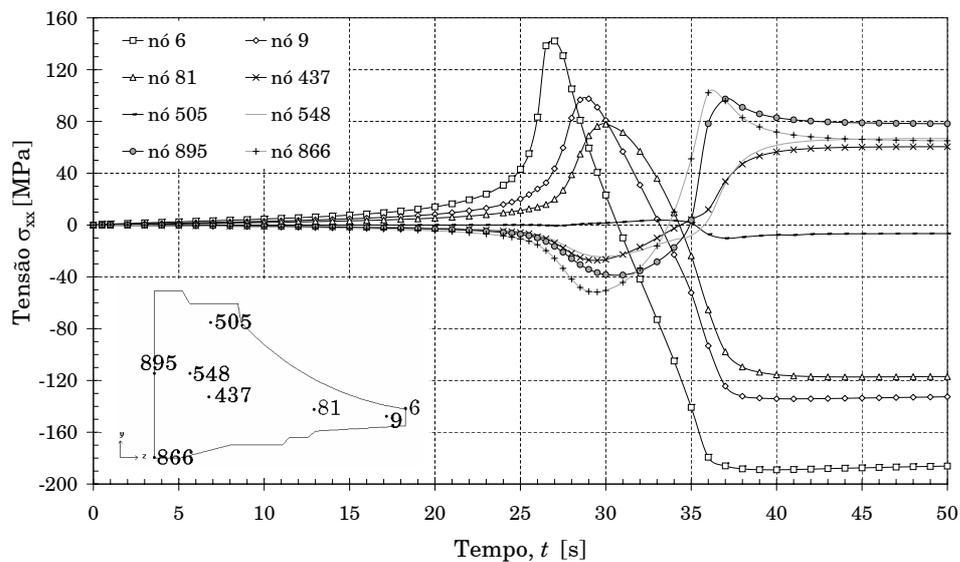


Figura 13.17: Evolução da tensão σ_{xx} ao longo do processo de têmpera do rotor.

De acordo com estas observações e pela figura 13.17, pode aferir-se que 27 s após a imersão da peça desenvolvem-se tensões de tracção no exterior do rotor e tensões de compressão no interior. Após esse instante, existe uma inversão de sinais e as superfícies exteriores ficam à compressão e o interior à tracção.

Na figura 13.18 apresenta-se a evolução da distribuição de tensão σ_{xx} na secção da peça. Inicialmente, quando o gradiente de temperaturas entre o interior e a superfície

aumenta, a zona próxima da superfície tende a contrair mais rapidamente. Desta forma, as regiões próximas da superfície apresentam-se em tracção e o interior em compressão (figuras 13.18(a)-(c)). Próximo do fim da têmpera, quando o campo de temperaturas torna-se mais homogêneo e o seu interior tende a arrefecer mais rapidamente, a distribuição de tensões inverte-se. Nas figuras 13.18(e) e (f) mostra-se a distribuição de tensões na parte final do processo de têmpera. Estas tensões correspondem à situação em que o interior do rotor tende a contrair, mas é contrariado pela zona envolvente. Consequentemente, as tensões são de tracção no centro e de compressão na superfície. Os efeitos de concentração de tensões nos cantos côncavos e ausência de tensões nos cantos convexos também podem ser observados nestas figuras.

Nas figuras 13.19(a) e (b) apresentam-se as tensões σ_{xx} ao longo das superfícies superior e inferior da secção, respectivamente. Nas figuras 13.20(a) e (b) mostram-se as tensões σ_{xx} e σ_{yy} ao longo da superfície interior do furo do rotor. Nas superfícies superior e inferior, a tensão σ_{xx} decresce com o aumento da distância ao eixo do rotor até a um valor absoluto máximo, de contracção. Na superfície interior do furo, o valor máximo absoluto aparece a, aproximadamente, 30 mm de altura. A tensão σ_{xx} é de tracção até 80% da altura, passando depois a compressão. Nesta superfície, a tensão σ_{yy} é sempre à compressão, devido à contracção nesta direcção.

Os resultados obtidos são confrontados com os valores encontrados, para um rotor semelhante, por [Boër *et al.* 86]. Apesar de [Boër *et al.* 86] utilizar uma lei constitutiva diferente e utilizar um modelo geométrico axissimétrico, os valores obtidos por este autor poderão ser utilizados para efeitos de comparação. A partir das figuras 13.19 e 13.20 observa-se que os valores calculados neste trabalho estão em bom acordo com os apresentados por [Boër *et al.* 86]. Todavia, os valores de tensão extremos são superiores. Este facto pode ser atribuído à maior complexidade geométrica do modelo tridimensional utilizado neste trabalho e a diferentes coeficientes de transferência de calor tomados.

Os isovalores da deformação plástica equivalente no final do processo estão representados na figura 13.21(a). Esta demonstra que as zonas delgada e exterior do rotor ficam sujeitas a níveis de deformação superiores. Este facto pode ser confirmado analisando a figura 13.21(b), onde se apresenta a distribuição da tensão equivalente na secção da peça. As tensões evidenciadas pela zona delgada são superiores à tensão limite de elasticidade levando a deformações permanentes. A superfície do furo interior do rotor também apresenta tensões mais elevadas que o interior do corpo da peça.

Na figura 13.22 compara-se a influência das alhetas na distribuição da tensão σ_{xx} na secção da peça. Através da figura 13.22(b) pode ver-se que os níveis de tensão σ_{xx} nas alhetas são reduzidos e que a distribuição de tensão é idêntica nas secções do rotor sem e com alheta. Portanto, pode concluir-se que não há influência da alheta no campo de tensões σ_{xx} da secção do rotor. Porém, o mesmo não se verifica para a tensão axial σ_{yy} (figura 13.23(a)). Na secção da alheta produzem-se tensões na direcção Oy de compressão e de tracção. No interior da alheta verificam-se 54 MPa à compressão e 27 MPa à tracção, como valores máximos. A distribuição de tensões representada na figura 13.23(a) dá-se devido ao arrefecimento mais rápido e consequente contracção do extremo da alheta, existindo posteriormente inversão de deformações. Os isovalores das tensão demonstradas são resposta aos movimentos de contracção da peça. Na figura 13.23(b) mostra-se a distribuição de tensões de corte τ_{xy} no final do processo. Esta figura confirma o facto referido, mostrando valores médios de tensão de corte no plano da alheta.

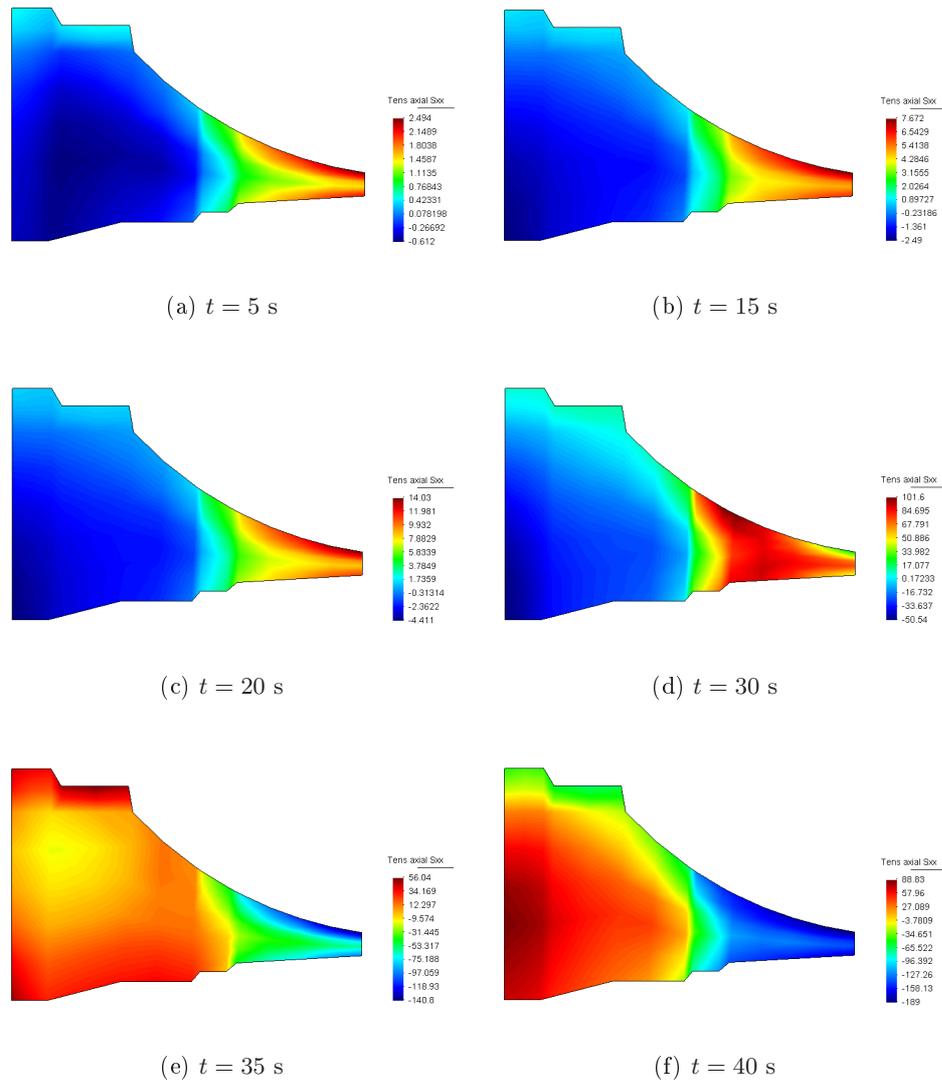


Figura 13.18: Distribuição da tensão σ_{xx} [MPa] na secção do rotor após imersão no fluido de têmpera.

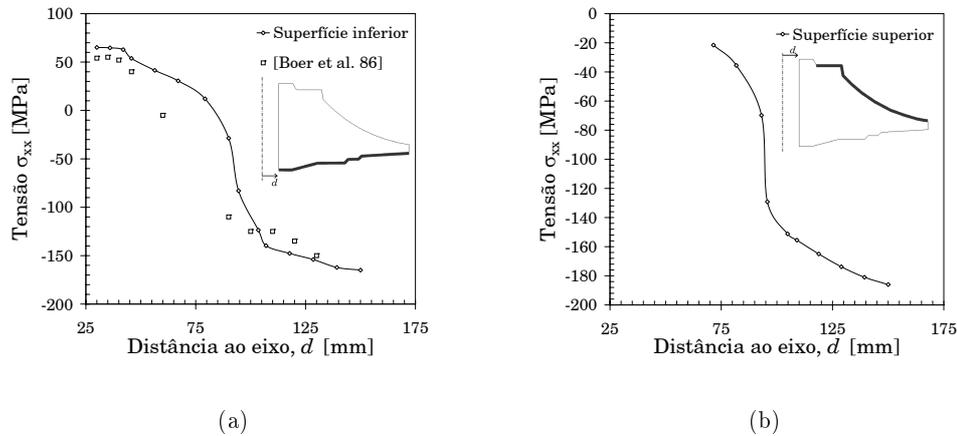


Figura 13.19: Tensões σ_{xx} [MPa] ao longo das superfícies (a) inferior e (b) superior da secção.

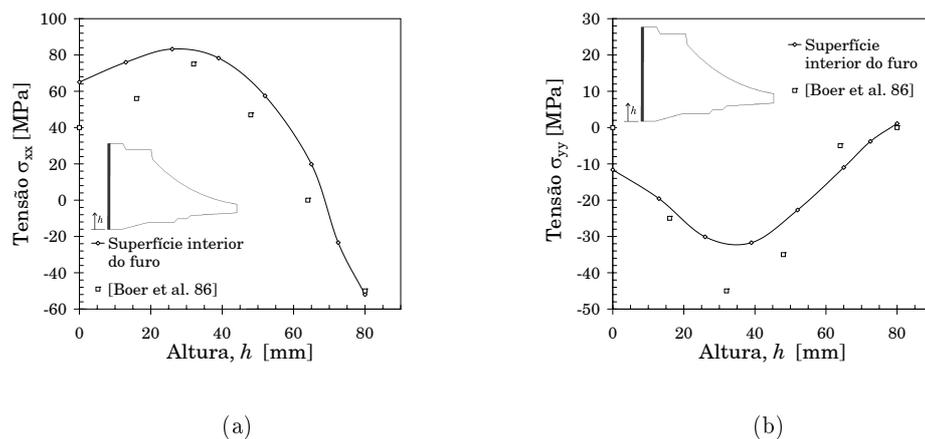


Figura 13.20: Tensões na superfície interior do furo do rotor: (a) tensão σ_{xx} [MPa] e (b) tensão σ_{yy} [MPa].

Por último, na figura 13.24 apresentam-se os campos de isovalores de tensão residual equivalente para o modelo tridimensional do rotor. Nesta figura, é possível verificar que a região mais afectada pelas tensões residuais é a superfície do anel exterior da peça, correspondente à parte delgada do rotor. O valor máximo de tensão equivalente ($\bar{\sigma} = 172$ MPa) encontra-se entre as alhetas. O gradiente geométrico de tensão máximo na superfície superior da peça e entre alhetas é de 50 MPa (30% da tensão máxima).

13.5 Conclusões

A modelação e simulação de processos termomecânicos é uma tarefa que depende das condições fronteira térmicas e mecânicas assumidas. O ensaio de têmpera apresentado neste

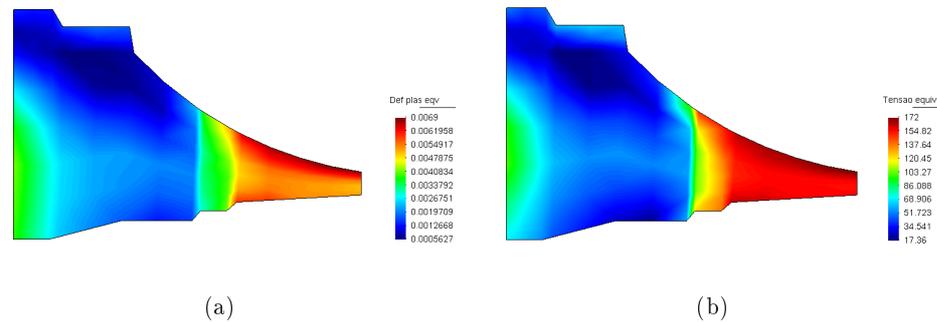


Figura 13.21: Isovalores (a) da deformação plástica equivalente, $\bar{\epsilon}^P$, e (b) de tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa], na secção do rotor no final do processo.

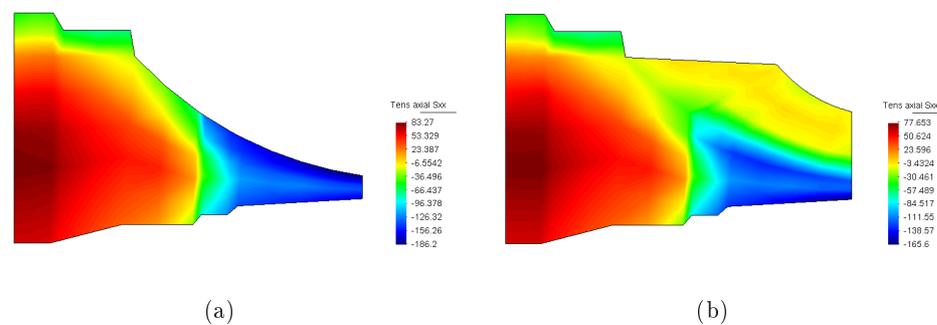


Figura 13.22: Influência da alheta na distribuição da tensão σ_{xx} [MPa] durante a têmpera. Distribuição da tensão σ_{xx} (a) na secção sem alheta e (b) na secção com alheta ($t = 50$ s).

capítulo demonstrou estar de acordo com os princípios e fenómenos físicos que acompanham a generalidade dos processos térmicos. Demonstrou também o potencial dos modelos desenvolvidos e implementados neste trabalho.

Realça-se que o ensaio reproduzido neste capítulo possui condições severas, dado que água em ebulição é um fluido de têmpera instável. Deste modo, a simulação de outra situação de têmpera apresentaria ainda um nível de confiança maior dos resultados apresentados.

O cálculo térmico realizado resultou em grandes gradientes de temperatura ao longo da peça e velocidades de arrefecimento elevadas. O processo térmico, não-linear, depende directamente do coeficiente de transferência de calor entre o fluido de têmpera e o sólido. A determinação dos valores deste coeficiente é uma tarefa complexa. Neste trabalho, assumiu-se um coeficiente de transferência de calor dependente da temperatura. Apesar de se demonstrar experimentalmente que este varia com a inclinação e rugosidade da superfície, velocidade de imersão e tamanho do recipiente de fluido, a simplificação tomada demonstrou-se apropriada. A não-linearidade do cálculo numérico é também devido à evolução das propriedades com a temperatura.

Em sólidos de geometria complexa sujeitos a fortes gradientes de temperatura desenvol-

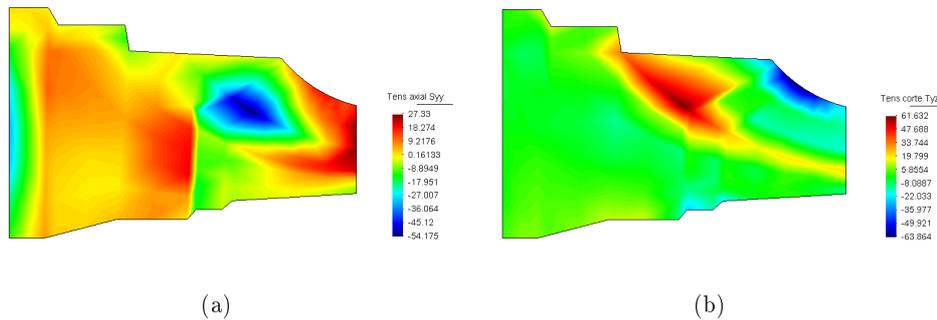


Figura 13.23: Distribuição de tensões nas alhetas: (a) tensão σ_{yy} [MPa] e (b) tensão de corte τ_{yz} [MPa] no final da têmpera.

vem-se tensões residuais. As contrações provocadas em processos térmicos produzem, muitas vezes, deformações permanentes que podem pôr em risco a utilização da peça. Este foi o caso do ensaio de têmpera simulado, em que as deformações desenvolvidas ultrapassaram às tolerâncias admissíveis. No presente trabalho demonstrou-se ainda que as superfícies exteriores estão sujeitas a tensões mais elevadas que as regiões interiores da peça. A existência de regiões delgadas na peça torna o problema da geração de tensões residuais ainda mais complexo. Para um rotor de alumínio, as tensões normais à secção podem atingir valores relativamente elevados. As tensões são tanto maiores quanto mais rápido for o arrefecimento da peça e, conseqüentemente, mais severo for o tratamento térmico de têmpera. Os resultados obtidos estão em bom acordo com resultados obtidos por outros autores, comprovando as observações e conclusões retiradas.

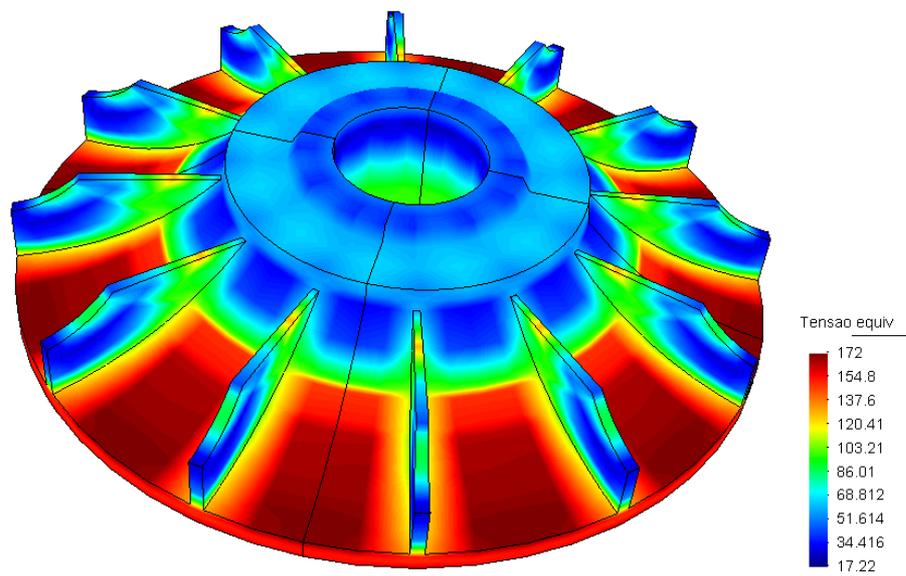


Figura 13.24: Isovalores da tensão equivalente, $\bar{\sigma}$ [MPa], no rotor ($t = 50$ s).

Capítulo 14

Considerações Finais

Descrevem-se, de modo global, as principais conclusões deste trabalho. Apresentam-se igualmente algumas perspectivas de desenvolvimento futuro no seguimento dos assuntos apresentados.

O trabalho que aqui se apresenta constitui o culminar de um conjunto de trabalhos desenvolvidos ao longo de cerca de quatro anos. Estes trabalhos, realizados no seio do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro e no *Laboratoire de Génie Mécanique et Matériaux* da *Université de Bretagne-Sud*, pretendem dar resposta, por via numérica, a alguns fenómenos do comportamento mecânico e térmico de alguns materiais metálicos. Para tal, desenvolveu-se um conjunto de modelos matemáticos inerentes a estes fenómenos e criou-se uma ferramenta numérica adaptada à simulação do comportamento termomecânico destes materiais quando solicitados por cargas térmicas e mecânicas diversas.

Dos objectivos inicialmente estabelecidos, constava o desenvolvimento de modelos matemáticos e sua implementação numérica adaptados à simulação do comportamento mecânico e térmico de ligas de alumínio específicas como, por exemplo, as ligas de alumínio Al-Mg-Si. Posteriormente, foi possível concluir que os modelos desenvolvidos e implementados permitiam não só a modelação de ligas de alumínio da série 6000, como de outras ligas de alumínio e de outros materiais metálicos. Como exemplo, vejam-se as simulações do comportamento à tracção do aço AISI 304.

Na investigação e desenvolvimento de modelos e técnicas numéricas, são possíveis dois tipos de abordagens: (i) o desenvolvimento de modelos numéricos e sua implementação em programas comerciais ou (ii) o desenvolvimento simultâneo de um código aberto e dos modelos numéricos que o compõem. A primeira abordagem, que tem tido um conjunto maior de seguidores, não permite ao investigador conhecer todas as técnicas numéricas envolvidas e executadas durante os testes numéricos necessários à validação do trabalho. Porém, esta é mais objectiva e temporalmente económica. A segunda abordagem, apesar

de ser de baixo custo e de não apresentar limitações, obriga ao total conhecimento das sub-rotinas presentes e, conseqüentemente, é mais morosa.

No caso de um trabalho conducente à obtenção do grau de doutoramento, o caminho percorrido pode ser tão ou mais importante do que a chegada ao objectivo final. Desta forma, a passagem pelo estudo e implementação de técnicas numéricas, muitas vezes fora do âmbito do trabalho, conduzem à aquisição de um maior número de conhecimentos numa área científica mais alargada que a inicialmente proposta. Tal opinião motivou a opção pelo segundo caminho. Este, apesar de, muitas vezes, se apresentar árduo e penoso, mostrou-se frutuoso.

14.1 Conclusões Gerais

Ainda que a utilização das ligas de alumínio esteja generalizada nos dias de hoje, estas têm uma utilização limitada uma vez que não contemplam situações de exigência extrema. Estas limitações prendem-se com vários factores sendo alguns de ordem financeira e a maior parte de ordem tecnológica. Isto é, os modelos que regem o comportamento destas ligas não são ainda bem conhecidos pela comunidade científica.

Tendo em conta o desenvolvimento de um código computacional que recorresse ao método dos elementos finitos e que permitisse simular o comportamento mecânico e térmico de ligas de alumínio, procedeu-se a uma recolha bibliográfica que permitiu concluir que seria indicado utilizar um modelo constitutivo termoelástico-viscoplástico preparado não só para gamas de temperatura elevadas como também para temperaturas mais baixas.

Os modelos viscoplásticos, como o de Brown e Anand [Brown *et al.* 89], cujo historial de deformação é representado por uma variável interna, apresentam-se ideais para o propósito estabelecido. Embora o modelo de Brown e Anand tenha em conta efeitos de restauração dinâmica e estática, este apresenta-se insuficiente para representar o comportamento do material a temperaturas mais baixas. Assim, o modelo proposto, é desenvolvido por forma a representar convenientemente o comportamento dos materiais numa gama alargada de temperaturas.

A implementação do modelo constitutivo é efectuada utilizando um esquema de integração temporal de gradiente progressivo e uma formulação lagrangeana reactualizada.

Impõe-se desenvolver e implementar um módulo de cálculo da distribuição de temperaturas que considere ainda os efeitos de inércia térmica. Tendo em conta os gradientes e velocidades de arrefecimento ou de aquecimento inerentes a certos processos termomecânicos como, por exemplo, têmperas, utilizou-se um algoritmo do tipo *previsão-correcção* cuja etapa de *previsão* é realizada de forma semi-implícita. A etapa da *correcção* utiliza a integração implícita com o auxílio de um cálculo iterativo pelo método de Newton-Raphson.

Paralelamente ao cálculo térmico, é inevitável o desenvolvimento e implementação de um modelo termoplástico que reflecta o fenómeno da geração de calor por deformação plástica. A execução destas tarefas levou ao desenvolvimento de um algoritmo de acoplamento termomecânico em que os problemas térmico e mecânico são resolvidos separadamente, existindo uma troca sucessiva de informação em intervalos predeterminados da simulação.

O programa de elementos finitos desenvolvido permite a discretização em elementos finitos tetraédricos de 1 e 4 pontos de integração e hexaédricos de 8 pontos de integração. O elemento hexaédrico está preparado para a integração completa, reduzida selectiva ou

estabilizada.

A complexidade do modelo termoelástico-viscoplástico implementado traduz-se pelo número de parâmetros do material cujo valor é necessário identificar. Quando o número de parâmetros ascende a mais de uma dezena, a sua determinação de forma exploratória é impraticável. Impunha-se assim o desenvolvimento de uma ferramenta de identificação de parâmetros pelo método inverso. Esta ferramenta, designada por ADAPCO, recorre a um algoritmo evolutivo de espaço de busca real para a optimização do processo. O algoritmo desenvolvido demonstrou-se mais eficiente que os algoritmos genéticos clássicos em testes comparativos e na procura e identificação de parâmetros de modelos de comportamento não-lineares. A título de comparação, utilizou-se ainda um método baseado no gradiente, implementado no programa SIDOLO. Ambos os métodos foram comparados. Embora o método baseado no gradiente se mostre computacionalmente mais eficiente, os resultados são excessivamente dependentes do conjunto inicial de parâmetros. Com o método baseado em algoritmos evolutivos, independente dos valores iniciais, obtêm-se resultados excelentes.

O modelo de comportamento apresentado neste trabalho, auxiliado pela ferramenta de identificação de parâmetros, pode ser aplicado a outros materiais metálicos como, por exemplo, os aços.

A validação do código de elementos finitos foi realizada separadamente nos domínios térmico e mecânico e em problemas de domínios acoplados. A validação do problema térmico é realizada comparando os resultados obtidos com soluções analíticas e numéricas de outros autores. O algoritmo de integração temporal utilizado para o problema térmico em regime transiente mostrou-se bastante eficaz levando a níveis de erro insignificantes mesmo quando se recorre a incrementos de tempo elevados. Em todos os testes efectuados a solução obtida mostrou-se muito aceitável.

A validação do problema mecânico permitiu auferir que o elemento hexaédrico de integração reduzida selectiva conduz a melhores resultados que o mesmo elemento com integração completa e que quer o método da rotação incremental quer o método de decomposição polar se apresentam adequados ao cálculo preciso do tensor de rotação.

Os problemas acoplados realizados, tendo em conta a validação do código desenvolvido, demonstram o bom desempenho deste. O problema de uma barra com temperatura prescrita numa das extremidades exemplifica o efeito mecânico da variação de temperatura. Quer o ensaio de compressão de um cilindro quer o ensaio de tracção do aço AISI 304 caracterizam o efeito da geração de calor por deformação plástica. As soluções obtidas são comparadas com soluções experimentais, analíticas e numéricas.

Os resultados obtidos na simulação de uma têmpera de uma liga de alumínio da série 2000 demonstraram estar de acordo com os princípios e fenómenos físicos que acompanham este processo, assim como com resultados obtidos por outros autores. A peça sujeita ao processo de têmpera é um rotor de pá direita. O cálculo térmico realizado resultou em grandes gradientes de temperatura ao longo da peça e velocidades de arrefecimento elevadas. Consequentemente, e devido aos fortes gradientes de temperatura existentes no processo, desenvolveram-se tensões residuais. As contracções provocadas produziram deformações permanentes, superiores às tolerâncias admissíveis. Este facto excluiu o uso da peça. Este ensaio, termomecanicamente acoplado e não-linear, atestou a potencialidade dos modelos constitutivos, térmico e termoplástico implementados assim como as técnicas numéricas desenvolvidas.

14.2 Perspectivas de Trabalho Futuro

No universo em que este trabalho se enquadra, novos desafios e desenvolvimentos se colocam continuamente. O desenvolvimento rápido da capacidade de processamento permite também aumentar as possibilidades e potencialidades da simulação numérica, aumentando o universo de trabalhos futuros.

O aumento da eficiência computacional é uma área abrangida por trabalhos futuros. A implementação de um algoritmo de otimização da evolução dos processos por controlo automático e contínuo do passo de tempo permitiria obter reduções substanciais no tempo de cálculo [Pinho-da-Cruz e Teixeira-Dias 05]. A convergência do problema em cada domínio não se traduz pela convergência do problema acoplado. Como tal, e para controlar automaticamente o passo de tempo, seria necessário avaliar quer os domínios mecânico e térmico quer o acoplamento entre eles.

O aumento da eficiência computacional também pode ser obtido por técnicas de programação, como a programação para cálculo paralelo e/ou distribuído. A massificação, redução do custo e evolução tecnológica dos computadores pessoais veio abrir novas perspectivas na possibilidade e eficiência da programação paralela e distribuída. Estas técnicas possibilitariam aumentar a dimensão e eficiência dos problemas resolvidos.

O modelo adoptado e desenvolvido neste trabalho é um modelo termoelástico-viscoplástico de variável interna que, apesar do significado físico da maioria dos parâmetros envolvidos, pertence à classe dos modelos fenomenológicos. Outros modelos fenomenológicos elastoviscoplásticos, que têm conduzido a bons resultados nas áreas dos processos de conformação, recorrem a leis de encruamento com superfícies de plasticidade associadas. Seria interessante a utilização e implementação modular de um modelo deste tipo, que tivesse em conta os efeitos de temperatura, como comparação na simulação de tratamentos térmicos das ligas de alumínio.

Na área dos modelos constitutivos, fica por estudar a influência da anisotropia no comportamento mecânico e térmico das ligas de alumínio. O fenómeno da anisotropia evolui com a textura, microestrutura do material e deformação plástica. Deste modo, seria interessante desenvolver um modelo que tivesse em conta a evolução dos efeitos da anisotropia com a história de deformação, a temperatura e com aspectos microestruturais.

No presente trabalho utilizaram-se unicamente malhas estruturadas de elementos hexaédricos por se saber que estas conduzem a resultados mais precisos. Em geometrias tridimensionais complexas, a utilização deste tipo de elementos torna-se impraticável, pois os algoritmos de geração destes elementos ainda necessitam de obedecer a certos requerimentos geométricos, muitas vezes demasiado complexos. Nestas geometrias, os elementos tetraédricos são os mais adequados. Os resultados obtidos com elementos tetraédricos de quatro nós, com um ou quatro pontos de integração, mostram-se dependentes da orientação da malha. Esta dependência é atenuada quando o elemento tetraédrico possui dez ou mais nós. Por conseguinte, torna-se essencial a implementação de elementos deste tipo para a simulação de processos tecnológicos sobre modelos com geometrias complexas.

Neste trabalho, a falta de condições de contacto e atrito limitaram as aplicações tecnológicas. Portanto, para um alargamento de utilização tecnológica do código apresentado impõe-se a implementação de algoritmos que permitam simular o contacto mecânico e térmico entre ferramentas e peças, assim como o atrito e conseqüente libertação de calor desenvolvido durante o contacto. A implementação de um algoritmo de contacto com atrito

leva ao desenvolvimento de um modelo de atrito associado à termodinâmica da plasticidade. Este modelo, além de variar com a pressão exercida, deve ser função da temperatura das superfícies de contacto e o seu trabalho deve ser transformado em calor.

Neste trabalho, implementou-se um algoritmo *staggered* para a resolução do problema acoplado. Esta abordagem, embora computacionalmente económica, pode apresentar problemas numéricos sérios quando o incremento de tempo é demasiado grande. Outras abordagens, de custo e complexidade de implementação mais elevados, não trazem estes problemas. Deste modo, seria interessante testar diferentes abordagens e estratégias de cálculo de problemas acoplados. A comparação destas passaria pela análise do erro e convergência das diferentes estratégias de acoplamento.

Um aspecto de grande actualidade, no qual é possível explorar as potencialidades do código desenvolvido, é a simulação do comportamento de materiais compósitos de matriz metálica. Estes materiais têm ocupado um lugar de destaque em muitas aplicações de engenharia. Contudo, o comportamento destes materiais em alguns processos tecnológicos ainda se revela desconhecida.

A dificuldade de identificação de parâmetros materiais dos modelos constitutivos é um problema generalizado na comunidade científica. Esta dificuldade é ainda dilatada pela falta de ferramentas de identificação que contenham as principais leis de comportamento e superfícies de plasticidade. Por conseguinte, o desenvolvimento de um programa que determine os parâmetros envolvidos em modelos constitutivos mais usuais e que possibilite a inserção de novos modelos é de grande importância científica e tecnológica. O desenvolvimento futuro do programa ADAPCO passa pela inserção de um conjunto de modelos de comportamento e pela implementação de novos algoritmos de optimização. Destes algoritmos, destacam-se as redes neuronais e os algoritmos imunes.

A utilização de algoritmos baseados na inteligência artificial, como as redes neuronais, podem permitir o desenvolvimento de programas que, a partir do comportamento real do material, escolha automaticamente o tipo e a lei de comportamento que melhor o reproduz. Conjuntamente com a selecção ou desenvolvimento da lei de comportamento, o referido programa pode ainda determinar os parâmetros ideais para esse material. A utilização de um código com estas particularidades, associado a programas de simulação pelo método dos elementos finitos, permitirá a utilização correcta de ferramentas de simulação por utilizadores menos conhecedores dos aspectos matemáticos da modelação. Este código, cuja informação de entrada se resume a conjuntos de curvas experimentais, contribuirá para realizar o sonho de Budiansky da automatização total de ferramentas numéricas de análise inversa.

Apêndice A

Notações, Nomenclatura e Siglas

A.1 Notações Algébricas

$\mathbf{0}$	- Tensor nulo
a, \dots, z	- Escalares pertencentes a \mathbb{R}
A, \dots, Z	
α, \dots, ω	
$\mathbf{a}, \dots, \mathbf{z}$	- Vectores e tensores pertencentes a \mathbb{R}^n
$\mathbf{A}, \dots, \mathbf{Z}$	
α, \dots, ω	
\mathbf{A}'	- Parte desviadora do tensor \mathbf{A}
$\dot{\mathbf{A}}$	- Derivada parcial do tensor \mathbf{A} em ordem ao tempo
\mathbf{A}^{-1}	- Tensor resultante da inversão de \mathbf{A}
\mathbf{A}^A	- Parte anti-simétrica do tensor \mathbf{A}
\mathbf{A}^S	- Parte simétrica do tensor \mathbf{A}
\mathbf{A}^T	- Tensor resultante da transposição de \mathbf{A}
$\hat{\mathbf{A}}$	- Tensor \mathbf{A} rodado para o referencial de ortotropia
$\det(\mathbf{A})$	- Determinante do tensor \mathbf{A}
$\ \mathbf{A}\ $	- Norma do tensor \mathbf{A}
$ a $	- Valor absoluto do escalar a
\mathbf{ab}	- Produto dos vectores \mathbf{a} e \mathbf{b}
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	- Produto interno dos tensores \mathbf{A} e \mathbf{B}
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	- Produto tensorial do tensor \mathbf{A} por \mathbf{B}
$\delta\mathbf{A}$	- Campo virtual do tensor \mathbf{A}
$\text{tr}(\mathbf{A})$	- Traço do tensor \mathbf{A}
da	- Incremento infinitesimal da variável genérica a
Δa	- Incremento da variável genérica a
(x, y, z)	- Sistema de eixos cartesiano
(x_1, x_2, x_3)	
δ_{ij}	- Símbolo de Kronecker
\mathfrak{S}	- Tensor identidade de quarta ordem
$\mathbf{1}$	- Tensor identidade de segunda ordem
\mathbb{R}	- Conjunto dos número reais

A.2 Operadores e Funções

$\cosh()$	- Função coseno hiperbólico
$\text{div}()$	- Operador divergente
$\exp()$	- Função exponencial
$\text{grad}()$	- Operador gradiente
$\ln()$	- Função logaritmo neperiano
$\max()$	- Função máximo
$\min()$	- Função mínimo
$\text{sgn}()$	- Função sinal
$\sinh()$	- Função seno hiperbólico

A.3 Índices

A.3.1 Sub-índices

0	- Valor inicial
amb	- Referente às condições ambiente
cond	- Referente à condução de calor
conv	- Referente à convecção de calor
t	- Referente ao incremento de tempo t
$t + \Delta t$	- Incremento de tempo
max	- Valor máximo
min	- Valor mínimo
p	- Referente a um valor prescrito
tol	- Referente a uma tolerância

A.3.2 Super-índices

$\hat{\quad}$	- Referida no referencial corotacional ortotrópico
e	- Parte elástica
k	- Referente à iteração de cálculo corrente
$k + 1$	- Referente à iteração de cálculo seguinte
p	- Parte plástica
pond	- Referente à ponderação
sim	- Valor simulado
*	- Valor observado experimentalmente
t	- Parte térmica
te	- Parte termoelástica
vp	- Parte viscoplástica
*	- Transformação para um novo referencial

A.4 Relações Menos Usuais

$A \stackrel{def}{=} B$	-	A definida igual a B
$A \equiv B$	-	A coincide com B
$A \approx B$	-	A aproximadamente igual a B
$A \ll B$	-	A significativamente menor do que B
$A \gg B$	-	A significativamente maior do que B
$A \rightarrow B$	-	A antecede B
$A \Rightarrow B$	-	A implica B

A.5 Siglas

AA	-	Liga de alumínio
CAD	-	Concepção assistida por computador
CET	-	Coefficiente de expansão térmica
GDL	-	Graus de liberdade
AE	-	Algoritmos evolucionários
MEF	-	Método dos elementos finitos
FI	-	Integração completa
GA	-	Algoritmos genéticos
GM	-	<i>General motors</i>
H8	-	Elemento finito hexaédrico de 8 nós
IR	-	Rotação incremental
ISQ	-	Instituto de soldadura e qualidade
PD	-	Decomposição polar
SRI	-	Integração reduzida selectiva

A.6 Mecânica dos Meios Contínuos

C_0	-	Configuração de referência no instante inicial
C_t	-	Configuração de referência no instante actual
\mathbf{C}^{sec}	-	Módulo elastoviscoplastico secante
\mathbf{C}^e	-	Tensor de elasticidade
\mathbf{D}	-	Tensor velocidade de deformação
$d\mathbf{x}_0$	-	Vector de posição do ponto material infinitesimal na configuração Γ_0
$d\check{\mathbf{x}}_0$	-	Transformada do vector $d\mathbf{x}_0$ na configuração relaxada $\check{\Gamma}_0$
$d\mathbf{x}$	-	Vector de posição do ponto material infinitesimal na configuração Γ_t
$d\check{\mathbf{x}}$	-	Transformada do vector $d\mathbf{x}$ na configuração relaxada $\check{\Gamma}_t$
$\boldsymbol{\varepsilon}$	-	Tensor de deformação
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$	-	Deformação equivalente
$\boldsymbol{\varepsilon}'$	-	Tensor desviador das deformações
$\nabla \boldsymbol{\varepsilon}$	-	Derivada objectiva de $\boldsymbol{\varepsilon}$

\mathbf{F}	-	Gradiente da transformação
Γ	-	Configuração da vizinhança do ponto material P
$\tilde{\Gamma}$	-	Configuração obtida após relaxação elástica da configuração Γ
\mathbf{L}	-	Gradiente do campo de velocidade \mathbf{v}
P e P'	-	Pontos materiais do meio contínuo Ψ
Ψ	-	Corpo sólido deformável
\mathbf{Q}	-	Tensor rotação ortogonal
\mathbf{R}	-	Tensor rotação
\mathbf{r}	-	Tensor incremento de rotação
$\boldsymbol{\sigma}$	-	Tensor das tensões de Cauchy
$\bar{\boldsymbol{\sigma}}$	-	Tensão equivalente
$\boldsymbol{\sigma}'$	-	Tensor desviador das tensões de Cauchy
$\boldsymbol{\sigma}^h$	-	Parte hidrostática do tensor das tensões de Cauchy
$\nabla \boldsymbol{\sigma}$	-	Derivada objectiva de $\boldsymbol{\sigma}$
$\nabla^{\text{GN}} \boldsymbol{\sigma}$	-	Derivada objectiva de Green-Nadghi
$\nabla^{\text{J}} \boldsymbol{\sigma}$	-	Derivada objectiva de Jaumann
$\nabla^{\text{log}} \boldsymbol{\sigma}$	-	Derivada objectiva logarítmica
$\nabla^{\text{Tr}} \boldsymbol{\sigma}$	-	Derivada objectiva de Truesdell
t	-	Instante de tempo genérico
\mathbf{U}	-	Tensor de deformação linear simétrico direito
\mathbf{u}	-	Deslocamento de um ponto material entre as configurações C_0 e C_t
\mathbf{V}	-	Tensor de deformação linear simétrico esquerdo
\mathbf{v} e $\dot{\mathbf{x}}$	-	Campo de velocidades associado à transformação \mathbf{F}
\mathbf{W}	-	Tensor velocidade de rotação, parte anti-simétrica de \mathbf{L}
$\boldsymbol{\Omega}$	-	Tensor velocidade de rotação do corpo rígido
$\boldsymbol{\Omega}^{\text{log}}$	-	Tensor velocidade de rotação logarítmico
\mathbf{N}^{log}	-	Tensor de rotação logarítmico de Xiao

A.7 Modelação Constitutiva

α	-	Coefficiente de expansão térmica
E	-	Módulo de elasticidade
$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$	-	Velocidade de deformação plástica equivalente
$f(\bar{\boldsymbol{\sigma}}, s, T)$	-	Função constitutiva representativa da velocidade de deformação plástica equivalente
$g(\bar{\boldsymbol{\sigma}}, s, T)$	-	Função constitutiva representativa da velocidade de variação da variável de estado s
$h(\bar{\boldsymbol{\sigma}}, s, T)$	-	Função constitutiva associada aos fenómenos de encruamento e restauração dinâmica
κ	-	Módulo de compressibilidade
λ e μ	-	Coefficientes de Lamé
$\bar{\lambda}$ e $\bar{\mu}$	-	Coefficientes de Lamé modificados
m	-	Sensibilidade à velocidade de deformação
ν	-	Coefficientes de Poisson dos materiais

Q e Q^*	- Energias de activação
R_g	- Constante dos gases perfeitos
$\dot{r}(s, T)$	- Função constitutiva associada aos fenómenos de restauração estática
B, p e Q_r	- Parâmetros característicos do material
s	- Resistência à deformação (variável de estado interna)
e	- Variável externa genérica
σ_0	- Tensão limite de elasticidade dos materiais
T	- Temperatura
T_t	- Temperatura de transição do material
\dot{T}	- Velocidade de aquecimento ou arrefecimento
τ	- Tensor das tensões de Kirchhoff
A	- Factor pré-exponencial (parâmetro característico do modelo constitutivo)
c	- Constante de proporcionalidade entre s e $\bar{\sigma}$
ξ, a e n	- Parâmetros característicos do material
h_0	- Velocidade de encruamento atérmico
s^*	- Valor de saturação de s
ξ	- Deformação plástica acumulada ([Valanis 71])
ζ	- Medida de tempo intrínseca ([Valanis 71])
$s_{0,1}$ e $s_{0,2}$	- Parâmetros característicos dos materiais
$\dot{\gamma}_{c,w}$	- Velocidade de deformação plástica de corte ([Nix <i>et al.</i> 85])
$\hat{\tau}_c, \hat{\tau}_w$ e $\dot{\gamma}_0$	- Parâmetros característicos do modelo de Nix e Gibeling
ρ_1, ρ_2 e K	- Parâmetros característicos do modelo de Prinz e Argon
τ_{01}	- Tensão de Orowan ([Prinz e Argon 84])
F_{def}	- Variável interna ([Miller e Sherby 78])
B e H	- Parâmetros característicos do modelo de Miller e Sherby
Ω	- Potencial viscoplástico

A.8 Comportamento Termomecânico

\mathbf{q}	- Tensor fluxo de calor por unidade de área
ρ	- Densidade
c	- Calor específico
\mathbf{k}	- Tensor de condutividade térmica
\mathbf{C}	- Matriz de capacitância térmica
Q	- Taxa de geração de calor
T_∞	- Temperatura do meio exterior
κ_r	- Coeficiente de transferência de calor por radiação
h_c	- Coeficiente de transferência de calor por convecção
h_{cont}	- Coeficiente de transferência de calor por contacto
\mathcal{H}	- Função constitutiva associada ao modelo termoplástico adoptado
ξ	- Factor de dissipação
ψ	- Factor corrector de dissipação
A e B	- Parâmetros característicos do modelo termoplástico de Rebelo e Kobayashi

$\hat{\varphi}$	- Energia livre de Helmholtz
$\hat{\psi}$	- Energia complementar de Helmholtz
μ	- Variável interna do modelo termoplástico de Perzina
\dot{J}_1	- Taxa do primeiro invariante do tensor de deformação plástica ([Argyris e Doltsinis 81])
\hat{M}	- Função da expansão térmica do modelo termoplástico de Simo e Miehe
λ	- Multiplicador de Lagrange ([Simo e Miehe 92])
\tilde{g}_e e \tilde{g}_p	- Componentes elástica e plástica da energia livre ([Kamlah e Haupt 97])
β	- Factor de dissipação ([Rodrigues e Martins 98])

A.9 Métodos Numéricos

Φ	- Factor escalar de ponderação para a integração do tensor \mathbf{D}
Λ	- Factor escalar de ponderação de avanço da integração temporal do tensor \mathbf{T}
$h_1, v, G,$ $K_1, K_2,$ h_1, v e G	- Valores escalares auxiliares de cálculo
\mathbf{R}	- Resíduo das equações de equilíbrio
\mathbf{K}_{CT}	- Matriz rigidez combinada
\mathbf{F}	- Vector de forças equivalente
r_T	- Coeficiente redução por controlo do incremento de temperatura
r_q	- Coeficiente redução por controlo dos fluxos de calor
r_{cond}	- Coeficiente redução por controlo das condições de fronteira
r_{min}	- Coeficiente de redução do tamanho do incremento global

A.10 Discretização por Elementos Finitos

\mathbf{N}	- Matriz das funções de forma elementares
\mathbf{B}	- Matrizes das derivadas parciais das funções de forma
\mathbf{M}	-
Σ	- Fronteira exterior do sólido deformável
\mathbf{a}	- Vector aceleração
\mathbf{f}	- Vector das forças exteriores por unidade de volume
$\Delta \mathbf{f}$	- Vector do segundo membro elementar
$\Delta \mathbf{F}$	- Vector do segundo membro global
\mathbf{k}	- Matriz rigidez elementar
\mathbf{K}	- Matriz rigidez global
NE	- Número total de nós do elemento
NG	- Número total de pontos de integração de Gauss
NN	- Número total de nós da malha de elementos finitos
$\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$	- Sistema de eixos global cartesiano
$\xi \equiv (\xi, \eta, \zeta)$	- Sistema de eixos de coordenadas canónicas

\mathbf{L}'	-	Parte desviadora do tensor gradiente de velocidade
\mathbf{L}^h	-	Parte hidrostática do tensor gradiente de velocidade
$\bar{\mathbf{L}}'$	-	Componente hidrostática corrigida do tensor gradiente velocidade
$\bar{\mathbf{B}}$	-	Matriz \mathbf{B} corrigida
\mathbf{B}^{dil}	-	Parte dilatacional de \mathbf{B}
\mathbf{B}'	-	Parte desviadora de \mathbf{B}
χ	-	Coefficiente de estabilização da integração elementar
\mathbf{J}	-	Matriz jacobiana
\mathbf{G}	-	Matriz genérica para integração volúmica

A.11 Identificação de Parâmetros de Modelos Constitutivos

\mathbf{Z}	-	Variáveis observáveis
\mathbf{A}	-	Conjunto dos parâmetros do modelo constitutivo
A	-	Parâmetro genérico do modelo constitutivo
$\mathbf{Z}_s^{\text{sim}}$	-	Variáveis observáveis por simulação
\mathbf{Z}_s^*	-	Variáveis observáveis experimentalmente
\mathcal{L}	-	Funcional a minimizar
\mathbf{D}	-	Matriz de peso
α	-	Coefficiente de penalidade
\mathbf{J}	-	Matriz jacobiana
δ	-	Tamanho do passo de Levenberg-Marquardt
μ	-	Parâmetro de Levenberg-Marquardt
\mathbf{f}	-	Primeira derivada da função de penalidade
\mathbf{H}	-	Segunda derivada da função de penalidade
\mathbf{r}	-	Vector dos resíduos
\mathbf{h}	-	Direcção de busca
λ	-	Tamanho do incremento
\mathbf{P}	-	População de indivíduos
Cr	-	Operador cruzamento
m	-	Operador mutação
El	-	Operador elitismo
Rl	-	Operador refinamento local
ERRORG	-	Erro relativo global

Apêndice B

Cálculos Adicionais

B.1 Cálculo do Tensor Gradiente de Velocidade

O Tensor gradiente de velocidade é dado pela expressão seguinte:

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}. \quad (\text{B.1})$$

Substituindo \mathbf{F} , dado por

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}, \quad (\text{B.2})$$

na equação do gradiente de velocidade \mathbf{L} (equação (B.1)) obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \frac{d}{dt} [\mathbf{F}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}] [\mathbf{F}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}]^{-1} = \\ &= \left\{ \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1} + \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}}(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1} + \mathbf{F}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}\frac{d}{dt}[(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}] \right\} \\ &\quad \left\{ [(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}]^{-1}(\mathbf{F}^{\text{P}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} \right\} = \\ &= \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} + \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}}(\mathbf{F}^{\text{P}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} + \mathbf{F}^{\text{te}}\mathbf{F}^{\text{P}}\frac{d}{dt}[(\mathbf{F}_0^{\text{e}})^{-1}]\mathbf{F}_0^{\text{e}}(\mathbf{F}^{\text{P}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Porém, considerando que

$$\dot{\mathbf{F}}_0^{\text{e}} = \mathbf{0}, \quad (\text{B.4})$$

pode concluir-se que

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} + \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}}(\mathbf{F}^{\text{P}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}. \quad (\text{B.5})$$

B.2 Decomposição do Gradiente de Velocidade

O gradiente de velocidade pode ser decomposto aditivamente nas suas partes termoelástica, $\mathbf{L}^{\text{te}} = \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}$, e plástica $\mathbf{L}^{\text{P}} = \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}}(\mathbf{F}^{\text{P}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1}$. Sabendo que o tensor gradiente de transformação termoelástico pode ser decomposto da seguinte maneira:

$$\mathbf{F}^{\text{te}} = \mathbf{V}\mathbf{R}, \quad (\text{B.6})$$

onde \mathbf{V} é o tensor deformação linear termoelástico. Substituindo a expressão (B.6) na definição da cada uma das partes do tensor campo gradiente de velocidade obtém-se

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^{\text{te}} &= \dot{\mathbf{F}}^{\text{te}}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} = (\dot{\mathbf{V}}\mathbf{R})(\mathbf{V}\mathbf{R})^{-1} = (\dot{\mathbf{V}}\mathbf{R} + \mathbf{V}\dot{\mathbf{R}})\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} = \\ &= \mathbf{V}\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} + \dot{\mathbf{V}}\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1} + \dot{\mathbf{V}}\mathbf{V}^{-1},\end{aligned}\quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^{\text{p}} &= \mathbf{F}^{\text{te}}\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}(\mathbf{F}^{\text{te}})^{-1} = (\mathbf{V}\mathbf{R})\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}(\mathbf{V}\mathbf{R})^{-1} = \\ &= \mathbf{V}\mathbf{R}\dot{\mathbf{F}}^{\text{p}}(\mathbf{F}^{\text{p}})^{-1}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{V}^{-1}.\end{aligned}\quad (\text{B.8})$$

B.3 Tensor de Rotação Logarítmico

O tensor de rotação logarítmico é definido por [Xiao *et al.* 97]:

$$\boldsymbol{\Omega}^{\text{log}} = \mathbf{W} + \mathbf{N}^{\text{log}} \quad (\text{B.9})$$

onde

$$\mathbf{N}^{\text{log}} = \begin{cases} 0 & \text{se } b_1 = b_2 = b_3 \\ \nu[\mathbf{B}\mathbf{D}] & \text{se } b_1 \neq b_2 = b_3 \\ \nu_1[\mathbf{B}\mathbf{D}] + \nu_2[\mathbf{B}^2\mathbf{D}] + \nu_3[\mathbf{B}^2\mathbf{D}\mathbf{B}] & \text{se } b_1 \neq b_2 \neq b_3 \neq b_1, \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

em que $\mathbf{B} = \mathbf{V}^2$ é o tensor esquerdo de Cauchy-Green e $b_i = \lambda_i^2$, $i = 1, \dots, 3$ são os valores próprios de \mathbf{B} e

$$\nu = \frac{1}{b_1 - b_2} \left[\frac{1 + (b_1/b_2)}{1 - (b_1/b_2)} + \frac{2}{\ln(b_1/b_2)} \right], \quad (\text{B.11})$$

$$\nu_k = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^3 (-b_i)^{3-k} \left(\frac{1 + \epsilon_i}{1 - \epsilon_i} \frac{2}{\ln \epsilon_i} + \right), \quad k = 1, \dots, 3, \quad (\text{B.12})$$

$$\Delta = (b_1 - b_2)(b_2 - b_3)(b_3 - b_1), \quad (\text{B.13})$$

$$\epsilon_1 = b_2/b_3; \quad \epsilon_2 = b_3/b_1; \quad \epsilon_3 = b_1/b_2. \quad (\text{B.14})$$

B.4 Lei de Comportamento Hipoelástica

Relembrando que, em pequenas deformações, é válida a seguinte expressão para deformações termohipoelásticas:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^e : \boldsymbol{\epsilon}^e, \quad (\text{B.15})$$

onde $\mathbf{C}^e = \mathbf{C}^e(T)$ é o tensor das constantes elásticas, dependente da temperatura T . Derivando em ordem ao tempo, teremos

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e(T) : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^e + \frac{\partial}{\partial t} [\mathbf{C}^e(T)] : \boldsymbol{\epsilon}^e. \quad (\text{B.16})$$

$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^e = \mathbf{D}^e$ é o tensor velocidade de deformação. Para processos não-isotérmicos, a expressão (B.16) toma a seguinte forma:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e(T) : \mathbf{D}^e + \dot{T} \frac{\partial}{\partial T} [\mathbf{C}^e(T)] : \boldsymbol{\epsilon}^e, \quad (\text{B.17})$$

onde $\dot{T} = \partial T / \partial t$. Para a generalidade dos materiais metálicos, o segundo termo da expressão (B.17) é muito menor que o primeiro e pode ser desprezado sem perda de consistência do modelo [Doltsinis 04]. A ordem de grandeza das propriedades que compõem a matriz \mathbf{C}^e como, por exemplo, o módulo de elasticidade, é muito superior à ordem de grandeza das suas variações com a temperatura. Desse modo, a expressão anterior, válida em pequenas deformações, pode ser escrita como

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e. \quad (\text{B.18})$$

B.5 Cálculo da Relação Constitutiva para \mathbf{D}^{VP}

A lei de comportamento viscoplástica pode ser dada por um potencial viscoplástico Ω ,

$$\mathbf{D}^{\text{VP}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad (\text{B.19})$$

em que $\Omega = \Omega(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\sigma}, s, T)$. Então,

$$\mathbf{D}^{\text{VP}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad (\text{B.20})$$

onde $\bar{\sigma}$ é a tensão equivalente de von Mises dada por,

$$\bar{\sigma} = \left[\frac{3}{2} (\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}') \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{com} \quad \boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1}. \quad (\text{B.21})$$

O termo $\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$ da equação B.20 pode ser manipulado algebricamente na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left\{ \left[\frac{3}{2} (\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}') \right]^{\frac{1}{2}} \right\} = \\ &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left\{ \left[\frac{3}{2} \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \right) : \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} = \\ &= \left[\frac{3}{2} \cdot 2 \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \right) \right] \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{3}{2} \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \right) : \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} = \\ &= \frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}' \left(\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' \right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}'}{\bar{\sigma}}, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

que, substituindo na equação (B.20), teremos

$$\mathbf{D}^{\text{VP}} = \frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}'}{\bar{\sigma}} \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}}. \quad (\text{B.23})$$

Pela fórmula de von Mises para a deformação é possível relacionar $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{P}}$ com \mathbf{D}^{VP} , isto é,

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{P}} = \left[\frac{2}{3} (\mathbf{D}^{\text{VP}} : \mathbf{D}^{\text{VP}}) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{B.24})$$

Substituindo (B.23) em (B.24) teremos:

$$\begin{aligned}
 \dot{\bar{\epsilon}}^p &= \left\{ \frac{2}{3} \left[\left(\frac{3 \boldsymbol{\sigma}'}{2 \bar{\sigma}} \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} \right) : \left(\frac{3 \boldsymbol{\sigma}'}{2 \bar{\sigma}} \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} \right) \right] \right\}^{\frac{1}{2}} = \\
 &= \left\{ \frac{2}{3} \left[\left(\frac{1}{\bar{\sigma}} \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} \right)^2 \cdot \left(\frac{3}{2} \right)^2 \cdot (\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}') \right] \right\}^{\frac{1}{2}} = \quad (\text{B.25}) \\
 &= \left\{ \frac{2}{3} \frac{1^2}{\bar{\sigma}} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} \right)^2 \cdot \frac{3}{2} \cdot \bar{\sigma}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}}.
 \end{aligned}$$

Deste modo, substituindo (B.25) em (B.23), obtém-se a relação constitutiva para a velocidade de deformação viscoplástica, isto é,

$$\mathbf{D}^{vp} = \dot{\bar{\epsilon}}^p \left(\frac{3 \boldsymbol{\sigma}'}{2 \bar{\sigma}} \right). \quad (\text{B.26})$$

Apêndice C

Considerações Sobre a Termodinâmica da Plasticidade

Neste anexo enunciam-se, de forma sucinta, os princípios básicos que descrevem a termodinâmica da deformação. A partir destas ferramentas, obtém-se a equação que descreve a evolução da temperatura num corpo sujeito a deformação plástica. Esta formulação envolve as equações de equilíbrio mecânico, a primeira e segunda lei da termodinâmica e a lei da conservação de massa. Para mais detalhes sobre o assunto e o seu desenvolvimento histórico, recomenda-se os trabalhos de Nicholson [Nicholson 03], Doltsinis [Doltsinis 04], Rebelo e Kobayashi [Rebelo e Kobayashi 80a] e Vaz Junior [Vaz Jr. 98, Vaz Jr. 00].

C.1 Princípios Básicos

Nesta secção apresentam-se alguns princípios, definições e considerações úteis à modelação termoplástica. Não se pretende fazer uma descrição detalhada de todos os princípios da termodinâmica da plasticidade, mas apenas daqueles relevantes para as secções 6.4) e C.2.

Princípio C.1.1 CONSERVAÇÃO DA MASSA

O princípio da conservação da massa requer que a massa total de um corpo isolado não se altere. Isto é

$$\frac{d}{dt} \int \rho dV = 0, \quad (\text{C.1})$$

onde $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ e t representam a massa específica e o tempo, respectivamente. Sabendo que $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = d\mathbf{x}/dt$ é o campo de velocidades, e após alguma manipulação algébrica, o princípio da conservação da massa pode reescrever-se da seguinte forma:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0 \quad (\text{C.2})$$

Definição C.1.1 EQUAÇÕES DE EQUILÍBRIO

No instante t , um sólido deformável Ω de fronteira Σ é submetido a forças exteriores de superfície ou volúmicas. As equações que definem o equilíbrio escrevem-se da forma seguinte:

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (\text{C.3})$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad \text{em } \Omega, \quad (\text{C.4})$$

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \quad \text{em } \Sigma. \quad (\text{C.5})$$

Na expressão anterior, \mathbf{t} e \mathbf{n} representam as forças na fronteira e a normal exterior à superfície Σ , respectivamente. \mathbf{b} é o vector das forças exteriores volúmicas. As equações de equilíbrio são representadas na sua forma local, tanto para o equilíbrio linear como angular. O equilíbrio angular é definido através da simetria do tensor das tensões (equação (C.4)).

Princípio C.1.2 PRIMEIRO PRINCÍPIO DA TERMODINÂMICA

O primeiro princípio da termodinâmica expressa a conservação de energia. Este princípio, quando aplicado a um corpo sujeito a deformações, pode ser escrito como

$$\rho \frac{du}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \text{div}(\mathbf{q}_k) + q_t \quad (\text{C.6})$$

onde $du/dt = \dot{u}$ é a variação da energia interna específica, \mathbf{D} é o tensor velocidade de deformação e \mathbf{q}_k e q_t são o vector condução de calor por unidade de área e o fluxo de calor por unidade de volume, respectivamente.

Princípio C.1.3 SEGUNDO PRINCÍPIO DA TERMODINÂMICA

O segundo princípio da termodinâmica introduz a entropia específica η como variável de estado termodinâmico para a unidade de massa do material. Este princípio representa o carácter irreversível dos processos de transferência de calor. O princípio, definido em termos da variação da entropia específica, $\dot{\eta} = d\eta/dt$, pode ser dado pela seguinte desigualdade:

$$\rho \dot{\eta} \geq \frac{q_t}{T} - \text{div} \left(\frac{\mathbf{q}_k}{T} \right) \quad (\text{C.7})$$

Definição C.1.2 ENERGIA ESPECÍFICA DE HELMHOLTZ

A energia livre específica $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \mathbf{s}, T)$, ou energia específica livre de Helmholtz, é um potencial termodinâmico associado à energia interna de modo que

$$\psi = u - T\eta. \quad (\text{C.8})$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ é o tensor de deformação elástica e \mathbf{s} representa o conjunto das variáveis internas.

A desigualdade de Clausius-Duhem é baseada no primeiro e segundo princípios da termodinâmica, em conjunto com a definição da energia livre.

Definição C.1.3 DESIGUALDADE DE CLAUSIUS-DUHEM

Combinando as equações (C.6) a (C.8) obtém-se a desigualdade de Clausius-Duhem:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \rho \left(\eta \dot{T} + \dot{\psi} \right) + T \mathbf{q}_k \cdot \text{grad}(T) \geq 0 \quad (\text{C.9})$$

A desigualdade de Clausius-Duhem representa uma restrição aos processos termodinamicamente admissíveis [Rebello e Kobayashi 80a]. As variáveis internas \mathbf{s} podem descrever a estrutura interna do material. Embora estas estejam representadas por uma variável matricial, elas podem ser expressas por uma única variável escalar (ver capítulo do modelo de comportamento mecânico).

C.2 Equação da Evolução da Temperatura

A partir da desigualdade de Clausius-Duhem pode obter-se a dissipação total ϕ definida por:

$$\phi = -\rho(\eta\dot{T} + \dot{\psi}) + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + T\mathbf{q}_k \cdot \text{grad}(T) \geq 0. \quad (\text{C.10})$$

A dissipação total pode ser dividida nas suas componentes intrínseca (ϕ_{intr}) e térmica (ϕ_{term}). A primeira é devida à deformação plástica e a segunda aos efeitos de transmissão de calor. Assim, e de acordo com esta decomposição:

$$\phi_{\text{intr}} = -\rho(\eta\dot{T} + \dot{\psi}) + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}, \quad (\text{C.11})$$

$$\phi_{\text{term}} = T\mathbf{q}_k \cdot \text{grad}(T). \quad (\text{C.12})$$

Combinando ϕ_{intr} com o primeiro princípio da termodinâmica (equação (C.6)) e com a variação da energia livre de Helmholtz $\dot{\psi}$, obtém-se

$$\text{div}(\mathbf{q}_k) + T\rho\dot{\eta} - q_t - \phi_{\text{intr}} = 0, \quad (\text{C.13})$$

que representa a equação da evolução da temperatura. Contudo, a variação da entropia específica, $\dot{\eta}$, e a dissipação intrínseca, ϕ_{intr} , têm de ser determinadas.

A variação da entropia específica, $\dot{\eta}$, pode ser determinada pelas definições associadas à energia específica de Helmholtz (equação (C.8)), isto é,

$$\rho\dot{\eta} = \rho \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial T} \right) = -\rho \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2} \dot{T} - \rho \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} : \mathbf{D}^e - \rho \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \mathbf{s}} : \dot{\mathbf{s}}. \quad (\text{C.14})$$

$\mathbf{D}^e = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e$ é a velocidade de deformação elástica. Sabendo que o calor específico (c), o tensor das tensões ($\boldsymbol{\sigma}$) e a força termodinâmica associada às variáveis internas \mathbf{s} (\mathbf{A}) são dados por

$$c = -T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e}, \quad \mathbf{A} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{s}}, \quad (\text{C.15})$$

é possível simplificar a escrita da expressão (C.14). Consequentemente, e substituindo as relações (C.15) em (C.14), obtém-se

$$\rho\dot{\eta} = \rho \frac{c}{T} \dot{T} - \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial T} : \dot{\mathbf{s}}. \quad (\text{C.16})$$

A substituição da variação da entropia específica (equação C.16) na equação da evolução da temperatura (equação C.13) resulta na expressão seguinte:

$$\rho c \dot{T} - \phi_{\text{intr}} - T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial T} : \dot{\mathbf{s}} \right) - q_t + \text{div}(\mathbf{q}_k) = 0. \quad (\text{C.17})$$

A dissipação intrínseca, ϕ_{intr} , pode ser obtida recorrendo à definição (C.11) em conjunto com a definição da energia específica de Helmholtz (equação (C.8)) e com as expressões (C.15). A derivada temporal de $\psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \mathbf{s}, T)$ é dada por

$$\rho\dot{\psi} = \rho \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \mathbf{s}, T) = \underbrace{\rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e}}_{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{D}^e + \underbrace{\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{s}}}_{\mathbf{A}} : \dot{\mathbf{s}} + \underbrace{\rho \frac{\partial \psi}{\partial T}}_{-\rho\eta} \dot{T}, \quad (\text{C.18})$$

onde as parcelas do segundo membro podem ser identificadas facilmente com as definições do tensor das tensões, $\boldsymbol{\sigma}$, das forças termodinâmicas conjugadas às variáveis internas, \mathbf{A} e da entropia, $\rho\eta$. Substituindo a expressão (C.18) na definição da dissipação intrínseca (equação (C.11)), e recordando que o tensor velocidade de deformação pode ser decomposto nas suas partes elástica e plástica, $\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p$, então

$$\begin{aligned}\phi_{\text{intr}} &= -\rho\eta\dot{T} - \rho\dot{\psi} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \\ &= -\rho\eta\dot{T} - \left[\boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) + \mathbf{A} : \dot{\mathbf{s}} - \rho\eta\dot{T} \right] + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \\ &= \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p - \mathbf{A} : \dot{\mathbf{s}}.\end{aligned}\quad (\text{C.19})$$

Finalmente, a equação da evolução da temperatura é obtida pela combinação das equações (C.17) e (C.19), dando origem a

$$\rho c \dot{T} - \left[\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p - \mathbf{A} : \dot{\mathbf{s}} + T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial T} \cdot \dot{\mathbf{s}} \right) \right] - q_t + \text{div}(\mathbf{q}_k) = 0. \quad (\text{C.20})$$

A parcela

$$q_i = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p - \mathbf{A} : \dot{\mathbf{s}} + T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial T} \cdot \dot{\mathbf{s}} \right) \quad (\text{C.21})$$

representa a geração de calor por deformação plástica. Os termos interdependentes às variáveis internas da equação (C.20) devem ser definidos de acordo com o problema e modelo de comportamento mecânico utilizado. A formulação baseada em variáveis internas traz uma grande complexidade, não somente pela escolha das variáveis, mas também devido às dependências de outros parâmetros envolvidos no problema. Por simplificação pode assumir-se que $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T)$ e, deste modo, simplificar a equação (C.20) para

$$\rho c \dot{T} - \left(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p + T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e \right) - q_t + \text{div}(\mathbf{q}_k) = 0. \quad (\text{C.22})$$

onde

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^p + T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial T} : \mathbf{D}^e = q_i \quad (\text{C.23})$$

O termo da variação da tensão com a temperatura, termo termoelástico, requer uma modelação complexa particular. Por este facto, várias têm sido as tentativas de modelação nas últimas décadas. Algumas das quais encontram-se descritas na secção 6.4.

Apêndice D

Violação da Realidade Física — Exemplo

Considere-se uma vara isolada, esquematicamente representada na figura D.1. Esta vara é modelada por 2 elementos barra. No exemplo apresentado, a vara tem 4 cm de comprimento e $\rho c = \lambda = 12 \text{ Jcm}^{-3}\text{C}^{-1}$. A condutividade térmica do material é de $4 \text{ W/cm}^\circ\text{C}$. Este

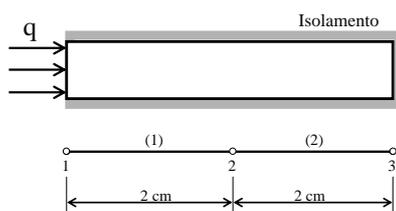


Figura D.1: Representação esquemática de uma vareta cilíndrica fina isolada. Modelação em elementos finitos unidimensionais.

problema será resolvido pelo método de Cranck-Nicholson (ou das diferenças centrais), com $\Lambda = 0.5$, sem diagonalização da matriz \mathbf{C} e com um incremento de tempo $\Delta t = 1 \text{ s}$. Este incremento de tempo é suficientemente pequeno para evitar oscilações numéricas da solução. Considera-se que a temperatura inicial da vara é zero. Um fluxo de calor, $q = 5 \text{ W}$, é aplicado numa extremidade da vara (ver figura D.1).

As matrizes elementares são

$$\mathbf{C}^{(e)} = \frac{\lambda L}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{k}^{(e)} = \frac{k}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

Consequentemente, as matrizes globais resultam

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 8 & 4 & 0 \\ 4 & 16 & 4 \\ 0 & 4 & 8 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{F} = \begin{Bmatrix} 5 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (\text{D.2})$$

\mathbf{F} é constituído unicamente pelo fluxo de calor imposto no primeiro nó. Construindo o

sistema dado pela equação (8.25) com $\Lambda = 1/2$ resulta:

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 & 0 \\ 3 & 18 & 3 \\ 0 & 3 & 9 \end{bmatrix} \mathbf{T}_{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} 7 & 5 & 0 \\ 5 & 14 & 5 \\ 0 & 5 & 7 \end{bmatrix} \mathbf{T}_t + \begin{Bmatrix} 5 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (\text{D.3})$$

que apresenta a forma geral dada em (8.46), ou seja, $\mathbf{K}^* \mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{Q}^* \mathbf{T}_t + \mathbf{F}^*$. Uma vez que $\mathbf{T}_t = \mathbf{T}_0 = \mathbf{0}$, o sistema resume-se a $\mathbf{T}_{t+\Delta t} = (\mathbf{K}^*)^{-1} \mathbf{F}^*$, com

$$(\mathbf{K}^*)^{-1} = \begin{bmatrix} 0.1180 & -0.0208 & 0.0069 \\ -0.0208 & 0.0625 & -0.0208 \\ 0.0069 & -0.0208 & 0.1180 \end{bmatrix}. \quad (\text{D.4})$$

O vector de temperaturas é, então,

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t} = (\mathbf{K}^*)^{-1} \mathbf{F}^* = \begin{Bmatrix} 0.5900 \\ -0.1040 \\ 0.0347 \end{Bmatrix}. \quad (\text{D.5})$$

Estes resultados (ver figura D.2) violam a realidade física, uma vez que se espera que a temperatura em todos os nós cresça com a adição de um fluxo de calor na extremidade da vara. Este tipo de resultados ocorre frequentemente quando é utilizada uma formulação consistente, sem diagonalização da matriz capacitância, para este tipo de integração temporal.

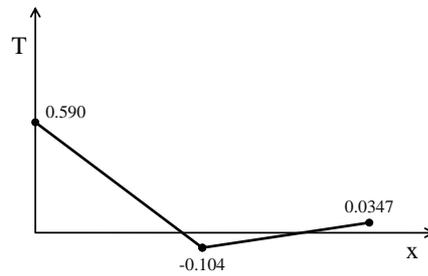


Figura D.2: Resultados finais, após o incremento de 1 s, do campo de temperaturas da vareta isolada.

Bibliografia

- [Alcan 04] Alcan Inc. Catálogo de produtos: The Alcan home page (<http://www.alcan.com/web/publishing.nsf/content/home>), 2004.
- [Alcoa 04] Alcoa. Advanced mettalic components, assemblies and services - Alcoa product Catalog, (<http://www.alcoa.com/aerospace/en/products/overview.asp>), 2004.
- [Aluplanet.com] Aluplanet.com - The portal of aluminium planet, Metef, The world aluminium exhibition e Edimet publishing company (<http://www.aluplanet.com/>), 2004.
- [Aluselect database] European Aluminium Association. European Aluminium Association – Aluselect database.
- [Alves e Menezes 02] J. Alves e L.F. Menezes. Resolução de sistemas lineares esparsos em simulação 3D do processo de conformação de chapa. Estudo da influência da numeração da malha, do condicionador e do método iterativo, *Actas do V Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, J.M. Goicolea, C. Mota Soares, M. Pastor e G. Bugada (Eds.), Madrid, España, p. 95, 2003.
- [Alves 03] J.L.M. Alves. *Simulação Numérica do Processo de Estampagem de Chapas Metálicas — Modelação Mecânica e Métodos Numéricos*, Tese de Doutoramento, Universidade do Minho, 2003.
- [Alves 04] M.L.S. Alves. *Modelação Numérica e Análise Experimental de Operações de Forjamento*, Tese de Doutoramento, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 2004.
- [Anand *et al.* 85] L. Anand, A. Lush, M.F. Briceno e D.M. Parks. *A Time-integration Procedure for a Set of Internal Variable Type Elasto-Viscoplastic Constitutive equations*, Relatório de investigação, Dept. Mechanical Engineering, MIT - Massachusetts Institute of Technology, 1985.
- [Anand 85] L. Anand. Constitutive equations for hot-working of metals, *International Journal of Plasticity*, **1**, pp. 213–231, 1985.
- [Anand 91] L. Anand. Elasto-viscoplasticity: constitutive modeling and deformation processing, *Actas da International Seminar MECAMAT'91*, Teodosiu, Raphanel e Sidoroff (Eds.), Fontainebleau, França, pp. 3–17, 1991.

- [Andrade-Campos *et al.* 03] A. Andrade-Campos, L.F. Menezes e F. Teixeira-Dias. On the numerical analysis of rate-dependent large deformation processes at elevated temperatures, Actas da *Computational Plasticity VII, Fundamentals and Applications*, D.R.J. Owen, E. Oñate e B. Suárez (Eds.), CIMNE, Barcelona, p. 189, 2003.
- [Andrade-Campos *et al.* 03b] A. Andrade-Campos, L.F. Menezes e F. Teixeira-Dias. Large deformation processes on AA1050-O aluminium at elevated temperatures. Actas da *II IMS — Materiais 2003 — II Materials Symposium*, FCT/UNL, Caparica, Portugal, p. 251, 2003.
- [Andrade-Campos *et al.* 04] A. Andrade-Campos, L.F. Menezes e F. Teixeira-Dias. Large deformation processes on AA1050-O aluminium at elevated temperatures, *Materials Science Forum – Advanced Materials Forum II*, **455–456**, pp. 723–727, 2004.
- [Andrade-Campos *et al.* 04a] A. Andrade-Campos, S. Thuillier, P. Pilvin e F. Teixeira-Dias. On the estimation of material parameters for internal variable thermoelastic-viscoplastic constitutive models: gradient-based and GA optimization algorithms, Actas da *Computational mechanics, WCCM VI in conjunction with APCOM'04, Beijing, China*, Z.H. Yao, M.W. Yuan e W.X. Zhong (Eds.), Vol. 2, Tsinghua University Press & Springer-Verlag, p. 435, 2004.
- [Andrade-Campos *et al.* 04b] A. Andrade-Campos e F. Teixeira-Dias. O efeito do reforço de fibras no campo térmico de materiais compósitos, Actas do *Congresso de Métodos Computacionais em Engenharia*, C.A. Mota Soares, A.L. Batista, G. Bugada, M. Casteleiro, J.M. Goicolea, J.A.C. Martins C.A.B. Pina e H.C. Rodrigues (Eds.), APMTAC, Lisboa, Portugal, p. 281, 2004.
- [Argon 75] A. Argon. Physical basis of constitutive equations for inelastic deformation, *Constitutive Equations in Plasticity*, MIT Press, USA, pp. 1–22, 1975.
- [Argyris e Doltsinis 81] J.H. Argyris e J.St. Doltsinis. On the natural formulation and analysis of large deformation coupled thermomechanical problems, *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, **25**, pp. 195–253, 1981.
- [Argyris *et al.* 82] J.H. Argyris, J.St. Doltsinis, P.M. Pimenta e H. Wustenberg. Thermo-mechanical response of solids at high strains - natural approach, *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, **32**, pp. 3–57, 1982.
- [Balasubramanian e Anand 02] S. Balasubramanian e L. Anand. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **50**, pp. 101–126, 2002.
- [Baque *et al.* 67] P. Baque, E. Felder, J. Hyafil e Y. Descatha. *Mise en Forme des Métaux - Calcul par la Plasticité*, Vol. 1 e 2, DUNOD, Paris, 1967.
- [Barlat *et al.* 97] F. Barlat, Y. Maeda, K. Chung, M. Yanagawa, J.C. Bren, Y. Hayashida, D.J. Lege, K. Matsui, S.J. Murtha, S. Hattori, R.C. Becker e S. Makosey. Yielding function development for aluminium alloy sheets, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**, pp. 1727–1763, 1997.

- [Bathe 96] K.J. Bathe. *Finite Element Procedures*, Prentice-Hall International, Inc., 1996.
- [Bay 97] N. Bay. Cold forming of aluminium — State of the art, *Journal of Materials Processing Technology*, **71**, pp. 76–90, 1997.
- [Belov *et al.* 02] N.A. Belov, D.G. Eskin e A.A. Aksenov. *Iron in Aluminium Alloys: Impurity and Alloying Element — Advances in Metallic Alloys*, Taylor & Francis, Londres, 2002.
- [Belytschko *et al.* 00] T. Belytschko, W.k. Liu e B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*, John Wiley & Sons, West Sussex, England, 2000.
- [Boër *et al.* 86] C.R. Boër, N. Rebelo, H. Rydstad e G. Schröder. *Process Modeling of Metal Forming and Thermomechanical Treatment*, Springer-Verlag, Heidelberg, Alemanha, 1986.
- [Brierley 98] P.D. Brierley. *Some Practical Applications of Neural Networks in the Electricity Industry*, Tese de Doutorado, Cranfield University, UK, 1998.
- [Brown 87] S.B. Brown. *An Internal Variable Constitutive Model for the Hot Working of Metals*, Tese de Doutorado, MIT - Massachusetts Institute of Technology, 1987.
- [Brown *et al.* 89] S.B. Brown, H.K. Kwon e L. Anand, An internal variable constitutive model for hot working of metals, *International Journal of Plasticity*, **5**, pp. 95–130, 1989.
- [Cailletaud e Pilvin 93] G. Cailletaud e P. Pilvin. Identification and inverse problems: a modular approach, *Material parameter estimation for modern constitutive equations*, L.A. Bertran, S.B. Brown e A.D. Freed (Eds.), Md-vol. **43**, pp. 33–45, ASME, 1993.
- [Cailletaud e Pilvin 94] G. Cailletaud e P. Pilvin. Identification and inverse problems related to material behaviour, *International Seminar on Inverse Problems*, Clamart, pp. 79–86, 1994.
- [Cao 90] H.L. Cao. *Modélisation Mécanique et Simulation Numérique de l'Emboutissage*, Tese de Doutorado, INPG-Grenoble, 1990.
- [Carroll 00] W.F. Carroll. *Finite Elements in Elastic Structures*, John Wiley and Sons, Inc., 2000.
- [Cazaku e Barlat 01] O. Cazacu e F. Barlat. Generalization of Drucker's yield criterion to orthotropy, *Mathematics and Mechanics of Solid*, **6**, pp. 613–630, 2001.
- [Casey 98] J. Casey. On the elastic-thermo-plastic materials at finite deformations, *International Journal of Plasticity*, **14**, pp. 173–191, 1998.
- [Castro e Timmis 02] L. Castro e J. Timmis. *Artificial Immune Systems: A New Computational Approach*, Springer-Verlag, New York, Inc., 2002.
- [Cervera *et al.* 93] M. Cervera, R. Codina e M. Galindo. *On the Computational Efficiency and Implementation of the Block-Iterative Algorithms for Nonlinear Coupled Problems*, Publicação CIMNE, **43**, 1993.

- [Cervera *et al.* 96] M. Cervera, R. Codina e M. Galindo. On the computational efficiency and implementation of the block-iterative algorithms for nonlinear coupled problems, *Engineering Computation*, **13** (6), pp. 4–30, 1996.
- [Coello 02] C.A. Coello Coello. Theoretical and numerical constraint-handling techniques used with evolutionary algorithms: a survey of the state of the art, *Computer Methods in Applied Mechanical and Engineering*, **191**, pp. 1245–1287, 2002.
- [Costa *et al.* 99] L.A. Costa, P. Oliveira, I.N. Figueiredo, L.F. Roseiro e R. Leal. Compliance minimization of a composite laminated plate by genetic algorithms, Actas da *European Conference on Computational Mechanics*, W. Wunderlich (Eds.), Munich, pp. 16, 1999.
- [Daaland e Nes 96] O. Daaland e E. Nes. Recrystallization texture development in commercial Al-Mn-Mg alloys, *Acta Metallurgica*, **44** (4), p. 1413–1435, 1996.
- [Dafalias 83] Y.F. Dafalias. Corotational rates for kinematic hardening at large plastic deformations, *Journal of Applied Mechanics*, **50**, pp. 561–565, 1983.
- [Dhatt e Touzout 84] G. Dhatt e G. Touzout. *The Finite Element Method Displayed*, John Wiley and Sons, 1984.
- [Dashner 86] P.A. Dashner. Invariance considerations in large strain elasto-plasticity, *Journal of Applied Mechanics*, **53**, p. 55, 1986.
- [Desbordes *et al.* 86] O. Desbordes, M. El Mouatassim e G. Touzot. *Local Numerical Integration of Large Strain Elasto-Plastic Constitutive Laws*, Relatório GRECO 193/1986, 1986.
- [Dogui e Sidoroff 84] A. Dogui e F. Sidoroff. Rheologie anisotrope en grandes déformations, Actas da *Colloque du Groupe Français de Rheologie*, Paris, 1984.
- [Dogui 87] A. Dogui. *Cinématique Bidimensionnelle en grandes Déformations - Application à la Traction hors Axes et à la Torsion*, Relatório GRECO – Grandes Déformations et endommagement, École Centrale de Lyon, 1987.
- [Doltsinis 04] I. Doltsinis. *Large Deformation Processes of Solids - From Fundamentals to Numerical Simulation and Engineering Applications*, WIT Press, 2004.
- [Dwight 98] J. Dwight. *Aluminium Design and Construction*, E & FN SPON 1998.
- [EAA 03] European Aluminium Association, *EAA - home of the European Aluminium Association* (<http://www.aluminium.org>), 2003.
- [EAA Automotive] European Aluminium Association. *Aluminium in the automotive industry - Brochure*, (<http://aluminium.org/downloads/auto.pdf>), 1996.
- [EAA Auto Manual] European Aluminium Association. *Aluminium Automotive Manual (AAM) — A guide to advance car design* (<http://www.eaa.net/home.jsd?content=aam/index.htm>), 2003.

- [Esparragoza *et al.* 03] I.E. Esparragoza, A.H. Aziz e A.S. Damle. Temperature distribution along a fiber embedded in a matrix under steady-state conditions, *Composites: Part B*, **34**, pp. 429–436, 2003.
- [Espírito Santo 01] I. Espírito Santo. *Modelação e Estimação de Parâmetros*, Provas de Aptidão Pedagógica e Capacidade Científica, Universidade do Minho, 2001.
- [Fenner 87] D.N. Fenner. *Engineering Stress Analysis*, John Wiley and Sons, Inc., 1987.
- [Fernandes 85] J. Valdemar Fernandes, *Estampagem de Chapas de Aço Macio: Estudo da Evolução da Microestrutura de Deslocações Durante a Deformação Plástica*, Tese de Doutoramento em Ciências de Engenharia - Tecnologia da Produção, Universidade de Coimbra, 1985.
- [Filippa e Parks 00] C.A. Filippa e K.C. Parks. Staggered transient analysis procedures for coupled mechanical systems: formulation, *Computer Methods in Mechanical and Engineering*, **34**, pp. 61–111, 1980.
- [Filippa 00] C.A. Filippa. *A Systematic Approach to the Element-Independent Corotational Dynamics of Finite Elements*, Relatório CU-CAS-00-03 Dept. of Aerospace Eng. Sciences and Center for Aerospace Structures, University of Colorado, USA, 2000.
- [Fragakis e Papadrakakis 02] Y. Fragakis e M. Papadrakakis. A family of new FETI methods for structural mechanics, Actas do *V World Congress of Computational Mechanics*, 7-12 Julho, Vienne, Austria, H.A. Mang, F.G. Rammerstorfer, J. Eberhardsteiner (Eds.), Vienna University of Technology Press, Austria, 2002.
- [François *et al.* 98] D. François, A. Pineau e A. Zoui. *Mechanical Behaviour of Materials — Volume I: Elasticity and Plasticity*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda, 1998.
- [François *et al.* 98b] D. François, A. Pineau e A. Zoui. *Mechanical Behaviour of Materials — Volume II: Viscoplasticity, Damage, Fracture and Contact*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda, 1998.
- [Furukawa e Yagawa 97] T. Furukawa e G. Yagawa. Inelastic constitutive parameter identification using an evolutionary algorithm with continuous individuals, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **40**, pp. 1071–1090, 1997.
- [Furukawa e Yagawa 98] T. Furukawa e G. Yagawa. Implicit constitutive modelling for viscoplasticity using neural networks, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **43**, pp. 195–219, 1998.
- [Furukawa 01] T. Furukawa. Parameter identification with weightless regularization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **52**, pp. 219–238, 2001.
- [Grefenstette 84] J. Grefenstette. GENESIS: a system for using genetic search procedures, Actas da *Conference of Intelligent Systems and Machines*, pp. 161–165, 1984.

- [Gullerud *et al.* 02] A. Gullerud, k. Koppenhoefer, A. Roy, S. Chowdhury, M. Walters, e R.H. Dodds Jr. *WARP3D - 3D Dynamic Nonlinear Fracture Analysis of Solids Using Parallel Computers and Workstations*, Relatório de investigação – Project Sponsored by the U.S. Nuclear Regulatory Commission and The NASA Ames Research Center, Civil Department of the University of Illinois, 2002.
- [Habracken 00] A. Habracken. *Contributions to Constitutive Laws of Metals: Micro-Macro and Damage Models*, Tese de Agregação, Université de Liège, 2000.
- [Haddadi 96] H. Haddadi. *Matériaux Composites à Matrice Métallique: Modélisation du Comportement Thermoélastiqueviscoplastique et Résolution de Problèmes aux Limites 3D par la Méthode des Éléments Finis*, Tese de Doutorado, Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux, Université Paris-Nord, 1996.
- [Harvey 82] P.D. Harvey. *Engineering Properties of Steels*, American Society for Metals, Metals Park, OH, 1982.
- [Hatch 84] J.E. Hatch. *Aluminum: Properties and Physical Metallurgy*, American Society for Metals, 1984.
- [Holman 81] J.P. Holman. *Heat Transfer*, International Student Edition, McGraw-Hill, Inc, 5ª edição, 1981.
- [Hughes 80] T.J.R. Hughes. Generalization of selective integration procedures to anisotropic and non-linear media, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **15**, pp. 1413–1418, 1980.
- [Hughes 87] T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Analysis*, Prentice-Hall, Inc., 1987.
- [Hughes e Winget 80] T.J. Hughes e J. Winget. Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **15**, pp. 1862–1867, 1980.
- [IAI 04] International Aluminium Institute, *World-Aluminium.org, home of the International Aluminium Institute*, (<http://www.world-aluminium.org>), 2004.
- [IAI-Stat 04] International Aluminium Institute. *Form 150 - Primary Aluminium Production - Statistical Report*, International Aluminium Institute, IAI Publications, 2004.
- [Incropera e DeWitt 80] F.P. Incropera e D.P. DeWitt. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 4ªEd., John Wiley & Sons, Toronto, Canada, 1996.
- [Johnson e Bauman 84] Johnson e Bauman. A discussion of stress rates in finite deformation rates in finite deformation problems, *International Journal for Solids and Structures*, **20**, pp. 725–737, 1984.
- [Ju *et al.* 87] J.W. Ju, J.C. Simo, K.S. Pister e R.L. Taylor. A parameter estimation algorithm for inelastic material models, Actas da *International Conference on Constitutive Laws for Engineering Materials - Theory and Applications*, Tucson, Arizona, pp. 1233–1239, 1987.

- [Kammer *et al.* 95] V.C. Kammer, M. Kaufeld e C. Bauer. *Aluminium-Taschenbuch*, vol.I, II e III, Weiterverarbeitung, Aluminium-Zentrale Düsseldorf, Verlag / Hersteller, 1995.
- [Kamlah e Haupt 97] M. Kamlah e P. Haupt. On the macroscopic description of stored energy and self heating during plastic deformation, *International Journal of Plasticity*, **13**, pp. 893–911, 1997.
- [King 87] F. King. *Aluminium and its Alloys — Series in Metals and Associated Materials*, Prentice Hall, 1987.
- [Knocks 75] U.F. Knocks. Recovery glide theory of creep, Actas da *ASM symposium - Rate Processes in Plastic Deformation of Materials*, J.C.M. Li (Ed.), pp. 356–383, 1975.
- [Koráb *et al.* 02] J. Koráb, P. Stefánik, S. Kavecky, P. Sebo e G. Korb. Thermal conductivity of unidirectional copper matrix carbon fibre composites, *Composites: Part A*, **33**, pp. 577–581, 2002.
- [Ladreyt 92] T. Ladreyt. *Modélisation Bidimensionnelle et Simulation Numérique des Processus de Mise en Forme des Tôles dans l'Industrie Automobile*, Tese de Doutorado, INP-Grenoble, 1992.
- [Leal e Ramos 02] R. Leal e U. Ramos. Algoritmos genéticos na optimização de compósitos laminados, Actas do *V Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, J.M. Goicolea, C. Mota Soares, M. Pastor, G. Bugeda (Eds.), SEMNI, Madrid, Spain, p. 381, 2002.
- [Lee 69] E.H. Lee. Elastic-plastic deformations at finite strains, *Journal of Applied Mechanics*, **36**, 1969.
- [Liu e Kang 97] Y.L. Liu e S.B. Kang. The solidification process of Al-Mg-Si alloys, *Journal of Materials Science*, **32**, pp. 1443–1447, 1997.
- [Löhner 03] R. Löhner. Moore's law and the diminishing importance of parallel computing, *Expressions of the IACM*, **13**, pp. 6–8, 2003.
- [Lopes *et al.* 03] A.B. Lopes, F. Barlat, J.J. Gracio, J.F. Ferreira Duarte e E.F. Rauch. Effect of texture and microstructure on strain hardening for aluminum deformed in uniaxial tension and simple shear. *International Journal of Plasticity*, **19**, pp. 1–22, 2003.
- [Lush e Anand 86] A. Lush e L. Anand. Implicit time-integration procedures for a set of internal variable constitutive equations for hot-working, Actas da *NUMIFORM'86*, Gothenburg, pp. 131–137, 1986.
- [Lush *et al.* 89] A.M. Lush, G. Weber e L. Anand. An implicit time-integration procedure for a set of internal variable constitutive equations for isotropic elasto-viscoplasticity, *International Journal of Plasticity*, **5**, pp. 521–549, 1989.
- [Malkus e Hughes 78] D.S. Malkus and T.J.R. Hughes. Mixed finite element methods - reduced and selective integration techniques: a unification of concepts, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **15**, pp. 63–81, 1978.

- [Marquardt 63] D.W. Marquardt. An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, **11**, pp. 431–441, 1963.
- [MatWeb] MatWeb — Material Property Data, materials database (<http://www.matweb.com>), Automation Creations, Inc., 2004.
- [Menezes *et al.* 91] L.F. Menezes, C. Teodosiu e A. Manouchi. 3-D solid elasto-plastic elements for simulationg sheet metal forming processes by the finite element method, *FE-simulation of 3-D sheet metal forming processes in automotive industry*, VDI Berichte Nr. **894**, pp. 381–403, 1991.
- [Menezes 94] L.F. Menezes. *Modelação Tridimensional e Simulação Numérica dos Processos de Enformação por Deformação Plástica*, Tese de Doutorado, Universidade de Coimbra, 1994.
- [Miau e Laughlin 99] W.F. Miau e D.E. Laughlin. Precipitation hardening in aluminum alloy 6022, *Scripta Materialia*, **40** (7), pp. 873–978, 1999.
- [Miller 76] A.K. Miller. An inelastic constitutive model for monotonic, cyclic, and creep deformation: part I - equations, development, and analytical procedures, and part II - application to type 304 stainless steel. *Journal of Engineering Materials and Technology*, **98** (2), pp. 97–113, 1976.
- [Miller e Sherby 78] A.K. Miller e O.D. Sherby. A simplified phenomenological model for non-elastic deformation: prediction of pure aluminum behavior and incorporation of solute strengthening effects, *Acta Metallurgica*, **26**, pp. 289–304, 1978.
- [Miller *et al.* 00] W.S. Miller, L. Zhuang, J. Bottema, A.J. Wittebrood, P. De Smet, A. Haszler e A. Vierregge. Recent development in aluminium alloys for the automotive industry, *Materials Science and Engineering A*, **280**, pp. 37–49, 2000.
- [Mitra e McLean 67] S.K. Mitra e D. McLean. Work hardening and recovery in creep, *Journal of Metallurgical Science*, **1**, p. 168, 1967.
- [Mitsutsuka e Fukuda 79] M. Mitsutsuka e K. Fukuda. Boiling phenomena and effects of water temperature on heat transfer in the process of immersion cooling of a heated steel plate, *Transactions ISIJ*, **19**, pp. 162–169, 1979.
- [Mondolfo 76] L.F. Mondolfo. *Aluminium Alloys: Structure and Properties*, Butterworths, Londres, 1976.
- [Murayama e Hono 99] M. Murayama e K. Hono. Pre-precipitate clusters and precipitation processes in Al-Mg-Si alloys, *Acta Metallurgica*, **47**(5), pp. 1537–1548, 1999.
- [Myers 71] G.E. Myers. *Analytical Methods in Conduction Heat Transfer*, McGraw-Hill, New-York, 1971.
- [Nagtegaal *et al.* 74] J.C. Nagtegaal, D.M. Parks e J.R. Rice. On numerically accurate finite element solutions in the fully plastic range, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **4**, pp. 153, 1974.

- [Nakamura *et al.* 86] T. Nakamura, C. Shih e L. Freund. Analysis of dynamically loaded SE(B) ductile fracture specimen, *Engineering Fracture Mechanics*, **25**, pp. 323–339, 1986.
- [Nicholson 03] D.W. Nicholson. *Finite Element Analysis - Thermomechanics of Solids*, 1ª Edição, CRC Press, 2003.
- [Nix *et al.* 85] W.D.Nix, J.C.Gibeling e D.A. Hughes. Time dependent deformation of metals, *Metallurgical Transactions A*, **16A**, pp. 2215–2226, 1985.
- [Oliveira e Menezes 04] M.C. Oliveira e L.F. Menezes. Automatic correction of the time step in implicit simulations of the stamping process, *Finite Elements in Analysis and Design*, **40** (13–14), pp. 1995–2010, 2004.
- [Oñate 95] E. Oñate. *Cálculo de Estructuras por el Método de Elementos Finitos - Análisis Estático Lineal*, Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, Barcelona, España.
- [Ortiz 87] M. Ortiz. Some computational aspects of finite deformation plasticity, *Actas da 2nd. Int. Conf. on Computational Plasticity*, D.R.J. Owen, E. Hinton and E. Onate (Eds.), Barcelona, p. 1717, 1987.
- [Ozisik 80] M.N. Ozisik. *Heat Conduction*, John Wiley & Sons, New York, 1980.
- [Patankar 80] S.V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere/McGraw-Hill, Washington DC, 1980.
- [Perzyna 93] P. Perzyna. Constitutive equations for thermoelasticity and instability phenomena in thermodynamics flow processes. *Progress in Computational Analysis of Inelastic Structures – Courses and Lectures*, Vol.1, **321** (1), pp. 1–78. Springer-Verlag, 1993.
- [Pfleiderer e Petermann 79] C. Pfleiderer e H. Petermann, *Máquinas de Fluxo*, Livros Técnicos SA, 1979.
- [Pilvin 90] P. Pilvin. *Approches Multiéchelles pour la Prédiction du Comportement Anélastique des Métaux*, Tese de Doutoramento, Laboratoire de Mécanique et Technologie, ENS Cachan/CNRS/Université Paris 6, 1990.
- [Pilvin 99] P. Pilvin. *Identification de Modèles Non Linéaires*, DEA Mécanique et Matériaux, École Centrale Paris, 1999.
- [Pina 95] H. Pina. *Métodos Numéricos*, McGraw-Hill, Lisboa, 1995.
- [Pinho-da-Cruz e Teixeira-Dias 05] J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. On the optimisation of viscoplastic constitutive modelling using a numerical feedback damping algorithm, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**, pp. 2191–2210, 2005.

- [Pinho-da-Cruz *et al.* 05] J. Pinho-da-Cruz, J.A. Oliveira, A. Andrade-Campos e F. Teixeira-Dias. Cálculo estrutural elástico de materiais compósitos de AlSi_p recorrendo a técnicas de paralelização e homogeneização assintótica, *Actas do Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, 4–7 de Julho, Granada, Espanha, aceite para publicação, 2005.
- [Pinsky *et al.* 83] P.M. Pinsky, M. Ortiz e K.S. Pister. Numerical integration of rate constitutive equations in finite deformation analysis, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **12**, pp. 353–364, 1983.
- [Polak 97] Elijah Polak. *Optimization - Algorithms and Consistent Approximations*, Springer-Verlag, New-York Inc., 1997.
- [Ponthot 02] J.P. Ponthot. Unified stress update algorithms for the numerical simulation of large deformation elasto-plastic and elasto-viscoplastic processes. *International Journal of Plasticity*, **18**, pp. 91–126, 2002.
- [Prat e Gens 02] P. Prat e A. Gens. *Leyes de Comportamiento de Materiales, Apuntes do Curso de Máster en Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, Universitat Politècnica de Catalunya, 2002.
- [Press *et al.* 92] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling e B. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, 1992.
- [Prinz e Argon 84] F.B. Prinz e A.S. Argon. The evolution of plastic resistance in large strain plastic flow of single phase subgrain forming metals, *Acta Metallurgica*, **32** (7), pp. 1021–1028, 1984.
- [Rebello e Kobayashi 80a] N. Rebello e S. Kobayashi. A coupled analysis of viscoplastic deformation and heat transfer - I. Theoretical considerations, *International Journal of Mechanical Science*, **22**, pp. 699–706, 1980.
- [Rebello e Kobayashi 80b] N. Rebello e S. Kobayashi. A coupled analysis of viscoplastic deformation and heat transfer - II. Applications, *International Journal of Mechanical Science*, **22**, pp. 707–718, 1980.
- [Rice 70] J.R. Rice. On the structural of stress-strain relations for time-dependent plastic deformation of metals, *Journal of Applied Mechanics*, pp. 728–737, 1970.
- [Rice 98] J. Rice. *Numerical Methods, Software, and Analysis*, International Student Edition, 1998.
- [Robinson *et al.* 99] J.S. Robinson, R.L.Cudd e D.A. Tanner. Thermal stress relief in AA2014 and AA7050 forgings, *Actas da 15th International Conference on Production Research ICPR15*, 9-13 August, University of Limerick, Ireland, 1999.
- [Rodrigues e Martins 98] J.M.C. Rodrigues e P.A.F. Martins. Coupled thermo-mechanical analysis of metal-forming processes through a combined finite element-boundary element approach, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **42**, pp. 631–645, 1998.

- [Rodríguez-Ferran e Huerta 96] A. Rodríguez-Ferran e A. Huerta. *Comparing Two Algorithms to Add Large Strains to a Small Strain Finite Element Code*, Publicação CIMNE, **91**, 1996.
- [Roy *et al.* 92] S. Roy, A.F. Fossum e R.J. Dexter. On the use of polar decomposition in the integration of hypo-elastic constitutive laws, *International Journal of Engineering Science*, **30**, pp. 119–133, 1992.
- [Seabra 81] A.V. Seabra. *Metalurgia Geral*, Vol.I e II, Edições do Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Lisboa, 1981.
- [Segerlind 84] L.J. Segerlind. *Applied Finite Element Analysis*, 2ª Edição, John Wiley and Sons, 1984.
- [Shackelford 99] J.F.Shackelford. *Introduction to Materials Science for Engineers*, 5ª Edição, Prentice-Hall, 1999.
- [Sidoroff 81] F. Sidoroff. *Formulation Elasto-plastique en Grandes Déformations*, Relatório GRECO 29, 1981.
- [Sidoroff 82] F. Sidoroff. Incremental constitutive equation for large strain elasto-plasticity, *International Journal of Engineering Science*, **20** (1), pp. 19-26, 1982.
- [Simo 85] J.C. Simo. On the computational significance of the intermediate configuration and hyperelastic stress relations in finite deformation elastoplasticity, *Mechanics of Materials*, **4**, pp. 439–451, 1985.
- [Simo e Hughes 98] J.C. Simo e T.J.R. Hughes. *Computational Inelasticity*, Springer-Verlag New-York, Inc., 1998.
- [Simo e Miehe 92] J.C. Simo e C. Miehe. Associative coupled thermoplasticity at finite strains: formulation, numerical analysis and implementation. *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, **98**, pp. 41–104, 1992.
- [Služalec 88] A. Služalec. Coupled thermoplasticity, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **4**, pp. 675–685, 1988.
- [Smith 96] W.F. Smith. *Principles of Materials Science and Engineering*, 3ª Edição, McGraw-Hill, Inc., New York, 1996.
- [Srikanth e Zabarás 99] A. Srikanth e N. Zabarás. A computational model for the finite element analysis of thermoplasticity coupled with ductile damage at finite strains, *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, **45**, pp. 1569–1605, 1999.
- [Sun *et al.* 99] Y. Sun, M. Baydogan e H. Çimenoglu. The effect of deformation before aging on the wear resistance of an aluminium alloy, *Materials Letters*, **38**, pp. 221–226, 1999.
- [Szabo e Varga 95] I. Szabo e I. Varga. Modified calculation of the dissipation term in thermoplastic finite element equations, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **11**, pp. 69–72, 1995.

- [Tamma *et al.* 00] K.K. Tamma, X. Zhou e D. Sha. The time dimension: a theory towards the evolution, classification, characterization and design of computational algorithms for transients/dynamics applications, *Archives of Computational Methods in Engineering - State of the art reviews*, **7** (2), pp. 67–290, 2000.
- [Tanner e Robinson 00] D.A. Tanner e J.S. Robinson. Residual stress prediction and determination in 7010 aluminium alloy forgings, *Experimental Mechanics*, **40** (1), pp. 75–82, 2000.
- [Teixeira-Dias 99] F. Teixeira-Dias. *Tensões Residuais de Origem Térmica em Materiais Compósitos de Matriz Metálica - Modelação Matemática e Estudos Numéricos*, Tese de Doutoramento, Universidade de Coimbra, 1999.
- [Teixeira-Dias e Menezes 99] F. Teixeira-Dias e L.F. Menezes. A Kinematics and incremental integration model for the micromechanical numerical analysis of dual-phase materials, *Computational Materials Science*, **25**, pp. 237–245, 2002.
- [Teixeira-Dias e Menezes 01] F. Teixeira-Dias e L.F. Menezes. Numerical aspects of finite element simulations of residual stresses in metal matrix composites, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **50**, pp. 629–644, 2001.
- [Teixeira-Dias e Menezes 01b] F. Teixeira-Dias e L.F. Menezes. Numerical determination of the influence of the cooling rate and reinforcement volume fraction on the levels of residual stresses in Al-SiC composites, *Computational Material Science*, **21**, pp. 26–36, 2001
- [Teixeira-Dias *et al.* 05] F. Teixeira-Dias, A. Andrade-Campos e J. Pinho-da-Cruz. On the effect of the orientation of the reinforcement on the overall behaviour of AlSiC_p composites, *Computers and Structures*, **82** (17-19), pp. 1323–1331, 2004.
- [Teodosiu e Genevois 88] C. Teodosiu e P. Genevois. Modelling large deformation anisotropic plastic behaviour of mild steel sheet, *Actas da Int. Symp. MECAMAT on Inelastic Behaviour of Solids: Models and Utilisation*, Besançon, p. 211, 1988.
- [Teodosiu 89] C. Teodosiu. The plastic spin: microstructural origin and computational significance, *Actas da 2nd. Int. Conf. on computational plasticity*, D.R.J. Owen, E. Hinton and E. Onate (Eds.), Barcelona, p. 163, 1989.
- [Totten e Mackenzie 03] G.E. Totten e D.S. Mackenzie. *Handbook of Aluminium: Physical Metallurgy and Processes*, Marcel Dekker Publisher, 2003.
- [Valanis 71] K. C. Valanis. A theory of viscoplasticity without a yield surface, *Archives of Mechanics*, **23** (4), pp. 517–551, 1971.
- [Valente 04] R.A.F. Valente. *Developments on Shell and Solid-Shell Finite Elements Technology in Nonlinear Continuum Mechanics*, Tese de Doutoramento, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, 2004.
- [Vaz Jr. 98] M. Vaz Junior. *Computational Approaches to Simulation of Metal Cutting Processes*, Tese de Doutoramento, University of Wales, Swansea, 1998.

- [Vaz Jr. 00] M. Vaz Junior. *Simulação de Problemas de Acoplamento Termomecânico*, Relatório Técnico DAPE 153/98, Universidade do Estado de Santa Catarina, Brasil, 2000.
- [Verner 94] J.H. Verner. A classification scheme for studying explicit Runge-kutta pairs, Actas da *Scientific Computing*, S.O.Fantula (Ed.), Ada and Jane Press, Benin City, Nigeria, pp. 201–225, 1994.
- [Vieira 89] M. Vieira. *A Recristalização Dinâmica em Condições de Deformação a Quente*, Relatório da Aula Teórico-Prática das Provas de Aptidão Pedagógica e Científica, Departamento de Metalurgia da FEUP, Porto, 1989.
- [Xiao *et al.* 97] H. Xiao, O.T. Bruhns e A. Meyers. Hypo-elasticity model based upon the logarithmic stress rate, *Journal of Elasticity*, **47**, pp. 51–98, 1997.
- [Xiao *et al.* 98] H. Xiao, O.T. Bruhns e A. Meyers. Strain rates and material spins, *Journal of Elasticity*, **52**, pp. 1–41, 1998.
- [Xing and Makinouchi 02] H.L. Xing e A. Makinouchi. Three dimension finite element modeling of thermomechanical frictional contact between finite deformation bodies using R-minimum strategy, *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, **191**, pp. 4193–4214, 2002.
- [Zhao e Lee 04] K.M. Zhao e J.K. Lee. Inverse estimation of material properties for sheet metals, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **20**, pp. 105–118, 2004.
- [Zienkiewicz *et al.* 86] O.C. Zienkiewicz, D.K. Paul e A.H.C. Chan. Unconditionally stable staggered solution procedures for soil-pore fluid interaction analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **19**, pp. 1669–1673, 1986.
- [Zienkiewicz e Taylor 91] O.C. Zienkiewicz e R.L. Taylor. *The Finite Element Method*, McGraw Hill, Vol. I., 1989, Vol. II., 1991.

Índice

- Aceleração, 86
- Acoplamento, 33, 34, 137
 - termomecânico, 4, 33, 36, 68, 77, 97, 112, 185
 - termoplástico, 73
- Agregação, 91, 122
- Algoritmo, 36, 40, 101, 119, 120, 123
 - de otimização, 137, 138, 230
 - evolucionário, 136, 140, 141, 144, 147, 166
 - genético, 145
- Algoritmos, 68, 77, 94, 107
 - imunes, 32, 231
- Alumínio, 3, 9, 10, 13, 23, 58, 60, 152, 154, 155, 198, 209, 211
 - puro, 60, 154, 155, 161
- Amaciamento, 20, 59, 72, 153
- Anisotropia, 31, 230
- Aplicações, 14, 23, 24, 27, 131, 208
 - de engenharia, 33, 231
 - indústria aeronáutica, 24
 - indústria automóvel, 12, 23, 25
- Aquecimento, 33
- Arrefecimento, 19, 33, 182, 184, 206, 213, 220, 228
 - velocidades de, 208, 213
- Assemblagem, 91
- Cálculo
 - distribuído, 230
 - paralelo, 38, 39, 230
- Campo
 - de deformação, 119, 194
 - de velocidade, 33, 44, 88
 - de velocidade virtual, 87, 89
- Capacitância
 - matriz, 104
- Carregamento, 31, 125, 134
- Cinética, 25
- Cinemática, 43, 45, 52
- Coefficiente
 - de expansão térmica, 56, 70, 73, 208, 212
 - de Poisson, 57, 154, 171, 195, 208
- Coefficientes
 - de Lamé, 57, 86
- Componentes, 11, 23, 131, 208
- Comportamento
 - elástico, 30, 78
 - elastoplástico, 49
 - hipoelástico, 51
 - lei de, 51, 57, 78, 231, 242
 - plástico, 30
 - termoelastoviscoplastico, 208
 - viscoplastico, 31, 53, 64
 - viscoso, 30
- Composição química, 8, 154, 211
- Condições
 - de fronteira, 70, 86, 88, 102
- Condução, 35, 68, 69, 102, 180, 186, 207, 214
- Condutibilidade, 28
- Configuração, 46, 88
 - actual, 44, 45
 - corrente, 88
 - corrotacional, 79, 83, 89, 90
 - de referência, 44, 88
 - geométrica, 68
 - irrotacional, 46
- Conformação, 230
- Constante dos gases perfeitos, 63
- Constituição, 3, 13, 16, 29
- Convecção, 32, 69, 94, 96, 109, 125, 183, 207, 215
 - com mudança de fase, 211
- Coordenadas canónicas, 113

- Corpo deformável, 87, 89
- Corrosão, 10, 12, 13, 23, 28, 206
- Corte
 - ensaios de, 155, 159, 164
- Custo
 - computacional, 4, 38, 51, 88, 125, 166, 167
- Deformação
 - de corte, 44, 72
 - elástica, 246
 - história de, 53
 - historial de, 48, 228
 - incremento de, 79, 80, 82, 90
 - plástica, 21, 56, 57, 71, 115, 245
 - plástica equivalente, 83, 173, 202, 220
 - termoelástica, 71
 - velocidade de, 43, 48, 56, 58
 - viscoplástica, 81
- Deformações
 - grandes, 43, 50, 51, 169
 - pequenas, 48, 49, 52, 242
- Densidade
 - de deslocações, 21, 23, 56, 63
- Derivada
 - objectiva, 50–52, 57
 - temporal, 44, 49, 52
- Deslocações, 22, 23
 - estrutura das, 55, 56, 61
 - movimento das, 16, 20, 62
- Deslocamento, 44
 - incremental, 79, 114
 - prescrito, 125
- Desviator, 115, 117
 - tensor, 83, 84
- Diagonalização, 97, 106
- Diferencial, 49, 54, 139
- Dilatação, 117, 186, 187
 - matriz de, 120
- Distribuição
 - de deformação, 173
 - de temperatura, 33, 176, 181, 187, 194, 215
 - de tensões, 220
 - normal, 142
- Ductilidade, 13, 22, 24
- Dureza, 18, 22
- Efeito
 - térmico, 68, 70, 185
- Eficiência, 230
- Eixo
 - ortogonal, 49
- Elementos finitos, 87, 89, 95, 111, 112
 - hexaédricos, 112, 170
 - isoparamétricos, 112
 - malha de, 112, 128, 186, 189, 209
 - tetraédricos, 112
- Embalagem, 23, 26
- Encruamento, 20, 56
 - atérmico, 59, 62, 65
 - cinemático, 31
 - isotrópico, 31, 73, 74
- Energia de activação, 58–60, 64, 152
- Enformação, 21
- Ensaio
 - de corte, 155, 159, 163
 - de tracção, 154, 159, 194, 198
- Equações
 - constitutivas, 30
 - diferenciais, 43, 56
 - equilíbrio, 30
- Equilíbrio, 71, 98
- Equipamento, 23, 199
- Escoamento, 56, 61
 - plástico, 56, 173
- Esquema
 - de integração, 51, 228
 - numérico, 33
- Estabilidade
 - numérica, 94, 97
- Estado, 19, 56, 154
 - corrente, 53
 - de equilíbrio, 77
 - de saturação, 153
 - do material, 120
 - estacionário, 53, 153
 - interno, 56
 - microestrutural, 55
 - variável de, 56, 59, 81
- Estampagem, 180
- Estudo, 72, 119, 169, 175, 203

- Evaporação, 207
 Evolução, 54, 55, 59, 68, 88, 129, 137, 142, 155
 Expansão
 térmica, 3, 185
 Fabrico, 10, 23
 Ficheiro, 119, 127
 Força, 86, 91, 126, 246
 Forjagem, 43, 209
 Forma
 euleriana, 88
 lagrangeana reactualizada, 88
 lagrangeana total, 88
 FORTRAN, 111, 147
 Fronteira, 39, 68, 87, 108
 condições de, 86, 112, 125
 Funções
 de forma, 89, 96, 114, 116
 de interpolação, 96, 114
 Fundição, 11, 13
 Geometria, 4, 112, 128
 Gradiente
 de tensão, 222
 de transformação, 45, 46, 74, 80, 123
 geométrico, 215, 222
 progressivo, 78, 80, 228
 Grandes
 deformações, 4, 46, 49, 51, 87, 139
 rotações, 51, 139, 170, 175
 transformações, 43, 44, 78, 88, 121
 Hexaedro, 112
 Implementação, 29, 228
 de algoritmos, 123, 230
 numérica, 4, 111, 177, 227
 Incremental, 43, 80, 90, 119
 actualização, 52
 Incremento, 51
 controlo do, 121
 da velocidade de deformação plástica, 83
 de deformação, 68, 79, 80, 90
 de deformação plástica, 80–82, 84, 85
 de tempo, 40, 52, 78, 85, 88, 91, 97, 105, 108, 183
 de tempo óptimo, 109
 de tempo inicial, 128
 de tensão, 86, 90
 de tensão equivalente, 84
 tamanho de, 51, 52
 Indústria
 aeroespacial, 3, 23, 24
 aeronáutica, 24, 208
 alimentar, 23
 astronáutica, 24
 automóvel, 12, 208
 de embalagem e acondicionamento, 26
 de transportes, 15
 metalúrgica, 5
 Inicialização, 40, 119, 120
 Instante, 46, 78, 81, 88, 98, 107
 corrente, 78
 de tempo, 44, 86
 inicial, 88
 Integração
 completa, 112, 115, 170, 171, 228
 esquema de, 51, 228
 método do gradiente progressivo, 78, 80
 numérica, 114, 115, 139
 pontos de, 52, 112, 116, 170, 175
 reduzida, 112
 reduzida selectiva, 112, 115, 116, 121
 temporal, 4, 78–80, 97, 98, 102, 104, 108, 182
 Interface, 111, 128
 gráfica, 127
 Interpolação, 89, 97, 112, 115
 funções de, 106, 112
 isoparamétrica, 112
 intervalo de tempo, 79, 83, 88, 134
 Investigação, 29, 60
 e desenvolvimento, 4, 25, 29
 Isocórico, 56, 115
 Isovalores, 129, 172, 173, 177, 179, 187, 199, 215, 217, 220, 222
 Jacobiana
 matriz, 106, 114, 118, 137

- Laminagem, 11, 12, 21, 43, 154
- Lei
- constitutiva, 43, 49–51, 55, 220
 - de comportamento, 51, 55, 57, 121, 231, 242
- Liga
- de alumínio, 3, 5, 10, 13, 14, 17, 20, 23, 25, 152, 154, 155, 163, 171, 211
 - metálicas, 16
- Linearização, 35, 89, 102
- Método
- analítico, 183
 - de integração, 80, 98, 106, 112, 148, 171, 173
 - de integração de Euler, 98
 - de integração de gradiente progressivo, 81
 - de integração explícito, 98
 - de integração implícito, 108
 - de integração semi-implícito, 97
 - de Levenberg-Marquardt, 132, 137, 166
 - de Newton-Raphson, 77, 99, 102, 108, 120, 137
 - dos elementos finitos, 4, 39, 51, 77, 87, 91, 103, 112
 - dos gradientes, 136
- Métodos
- de integração, 77, 98, 106, 115, 139, 170, 172
 - numéricos, 4, 29, 135, 139
- Módulo, 59
- de corte, 60–62
 - de elasticidade, 13, 57, 73, 154, 171, 191, 195, 212
 - elastoplástico, 73
 - elastoviscoplastico, 85, 86
 - secante, 81, 85, 86, 120
 - tangente, 81
 - volumétrico, 57
- Módulos, 119
- Malha de elementos finitos, 128, 175, 186, 189, 194, 209
- Maquinagem, 15
- Materiais, 180, 181
- Material
- metálico, 5, 11, 29, 48, 68, 207, 227
- Matriz
- capacitância, 96, 104, 106
 - rigidez, 91, 96, 99, 115, 121, 126
 - rigidez global, 91, 125
- Meio
- contínuo, 5, 44, 45, 51
- Memória, 119, 120, 125, 126
- Microestrutura, 16, 21–23, 206, 230
- Modelação, 33, 70, 166, 206, 208, 231, 245
- cinemática, 44
 - isotérmica, 33
 - matemática, 4
- Modelo
- analítico, 54, 55
 - constitutivo, 55, 56, 61, 85, 147, 155
 - de Brown e Anand, 55, 64, 228
 - de comportamento, 55, 58, 61, 64, 132, 133, 139, 152
 - de Miller e Sherby, 55, 63
 - de Nix e Gibeling, 60
 - de previsão, 107
 - de Prinz e Argon, 62
 - geométrico, 118, 128, 129, 170, 175, 177, 180, 186, 209
 - matemático, 5, 133, 154
 - mecânico, 72, 78
 - numérico, 193
 - térmico, 93
 - termoelastoviscoplastico, 64
 - termomecânico, 68
 - termoplastico, 68, 71, 73
- Nó, 40, 114, 115
- Não-linear, 4, 35, 99, 100, 102, 108, 133, 140, 144
- Objectividade, 49, 51
- Objectivos, 5, 10, 132, 144
- Optimização, 128, 132, 133, 140, 146
- algoritmo de, 138, 140
 - ciclo de, 122
 - método de, 32, 136, 140, 144, 165
 - problema de, 133
 - problemas de, 144, 147

- processo de, 143, 147
- Oscilações, 104
 - numéricas, 104, 105
- Pós-processamento, 127, 129
- Parâmetros
 - constitutivos, 61, 132, 159, 161, 163, 165
 - de cálculo, 120, 128
 - do material, 60, 64, 138, 159, 190, 191, 196
 - escalares, 55
 - materiais, 55, 65
 - tecnológicos, 5
- Paralelo, 40, 230
- Pequenas
 - deformações, 48, 49, 52, 73, 89, 242, 243
- Peso, 15, 23, 98, 125, 134
 - de cruzamento, 142
 - de integração, 115
 - de penalidade, 137
 - parâmetro de, 97
 - regularização sem, 32
- Pontos
 - de Gauss, 112, 113
 - de integração, 52, 112, 115, 116, 170, 175, 228, 230
- Pré-processamento, 127, 128
- Precipitação, 21
 - endurecimento por, 5, 13, 14, 16
- Precisão, 5, 102, 107, 134, 143, 163, 184, 206
- Pressão, 10, 11, 118, 207
- Previsão, 107, 108, 119
 - correção, 39, 108, 119
 - algoritmo de, 212
- Princípio
 - básico, 10
 - da conservação de massa, 106
 - da objectividade, 49, 51
 - da termodinâmica, 68
 - das potências virtuais, 87, 88, 90
 - de funcionamento, 127
- Problema
 - de optimização, 133–135
 - térmico, 70, 94, 97, 106, 175
- Processamento, 230
 - paralelo, 39
 - unidade de, 40
- Processo, 65
 - de cruzamento, 136
 - de deformação, 35
 - de endurecimento por precipitação, 16
 - de fabrico, 10
 - de identificação, 133, 136, 154, 163
 - de optimização, 137, 147, 159
 - de selecção, 142
 - de têmpera, 206, 212, 220
- Programa, 39, 112, 119, 125, 127, 138, 139, 144, 145, 147, 189, 192, 231
- Propriedades
 - do material, 102, 171, 175, 183, 186, 190, 194, 210
 - mecânicas, 18, 21, 33, 206, 212
 - térmicas, 195, 202, 212
- Radiação, 32, 69, 94, 96, 109, 125, 207, 211
- Recristalização, 18, 22, 23
- Referencial
 - corrotacional, 78, 85, 90
 - ortotropia, 78, 119
- Regime, 207
 - estacionário, 23, 101, 175
 - transiente, 35, 97, 103, 175, 182
- Relação
 - constitutiva, 57, 243, 244
- Resistência, 10, 14, 24
 - à corrosão, 14, 25, 28, 206
 - à deformação, 12, 56, 60, 64, 203
 - à tracção, 15
 - interna, 182
 - isotrópica, 56
 - mecânica, 13, 14, 16, 21, 22
 - térmica, 33, 70, 183
- Restauração, 56, 62
 - dinâmica, 55, 59, 62
 - estática, 22, 55, 60–62, 153
- Resultados, 151
- Rigidez
 - de torsão, 26

- do elemento, 115, 172
- Rotação
 - elástica, 78
 - incremental, 80, 123, 170, 229
 - tensor de, 50, 52, 57, 78–80, 242
 - velocidade de, 48, 51, 80, 123
- Rotor, 208–211, 213
- Sólido
 - deformável, 86, 87, 112, 245
- Saturação, 54, 59, 61, 153
 - temperatura de, 207
- Segundo membro, 34, 123, 137, 248
- Simulação, 4, 5, 39, 112, 123, 127, 133, 194, 206, 230
 - numérica, 3, 230
 - programa de, 138, 189
 - programas de, 130
- Sistema
 - acoplado, 33, 35, 38
 - de eixos, 45
 - de eixos ortogonais, 45
 - global de equações, 40, 91, 119, 120, 123
- Solicitação, 173, 199
- Taylor
 - série de, 78, 79, 82, 99
- Temperatura
 - absoluta, 56, 69
 - ambiente, 17, 18, 20, 55, 67, 185, 191, 206
 - campo de, 3, 33, 68, 94, 108, 119, 183, 220
 - de fusão, 22, 212
 - evolução da, 94, 187, 198, 214, 245
 - gradiente de, 32, 118, 202, 219
 - inicial, 60, 184, 214, 249
 - máxima, 176, 177, 205
 - mínima, 177
 - prescrita, 175, 186, 187
- Tempo
 - de cálculo, 107, 112, 115, 171, 230
 - incremento de, 40, 85, 88, 91, 97, 105–109, 120, 128, 183, 212, 231
- Tensão
 - de Cauchy, 78, 87
 - distribuição de, 219, 220
 - equivalente, 58, 59, 63, 83, 173, 189, 192, 222
 - incremento de, 84, 86, 90
 - limite de elasticidade, 23, 60, 64, 75, 193, 206, 220
 - relaxação, 20, 47
 - residual, 18, 206, 209, 212, 222, 224
- Tensor
 - das constantes elásticas, 78, 242
 - das deformações, 48
 - das tensões, 49, 50, 52, 72, 80, 86, 88
 - das tensões de Cauchy, 49, 52, 56, 73, 89, 172
 - de deformação, 51, 74, 242
 - de deformação elástica, 246
 - de deformação Green-Lagrange, 88
 - de rotação, 50, 52, 57, 78–80, 242
 - de tensão de Piola-Kirchhoff, 88
 - desviador das tensões, 54, 58, 83–85
 - identidade de quarta ordem, 57
 - identidade de segunda ordem, 45, 56
 - ortogonal, 45, 49
 - velocidade de deformação, 49, 56, 87, 242, 246
 - velocidade de deformação plástica, 49
 - velocidade de deformação viscoplástica, 72, 81, 82
- Terminologia, 8
- Tolerância, 102, 103, 119, 143, 152, 218
- Transformação, 45
 - gradiente de, 45
 - pontual, 44
 - termoelástica, 46
 - viscoplástica, 46
- Translação, 49, 88
- Tratamento
 - térmico, 5, 14, 16, 17, 205, 206, 210, 218
 - termomecânico, 205
- Utilizador, 119, 127, 129, 231
- Validação, 4, 169, 175, 182, 185, 227
- Valores

- prescritos, 70, 125, 126
- Variável
 - de estado, 56, 59, 246
 - escalar interna, 54, 58, 63, 78
 - interna, 54, 55, 58–60, 132, 153, 173
- Vector
 - posição, 44, 114, 115
- Velocidade
 - campo de, 33, 44, 87, 89
 - de arrefecimento, 208, 213–215
 - de corte, 155
 - de deformação, 43, 48, 56, 59, 60, 64, 72, 155
 - de deformação elástica, 56
 - de deformação plástica, 31, 49, 57, 60, 63, 72
 - de deformação plástica equivalente, 57, 58, 64
 - de deformação viscoplástica, 56, 82
 - de rotação, 48, 51, 80, 123
 - de tensão, 83
 - gradiente de, 46, 47, 116, 241
- Viscosidade, 30
- von Mises, 31, 58, 243