



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

FELIPE AUGUSTO CRUZ

DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR PARA PROBLEMAS ELASTOPLÁSTICOS
AFETADOS PELA DIFUSÃO E DANO

RECIFE

2018

FELIPE AUGUSTO CRUZ

DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR PARA PROBLEMAS ELASTOPLÁSTICOS
AFETADOS PELA DIFUSÃO E DANO

Tese submetida ao corpo docente do curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de doutor em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: energia

Orientador: Prof. Dr. José Maria Andrade Barbosa

Coorientador: Prof. Dr. Félix Christian Guimarães Santos

RECIFE

2018

Catálogo na fonte
Bibliotecária Margareth Malta, CRB-4 / 1198

C957d Cruz, Felipe Augusto Cruz.
Desenvolvimento de um simulador para problemas elastoplásticos afetados pela difusão e dano / Felipe Augusto Cruz. - 2018.
152 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. José Maria Andrade Barbosa.
Coorientador: Prof. Dr. Félix Christian Guimarães Santos.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2018.
Inclui Referências e Apêndices.

1. Engenharia Mecânica. 2. Simulação multifísica. 3. Elastoplasticidade.
4. Difusão. 5. Dano. 6. Método do elemento finito. I. Barbosa, José Maria Andrade. (Orientador). II. Santos. Félix Christian Guimarães. (Coorientador).
III. Título.

UFPE

621 CDD (22. ed.)

BCTG/2018-250

09 de março de 2018.

“DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR PARA PROBLEMAS
ELASTOPLÁSTICOS AFETADOS PELA DIFUSÃO E DANO”

FELIPE AUGUSTO CRUZ

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: ENERGIA

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE

Prof. Dr. JOSÉ MARIA ANDRADE BARBOSA
ORIENTADOR/PRESIDENTE

Prof. Dr. FÉLIX CHRISTIAN GUIMARÃES SANTOS
COORDENADOR

Prof. Dr. CEZAR HENRIQUE GONZALEZ
COORDENADOR DO PROGRAMA

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. JOSÉ MARIA ANDRADE BARBOSA (UFPE)

Prof. Dr. FÉLIX CHRISTIAN GUIMARÃES SANTOS (UFPE)

Prof^a Dr^a NADÈGE SOPHIE BOUCHONNEAU DA SILVA (UFPE)

Prof. Dr. RICARDO ARTUR SANGUINETTI FERREIRA (UFPE)

Prof. Dr. FERNANDO PEREIRA DUDA (UFRJ)

Prof. Dr. JORGE ANTONIO PALMA CARRASCO (UFPE)

*Dedico esta tese de doutorado aos meus pais,
Sérgio Luiz Cruz e Maria Lúcia Cruz que me deram todo
o apoio e suporte para eu alcançar este feito. Dedico
também aos meus irmãos, esposa, filho e amigos
que tanto me ajudaram.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por todas as alegrias, pela saúde e pela força que me concedeu, para que eu conseguisse chegar até aqui.

Ao meu orientador, José Maria Andrade Barbosa, pela oportunidade que me foi oferecida e por todo apoio necessário à finalização desta tese. Ao meu co-orientador, Félix Christian Guimarães Santos, com quem aprendi muito sobre implementação e programação, necessárias à este trabalho.

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco, com os quais consegui obter meu grau de graduado em engenharia mecânica.

Agradeço aos meus pais, Sérgio Luiz Cruz e Maria Lúcia Cruz por tudo que me ensinaram e por sempre me darem o apoio necessário em todas as decisões tomadas.

Aos meus irmãos, Oswaldo Cruz Neto e Fabrício Cruz, pelos momentos de descontrações e alegria. À minha irmã, Ana Aparecida Gabriel de Lima, por ter me dado dois sobrinhos maravilhosos.

À minha esposa Juliana Dias Barreto Cruz, pela paciência e compreensão pelos momentos em que estive ausente, sempre me apoiando nos momentos de dificuldade. Quero agradecer também ao meu filho Cauê Barreto Cruz, que embora não tivesse conhecimento disto, iluminou de maneira especial os meus pensamentos.

Aos meus avós e avôs, tios e tias, primos e primas, por fazerem parte da minha vida.

Agradeço também ao Instituto Federal de Pernambuco (IFPE), pelo crescimento profissional e pela oportunidade de realizar o meu sonho de ser professor.

Aos meus amigos de infância, da escola, da graduação, da Marinha do Brasil e todos os meus amigos do LABCOM que me ajudaram a ser a pessoa que sou hoje.

Agradeço ao PRH-PB03 pelo suporte financeiro oferecido como apoio para o desenvolvimento desta tese.

E finalmente, agradeço a todos que me ajudaram direta e indiretamente no desenvolvimento deste trabalho e que não foram citados.

*"Você deve ser a mudança que
você deseja ver no mundo."
(Mahatma Gandhi)*

RESUMO

Este trabalho apresenta a modelagem e a simulação multifísica de um problema onde os fenômenos envolvidos interagem entre si, no espaço e no tempo, possuindo a seguinte característica: uma parte dos dados de um fenômeno depende das informações do outro fenômeno. A formulação foi desenvolvida utilizando o Princípio das Potências Virtuais e leis da termodinâmica. Cada um dos fenômenos tem uma lei de comportamento, que é usualmente descrita através de equações diferenciais parciais juntamente com as condições inicial e de contorno adequadas, resultando em leis de comportamento compartilhadas. Estes problemas são difíceis de simular, pois as equações de acoplamento entre os fenômenos são complexas resultando em um maior tempo de programação computacional e de testes de codificação. A programação computacional foi realizada no MPhyScas, pois há bastante flexibilidade e reusabilidade nas peças de software construídas, possibilitando a utilização do método de decomposição do operador para resolução de problemas acoplados. Além disto, para o fenômeno do dano, fez-se uma análise numérica alterando valores de parâmetros relacionados à resistência mecânica e outro relativo ao gradiente de dano. Para o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano foi realizada uma simulação em uma placa com dois furos descentralizados e uma reentrância na parte inferior havendo distribuição de soluto uniforme em todo o seu domínio, submetida a um carregamento crescente. Os resultados obtidos foram confrontados com resultados numéricos realizados em outros trabalhos mostrando grande semelhança qualitativa. Como era de se esperar, os resultados mostraram que houve migração de soluto no interior da matriz metálica, assim como endurecimento mecânico, danificação e plastificação de algumas regiões.

Palavras-chave: Simulação multifísica. Elastoplasticidade. Difusão. Dano. Método do elemento finito.

ABSTRACT

This work presents the modelling and multi-physical simulation of a problem where the phenomena involved interact in space and time, having the following characteristic: a part of the data of a phenomenon depends on information from the other phenomenon. The formulation was developed using the Principle of Virtual Powers and laws of thermodynamics. Each of the phenomena has a law of behavior, which is usually described through partial differential equations along with the appropriate initial and boundary conditions, resulting in a set of coupled laws of behavior. These problems are difficult to simulate because the coupling equations between the phenomena are complex resulting in a longer computational programming time and testing. The computational programming was performed in MPhyScas, since there is a lot of flexibility and reusability in the pieces of software built, allowing the use of the operator decomposition method to solve coupled problems. In addition, for the damage phenomenon, a numerical analysis was performed, altering parameter values related to mechanical resistance and another one related to the damage gradient. For the elastoplastic problem affected by the diffusion and damage, a simulation was performed on a plate with two decentralized holes and a recess at the bottom with a uniform solute distribution throughout its domain, subjected to increasing loading. The results obtained were compared with numerical results obtained in other studies showing great qualitative similarity. As expected, the results showed that there was migration of solute within the metal matrix, as well as mechanical hardening, damaging and accumulated plastic strain areas.

Keywords: Multiphysics simulation. Elastoplastic. Diffusive. Damage. Finite element method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Representação do elemento volumétrico	24
Figura 2 – Corpo no espaço	28
Figura 3 – Representação computacional das camadas do Simulador	62
Figura 4 – Hierarquia das camadas	63
Figura 5 – Diagrama relativo ao Algoritmo do Kernel	63
Figura 6 – Diagrama relativo ao algoritmo do Block	64
Figura 7 – Diagrama relativo à GroupTask	65
Figura 8 – Construção do Simulador e Simulação	66
Figura 9 – Dados do Sistema	67
Figura 10 – Fluxograma de resolução do pEPADD	71
Figura 11 – Problema construído no MPhyScas	72
Figura 12 – Acoplamento entre Phenomena	73
Figura 13 – Distribuição de dano em um instante intermediário: a) resultado extraído de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015); b) resultado simulado no MPhyScas	74
Figura 14 – Distribuição no instante final: a) resultado para a variável dano extraído de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015); b) resultado para a variável dano simulado no MPhyScas; c) resultado para a variável Tensão de Von Mises simulado no MPhyScas	75
Figura 15 – Problema simulado	76
Figura 16 – Carregamento monotônico	76
Figura 17 – Gráfico do detalhe da função exponencial utilizada para dano	78
Figura 18 – Fluxograma para o cálculo da nova variação de tempo	79
Figura 19 – Resultados para a variável Dano utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$	81
Figura 20 – Resultados para a variável taxa de dano utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$	82
Figura 21 – Resultados para a variável de plastificação acumulada utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$	82
Figura 22 – Resultados para a variável tensão de Von Mises utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$	83
Figura 23 – Resultados para a variável concentração de soluto utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$	84
Figura 24 – Problema com entes numerados	86
Figura 25 – Identificação dos entes geométricos	86
Figura 26 – Detalhes da malha construída: a) detalhe do refinamento na parte inferior; b) detalhe do refinamento na parte superior	87

Figura 27 – Resultado obtido para a variável dano, no instante final, utilizando o MPhyScas	88
Figura 28 – Resultado obtido para a concentração de soluto, no instante final, utilizando o MPhyScas	89
Figura 29 – Resultado obtido para a taxa de dano, no instante final, utilizando o MPhyScas	89
Figura 30 – Resultado obtido para a plastificação acumulada, no instante final, utilizando o MPhyScas	90
Figura 31 – Resultado obtido para a tensão de Von Mises, no instante final, utilizando o MPhyScas	90
Figura 32 – Ponto escolhido para gráficos	91
Figura 33 – Valor para a variável dano com aumento da carga monotonicamente	92
Figura 34 – Valor para a variável da velocidade do dano com aumento da carga monotonicamente	92
Figura 35 – Valor para a variável concentração de soluto com aumento da carga monotonicamente	93
Figura 36 – Valor para a variável da plastificação acumulada com aumento da carga monotonicamente	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Valores relativos ao material e carregamento	77
Tabela 2	– Valores relativos à erros e tempo	79
Tabela 3	– Valores obtidos para as variáveis através da simulação do problema, considerando $par_{A3} = 1.0e12$	85
Tabela 4	– Configuração da Máquina	91

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω	Domínio
$\partial\Omega$	Contorno do domínio
ς	Subdomínio
$\partial\varsigma$	Contorno do subdomínio
Π	Vetor de Tensões
φ	Parâmetro associado ao endurecimento cinemático
λ e μ	Parâmetros de Lamé
η	Entropia
ψ	Energia Livre de Helmholtz
$\tilde{\mu}$	Potencial químico
σ_y	Tensão de escoamento
β^k	Variável associada à fenômeno(s) não definido(s)
α	Parâmetro relacionado com a difusão
$\bar{\lambda}$	Parâmetro relacionado com o acoplamento entre o dano e a difusão
a, b, d	Parâmetros constitutivos associados aos endurecimentos
$\tilde{e}$	Parâmetro constitutivo associado à difusão [<i>volume/mol da substancia química</i>]
C	Concentração de Solute [<i>mol/volume</i>]
C_0	Concentração Inicial de Solute [<i>mol/volume</i>]
D	Variável de dano
E	Módulo de Young
e	Energia interna
$\mathbf{E}$	Tensor de deformação total
$\mathbf{E}^C$	Tensor de deformação difusiva

$\mathbf{E}^e$	Tensor de deformação elástica
$\mathbf{E}^{\beta^k}$	Tensor de deformação dependente da variável β^k
$\mathbf{E}^p$	Tensor de deformação plástica
f	Função de plastificação
f_i	Funções definidas no texto, para $i = 1, 2, 3, 4, 5$
$\mathbf{F}$	Vetor de forças no contorno
$\mathbf{F}^C$	Vetor força associado à difusão
$\mathbf{F}^D$	Vetor força associado ao dano
$\mathbf{F}^e$	Vetor força associado à elasticidade
$\mathbf{F}^{\beta^k}$	Vetor força associado ao(s) fenômeno(s) não definido(s)
$\mathbf{g}$	Vetor de forças de corpo internas
$\mathbf{g}^C$	Força de corpo interna associada à difusão
$\mathbf{g}^D$	Força de corpo interna associada ao dano
$\mathbf{g}^e$	Força de corpo interna associada à elasticidade
$\mathbf{g}^{\beta^k}$	Força de corpo interna associada à fenômeno(s) não definido(s)
h	Termo de fonte
$\mathbf{J}$	Fluxo de soluto
$\mathbf{I}$	Tensor identidade
M	Parâmetro constitutivo associado ao coeficiente de mobilidade
$\mathbf{n}$	Vetor unitário normal exterior à superfície
$\mathbf{P}$	Vetor de potências associadas aos fenômenos
P^C	Potência associada à difusão
P^D	Potência associada ao dano
P^e	Potência associada à elasticidade
P^{int}	Potência interna
P^{ine}	Potência inercial

P^{ext}	Potência externa
$\mathbf{q}$	Fluxo de soluto
par_{kc}	Parâmetro relacionado com o dano
$par_{DeltaDmax}$	Parâmetro relacionado com a velocidade do dano
$par_{Dmgtime}$	Parâmetro a partir do qual pode-se iniciar novo cálculo de tempo
s	Argumento que depende de variáveis
$\mathbf{S}^C$	Tensão Difusiva
$\mathbf{S}^D$	Tensão Dano
$\mathbf{S}^e$	Tensão Elástica
$\mathbf{S}^p$	Tensão Plástica
$\mathbf{S}^{\beta^k}$	Tensão associada ao(s) fenômeno(s) não definido(s)
$\mathbf{t}$	Vetor de forças de corpo externas
$\mathbf{t}^C$	Força de corpo externa associada à difusão
$\mathbf{t}^D$	Força de corpo externa associada ao dano
$\mathbf{t}^e$	Força de corpo externa associada à elasticidade
$\mathbf{t}^{\beta^k}$	Força de corpo externa associada ao(s) fenômeno(s) não definido(s)
$\mathbf{u}$	Vetor deslocamento
$\mathbf{v}$	Vetor de velocidades primitivas
$\bar{\mathbf{v}}$	Vetor de velocidades virtuais
$\mathbf{X}$	Endurecimento Cinemático
Y	Endurecimento Isotrópico
$\dot{p}$	Taxa de plastificação acumulada

NOTAÇÃO

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	Produto entre dois tensores
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	Produto interno entre dois tensores, termo a termo ($tr(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}^T)$)
$\mathbf{A} * \mathbf{B}$	Produto a ser definido

$\mathbf{A}^T$	Transposta do tensor $\mathbf{A}$
$tr(\mathbf{A})$	Traço do tensor $\mathbf{A}$
∇a	Gradiente da função escalar a
$\nabla \cdot \mathbf{A}$	Divergente do campo vetorial $\mathbf{A}$
$\ \mathbf{A}\ = \sqrt{\frac{3}{2}\mathbf{A} : \mathbf{A}}$	Norma do tensor $\mathbf{A}$

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Motivação	18
1.2	Objetivos	19
1.3	Organização da Tese	19
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
2.1	Modelos envolvendo o acoplamento entre os fenômenos de difusão e dano	21
2.2	Modelos envolvendo o acoplamento entre os fenômenos de elastoplasticidade e dano	23
2.3	Modelos envolvendo o acoplamento entre difusão e elastoplasticidade	25
3	DESENVOLVIMENTO DO MODELO PARA PROBLEMAS ELASTOPLÁSTICOS AFETADOS PELA DIFUSÃO E DANO	28
3.1	Restrições Internas	33
3.2	Teoria Constitutiva	35
3.2.1	Desenvolvimento da evolução da variável dano	39
3.2.2	Desenvolvimento da evolução da variável β^k	40
3.2.3	Desenvolvimento do potencial químico	41
3.3	Particularização do Problema	42
3.3.1	Critério do dano:	42
3.3.2	Critério para as variáveis β^k :	45
3.4	Equações de Governo	49
3.5	Energia livre	51
3.6	Descrição das Leis que Governam o Problema	52
3.6.1	Leis de Estado	52
3.6.2	Leis de Evolução	55
3.7	Modelo para o Problema Elastoplástico Afetado pela Difusão e Dano	58
4	ORGANIZAÇÃO HIERÁRQUICA DO MPHYSCAS	60
4.1	Visão Hierárquica do Simulador	60
4.2	Arquitetura do MPhyScas	61
4.2.1	Sistema de Dados de Armazenamento	66
4.2.2	Pré-processamento dos dados da simulação	67
4.3	Simulador e Simulação	72
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	74

5.1	Apresentação do problema	76
5.1.1	Análise envolvendo os parâmetros relacionados ao gradiente do dano (par_kd) e resistência mecânica (par_A3)	80
5.1.1.1	<i>Análise do parâmetro par_kd, mantendo o par_A3 constante</i>	80
5.1.1.2	<i>Análise do parâmetro par_A3, mantendo o par_kd constante</i>	85
5.1.2	Simulação elastoplástica afetada pela difusão e dano	85
5.2	Construção do Simulador Utilizando o MPhyScas	94
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	96
6.1	Conclusões	96
6.2	Trabalhos Futuros	97
	REFERÊNCIAS	98
	APÊNDICE A – DESENVOLVIMENTO DO INCREMENTO DA PLASTIFICAÇÃO	101
	APÊNDICE B – ALGORITMO GERAL - PROBLEMA ELASTO- PLÁSTICO AFETADO PELA DIFUSÃO E DANO	106
	APÊNDICE C – ALGORITMO DO KERNEL	117
	APÊNDICE D – ALGORITMO DOS BLOCKS	118
	APÊNDICE E – TAREFAS DOS GROUPS	121
	APÊNDICE F – FORMAS FRACAS DESENVOLVIDAS	124
	APÊNDICE G – LISTA DOS CAMPOS VETORIAIS	134
	APÊNDICE H – EXPRESSÕES PARA MATRIZES E VETORES .	136
	APÊNDICE I – DESENVOLVIMENTO DAS FORMAS FRACAS .	138

1 Introdução

1.1 Motivação

O presente trabalho foi desenvolvido com o propósito de construir simuladores através de uma ferramenta computacional que possui a capacidade de acoplar fenômenos físicos. Por se tratar de um trabalho de simulação, a ideia é conseguir que a vida útil do equipamento possa ser estimada muito antes de falhar, criando condições para que as devidas correções/manutenções ou até mesmo alteração nas operações de trabalho possam ser realizadas para que não ocorra nenhum tipo de acidente. Em se tratando de correções/manutenções, sabe-se que elas são programadas pelos engenheiros/técnicos e são realizadas no período que forneça os menores prejuízos possíveis e perdas financeiras, mas isto nem sempre é possível devido ao processo contínuo de produção.

Diversos acidentes que ocorrem na indústria são oriundos de colapso de linhas de transporte de fluidos. Estes colapsos muitas vezes resultam em prejuízos financeiros (necessário gasto para repor as peças afetadas e tempo parado da produção), estruturais (afetam peças responsáveis pela parte de sustentação), ambientais (afetam a fauna e flora através de vazamentos/derramamentos e explosão), humano (risco de saúde para a população e empregados em serviço) entre outros.

Baseado nas falhas mecânicas de equipamentos verificou-se a necessidade de estudos mais aprofundados nesta área, constatando-se a influência mútua entre os fenômenos, ou seja, a evolução de um determinado fenômeno afeta outro(s) fenômeno(s) em estudo, fazendo com que um determinado material falhe antes do previsto, resultando em prejuízos ambientais, sociais e econômicos.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um modelo de fenômenos acoplados e a forma na qual as suas características e leis de comportamento foram implementadas. O modelo consiste no acoplamento dos fenômenos de elasticidade, plasticidade, difusão e dano, de forma a aproximar o comportamento da degradação de materiais submetidos a ambientes agressivos.

Na presença de um agente difusivo, equipamentos apresentam alterações no seu comportamento sob o ponto de vista mecânico. Além do mais, quando submetidos a cargas e/ou temperaturas moderadas oferecem um grande risco de acidente influenciando diretamente no processo de continuidade operacional do equipamento submetido a este processo.

Este trabalho demonstra que uma visão hierárquica da organização de simuladores de fenômenos acoplados pode ser muito relevante para sua implementação. Esta visão permite o uso de infraestruturas computacionais que são fundamentais para diminuir o tempo de desenvolvimento de simuladores; permitir a reutilização de software; facilitar o trabalho cooperativo e

tornar o resultado final mais compreensível e manutenível.

Dentre os trabalhos pesquisados encontram-se variações de fenômenos envolvidos e acoplamentos, mas em nenhum deles há os quatro fenômenos (elasticidade, plasticidade, difusão e dano) desenvolvidos conjuntamente sendo afetados por endurecimentos cinemático e isotrópico não lineares, portanto a realização desta tese é de extrema importância para o projeto de equipamentos que funcionam em condições semelhantes. Acobertando a literatura com esta abordagem que permite simular com maior grau de aproximação os fenômenos envolvidos em casos reais, podendo prever as condições e o tempo até a falha.

1.2 Objetivos

O objetivo geral desta tese é desenvolver um simulador de fenômenos acoplados tais como elastoplasticidade, difusão e dano na forma de uma ferramenta computacional orientada à representação de fenômenos multifísicas.

Os objetivos específicos do trabalho são:

- Formular um modelo físico e matemático que envolva o acoplamento entre os fenômenos de elastoplasticidade, difusão e dano conjuntamente com endurecimentos cinemático e isotrópico, para material metálico de comportamento dúctil;
- Desenvolver algoritmos de solução para o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano com endurecimentos cinemático e isotrópico não lineares;
- Implementar os algoritmos de solução criados a partir do modelo, no ambiente denominado MPhyScas (Multi-Physics and Multi-Scale Solver Environment).

1.3 Organização da Tese

A presente tese está dividida em seis capítulos, além da referência bibliográfica e oito apêndices. Neste primeiro capítulo foi apresentado uma breve motivação e os principais objetivos.

No Capítulo 2 apresenta-se a revisão bibliográfica dos principais trabalhos feitos na área, que consideram os acoplamentos entre os fenômenos elasticidade e difusão, ou elasticidade e plasticidade, ou elasticidade e dano.

No Capítulo 3 está apresentado todo o desenvolvimento do modelo físico e matemático utilizado, assim como as hipóteses definidas para o problema de fenômenos acoplados envolvendo os fenômenos da elasticidade, da plasticidade, da difusão e do dano, juntamente com as parcelas de endurecimento cinemático e isotrópico.

No Capítulo 4 é apresentado o ambiente dedicado ao desenvolvimento automático de simuladores baseados no método do elemento finito. Neste capítulo também encontra-se a forma na qual o modelo desenvolvido no capítulo anterior foi implementado no "framework".

No Capítulo 5 encontram-se os resultados obtidos através da implementação do modelo desenvolvido no Capítulo 3 com a utilização do ambiente dedicado ao desenvolvimento automático de simuladores baseados no método do elemento finito, que encontra-se em detalhes no Capítulo 4. Além disto há análises comparando parâmetros e a interação entre as variáveis.

No Capítulo 6 são apresentadas as conclusões e as principais considerações sobre o simulador construído. Além disto, há uma seção indicando propostas para trabalhos futuros.

2 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são apresentados alguns artigos relevantes à este trabalho. Entre eles há artigos que envolvem problemas com fenômenos acoplados envolvendo: modelos de difusão de hidrogênio com dano; modelos de acoplamento elastoplástico e dano; modelos de acoplamento elastoplástico e difusão.

Inicialmente há uma seção que envolve os fenômenos de difusão e dano seguido pelas seções envolvendo o acoplamento entre elastoplasticidade com dano; e por fim, modelos entre os fenômenos da difusão e elastoplasticidade.

2.1 Modelos envolvendo o acoplamento entre os fenômenos de difusão e dano

O trabalho de Bolotin e Shipkov (1998) utiliza o trabalho virtual decomposto aditivamente nas parcelas de trabalho das forças aplicadas, das forças internas e das forças de movimentação da ponta da trinca. Descreve o processo de danificação combinando efeitos ambientais (processo difusivo) com cargas cíclicas, encontrando uma equação de equilíbrio entre força generalizada e força de resistência.

A degradação do material ocorre quando a força generalizada de propagação é maior que a força de resistência, dependendo de parâmetros de carregamento, de parâmetros ambientais e de parâmetros relacionados à distribuição de dano na ponta da trinca.

Comparações entre resultados da modelagem e experimentais foram apresentados por Bolotin e Shipkov (2001). Abordou a relação existente entre a difusão de soluto e a trinca, indicando a dependência do aumento da trinca é devido ao ciclo de carregamento e ao acúmulo de dano em sua ponta.

O Princípio da Potências Virtuais (PPV) é utilizado no trabalho de Duda et al. (2006) e Barbosa et al. (2007) relacionando as parcelas de potência interna e externa de um sub-domínio contido no corpo. Além disto, há o desenvolvimento da formulação matemática do acoplamento entre os modelos de difusão e dano em sólidos elásticos baseado na teoria constitutiva termodinamicamente consistente.

A introdução do acoplamento foi realizada através da energia livre, resultando nas seguintes dependências:

- A tensão (S) está sendo afetada pela difusão e dano (conforme Equação 2.1);

$$\mathbf{S} = (1 - D) (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}) + 2\mu \mathbf{E} - e(3\lambda + 2\mu)(C - C_0)\mathbf{I}) \quad (2.1)$$

sendo: λ e μ são parâmetros, D a variável dano, $\mathbf{E}$ deformação total, C é a concentração de soluto e C_0 é a concentração de soluto inicial. Pela Equação 2.1, percebe-se que o modelo desenvolvido não apresenta o acoplamento elastoplástico, pois a deformação total ($\mathbf{E}$) foi dividida nas parcelas elástica e difusiva, ou seja, não há parcela de tensão plástica na equação da tensão.

A parcela de deformação difusiva modelada afetando a parcela hidrostática, ou seja, é a componente da deformação responsável pelo aumento ou diminuição volumétrica.

- O fluxo de soluto ($\mathbf{J}$) está sendo afetado pelo gradiente do traço da tensão e pelo gradiente do dano (conforme Equação 2.2);

$$\mathbf{J} = -f_1(M) (\nabla C - f_2(C) \nabla (\text{etr}(\mathbf{S}) + f_3(D))) \quad (2.2)$$

sendo: $f_1(M)$ expresso em função da mobilidade do soluto; $f_2(C)$ expresso em função da concentração do soluto; e $f_3(D)$ expresso em função do dano. Analisando a Equação 2.2 em relação ao gradiente do traço da tensão, pode-se dizer que: quanto maior o gradiente do traço da tensão resultará em um maior fluxo de soluto. A mesma análise pode ser feita comparando a variável dano com o fluxo de soluto.

Em Brito (2007) houve a construção de simuladores para problemas com acoplamento elasto-viscoplástico com dano e outro simulador para modelo puramente difusivo. A modelagem matemática foi baseada na mecânica do contínuo, onde em adição ao campo que descreve o movimento do sólido são introduzidos campos microestruturais para representar a medida de dano, a concentração de soluto e o fluxo de soluto. Utilizou o Princípio das Potências Virtuais, a desigualdade de dissipação e os acoplamentos surgiram a partir da energia livre. A implementação e a construção dos simuladores foram feitas utilizando o MPhyScas.

Outro trabalho bastante interessante foi desenvolvido por Moriconi, Hénaff e Halm (2014), onde foi abordado a comparação entre os resultados simulados e experimentais. Neste trabalho também está presente o acoplamento entre os fenômenos difusivo e dano, onde os resultados experimentais indicaram que em um ambiente rico de hidrogênio há o decréscimo da resistência mecânica, utilizando o hidrogênio como elemento difusivo que modifica os mecanismos de deformação e dano em materiais metálicos.

Em Moriconi, Hénaff e Halm (2014) a implementação foi realizada utilizando o software ABAQUS, sendo feita a analogia entre as equações de calor e difusão de soluto, ou seja, o acoplamento entre o comportamento mecânico e a difusão de hidrogênio foi modelada como se fosse um problema envolvendo o procedimento entre deslocamento e temperatura. Baseado nisto, pode-se dizer que o software utilizado não foi o mais adequado para o acoplamento entre os fenômenos de difusão e dano, outra fator importante é que a formulação do trabalho foi feita

descrevendo um potencial termodinâmico relacionado à rigidez do material, onde a variável dano evolui se ultrapassar um determinado patamar.

Então, nesta seção foram abordados alguns trabalhos envolvendo fenômenos multifísicas de difusão e dano. Na próxima seção, encontram-se alguns trabalhos relacionando os fenômenos de elastoplasticidade e dano.

2.2 Modelos envolvendo o acoplamento entre os fenômenos de elastoplasticidade e dano

O princípio das potências virtuais (PPV) tinha sido recentemente proposto e já foi utilizado no trabalho de Nedjar (2001). Neste trabalho houve a utilização da irreversibilidade termodinâmica e das variáveis de estado interna. Inicialmente, considerou que a energia livre era dependente do campo de deformação e das variáveis do dano e de seu gradiente, resultando em uma inequação onde pode-se obter as forças termodinâmicas e por fim, a inequação de dissipação relacionada a variável dano. Além disto, foi realizado alguns estudos em relação a dependência e independência do tempo, obtendo critérios para a evolução da variável dano.

O modelo elastoplástico foi inserido no trabalho de Nedjar (2001) através do campo de deformações, onde foi considerado um problema de pequenas deformações, fazendo a decomposição aditiva da deformação em duas parcelas, sendo elas: elástica e plástica. A partir disto, formulou-se novamente as equações, obtendo-se novamente a inequação da desigualdade, só que agora com termos relacionados aos dois fenômenos: elastoplasticidade e dano.

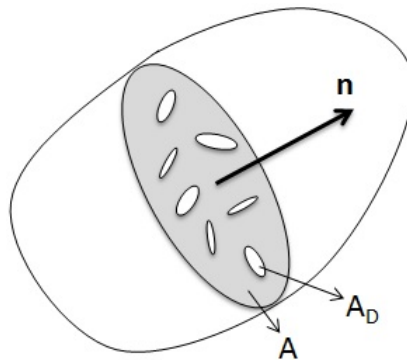
Além dos fenômenos de elastoplasticidade e dano, no trabalho de Menzel (2005), foi considerado endurecimento cinemático. Neste trabalho utilizou-se o princípio de entropia de Coleman-Noll, densidade de energia livre de Helmholtz e a inequação de Clausius-Duhem. Através desta inequação, encontra-se algumas expressões para alguns termos e os outros são escritos na inequação da dissipação.

Materiais semi-frágeis foram objeto de estudo no trabalho de Shao et al. (2006), sendo desenvolvido um modelo de acoplamento entre elastoplasticidade e dano. Notou-se a interação entre o início e crescimento de microtrincas com o dano induzido pela tensão. O fluxo plástico considerado foi o não associativo, ou seja, a deformação plástica não está orientada obrigatoriamente na normal a superfície de plastificação, diferentemente dos metais. Foi feito estudo entre simulações e dados experimentais, mostrando que o modelo proposto foi capaz de descrever as principais características do comportamento mecânico.

Segundo Arun, Rao e Srinivasan (2010) o dano inicial é visto como micro-vazios ou micro-trincas presentes nos materiais da engenharia, podendo ser isotrópico ou anisotrópico. Considerando um elemento volumétrico representativo (Figura 1), faz-se um corte em qualquer seção transversal, obtendo-se uma certa quantidade de área vazia (A_D , conforme Figura 1). Esta

área vazia dividida pela área da seção transversal total (A) é denominada dano, sendo uma grandeza adimensional. O dano isotrópico é definido como sendo independente da normal ($\mathbf{n}$, conforme Figura 1), ou seja, para qualquer corte feito no elemento representativo resultará na mesma quantidade de vazios, assumindo que o dano é igualmente distribuído em todas as direções do elemento.

Figura 1 – Representação do elemento volumétrico



Fonte: Autor

Na Figura 1 nota-se uma área sombreada, representando a área que resiste mecanicamente a um determinado carregamento, em outras palavras, diz-se que um material virgem ($D = 0$, sem dano) resiste a um carregamento maior do que o mesmo material não virgem ($0 < D < 1$, material danificado), por possuir uma área de resistência maior.

Em Arun, Rao e Srinivasan (2010), o potencial de dissipação considerado foi subdividido na parcela relativa à função de plastificação, outra parcela relativa ao endurecimento cinemático e por fim uma parcela de potencial relacionada à variável dano. Para Arun, Rao e Srinivasan (2010) fez-se com que a evolução do dano só ocorreria quando a plastificação acumulada atingisse um certo limite.

Dando continuidade no desenvolvimento dos modelos que relacionam os fenômenos de elastoplasticidade e dano, destaca-se o trabalho de Chen, Morozov e Shankar (2012), implementado uma subrotina no software Abaqus. O modelo considera o dano afetando diretamente a tensão aplicada e trabalha com a decomposição aditiva da deformação nas parcelas elástica e plástica. Para a variável dano, o autor diferencia os efeitos de compressão e tração levando em consideração o sinal da tensão aplicada, impondo patamares diferentes para o dano crítico.

O princípio do trabalho virtual, assim como pequenas deformações foram considerados no trabalho de Notta-Cuvier et al. (2015) onde ele considerou o acoplamento entre os fenômenos elastoplástico e dano juntamente com o endurecimento isotrópico. O endurecimento isotrópico no formato não linear fez com que o material aumentasse seu limite de escoamento, uma vez que o mesmo tenha sido atingido. Por utilizar geometrias bastante finas, considerou que o problema estava submetido a um estado plano de tensões, sendo carregadas axialmente por um processo quase estático. Levou em consideração também o endurecimento isotrópico,

Assim como Notta-Cuvier et al. (2015) e outros autores, Feitosa et al. (2015) também considerou pequenas deformações, mas ao invés de utilizar o princípio do trabalho virtual, utilizou o princípio das potências virtuais, levando em consideração as potências relativas às forças microestruturais. Baseado na segunda lei da termodinâmica obteve-se a inequação da desigualdade, possuindo termos de potência relacionados à: energia livre, deformação elástica, plastificação e dano.

Baseado na teoria das restrições internas e assumindo algumas hipóteses encontrou relações para as forças reativas baseado nas evoluções das variáveis de dano e plastificação. Foi feita analogias com relação às microforças obtendo expressões para o modelo envolvendo o acoplamento elastoplástico e dano independentes de taxas. Ainda em Feitosa et al. (2015), tem-se que a equação da tensão está dividida em duas parcelas: uma delas relaciona os elementos que sofrem compressão e a outra parcela relaciona os elementos que sofrem tração, estes sendo afetados pela variável dano.

No trabalho de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015) há a explanação sobre a fratura frágil e fratura dúctil em materiais sólidos elásticos. A fratura frágil é introduzida a partir da teoria de Griffith, já a fratura dúctil é introduzida via decomposição da energia livre nas parcelas de elasticidade e plasticidade com endurecimento isotrópico. Notou que o início do dano se deu próximo à concentradores de tensão e a partir deste início houve sua propagação, paralelamente à isto, houve um aumento da plastificação acumulada nas regiões onde as tensões ultrapassaram os limites de escoamento do material.

No trabalho de Miehe, Aldakheel e Raina (2016) destaca-se a forma da função de degradação ser quadrática, se tornando uma importante contribuição para que a construção da taxa de dano se torne linear. Além disto, o problema considerado foi desenvolvido sob um ambiente termodinamicamente consistente.

Então, nesta seção foram abordados alguns trabalhos envolvendo fenômenos multifísicas de elastoplasticidade e dano. Na próxima seção, encontram-se alguns trabalhos relacionando os fenômenos de elastoplasticidade e difusão.

2.3 Modelos envolvendo o acoplamento entre difusão e elastoplasticidade

No trabalho de Krom, Koers e Bakker (1999) foi utilizado o modelo de Sofronis e McMeeking ((SOFRONIS; MCMEEKING, 1989)) mostrando que o transporte de hidrogênio não fornece uma equação de balanço correta, então propôs-se uma modificação incluindo um fator dependente da taxa de deformação. Além disto, a deformação plástica proporciona ao material armadilhas onde os átomos de hidrogênio são capturados, fornecendo um aumento da tensão hidrostática nestas regiões.

O mecanismo de fragilização induzida pelo hidrogênio proporciona ao material uma instabilidade plástica localizada resultando em falha repentina. No trabalho de Sofronis, Liang e Aravas (2001) o efeito do hidrogênio na deformação do material é modelado através da dilatação do volume induzida pelo hidrogênio.

No trabalho de Taha e Sofronis (2001) apresenta-se um modelo de difusão de hidrogênio baseado na interação da tensão induzida pelo hidrogênio na rede com o fenômeno da elastoplasticidade do material considerando grandes deformações.

Em Cruz (2012) foi construído um simulador envolvendo o acoplamento elastoplástico e difusivo, onde foram testados diversos modelos analíticos para validação do código. Além do acoplamento entre os fenômenos elastoplástico e difusivo, foi implementado os endurecimentos cinemático e isotrópico não lineares, com a construção do simulador desenvolvida no MPhyScas. A resolução do problema multifísica foi implementada utilizando-se do método de decomposição do operador.

O modelo implementado possui a seguinte expressão para a tensão ($\mathbf{S}$):

$$\mathbf{S} = \underbrace{\lambda \text{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}}_{\mathbf{S}_{total}} - \underbrace{\bar{e}(3\lambda + 2\mu)(C - C_0) \mathbf{I}}_{\mathbf{S}_{difusivo}} - \underbrace{2\mu \mathbf{E}^p}_{\mathbf{S}_{plastico}} \quad (2.3)$$

Através da Equação 2.3, identifica-se três parcelas formando a tensão aplicada, que são: tensão total ($\mathbf{S}_{total}$, dependente da deformação total), tensão química ($\mathbf{S}_{difusivo}$, dependente da deformação química na forma hidrostática) e tensão plástica ($\mathbf{S}_{plastico}$, dependente da deformação plástica).

$$\mathbf{J} = -f_4(M) (\nabla C - f_5(C) \nabla (\text{etr}(\mathbf{S}))) \quad (2.4)$$

sendo: $f_4(M)$ expresso em função da mobilidade do soluto; e $f_5(C)$ expresso em função da concentração do soluto. Analisando a Equação 2.4 em relação ao gradiente do traço da tensão, pode-se dizer que: quanto maior o gradiente do traço da tensão resultará em um maior fluxo de soluto.

No recente trabalho de Fischer e Svoboda (2014) foi feito um estudo baseado em tubos de aço utilizados na indústria de petróleo estando submetidos a agressivas condições ambientais, podendo provocar a geração de hidrogênio atômico na sua superfície por processos eletroquímicos. Os átomos de hidrogênio podem penetrar e migrar-se pela rede cristalina, reagindo com outros átomos e formando moléculas, aumentando seu volume proporcionando deformações no material. A quantia de consumo de energia livre por cada um dos processos é fortemente dependente do tempo, com um consumo de energia inicialmente maior na difusão de soluto e posteriormente o consumo de energia maior no processo de deformação plástica.

Em Cruz, Barbosa e Santos (2017) utilizou-se o MPhyScas para construção do simulador

envolvendo o acoplamento entre os fenômenos elastoplástico e difusivo. Além disto, os resultados apresentados mostraram regiões plastificadas e migrações de soluto para as regiões de maior tensão.

Dentre os acoplamentos apresentados há outros trabalhos que incluem o fenômeno da temperatura, por exemplo: Roubicek e Tomassetti (2015). Mas, por motivos analíticos algumas simplificações são feitas, como: desprezar os efeitos de expansão térmica; desprezar o acoplamento direto entre concentração e deformação; e desprezar o acoplamento entre dano e temperatura.

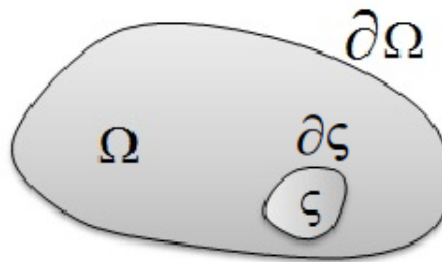
Através dos trabalhos apresentados acima, pode-se perceber a importância em estudar fenômenos multifísicas, pois os modelos caracterizam o acoplamento entre os fenômenos e estes acoplamentos permitem prever o processo de degradação com maior grau de proximidade ao fenômeno real. Isto quer dizer que fatores ambientais como ar úmido, água e substâncias utilizadas na indústria intensificam o processo de degradação de materiais, fazendo com que o material falhe em níveis de cargas bem abaixo daquelas que o material é capaz de suportar.

Ultimamente, os problemas de uma única física assim como os problemas multifísicas e suas relações têm sido bastante estudados conforme apresentado acima. Apresentou-se alguns modelos baseados na interação entre os fenômenos de difusão e dano, entre os fenômenos de elastoplasticidade e dano e por fim entre os fenômenos de difusão e elastoplasticidade, mas em nenhuma apresentação houve a interação entre todos eles em um único modelo. Portanto, no próximo capítulo apresenta-se o desenvolvimento do modelo envolvendo os fenômenos de elastoplasticidade, difusão e dano conjuntamente com endurecimentos cinemático e isotrópico não lineares.

3 Desenvolvimento do Modelo para Problemas Elastoplásticos Afetados pela Difusão e Dano

Neste capítulo apresenta-se o modelo utilizado neste trabalho que envolve problemas com fenômenos de elastoplasticidade, difusão e dano, acoplados. Utilizou-se o balanço de massa para o soluto, Princípio das Potências Virtuais (PPV) e a segunda lei da termodinâmica. Inicialmente, na Figura 2 há a representação de um corpo no espaço, onde estão apresentados o domínio (Ω) e seu contorno ($\partial\Omega$), além de um subdomínio (ζ) e o seu contorno ($\partial\zeta$).

Figura 2 – Corpo no espaço



Fonte: Autor

Baseado na representação do corpo acima e sabendo que o modelo aborda o fenômeno da difusão, apresenta-se abaixo o balanço do soluto:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} C dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} h dV \quad (3.1)$$

A equação acima relaciona a taxa de concentração de soluto dentro do domínio e o fluxo através do contorno, resultando no termo fonte. As formas fortes estão representadas abaixo permitindo analisar pontualmente a concentração de soluto no tempo e no espaço, estando definida no domínio e no contorno.

$$\begin{cases} \dot{C} = -\nabla \cdot \mathbf{J} + h & \text{em } \Omega \\ \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q} & \text{em } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.2)$$

A formulação variacional é uma maneira de encontrar as leis que governam o comportamento dos meios contínuos, podendo ser utilizada para problemas estruturais, para problemas de mecânica dos fluidos, para problemas de transferência de calor, entre outros.

O Princípio das Potências Virtuais é utilizado, pois envolve as velocidades virtuais, ou seja, a taxa das variáveis que deseja-se estudar, obtendo-se assim as evoluções das variáveis em estudo levando em consideração o comportamento mecânico.

Segundo o Princípio das Potências Virtuais, tem-se que para um corpo submetido a uma velocidade virtual $\bar{\mathbf{v}}$, a soma das potências externa (P^{ext}) e interna (P^{int}) localizadas em um subdomínio ($\zeta \subset \Omega$) é igual à potência de inércia (P^{ine}) do corpo, resultando na seguinte expressão:

$$P^{ext} + P^{int} = P^{ine} \quad (3.3)$$

A expressão acima considera problemas dinâmicos, onde a soma das parcelas de potência externa e interna resulta na parcela da potência inercial. Assumindo a seguinte hipótese:

H1 Considerando o problema como sendo estático, a parcela de potência inercial é nula, resultando em:

$$P^{ext} + P^{int} = 0$$

A potência externa está relacionada às movimentações realizadas sobre o corpo, já a potência interna relaciona as deformações existentes. Portanto, se for realizada uma movimentação de corpo rígido tem-se somente a parcela de potência externa, pois um corpo rígido não se deforma, ou seja, potência interna nula.

As expressões para as parcelas de potência externa e interna são encontradas em Fremond e Nedjar (1996) e estão apresentadas nas Equações 3.4 e 3.5 respectivamente. As equações levam em consideração as tensões, forças e taxas, tanto no contorno (parcela de potência externa) como no seu domínio (parcela de potência externa e interna).

Conforme pode ser observado a partir da Equação 3.4 há um símbolo (*) definido na lista de símbolos e variáveis abordando o produto entre dois termos que podem ser: tensores, vetores ou escalares. Esta nomenclatura foi escolhida para sintetizar a apresentação das equações, mas posteriormente cada um destes produtos estará adequado à respectiva aplicação.

$$P^{ext} = \int_{\partial\zeta} (\mathbf{F} * \bar{\mathbf{v}}) dS + \int_{\zeta} (\mathbf{t} * \bar{\mathbf{v}}) dV \quad (3.4)$$

$$P^{int} = - \int_{\zeta} (\mathbf{\Pi} * \nabla \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{g} * \bar{\mathbf{v}}) dV \quad (3.5)$$

Todas as componentes apresentadas acima estão definidas nas Equações 3.6-3.9, estando relacionadas aos fenômenos de elasticidade(^e), difusão(^C), dano(^D) e parcela relacionada a

outros fenômenos (β^k). A Equação 3.6 apresenta o vetor de forças no contorno, enquanto que as Equações 3.7, 3.8 e 3.9 representam as forças de corpo externas ($\mathbf{t}$), o vetor de tensões $\mathbf{\Pi}$ e o vetor de forças de corpo internas ($\mathbf{g}$), respectivamente.

$$\mathbf{F} = [\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^C, \mathbf{F}^D, \mathbf{F}^{\beta^k}]^T \quad (3.6)$$

$$\mathbf{t} = [\mathbf{t}^e, \mathbf{t}^C, \mathbf{t}^D, \mathbf{t}^{\beta^k}]^T \quad (3.7)$$

$$\mathbf{\Pi} = [\mathbf{S}^e, \mathbf{S}^C, \mathbf{S}^D, \mathbf{S}^{\beta^k}]^T \quad (3.8)$$

$$\mathbf{g} = [\mathbf{g}^e, \mathbf{g}^C, \mathbf{g}^D, \mathbf{g}^{\beta^k}]^T \quad (3.9)$$

A parcela β^k está relacionada a outros fenômenos que possam vir a ser inseridos no problema, por exemplo: plastificação, envelhecimento, entre outros. Está definida abaixo:

$$\beta^k = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n\} \quad (3.10)$$

onde n é o número de fenômenos que possam vir a ser inseridos na modelagem.

Nota-se pela Equação 3.4 e 3.5 que todas as componentes apresentadas nas Equações 3.6-3.9 são multiplicadas pelo campo ou pelo gradiente do campo de velocidades virtuais, onde o campo de velocidade virtual é definido como: $\bar{\mathbf{v}} = (\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mu}, \bar{D}, \bar{\beta}^k)$, sendo realizadas em qualquer parte do domínio. Substituindo as expressões das potências externa e interna na equação obtida pela Hipótese **H1**, tem-se:

$$\int_{\partial\zeta} (\mathbf{F} * \bar{\mathbf{v}}) dS + \int_{\zeta} (\mathbf{t} * \bar{\mathbf{v}}) dV - \int_{\zeta} (\mathbf{\Pi} * \nabla \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{g} * \bar{\mathbf{v}}) dV = 0 \quad (3.11)$$

Sabendo que o vetor força ($\mathbf{F}$) é obtido após a aplicação do vetor normal no vetor de tensões ($\mathbf{\Pi}$), conforme apresentado na equação abaixo:

$$\mathbf{F} = \mathbf{\Pi} * \mathbf{n}^T \quad \text{em } \partial\Omega \quad (3.12)$$

onde cada uma linha do vetor tensão $\mathbf{\Pi}$ definido na Equação 3.8 é multiplicado pelo vetor normal, obtendo o vetor força $\mathbf{F}$. Substituindo este vetor força na Equação 3.11, tem-se:

$$\int_{\partial\zeta} ((\mathbf{\Pi} * \mathbf{n}) * \bar{\mathbf{v}}) dS + \int_{\zeta} (\mathbf{t} * \bar{\mathbf{v}}) dV - \int_{\zeta} (\mathbf{\Pi} * \nabla \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{g} * \bar{\mathbf{v}}) dV = 0, \quad \forall \zeta \subset \Omega \quad (3.13)$$

Aplicando o teorema da divergência na Equação 3.13, obtém-se as equações de balanço para cada um dos fenômenos (elasticidade, difusão, dano e outros) na sua forma forte, sendo representado pela seguinte expressão:

$$\nabla \cdot \Pi - \mathbf{g} + \mathbf{t} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega \quad (3.14)$$

A potência externa envolve a potência inserida por agentes externos em um subdomínio possuindo as seguintes parcelas: elasticidade, difusão, dano e outras variáveis. Em Gurtin, Fried e Anand (2013), adiciona-se ao termo de potência externa um termo de potência química (P^{qui}), que representa o fluxo de energia adicionado ao subdomínio pela inclusão de átomos por agentes externos, levando em consideração o termo fonte (h) e o fluxo de soluto ($\mathbf{J}$), o primeiro deles atuando no domínio e o segundo atuando sobre o seu contorno. Sendo $\tilde{\mu}$ o potencial químico.

$$P^{qui} = \int_{\zeta} \tilde{\mu} h \, d\zeta - \int_{\partial\zeta} \tilde{\mu} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (3.15)$$

Para a equação da segunda lei, foi considerado que a temperatura seja independente do tempo e da posição, estando representada abaixo em termos da energia livre (ψ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\zeta} \psi \, d\zeta \leq P^{ext} + \int_{\zeta} \tilde{\mu} h \, d\zeta - \int_{\partial\zeta} (\tilde{\mu} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) \, dA \quad (3.16)$$

Utilizando a Hipótese **H1**, isolando o termo fonte da Equação 3.2, substituindo na inequação acima e realizando manipulações matemáticas, obtém-se:

$$\dot{\psi} \leq \Pi * \nabla \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{g} * \bar{\mathbf{v}} + \tilde{\mu} \dot{C} - \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \quad (3.17)$$

A expressão acima está escrita de forma bem compacta, mas ela engloba todas as parcelas referentes aos fenômenos pertencentes ao problema, que são responsáveis em contribuir com a taxa de energia envolvida.

Para melhor entendimento da inequação acima, faz-se as substituições dos termos relacionados com o vetor de tensões Π (Equação 3.8) e com o vetor de forças internas $\mathbf{g}$ (Equação 3.9), considerados neste trabalho, resultando em:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}} - \mathbf{S}^C \cdot \nabla \dot{C} - g^C \dot{C} - \mathbf{S}^D \cdot \nabla \dot{D} - g^D \dot{D} - \\ - \left(\mathbf{S}^{\beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k \right) - \left(g^{\beta^k} * \dot{\beta}^k \right) - \tilde{\mu} \dot{C} + \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \leq 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Conforme apresentado na inequação acima, há vários termos de potências, sendo um deles relativo a taxa de deformação. Neste trabalho considera-se que o problema é composto por pequenas deformações e assume-se sua decomposição aditiva em três parcelas, sendo elas: elástica ($\mathbf{E}^e$), difusiva ($\mathbf{E}^C$) e em função de outras variáveis ($\mathbf{E}^{\beta^k}$). Isto quer dizer que a

deformação total pode apresentar três fontes de contribuição. Sua expressão está apresentada abaixo:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^C + \mathbf{E}^{\beta^k} \quad (3.19)$$

A deformação elástica (reversível) é caracterizada pelo regime de deformação onde não há mudança dimensional permanente, após a retirada do carregamento. A deformação química considerada neste trabalho afeta as componentes hidrostáticas do tensor deformação (permitindo alterações volumétricas), conforme equação abaixo:

$$\mathbf{E}^C = \tilde{e}(C - C_0)\mathbf{I} \quad (3.20)$$

sendo: C é a concentração de soluto e C_0 é a concentração inicial de soluto. A deformação relativa à outras variáveis (β^k) será utilizada e posteriormente particularizada, portanto a derivada da deformação relativa a outras variáveis em relação ao tempo está apresentada abaixo e será utilizada na Equação 3.18 através da taxa de deformação.

$$\dot{\mathbf{E}}^{\beta^k} = \frac{\partial \mathbf{E}^{\beta^k}}{\partial \beta^k} \dot{\beta}^k \quad (3.21)$$

Após estes detalhes a respeito do tensor deformação e baseado na sua decomposição aditiva apresentada na Equação 3.19, pode-se ter a seguinte expressão para a taxa de deformação:

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^e + \dot{\mathbf{E}}^C + \frac{\partial \mathbf{E}^{\beta^k}}{\partial \beta^k} \dot{\beta}^k \quad (3.22)$$

O desenvolvimento acima foi realizado para que seja substituído na inequação apresentada na Equação 3.18, assim como rearranjos matemáticos, apresenta-se abaixo a inequação de Clausius-Duhem.

$$\begin{aligned} \dot{\psi} - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}}^e - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}}^C - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}}^{\beta^k} - \mathbf{S}^C \cdot \nabla \dot{C} - (g^C + \tilde{\mu}) \dot{C} - \\ - \mathbf{S}^D \cdot \nabla \dot{D} - g^D \dot{D} - (\mathbf{S}^{\beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k) - (g^{\beta^k} * \dot{\beta}^k) + \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \leq 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Pela equação acima, verifica-se a existência das taxas de deformação, na Equação 3.21 há a definição da deformação para outras variáveis e conforme definido na Equação 3.20, faz-se sua derivada temporal e através de rearranjos matemáticos, encontra-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}}^e - \mathbf{S}^C \cdot \nabla \dot{C} - \bar{g}^C \dot{C} - \mathbf{S}^D \cdot \nabla \dot{D} - \\ - g^D \dot{D} - \mathbf{S}^{\beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k - \bar{g}^{\beta^k} * \dot{\beta}^k + \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \leq 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Definindo-se:

$$\begin{aligned}\bar{g}^{\beta^k} &= g^{\beta^k} + \tau^{\beta^k} \\ \bar{g}^C &= g^C + \tilde{\mu} + \tau^C\end{aligned}\quad (3.25)$$

onde:

$$\begin{aligned}\tau^{\beta^k} &= \mathbf{S}^e : \frac{\partial \mathbf{E}^{\beta^k}}{\partial \beta^k} \\ \tau^C &= \tilde{e}tr(\mathbf{S}^e)\end{aligned}\quad (3.26)$$

A inequação acima apresenta as parcelas de potências envolvidas no problema, sendo obtida pelas definições de potência externa e interna, hipóteses, pela utilização do PPV e da segunda lei da termodinâmica.

No âmbito da mecânica do contínuo que aborda aspectos cinemáticos, leis básicas de equilíbrio e equações constitutivas, tem-se ainda uma teoria que abrange grande parte dos materiais denominada Teoria de Restrições Internas, com o objetivo de delimitar as respostas internas do material como por exemplo: incompressibilidade e vínculo cinemático. Esta teoria aborda conceitos definidos em Capriz (1989), onde as variáveis são subdivididas em ativas e reativas de forma a analisar a energia envolvida e suas implicações de natureza cinemática.

3.1 Restrições Internas

Esta subseção diz respeito a restrições internas onde as variáveis são analisadas (variáveis consideradas restritas são: D e β_r^k , onde β_r^k são algumas variáveis pertencentes a β^k com valores restritos). Segundo (CAPRIZ, 1989), cada uma das variáveis é dividida em duas componentes, denominadas: *reativas* e *ativas*. A componente *reativa* é a parcela da variável cuja respectiva força não executa trabalho e a componente *ativa* é a parcela da variável cuja força realiza trabalho.

Há outros autores como nos trabalhos de Carlson, Fried e Tortorelli (2003) e Fu e Chen (2007) que tratam as restrições de forma geométrica (havendo uma componente normal e outra tangencial), onde a componente normal é automaticamente definida como a responsável por não realizar trabalho e somente a componente tangencial entra na parcela da inequação da energia. Consequentemente, a componente tangencial está relacionada a componente ativa e é de se esperar que seja escrita uma equação constitutiva para ela (CARLSON; FRIED; TORTORELLI, 2003). A componente normal está relacionada à componente reativa e é determinada pelas restrições com um multiplicador escalar que assume-se ser constitutivamente indeterminado.

Escolheu-se trabalhar com o termo reativo e ativo, sendo assim pode-se escrever as tensões ($\mathbf{S}$) e forças internas ($\mathbf{g}$) conforme apresentados abaixo:

$$\begin{aligned}
S^e &= S_a^e + S_r^e; & S^C &= S_a^C + S_r^C; & S^D &= S_a^D + S_r^D; \\
S^{\beta^k} &= S_a^{\beta^k} + S_r^{\beta^k}; & \tilde{\mu} &= \tilde{\mu}_a + \tilde{\mu}_r; & g^e &= g_a^e + g_r^e; \\
\bar{g}^C &= \bar{g}_a^C + \bar{g}_r^C; & g^D &= g_a^D + g_r^D; & \bar{g}^{\beta^k} &= \bar{g}_a^{\beta^k} + \bar{g}_r^{\beta^k}
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Segundo Duda et al. (2015) as relações constitutivas só podem ser determinadas para as componentes ativas. Sabendo que, as componentes reativas não gastam potência, pode-se concluir que a soma das potências geradas pela parte reativa das tensões e forças é nula, conforme apresentado abaixo:

$$\begin{aligned}
& \mathbf{S}_r^e : \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{S}_r^C \cdot \nabla \dot{C} + \mathbf{S}_r^D \cdot \nabla \dot{D} + \mathbf{S}_r^{\beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k + \\
& + \bar{g}_r^C \dot{C} + g_r^D \dot{D} + \left(\bar{g}_r^{\beta^k} * \dot{\beta}^k \right) - \nabla \tilde{\mu}_r \cdot \mathbf{J} = 0
\end{aligned} \tag{3.28}$$

O termo *restrito* ou *restrição* quer dizer que ele impõem um certo conhecimento sobre o termo, ou seja, para uma variável *restrita*, significa dizer que está relacionado à ela uma equação (de restrição) pré-determinada. Para o termo *não restrito*, se tratando de variável, podemos concluir que ela pode assumir qualquer valor, ou seja, um valor a ser calculado. Baseado nisto e na Equação 3.28, considera-se a seguinte hipótese.

H2 Assume-se que as variáveis: $\dot{\mathbf{E}}$, $\nabla \dot{C}$, $\nabla \dot{D}$, $\nabla \dot{\beta}^k$, $\dot{C}$ e $\mathbf{J}$ são não restritas, portanto:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_r^e &= \mathbf{0}, & \mathbf{S}_r^C &= \mathbf{0}, & \mathbf{S}_r^D &= \mathbf{0}, \\
\mathbf{S}_r^{\beta^k} &= \mathbf{0}, & \bar{g}_r^C &= 0, & e & \nabla \tilde{\mu}_r = \mathbf{0}
\end{aligned}$$

Aplicando esta hipótese na Equação 3.28, resulta em:

$$g_r^D \dot{D} + \bar{g}_r^{\beta^k} * \dot{\beta}^k = 0 \tag{3.29}$$

Considerando iguais a zero cada um dos termos acima, assume-se a seguinte hipótese para a primeira variável restrita:

H3 Taxa de dano ($\dot{D}$) sempre maior ou igual a zero, pois uma das características do dano é a relação existente com processos irreversíveis.

$$\dot{D} \geq 0$$

Tomando como base esta hipótese, conclui-se que:

$$\begin{cases} g_r^D = \text{Indeterminado} & ; \text{se } \dot{D} = 0 \\ g_r^D = 0 & ; \text{se } \dot{D} > 0 \end{cases} \quad (3.30)$$

Da mesma forma que a hipótese anterior, cria-se uma hipótese para a(s) outra(s) variável(is) restrita(s) definida(s) no início da subseção representada por β_r^k . Esta variável por poder se tratar de diversos fenômenos, então considera-se que uma parcela dessas variáveis é restrita e outra parte é não restrita, portanto, para as variáveis pertencentes à β^k que são restritas, assume-se a seguinte hipótese:

H4 Taxa da variável β_r^k sempre maior ou igual a zero.

$$\dot{\beta}_r^k \geq 0$$

Tomando como base esta hipótese, conclui-se que:

$$\begin{cases} \bar{g}_r^{\beta_r^k} = \text{Indeterminado} & ; \text{se } \dot{\beta}_r^k = 0 \\ \bar{g}_r^{\beta_r^k} = 0 & ; \text{se } \dot{\beta}_r^k > 0 \end{cases} \quad (3.31)$$

Com a teoria de restrições internas, percebe-se a relação entre as evoluções das variáveis com as respectivas forças internas, concluindo que as evoluções só ocorrem quando toda força interna aplicada gere trabalho. Sabe-se que a força interna foi dividida em duas componentes (Equação 3.27), então, tem-se que o trabalho realizado pelas variáveis restritas só existirá se a respectiva força reativa for nula (conforme Equações 3.30 e 3.31), ou seja, toda a força interna está atribuída a componente ativa.

Após as análises e conclusões a respeito das restrições internas (abranjem a parcela reativa), na próxima subseção encontra-se a teoria constitutiva que engloba a parcela das forças internas ativas respectiva às variáveis.

3.2 Teoria Constitutiva

Esta teoria relaciona os acoplamentos existentes entre os fenômenos através da energia livre e da desigualdade de dissipação obtendo-se expressões para as forças relativas a cada uma das variáveis. Além disto, propôs-se algumas hipóteses aos termos dissipativos, para que a inequação seja satisfeita e ainda apresenta-se uma análise acerca do desenvolvimento das variáveis.

Abaixo, encontra-se uma lista com todas as variáveis que compõem o argumento constitutivo (s).

$$s = (\mathbf{E}^e, C, \nabla C, D, \nabla D, \beta^k, \nabla \beta^k, \mathbf{J}, \dot{D}, \dot{\beta}^k) \quad (3.32)$$

As variáveis com taxa ($\mathbf{J}, \dot{D}, \dot{\beta}^k$) foram definidas no argumento s_d e as demais variáveis estão compondo o argumento s_e .

$$s = (s_e, s_d) \begin{cases} s_e = (\mathbf{E}^e, C, \nabla C, D, \nabla D, \beta^k, \nabla \beta^k) \\ s_d = (\mathbf{J}, \dot{D}, \dot{\beta}^k) \end{cases} \quad (3.33)$$

Esta divisão será útil na hipótese criada posteriormente, que trata das forças mecânicas dissipativas.

As equações constitutivas estão relacionadas a todos os termos que multiplicam as taxas na desigualdade 3.24 e estão listadas abaixo:

- Equações constitutivas: $\psi, \mathbf{S}^e, \mathbf{S}^C, \bar{g}^C, \mathbf{S}^D, g^D, \mathbf{S}^{\beta^k}, \bar{g}^{\beta^k}, \tilde{\mu}, \nabla \tilde{\mu}$

$$\begin{aligned} \psi &= \hat{\psi}(s); \quad \mathbf{S}^e = \hat{\mathbf{S}}^e(s); \quad \mathbf{S}^C = \hat{\mathbf{S}}^C(s); \quad \bar{g}^C = \hat{g}^C(s); \quad \mathbf{S}^D = \hat{\mathbf{S}}^D(s); \\ g^D &= \hat{g}^D(s); \quad \mathbf{S}^{\beta^k} = \hat{\mathbf{S}}^{\beta^k}(s); \quad \bar{g}^{\beta^k} = \hat{g}^{\beta^k}(s); \quad \tilde{\mu} = \hat{\mu}(s); \quad \nabla \tilde{\mu} = \nabla \hat{\mu}(s) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Como as variáveis $\mathbf{J}, \dot{D}$ e $\dot{\beta}^k$ são consideradas dissipativas, então as forças $\tilde{\mu}, g^D$ e $\bar{g}^{\beta^k}$ são consideradas dissipativas, portanto devem ser tratadas de forma diferente das variáveis de equilíbrio. Com relação à força química ($\tilde{\mu}$), será abordado um tratamento específico para ela na Subseção 3.2.3. Já para as forças ativas relativas à mecânica, considera-se que as forças foram decompostas aditivamente nas parcelas de equilíbrio e dissipativa, conforme apresentado abaixo:

$$\begin{cases} g_a^D = g_e^D + g_d^D \\ \bar{g}_a^{\beta^k} = \bar{g}_e^{\beta^k} + \bar{g}_d^{\beta^k} \end{cases} \quad (3.35)$$

onde os sub-índices e e d se referem às parcelas da força de equilíbrio e não equilíbrio ou dissipativa, respectivamente.

Assim como apresentado em Coleman e Noll (1963), usa-se o procedimento de Coleman-Noll na desigualdade de dissipação expressa na Equação 3.24 exigindo que as respostas constitutivas sejam válidas para todos os processos constitutivos.

Assumindo que a energia livre não depende dos termos dissipativos, ou seja, a derivada da energia em função das variáveis dissipativas é nula, conforme apresentado abaixo:

$$\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathbf{J}} = 0; \quad \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \dot{D}} = 0; \quad \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \dot{\beta}^k} = 0 \quad (3.36)$$

Reescrevendo a dependência da energia livre $\psi(\mathbf{E}^e, C, \nabla C, D, \nabla D, \beta^k, \nabla \beta^k)$, faz-se a derivada dela em relação ao tempo para substituir na desigualdade de dissipação (Equação 3.24).

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}^e} \dot{\mathbf{E}}^e + \frac{\partial \psi}{\partial C} \dot{C} + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \nabla \dot{C} + \frac{\partial \psi}{\partial D} \dot{D} + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \nabla \dot{D} + \\ & + \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} * \dot{\beta}^k + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k \end{aligned} \quad (3.37)$$

Substituindo as Equações 3.35 e 3.37 na 3.24, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}^e} \dot{\mathbf{E}}^e + \frac{\partial \psi}{\partial C} \dot{C} + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \nabla \dot{C} + \frac{\partial \psi}{\partial D} \dot{D} + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \nabla \dot{D} + \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} * \dot{\beta}^k + \\ & + \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k - \mathbf{S}^e : \dot{\mathbf{E}}^e - \mathbf{S}^C : \nabla \dot{C} - (\tilde{\mu} + g^C + \tau^C) \dot{C} - \mathbf{S}^D : \nabla \dot{D} - \\ & - (g_e^D + g_d^D) \dot{D} - (\mathbf{S}^{\beta^k} * \nabla \dot{\beta}^k) - (\bar{g}_e^{\beta^k} + \bar{g}_d^{\beta^k}) * \dot{\beta}^k + \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \leq 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Reorganizando a inequação acima em função das taxas das variáveis, multiplicando por -1 e reescrevendo, obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{S}^e - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}^e} \right) : \dot{\mathbf{E}}^e + \left((\tilde{\mu} + g^C + \tau^C) - \frac{\partial \psi}{\partial C} \right) \dot{C} + \left(\mathbf{S}^C - \frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \right) \nabla \dot{C} + \\ & + \left(g_e^D - \frac{\partial \psi}{\partial D} \right) \dot{D} + \left(\mathbf{S}^D - \frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) \nabla \dot{D} + \left((\bar{g}_e^{\beta^k} - \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k}) * \dot{\beta}^k \right) + \\ & + \left((\mathbf{S}^{\beta^k} - \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k}) * \nabla \dot{\beta}^k \right) + g_d^D \dot{D} + \bar{g}_d^{\beta^k} * \dot{\beta}^k - \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \geq 0 \end{aligned} \quad (3.39)$$

Para satisfazer a Inequação 3.39, primeiramente deduz-se a partir de considerar as taxas como arbitrárias e as forças e as derivadas da energia livre em função das variáveis como não dependentes das taxas, tem-se as equações de estado que relacionam as forças à energia livre, conforme apresentado abaixo:

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{S}^e = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}^e} \right); \left(\tilde{\mu} + g^C + \tau^C = \frac{\partial \psi}{\partial C} \right); \left(\mathbf{S}^C = \frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \right); \\ & \left(g_e^D = \frac{\partial \psi}{\partial D} \right); \left(\mathbf{S}^D = \frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right); \left(\bar{g}_e^{\beta^k} = \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} \right); \left(\mathbf{S}^{\beta^k} = \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

Como assumido anteriormente, as forças relativas às variáveis mecânicas dependentes de taxa foram subdivididas em duas componentes (Equação 3.35), sendo uma parcela de equilíbrio e outra dissipativa. As componentes das forças relacionadas com o equilíbrio estão definidas

acima e associadas com a energia livre. As parcelas dissipativas são os termos que sobram da Inequação 3.39 e estão reescritas abaixo:

$$\delta = g_d^D \dot{D} + \bar{g}_d^{\beta^k} * \dot{\beta}^k - \nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \geq 0 \quad (3.41)$$

Cada uma das parcelas acima corresponde a um dos fenômenos envolvidos no problema, como: danificação ($\dot{D}$), difusão ($\mathbf{J}$) e outros ($\dot{\beta}^k$). Todos estão relacionados com a dissipação de energia pelo sistema, pois foram os termos que resultaram da segunda lei da termodinâmica, desenvolvida anteriormente. Para que a Inequação 3.41 seja satisfeita propõem-se a seguinte Hipótese:

H5 Assumindo que cada um dos termos da inequação acima tem a característica de ser não negativo, ou seja:

$$\begin{cases} g_d^D \dot{D} \geq 0 \\ \bar{g}_d^{\beta^k} * \dot{\beta}^k \geq 0 \\ -\nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \geq 0 \end{cases}$$

garante-se que $\delta \geq 0$, satisfazendo o problema.

Com relação ao sistema acima, considera-se duas linhas de pesquisa: a primeira envolvendo variáveis mecânicas ($\dot{D}$ e $\dot{\beta}^k$) e a segunda envolvendo uma variável de difusão ($\mathbf{J}$) que será tratada posteriormente. As variáveis estão sendo multiplicadas pelas forças, portanto assume-se a seguinte hipótese:

H6 Assumindo que as forças mecânicas dissipativas possam ser escritas como:

$$\begin{cases} g_d^D = A_1(s_e, J) + \sum_{k=1}^n A_{2_{\beta^k}}(s_e, \dot{\beta}^k) + A_3(s) \dot{D} = \bar{A}_0 + A_3 \dot{D} \\ \bar{g}_d^{\beta^k} = A_4^{\beta^k}(s_e, \dot{D}) + A_5^{\beta^k}(s_e, J) + \sum_{i \neq k}^n A_{6_{\beta^i}}^{\beta^k}(s_e, \dot{\beta}^i) + A_7^{\beta^k}(s) * \dot{\beta}^k = \bar{A}_1^{\beta^k} + A_7^{\beta^k} * \dot{\beta}^k \end{cases}$$

onde n é a quantidade de variáveis que possam vir a ser inseridas na formulação do problema. A primeira linha de pesquisa está analisada a seguir, enquanto a segunda linha de pesquisa será abordada posteriormente. Admitindo que A_3 e $A_7^{\beta^k}$ não dependem de $\dot{D}$ e $\dot{\beta}^k$, respectivamente.

Então, para que a desigualdade apresentada na Equação 3.41 seja satisfeita, assume-se que:

$$\begin{aligned} (A_1 \geq 0); \quad (A_{2_{\beta^k}} \geq 0); \quad (A_3 > 0); \\ (A_4^{\beta^k} \geq 0); \quad (A_5^{\beta^k} \geq 0); \quad (A_{6_{\beta^i}}^{\beta^k} \geq 0); \quad (A_7^{\beta^k} > 0) \end{aligned} \quad (3.42)$$

ou seja, os termos $\bar{A}_0$ e $\bar{A}_1^{\beta^k}$ são maiores ou iguais a zero e representam termos dissipativos podendo estar relacionados à todas as taxas dissipativas exceto à taxa da variável que ele está relacionado.

Baseado na divisão das variáveis feita pela teoria constitutiva (divisão em variáveis de equilíbrio e não equilíbrio), assim como nos termos obtidos na Equação 3.40 (relacionam forças e tensões com a derivada de energia livre) em conjunto com a Hipótese **H6**, escreve-se o seguinte desenvolvimento para a força interna relacionada ao dano:

$$g^D = g_e^D + g_d^D + g_r^D \begin{cases} g_e^D = \frac{\partial \psi}{\partial D} \\ g_d^D = \bar{A}_0 + A_3 \dot{D} \end{cases} \quad (3.43)$$

Juntando as equações acima, escreve-se a força interna relativa ao dano, como:

$$g^D = \frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 + A_3 \dot{D} + g_r^D \quad (3.44)$$

Utilizando-se do mesmo raciocínio abordado acima, conclui-se que a parcela de força relativa a outros processos pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\bar{g}^{\beta^k} = \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} + \bar{A}_1^{\beta^k} + A_7 \dot{\beta}^k + \bar{g}_r^{\beta^k} \quad (3.45)$$

A análise acima é válida para os casos onde há dependência de taxa. Nas próximas subseções apresentam-se os estudos envolvendo as taxas das variáveis, iniciando com o estudo da variável dano (D) e em seguida com outras variáveis (β^k).

3.2.1 Desenvolvimento da evolução da variável dano

Apresenta-se nesta subseção todo o desenvolvimento necessário para a obtenção da evolução da variável dano. Tomando como base a equação apresentada pela Hipótese **H6**, tem-se:

$$g_d^D = \bar{A}_0 + A_3 \dot{D} \quad (3.46)$$

Encontram-se abaixo as expressões necessárias para o desenvolvimento da evolução do dano, lembrando que todas elas foram obtidas e apresentadas anteriormente, provenientes da teoria constitutiva, de critérios assumidos na desigualdade de dissipação Equação 3.40 e da equação de balanço 3.14.

$$\begin{aligned} & (g^D = g_e^D + g_d^D + g_r^D); \quad \left(g_e^D = \frac{\partial \psi}{\partial D} \right); \quad \left(s^D = \frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) \\ e \quad & (\nabla \cdot s^D - g^D + t^D = 0) \end{aligned}$$

Utilizando estas expressões e fazendo as devidas substituições na Equação 3.46, tem-se o seguinte desenvolvimento para a evolução do dano:

$$A_3 \dot{D} = g_d^D - \bar{A}_0 \quad (3.47)$$

$$= g^D - g_e^D - g_r^D - \bar{A}_0 \quad (3.48)$$

$$= (\nabla \cdot S^D + t^D) - g_e^D - g_r^D - \bar{A}_0 \quad (3.49)$$

$$= \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) + t^D - \frac{\partial \psi}{\partial D} - g_r^D - \bar{A}_0 \quad (3.50)$$

Então a evolução do dano, pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$A_3 \dot{D} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) + t^D - \left(\frac{\partial \psi}{\partial D} + g_r^D + \bar{A}_0 \right) \quad (3.51)$$

Após a formulação da evolução do dano ter sido concluída e expressa na Equação 3.51, faz-se a análise relativa à taxa da variável β^k .

3.2.2 Desenvolvimento da evolução da variável β^k

Assim como foi feito na subseção anterior, quando foi abordado a evolução da variável dano, encontra-se abaixo o mesmo desenvolvimento para as outras variáveis (β^k). A expressão abaixo foi obtida da Hipótese **H6**.

$$\bar{g}_d^{\beta^k} = \bar{A}_1^{\beta^k} + A_7^{\beta^k} * \dot{\beta}^k \quad (3.52)$$

As equações abaixo são necessárias no desenvolvimento da evolução da variável β^k e foram obtidas anteriormente através da teoria constitutiva, de critérios assumidos na inequação de Clausius-Duhem e da equação de balanço.

$$\begin{aligned} \left(\bar{g}^{\beta^k} = \bar{g}_e^{\beta^k} + \bar{g}_d^{\beta^k} + \bar{g}_r^{\beta^k} \right) \quad & \left(\bar{g}_e^{\beta^k} = \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} \right) \quad \left(S^{\beta^k} = \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} \right) \\ \left(\bar{g}^{\beta^k} = g^{\beta^k} + \tau^{\beta^k} \right) \quad & e \quad \left(\nabla \cdot S^{\beta^k} - g^{\beta^k} + t^{\beta^k} = 0 \right) \end{aligned}$$

Assim como foi feito na análise da função resposta para a variável dano, faz-se a análise da taxa da variável β^k , possuindo o seguinte desenvolvimento:

$$A_7^{\beta^k} \dot{\beta}^k = \bar{g}_d^{\beta^k} - \bar{A}_1^{\beta^k} \quad (3.53)$$

$$= \bar{g}^{\beta^k} - \bar{g}_e^{\beta^k} - \bar{g}_r^{\beta^k} - \bar{A}_1^{\beta^k} \quad (3.54)$$

$$= g^{\beta^k} + \tau^{\beta^k} - \bar{g}_e^{\beta^k} - \bar{g}_r^{\beta^k} - \bar{A}_1^{\beta^k} \quad (3.55)$$

$$= \left(\nabla \cdot S^{\beta^k} + t^{\beta^k} \right) + \tau^{\beta^k} - \bar{g}_e^{\beta^k} - \bar{g}_r^{\beta^k} - \bar{A}_1^{\beta^k} \quad (3.56)$$

$$= \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} \right) + t^{\beta^k} + \tau^{\beta^k} - \frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} - \bar{g}_r^{\beta^k} - \bar{A}_1^{\beta^k} \quad (3.57)$$

Então a taxa da variável β^k , pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$A_7^{\beta^k} \dot{\beta}^k = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla \beta^k} \right) + t^{\beta^k} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial \beta^k} + \bar{g}_r^{\beta^k} + \bar{A}_1^{\beta^k} - \tau^{\beta^k} \right) \quad (3.58)$$

Após realizar o estudo sobre os problemas relacionados aos fenômenos mecânicos, na próxima subseção tem-se a análise realizada considerando o fenômeno da difusão.

3.2.3 Desenvolvimento do potencial químico

Combinando as duas equações relacionadas à difusão apresentadas na Equação 3.40 com a Equação 3.14 (referente ao fenômeno da difusão), tem-se a seguinte expressão para o potencial químico.

$$\tilde{\mu} = \frac{\partial \psi}{\partial C} - \left(\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \right) + t^C + \tau^C \right) \quad (3.59)$$

A expressão acima é muito similar às encontradas nas literaturas, como nos trabalhos de Duda et al. (2009) e Barbosa et al. (2007).

De posse do potencial químico desenvolvido acima, desenvolve-se a segunda linha de pesquisa que aborda sobre a variável de difusão, lembrando que as condições para que a Inequação 3.41 seja satisfeita já foram impostas na Hipótese **H5**. Esta hipótese possui três inequações, das quais, duas já foram analisadas nas subseções anteriores, portanto resta a análise da seguinte inequação:

$$-\nabla \tilde{\mu} \cdot \mathbf{J} \geq 0 \quad (3.60)$$

H7 Assumindo que o gradiente do potencial químico seja proporcional ao fluxo.

$$-\nabla \tilde{\mu} = \mathbf{A}_0 \mathbf{J}$$

sendo, $\mathbf{A}_0 = \frac{1}{CM} \mathbf{I}$, então:

$$\mathbf{J} = CM(-\nabla \tilde{\mu}) \quad (3.61)$$

Substituindo a Equação 3.59 acima, obtém-se a seguinte expressão para o fluxo químico:

$$\mathbf{J} = CM \left(-\nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial C} - \left(\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \right) + t^C + \tau^C \right) \right) \right) \quad (3.62)$$

Após o desenvolvimento para as taxas das variáveis relacionadas a cada um dos fenômenos, nas próximas subseções apresentam-se os desenvolvimentos necessários para o sistema de fenômenos acoplados considerados neste trabalho.

3.3 Particularização do Problema

Para o problema em análise, considera-se duas linhas para a variável β^k , uma delas está relacionada com o endurecimento isotrópico e a outra com o endurecimento cinemático.

Assumiu-se o seguinte:

$$\beta = [p, \mathbf{z}]$$

Onde p é a variável relacionada com o endurecimento isotrópico e $\mathbf{z}$ é a variável relacionada com o endurecimento cinemático, portanto, a partir de agora a variável β^k estará relacionada com as variáveis de endurecimento.

Utilizando a teoria de restrição interna e a teoria constitutiva, obtém-se equações para os casos dependentes e independentes das taxas das variáveis. Nesta seção apresenta-se inicialmente a análise para a variável dano, seguida pelas variáveis relacionadas com os endurecimentos.

3.3.1 Critério do dano:

As possibilidades para a variável da taxa de dano foram determinadas pela teoria de restrições internas e apresentadas na Equação 3.30, onde foram apresentadas as duas possibilidades: $(\dot{D} = 0)$ e $(\dot{D} > 0)$. Para cada uma delas foi imposto um valor para a microforça reativa (g_r^D) de forma a anular os termos relacionados à potência das parcelas reativas. A relação encontrada está reescrita abaixo:

$$\begin{cases} g_r^D = \text{Indeterminado} & ; \text{se } \dot{D} = 0 \\ g_r^D = 0 & ; \text{se } \dot{D} > 0 \end{cases} \quad (3.63)$$

Pela teoria constitutiva foi possível encontrar uma expressão para a evolução do dano (Equação 3.51) utilizando diversas equações pré-definidas no texto (Subseção 3.2.1). A evolução

do dano é dependente de derivadas da energia livre e outras funções dependentes das variáveis de fluxo químico, endurecimento isotrópico e cinemático, conforme reescrito abaixo:

$$g_r^D + A_3 \dot{D} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) + t^D - \left(\frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 \right) \quad (3.64)$$

Assumindo que a força externa (t^D) relativa à variável dano seja nula, então:

$$g_r^D + A_3 \dot{D} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial D}}_{\Upsilon^D} - \bar{A}_0 \quad (3.65)$$

Baseado na Hipótese **H3**, tem-se dois cenários para serem avaliados, um deles é com a evolução do dano e outro sem a evolução do dano, conforme apresentado abaixo:

Para ($\dot{D} > 0$) e sabendo que ($A_3 > 0$) e ($g_r^D = 0$), tem-se que o produto entre eles apresentado na Equação 3.65 é maior que zero, portanto:

$$\Upsilon^D > \bar{A}_0 \quad (3.66)$$

Pode-se concluir que para os casos onde não haja evolução do dano tem-se o seguinte termo:

$$\Upsilon^D \leq \bar{A}_0 \quad ; \text{se} \quad g_r^D \leq 0 \quad (3.67)$$

Resumindo:

$$\begin{cases} \Upsilon^D > \bar{A}_0 & ; \text{se} \quad \dot{D} > 0, \quad g_r^D = 0 \\ \Upsilon^D \leq \bar{A}_0 & ; \text{se} \quad \dot{D} = 0, \quad g_r^D \leq 0 \end{cases} \quad (3.68)$$

ou seja:

$$\Upsilon^D - \bar{A}_0 = \begin{cases} A_3 \dot{D} & ; \text{se} \quad \dot{D} > 0 \\ g_r^D & ; \text{se} \quad \dot{D} = 0 \end{cases} \quad (3.69)$$

sendo os casos de dependência e independência de taxa.

Com os resultados obtidos pela teoria de restrições internas (Equações 3.63) e pela teoria constitutiva (3.68), faz-se a análise dos resultados em conjunto e apresenta-se abaixo a conclusão para os dois cenários (sem evolução do dano e com evolução do dano):

- 1º Cenário: Sem evolução do dano ($\dot{D} = 0$);

Pela teoria de restrições internas tem-se que a microforça reativa é um valor indeterminado (Equação 3.63), portanto, pode-se concluir que alterações microestruturais são possíveis, mas a existência dessas microforças reativas fazem com que essas alterações sejam bloqueadas, pois não há evolução do dano. Conforme apresentado pela Equação 3.68, as forças relativas à energia livre (Υ^D) devem ser numericamente menores ou iguais à soma das forças internas dissipativas:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } g_r^D = \text{Indeterminado} \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^D \leq \bar{A}_0 \quad \text{se } g_r^D \leq 0 \end{cases} \quad (3.70)$$

Utilizando-se das seguintes equações apresentadas anteriormente durante o desenvolvimento do texto:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - g^D + t^D = 0 \\ g^D = g_a^D + g_r^D \\ g_a^D = \frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 \\ t^D = 0 \end{cases}$$

e fazendo as seguintes manipulações matemáticas, obtém-se uma expressão para a força interna reativa, conforme apresentado abaixo:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - (g_a^D + g_r^D) = 0 \quad (3.71)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 + g_r^D \right) = 0 \quad (3.72)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 \right) = g_r^D \quad (3.73)$$

baseado na Equação 3.73, reescreve-se a Equação 3.70:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } g_r^D = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial D} + \bar{A}_0 \right) \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^D \leq \bar{A}_0 \quad \text{se } g_r^D \leq 0 \end{cases} \quad (3.74)$$

Então, conclui-se que pelo 1º Cenário, tem-se:

$$g_r^D = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial D} - \bar{A}_0 \quad (3.75)$$

$$g_r^D = \Upsilon^D - \bar{A}_0 \quad (3.76)$$

Pela teoria constitutiva, sabe-se que: $\Upsilon^D \leq \bar{A}_0$; então, pode-se concluir que:

$$g_r^D \leq 0 \quad (3.77)$$

- 2º Cenário: Com evolução do dano ($\dot{D} > 0$);

Como a microforça reativa é nula (Equação 3.63) conclui-se que toda a microforça interna atuante está responsável pela dissipação de energia dentro do material, não havendo restrições no que diz respeito às alterações microestruturais, ou seja, há alterações microestruturais, afinal o dano evoluiu. Assim como apresentado na Equação 3.68, onde a força relativa à energia livre (Υ^D) é maior que as forças internas dissipativas ($\bar{A}_0$) que podem estar relacionadas ao fluxo químico, aos endurecimentos isotrópico e cinemático, fazendo com que a região em estudo sofra alterações, então:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } g_r^D = 0 \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^D = \bar{A}_0 + A_3 \dot{D} \end{cases} \quad (3.78)$$

Conclui-se que tanto pelo 1º quanto pelo 2º Cenários tem-se que a microforça interna reativa relativa ao dano é:

$$g_r^D \leq 0 \quad (3.79)$$

3.3.2 Critério para as variáveis β^k :

Conforme estipulado anteriormente, a variável β^k corresponde a duas outras variáveis, portanto o desenvolvimento será feito para cada uma delas independentemente, iniciando pela variável relacionada ao endurecimento isotrópico.

(i) Variável relativa ao endurecimento isotrópico

Antes de inicializar esta análise, é necessário a seguinte hipótese:

H8 Plastificação acumulada ($\dot{p}$) sempre maior ou igual a zero, pois uma das características da plastificação é a relação existente com deformações irreversíveis.

$$\dot{p} \geq 0$$

As possibilidades para a variável da taxa de plastificação foram determinadas pela teoria de restrições internas e apresentadas na Equação 3.31, mas baseado na hipótese acima, tem-se o seguinte resultado para a variável relativa ao endurecimento isotrópico:

$$\begin{cases} \bar{g}_r^p = \text{Indeterminado} & ; \text{se } \dot{p} = 0 \\ \bar{g}_r^p = 0 & ; \text{se } \dot{p} > 0 \end{cases} \quad (3.80)$$

Como pode ser observado, o valor para a microforça reativa (g_r^p) é estipulado afim de que o produto entre a microforça e a taxa da variável seja nulo (Vide Equação 3.29).

Pela teoria constitutiva foi possível encontrar uma expressão para a plastificação acumulada (Equação 3.58) utilizando diversas equações pré-definidas no texto (Subseção 3.3.2). A evolução da plastificação é dependente de derivadas da energia livre e outras funções dependentes das variáveis de evolução de dano, fluxo químico e endurecimento cinemático, conforme readaptado e reescrito abaixo:

$$\bar{g}_r^p + A_7^p \dot{p} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) + t^p - \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} - \tau^p + \bar{A}_1^p \right) \quad (3.81)$$

Assumindo que a força externa (t^p) relativa à variável de endurecimento isotrópico seja nula, então:

$$\bar{g}_r^p + A_7^p \dot{p} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial p}}_{\Upsilon^p} + \tau^p - \bar{A}_1^p \quad (3.82)$$

Na abordagem da plastificação, considera-se neste trabalho que a plastificação é associativa (BATE, 1992), ou seja, a função de escoamento é coincidente com o potencial plástico resultando na seguinte característica de evolução da plastificação: ser normal à superfície de escoamento do material. Além disto, assume-se que a deformação plástica é desviadora, ou seja: $tr(\mathbf{E}^p) = 0$. O módulo da evolução da deformação plástica é $\dot{p}$ na direção $\mathbf{N}$. Considera-se o tensor $\mathbf{N}$ como unitário e desviador, portanto o τ^p pode ser escrito da seguinte forma:

$$\tau^p = \mathbf{S}^e : \frac{\partial \mathbf{E}^p}{\partial p} = \mathbf{S}^e : \mathbf{N} \quad (3.83)$$

Baseado na Hipótese **H8**, tem-se dois cenários para serem avaliados, um deles é sem evolução da plastificação e outro com a evolução da plastificação, conforme apresentado abaixo:

Para ($\dot{p} > 0$) e sabendo que ($A_7^p > 0$) e ($\bar{g}_r^p = 0$), tem-se que o produto entre eles apresentado na Equação 3.82 é maior que zero, portanto::

$$\Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p > 0 \quad (3.84)$$

Pode-se concluir: para os casos sem evolução da plastificação, tem-se:

$$\Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p \leq 0 \quad \text{se} \quad \bar{g}_r^p \leq 0 \quad (3.85)$$

Resumindo:

$$\begin{cases} \Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p > 0 & ; \text{se } \dot{p} > 0 \text{ e } \bar{g}_r^p = 0 \\ \Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p \leq 0 & ; \text{se } \dot{p} = 0 \text{ e } \bar{g}_r^p \leq 0 \end{cases} \quad (3.86)$$

ou seja,

$$\Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p = \begin{cases} A_7 \dot{p} & ; \text{se } \dot{p} > 0 \\ \bar{g}_r^p & ; \text{se } \dot{p} = 0 \end{cases} \quad (3.87)$$

sendo os casos de dependência e independência de taxa.

Com os resultados obtidos pela teoria de restrições internas (Equações 3.80) e pela teoria constitutiva (3.86), analisa-se os dois resultados em conjunto, atentando-se aos dois seguintes cenários:

- 1º Cenário: Sem evolução da plastificação ($\dot{p} = 0$);

Como a microforça reativa é um valor indeterminado (Equação 3.80), portanto, pode-se concluir que alterações microestruturais são possíveis, mas a existência dessas microforças reativas fazem com que essas alterações sejam bloqueadas. Conforme apresentado pela Equação 3.86, onde as forças relativas à energia livre (Υ^p) devem ser numericamente iguais à soma das forças internas dissipativas, então:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } \bar{g}_r^p = \text{Indeterminado} \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^p + \mathbf{S}^e : \mathbf{N} - \bar{A}_1^p \leq 0 \quad \text{se } \bar{g}_r^p \leq 0 \end{cases} \quad (3.88)$$

Utilizando-se das seguintes equações apresentadas anteriormente durante o desenvolvimento do texto:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \nabla p} \right) - \bar{g}^p + t^p = 0 \\ g^p = \bar{g}_a^p + \bar{g}_r^p - \tau^p \\ \bar{g}_a^p = \frac{\partial \Psi}{\partial D} + \bar{A}_1^p \\ t^p = 0 \end{cases} \quad (3.89)$$

faz-se as seguintes manipulações matemáticas, obtendo-se uma expressão para a microforça interna reativa, conforme apresentado abaixo:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - (\bar{g}_a^p + \bar{g}_r^p - \tau^p) = 0 \quad (3.90)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} + \bar{A}_1^p + \bar{g}_r^p - \tau^p \right) = 0 \quad (3.91)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} + \bar{A}_1^p - \tau^p \right) = \bar{g}_r^p \quad (3.92)$$

baseado na Equação 3.92, reescreve-se a Equação 3.88:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } \bar{g}_r^p = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} + \bar{A}_1^p - \tau^p \right) \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^p + \tau^p - \bar{A}_1^p \leq \quad \text{se } \bar{g}_r^p \leq 0 \end{cases} \quad (3.93)$$

Então, conclui-se que pelo 1º Cenário, tem-se:

$$\bar{g}_r^p = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial p} - \bar{A}_1^p + \tau^p \quad (3.94)$$

$$\bar{g}_r^p = \Upsilon^p - \bar{A}_1^p + \tau^p \quad (3.95)$$

Sabendo que: $\Upsilon^p + \tau^p - \bar{A}_1^p \leq 0$, então:

$$\bar{g}_r^p \leq 0 \quad (3.96)$$

- 2º Cenário: Com evolução da plastificação ($\dot{p} > 0$);

Como a microforça reativa é nula (Equação 3.80) conclui-se que toda a microforça interna atuante está responsável pela dissipação de energia dentro do material, não havendo restrições no que diz respeito às alterações microestruturais, ou seja, há alterações microestruturais. Assim como apresentado na Equação 3.86, onde a força relativa à energia livre (Υ^p) é maior que a soma das forças internas dissipativas relacionadas ao dano (A_4^p), fluxo químico (A_5^p) e endurecimento cinemático ($A_{6_z}^p$), fazendo com que a região em estudo sofra alterações, então:

$$\begin{cases} \text{Teoria de Restrições Internas: } \bar{g}_r^p = 0 \\ \text{Teoria Constitutiva: } \Upsilon^p = \bar{A}_1^p + A_7^p \dot{p} - \tau^p \end{cases} \quad (3.97)$$

Conclui-se que tanto pelo 1º quanto pelo 2º Cenários tem-se que a microforça reativa relativa ao endurecimento isotrópico é:

$$\bar{g}_r^p \leq 0 \quad (3.98)$$

(ii) *Variável relativa ao endurecimento cinemático*

Conforme abordado na Hipótese **H4**, só as variáveis restritas de β^k possuiriam força interna reativa $g_r^{\beta^k}$ diferente de zero, portanto, como a variável relativa ao endurecimento cinemático é não restrita, ela pode assumir qualquer valor. Estando incorporada à Hipótese **H2**, onde os termos estão relacionados às variáveis não restritas, fazendo com que: $\bar{g}_r^z = 0$.

Baseado na teoria constitutiva foi possível encontrar uma expressão para a taxa da variável de endurecimento cinemático (Equação 3.58) utilizando diversas equações pré-definidas no texto (Subseção 3.3.2). A evolução da variável cinemática é dependente de derivadas da energia livre e outras funções dependentes das variáveis de evolução de dano, fluxo químico e endurecimento isotrópico, conforme readaptado e reescrito abaixo:

$$A_7^z \dot{\mathbf{z}} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla \mathbf{z}} \right) + \mathbf{t}^z - \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} + \bar{A}_1^z - \tau^z \right) \quad (3.99)$$

Visto que τ^z é a derivada da deformação em relação à variável de endurecimento cinemático e que neste trabalho não será considerado esta dependência direta, fazendo com que τ^z seja nulo.

Assume-se que a força externa (t^z) relativa à variável de endurecimento cinemático seja nula, então:

$$A_7^z \dot{\mathbf{z}} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla \mathbf{z}} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}}}_{\gamma^z} - \bar{A}_1^z \quad (3.100)$$

3.4 Equações de Governo

As equações de governo são obtidas através da teoria de balanço de forças (introduzida via PPV) e pela teoria da termodinâmica. As equações relacionadas à parcela de dano e endurecimento isotrópico estão apresentadas abaixo.

(i) *Variável dano (D)*:

Analisando a situação que não haja evolução do dano ($\dot{D} = 0$, 1º Cenário), juntamente com a Equação 3.74, tem-se que:

$$g_r^D \leq 0 \quad (3.101)$$

Analisando a situação que haja evolução do dano ($\dot{D} > 0$, 2º Cenário), juntamente com a Equação 3.78, tem-se que:

$$g_r^D = 0 \quad (3.102)$$

portanto, o produto entre a evolução da variável e a microforça interna reativa relativa ao dano é nula, ou seja:

$$g_r^D \dot{D} = 0 \quad \begin{cases} \dot{D} = 0; & g_r^D \leq 0 \\ \dot{D} > 0; & g_r^D = 0 \end{cases} \quad (3.103)$$

Além disso, pode-se analisar a continuidade da evolução do dano fazendo a derivada temporal do produto acima:

$$\dot{g}_r^D \dot{D} + g_r^D \ddot{D} = 0 \quad (3.104)$$

Para que o material continue danificando a taxa de dano é maior que zero ($\dot{D} > 0$), então a força interna é zero ($g_r^D = 0$), conforme Equação 3.104, então:

$$\dot{g}_r^D \dot{D} = 0 \quad (3.105)$$

A equação acima é conhecida como condição de consistência, isto quer dizer que a evolução da variável está vinculada ao crescimento da função, fazendo com que o ponto calculado sempre esteja sobre a curva.

(ii) *Variável endurecimento isotrópico (p):*

Analisando a situação que não haja evolução do endurecimento isotrópico ($\dot{p} = 0$, 1º Cenário), juntamente com a Equação 3.93, tem-se que:

$$\bar{g}_r^p \leq 0 \quad (3.106)$$

Analisando a situação que haja evolução do endurecimento isotrópico ($\dot{p} > 0$, 2º Cenário), juntamente com a Equação 3.97, tem-se que:

$$\bar{g}_r^p = 0 \quad (3.107)$$

portanto, o produto entre a evolução da variável e a microforça interna reativa relativa ao endurecimento isotrópico é nula, ou seja:

$$\bar{g}_r^p \dot{p} = 0 \quad \begin{cases} \dot{p} = 0; & \bar{g}_r^p \leq 0 \\ \dot{p} > 0; & \bar{g}_r^p = 0 \end{cases} \quad (3.108)$$

Além disso, pode-se analisar a continuidade da evolução da plastificação fazendo a derivada temporal do produto acima:

$$\dot{\bar{g}}_r^p \dot{p} + \bar{g}_r^p \ddot{p} = 0 \quad (3.109)$$

Para que o material continue plastificando a taxa de plastificação é maior que zero ($\dot{p} > 0$), então a força interna é zero ($\bar{g}_r^p = 0$), conforme Equação 3.108, então:

$$\dot{\bar{g}}_r^p \dot{p} = 0 \quad (3.110)$$

Assim como dito no estudo para a variável dano, pode-se dizer que a equação acima é conhecida como condição de consistência, isto quer dizer que a evolução da variável está vinculada ao crescimento da função, fazendo com que o ponto calculado sempre esteja sobre a curva.

3.5 Energia livre

Conforme encontrado na literatura, a energia total é decomposta em um somatório de parcelas, neste trabalho considerou-se as seguintes: elasticidade (ψ^e), difusão (ψ^C), dano (ψ^D) e endurecimentos cinemático (ψ^z) e isotrópico (ψ^p), conforme apresentado abaixo:

$$\psi = \psi^e + \psi^C + \psi^D + \psi^z + \psi^p \quad (3.111)$$

Cada uma das parcelas de energia estão apresentadas abaixo e algumas podem ser encontradas em (DUDA et al., 2015):

$$\psi^e = \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left(\lambda (tr(\mathbf{E}^e))^2 + 2\mu \mathbf{E}^e : \mathbf{E}^e \right) \quad (3.112)$$

$$\psi^C = \alpha (\ln(C) - 1) C \quad (3.113)$$

$$\psi^D = D\omega (1 - \bar{\lambda}C) + \frac{k|\nabla D|^2}{2} \quad (3.114)$$

$$\psi^z = \frac{1}{2} a \mathbf{z} : \mathbf{z} \quad (3.115)$$

$$\psi^p = \sigma_y p + bp + \frac{b}{d} \left(e^{-dp} - 1 \right) + \frac{\sigma_y^2}{2E} \quad (3.116)$$

O parâmetro k_c é maior que zero e é introduzido para prevenir a possibilidade de mal condicionamento do modelo quando o dano se tornar 1.

Analisando a expressão apresentada na Equação 3.116 e considerando que o material não tenha sido plastificado ($p = 0$), tem-se que sua energia relacionada ao endurecimento isotrópico é igual ao modulo da energia expressa em Duda et al. (2015), para as mesmas condições, se tornando uma expressão razoável para ser considerada.

Na próxima subseção, utiliza-se as definições de cada uma das parcelas de energia apresentadas acima com o objetivo de determinar as leis de estado e leis de evolução que governam o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano.

3.6 Descrição das Leis que Governam o Problema

3.6.1 Leis de Estado

A expressão abaixo se refere a energia total do problema em estudo, possibilitando identificar a influência de cada uma das variáveis.

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \left(tr(\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) \right\} + \psi^C + \psi^D + \psi^p \end{aligned} \quad (3.117)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \left((tr(\mathbf{E}))^2 - (tr(\mathbf{E}^p))^2 - (tr(\mathbf{E}^c))^2 - \right. \right. \\ &\quad \left. - 2tr(\mathbf{E})tr(\mathbf{E}^p) - 2tr(\mathbf{E})tr(\mathbf{E}^c) + 2tr(\mathbf{E}^p)tr(\mathbf{E}^c) \right) + \\ &\quad + 2\mu ((\mathbf{E} : \mathbf{E}) + (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p) + (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}^c) - (\mathbf{E} : \mathbf{E}^p) - (\mathbf{E} : \mathbf{E}^c) - \\ &\quad - (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}) - (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}) + (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}^c) + (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}^p)) \left\} + \right. \\ &\quad + \alpha (\ln(C) - 1) C + D\omega (1 - \bar{\lambda}C) + \frac{k|\nabla D|^2}{2} + \frac{1}{2} a\mathbf{z} : \mathbf{z} + \\ &\quad \left. + \sigma_y \left(p + \frac{\sigma_y}{E} \right) + bp + \frac{b}{d} \left(e^{-dp} - 1 \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.118)$$

Baseado na expressão da energia pode-se determinar várias informações como, por exemplo: a tensão aplicada, os endurecimentos, entre outros.

(i) Relação com a deformação

A tensão aplicada foi obtida pela Equação 3.40, então:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} = \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda (2tr(\mathbf{E}) - 2tr(\mathbf{E}^p) - 2tr(\mathbf{E}^c)) \mathbf{I} + \right. \\ &\quad \left. + 2\mu (2\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) \right\} \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ 2\lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^p) - tr(\mathbf{E}^c)) \mathbf{I} + \right. \\ &\quad \left. + 4\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) \right\} \end{aligned} \quad (3.120)$$

$$\begin{aligned} &= \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^p) - tr(\mathbf{E}^c)) \mathbf{I} + \right. \\ &\quad \left. + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p - \mathbf{E}^c) \right\} \end{aligned} \quad (3.121)$$

Como a deformação plástica é desviadora, então o $tr(\mathbf{E}^p)$ é nula, resultando nas seguintes componentes para a tensão:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ (\lambda tr(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}) - (\lambda tr(\mathbf{E}^c) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^c) - \right. \\ &\quad \left. - 2\mu \mathbf{E}^p \right\} \end{aligned} \quad (3.122)$$

(ii) Relação com a concentração de soluto

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial C} = & \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \left(\frac{\partial (tr(\mathbf{E}^C))^2}{\partial C} - 2tr(\mathbf{E}) \frac{\partial (tr(\mathbf{E}^C))}{\partial C} + \right. \right. \\ & + 2tr(\mathbf{E}^P) \frac{\partial (tr(\mathbf{E}^C))}{\partial C} \left. \right) + 2\mu \left(\frac{\partial (\mathbf{E}^C : \mathbf{E}^C)}{\partial C} - \frac{\partial (\mathbf{E} : \mathbf{E}^C)}{\partial C} - \right. \\ & - \frac{\partial (\mathbf{E}^C : \mathbf{E})}{\partial C} + \frac{\partial (\mathbf{E}^P : \mathbf{E}^C)}{\partial C} + \frac{\partial (\mathbf{E}^C : \mathbf{E}^P)}{\partial C} \left. \right) \left. \right\} + \alpha + \\ & + \alpha \ln(C) - \alpha - D\omega\lambda \end{aligned} \quad (3.123)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial C} = & \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \left(\tilde{e}^2 (tr(\mathbf{I}))^2 2(C - C_0) - 2tr(\mathbf{E}) \tilde{e} tr(\mathbf{I}) + \right. \right. \\ & + 2tr(\mathbf{E}^P) \tilde{e} tr(\mathbf{I})) + 2\mu \left(2\mathbf{E}^C : \frac{\partial \mathbf{E}^C}{\partial C} - \mathbf{E} : \frac{\partial \mathbf{E}^C}{\partial C} - \frac{\partial \mathbf{E}^C}{\partial C} : \mathbf{E} + \right. \\ & + \mathbf{E}^P : \frac{\partial \mathbf{E}^C}{\partial C} - \frac{\partial \mathbf{E}^C}{\partial C} : \mathbf{E}^P \left. \right) \left. \right\} + \alpha \ln(C) - D\omega\bar{\lambda} \end{aligned} \quad (3.124)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial C} = & \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \left(2\tilde{e}^2 (tr(\mathbf{I}))^2 (C - C_0) - 2\tilde{e} tr(\mathbf{E}) tr(\mathbf{I}) + \right. \right. \\ & + 2\tilde{e} tr(\mathbf{E}^P) tr(\mathbf{I})) + 2\mu (2\tilde{e} (C - C_0) \mathbf{I} : \tilde{e} \mathbf{I} - \mathbf{E} : \tilde{e} \mathbf{I} - \tilde{e} \mathbf{I} : \mathbf{E} + \\ & + \mathbf{E}^P : \tilde{e} \mathbf{I} + \tilde{e} \mathbf{I} : \mathbf{E}^P) \left. \right\} + \alpha \ln(C) - D\omega\bar{\lambda} \end{aligned} \quad (3.125)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial C} = & \frac{1}{2} \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ 2\lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) (\tilde{e} (C - C_0) tr(\mathbf{I}) - tr(\mathbf{E}) + \right. \\ & + tr(\mathbf{E}^P)) + 2\mu (2\tilde{e}^2 (C - C_0) \mathbf{I} : \mathbf{I} + \tilde{e} (-\mathbf{E} : \mathbf{I} - \mathbf{I} : \mathbf{E} + \\ & + \mathbf{E}^P : \mathbf{I} + \mathbf{I} : \mathbf{E}^P)) \left. \right\} + \alpha \ln(C) - D\omega\bar{\lambda} \end{aligned} \quad (3.126)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial C} = & \left((1-D)^2 + k_c \right) \left\{ \lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) (\tilde{e} (C - C_0) tr(\mathbf{I}) - tr(\mathbf{E}) + \right. \\ & + tr(\mathbf{E}^P)) + \mu (2\tilde{e}^2 (C - C_0) \mathbf{I} : \mathbf{I} + \tilde{e} (-2tr(\mathbf{E}) + \\ & + 2tr(\mathbf{E}^P))) \left. \right\} + \alpha \ln(C) - D\omega\bar{\lambda} \end{aligned} \quad (3.127)$$

Reescrevendo:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial C} = & \left((1-D)^2 + k_c \right) \{ (-\lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) tr(\mathbf{E}) - 2\mu \tilde{e} tr(\mathbf{E})) + \\
& + \left(\lambda \tilde{e}^2 (tr(\mathbf{I}))^2 (C - C_0) + 2\mu \tilde{e}^2 (C - C_0) \mathbf{I} : \mathbf{I} \right) + \\
& + (\lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) tr(\mathbf{E}^p) + 2\mu \tilde{e} tr(\mathbf{E}^p)) \} + \alpha \ln(C) - D\omega \bar{\lambda}
\end{aligned} \quad (3.128)$$

Em relação ao gradiente da concentração:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} = \mathbf{0} \quad (3.129)$$

(iii) Relação com a variável dano

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial D} = & -(1-D) \left\{ \lambda (tr(\mathbf{E}^e))^2 + 2\mu (\mathbf{E}^e)^2 \right\} + \\
& + \omega (1 - \lambda C) + \frac{\partial}{\partial D} \left(\frac{k |\nabla D|^2}{2} \right)
\end{aligned} \quad (3.130)$$

$$\begin{aligned}
= & -(1-D) \left\{ \lambda (tr(\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p))^2 + \right. \\
& \left. + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p)^2 \right\} + \omega (1 - \bar{\lambda} C) + k |\nabla D| |\nabla^2 D|
\end{aligned} \quad (3.131)$$

$$\begin{aligned}
= & -(1-D) \left\{ \lambda \left((tr(\mathbf{E}))^2 - (tr(\mathbf{E}^p))^2 - (tr(\mathbf{E}^c))^2 - \right. \right. \\
& - 2tr(\mathbf{E})tr(\mathbf{E}^p) - 2tr(\mathbf{E})tr(\mathbf{E}^c) + 2tr(\mathbf{E}^p)tr(\mathbf{E}^c) \left. \right) + \\
& + 2\mu ((\mathbf{E} : \mathbf{E}) + (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p) + (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}^c) - (\mathbf{E} : \mathbf{E}^p) - (\mathbf{E} : \mathbf{E}^c) - \\
& - (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}) - (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}) + (\mathbf{E}^p : \mathbf{E}^c) + (\mathbf{E}^c : \mathbf{E}^p)) \left. \right\} + \\
& + \omega (1 - \bar{\lambda} C)
\end{aligned} \quad (3.132)$$

Reescrevendo:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial D} = & -(1-D) \left\{ \lambda \left((tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 \right) + 2\mu ((\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p)) \right\} + \\
& + \omega (1 - \bar{\lambda} C)
\end{aligned} \quad (3.133)$$

Em relação ao gradiente do dano:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} = \frac{\partial}{\partial \nabla D} \left(\frac{k |\nabla D|^2}{2} \right) = k \nabla D \quad (3.134)$$

(iv) Relação com a plastificação

Na Equação 3.40 encontra-se a relação entre a força interna relativa à variável β^k com a energia livre, por questões de implementação, optou-se redefinir a força interna de equilíbrio por Y , então:

$$Y = \frac{\partial \psi}{\partial p} = \sigma_y + b + \frac{b}{d} e^{-dp} \cdot (-d)$$

$$Y = \sigma_y + \underbrace{b(1 - e^{-dp})}_R \quad (3.135)$$

sendo: σ_y a tensão de escoamento do material e b, d são parâmetros constitutivos.

Em relação ao gradiente da variável relacionada ao isotrópico:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} = 0 \quad (3.136)$$

(v) Relação com a variável cinemática

A variável relacionada com o endurecimento cinemático foi criada a partir da variável β^k . Na Equação 3.40 encontra-se a relação entre a força interna relativa à variável β^k com a energia livre, por questões de implementação, optou-se redefinir a força interna de equilíbrio por $\mathbf{X}$, então:

$$\mathbf{X} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} = a\mathbf{z} \quad (3.137)$$

Em relação ao gradiente da variável relacionada ao cinemático:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \nabla \mathbf{z}} = 0 \quad (3.138)$$

As leis de evolução assim como o desenvolvimento para cada uma delas está apresentado abaixo, iniciando pela lei que governa o fenômeno da difusão, dano e seguida pelos endurecimentos isotrópico e cinemático.

3.6.2 Leis de Evolução

Nesta subseção encontram-se os desenvolvimentos para cada uma das variáveis do problema. Iniciando na equação para o fluxo de soluto, taxa de dano e endurecimento cinemático. O desenvolvimento do incremento da plastificação foi feito à parte e encontra-se no Apêndice A.

(i) Desenvolvimento para o fluxo de soluto

A expressão para o fluxo de soluto foi desenvolvida em subseções anteriores (Equação 3.62) e está reescrita abaixo:

$$\mathbf{J} = CM \left(-\nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial C} - \left(\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla C} \right) + t^C + \tau^C \right) \right) \right)$$

Conforme trabalhos de Duda et al. (2015), Duda et al. (2006) e Duda et al. (2009) assumiu-se que as forças externas sejam nulas ($t^C = 0$); e pela Equação 3.129, resultou-se que o termo relativo à derivada da energia livre em relação ao gradiente da concentração é nulo, portanto:

$$\mathbf{J} = CM \left(-\nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial C} - \tau^C \right) \right) \quad (3.139)$$

Substituindo o termo obtido da Equação 3.128, na equação acima, tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & -CM \nabla \left\{ \left((1-D)^2 + k_c \right) \{ (-\lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) tr(\mathbf{E}) - 2\mu \tilde{e} tr(\mathbf{E})) + \right. \\ & + \left(\lambda \tilde{e}^2 (tr(\mathbf{I}))^2 (C - C_0) + 2\mu \tilde{e}^2 (C - C_0) \mathbf{I} : \mathbf{I} \right) + \\ & \left. + (\lambda \tilde{e} tr(\mathbf{I}) tr(\mathbf{E}^p) + 2\mu \tilde{e} tr(\mathbf{E}^p)) \} + \alpha \ln(C) - D\omega \bar{\lambda} - \tau^C \right\} \end{aligned} \quad (3.140)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & -CM \nabla \left\{ \tilde{e} \left((1-D)^2 + k_c \right) \{ -(3\lambda + 2\mu) tr(\mathbf{E}) + \right. \\ & \left. + (3\lambda + 2\mu) \tilde{e} (C - C_0) tr(\mathbf{I}) \} + \alpha \ln(C) - D\omega \bar{\lambda} - \tau^C \right\} \end{aligned} \quad (3.141)$$

$$\mathbf{J} = -CM \nabla \left(-\tilde{e} tr(\mathbf{S}) + \alpha \ln(C) - D\omega \bar{\lambda} - \tau^C \right) \quad (3.142)$$

$$\mathbf{J} = CM \nabla \left(-\alpha \ln(C) + \tilde{e} tr(\mathbf{S}) + D\omega \bar{\lambda} \right) \quad (3.143)$$

sendo: $\tilde{e} = 2\tilde{e} tr(\mathbf{S}^e) = 2\tau^C$

(ii) Desenvolvimento para a taxa de dano

Substituindo as derivadas encontradas, temos que: Da Equação 3.51:

$$A_3 \dot{D} = \left(\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla D} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial D} - g_r^D - \bar{A}_0 \right) \quad (3.144)$$

$$\begin{aligned} A_3 \dot{D} = & \left(\nabla \cdot (k \nabla D) - \left(-(1-D) \left(\lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) + \omega (1 - \bar{\lambda} C) \right) - g_r^D - \bar{A}_0 \end{aligned} \quad (3.145)$$

$$\begin{aligned} A_3 \dot{D} = & \left((1-D) \left(\lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) - \right. \\ & \left. - \omega (1 - \bar{\lambda} C) + \nabla \cdot (k \nabla D) - g_r^D - \bar{A}_0 \right) \end{aligned} \quad (3.146)$$

Conforme assumido anteriormente que $A_3 > 0$ e $\dot{D} \geq 0$, então:

$$A_3 \dot{D} = \left\langle (1-D) \left(\lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) - \omega (1 - \bar{\lambda}C) + \nabla \cdot (k \nabla D) - g_r^D - \bar{A}_0 \right\rangle \quad (3.147)$$

outra forma pode ser expressa a seguir, fazendo:

$$m = \left(\lambda (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) \quad (3.148)$$

então:

$$A_3 \dot{D} = (1-D)m - \omega (1 - \bar{\lambda}C) + \nabla \cdot (k \nabla D) - g_r^D - \bar{A}_0 \quad (3.149)$$

resultando em:

$$A_3 \dot{D} = -m \left(D - \left(1 - \left(\frac{\omega (1 - \bar{\lambda}C) + g_r^D + \bar{A}_0}{p} \right) \right) \right) + \nabla \cdot (k \nabla D) \quad (3.150)$$

(iii) Desenvolvimento para o endurecimento cinemático

Utilizando-se da Equação 3.100 e das Equações 3.137 e 3.138 definidas na seção 3.6, assume-se o seguinte:

$$A_7^z(s) = 1; \quad \bar{\mathbf{A}}_1^z = -\dot{\mathbf{E}}^p + \dot{p} \frac{\varphi}{a} \mathbf{z} - a \mathbf{z}$$

Conclui-se que a evolução relativa ao endurecimento cinemático pode ser escrita da seguinte forma:

$$\dot{\mathbf{z}} = \dot{\mathbf{E}}^p - \dot{p} \frac{\varphi}{a} \mathbf{z} \quad (3.151)$$

(iv) Desenvolvimento para o endurecimento isotrópico

$$\bar{g}_r^p + A_7^p \dot{p} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial p} + \tau^p - \bar{A}_1^p \quad (3.152)$$

utilizando-se das seções anteriores, destacam-se as seguintes equações para a variável de endurecimento isotrópico:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial \nabla p} = 0 \\ \frac{\partial \psi}{\partial p} = Y \\ \tau^p = \mathbf{S}^e : \mathbf{N} \end{cases} \quad (3.153)$$

Baseado no exposto acima, pode-se assumir que a variável ($\bar{A}_1$) inserida na dissipação possui a seguinte característica:

$$\bar{A}_1^p = \mathbf{X} : \mathbf{N} \quad (3.154)$$

Então, pode-se reescrever a Equação 3.152 e após rearranjos matemáticos, tem-se:

$$\bar{g}_r^p + A_7^p \dot{p} = (\mathbf{S}^e - \mathbf{X}) : \mathbf{N} - Y \quad (3.155)$$

Por questões de implementação considera-se: $f = \bar{g}_r^p$

$$f \dot{p} = 0 \begin{cases} \dot{p} = 0; & f \leq 0 \\ \dot{p} > 0; & f = 0 \end{cases} \quad (3.156)$$

Sendo f conhecida como função de plastificação, sendo negativo quando a plastificação não evolui, ou seja, o material encontra-se no regime elástico. Para evolução da plastificação a função de plastificação é maior que zero.

3.7 Modelo para o Problema Elastoplástico Afetado pela Difusão e Dano

O presente trabalho consiste em implementar o sistema abaixo. Conhecendo-se as condições iniciais, os parâmetros do material e as forças de corpo, deseja-se encontrar valores do deslocamento, da plastificação, do dano e da concentração de soluto no material, satisfazendo as

seguintes equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{S} = -\mathbf{b} \\ \mathbf{S} = \left((1-D)^2 + k_c \right) \{ (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}) - \\ \quad - (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}^c) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^c) - 2\mu \mathbf{E}^p \} \\ \mathbf{X} = a\mathbf{z} \\ Y = R + \sigma_y \\ R = b(1 - e^{-dp}) \\ \mathbf{N} = \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{\|\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}\|} \\ \dot{\mathbf{E}}^p = \dot{p} \mathbf{N} \\ \dot{\mathbf{z}} = \dot{\mathbf{E}}^p - \dot{p} \frac{\varphi}{a} \mathbf{z} \\ \dot{C} = -\nabla \cdot \mathbf{J} + h \\ A_3 \dot{D} = \left\langle (1-D) \left(\lambda (\text{tr}(\mathbf{E}) - \text{tr}(\mathbf{E}^c))^2 + \right. \right. \\ \quad \left. \left. + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) - \omega(1 - \lambda C) + \right. \\ \quad \left. + \nabla \cdot (k \nabla D) - \bar{A}_0 \right\rangle \\ \mathbf{J} = -M(\alpha \nabla C - C e \nabla (\text{tr}(\mathbf{S})) - C \nabla (D \omega \lambda)) \\ f = \|\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}\| - Y \\ \dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\mathbf{E}}^p : \dot{\mathbf{E}}^p} \\ f \cdot \dot{p} = 0 \quad \begin{cases} \dot{p} > 0 & e \quad f = 0 \\ \dot{p} = 0 & e \quad f < 0 \end{cases} \\ \dot{f} \dot{p} = 0 \end{array} \right. \quad (3.157)$$

Com a apresentação do sistema de equações exposto acima, no próximo capítulo será definido como foi implementado este modelo elastoplástico afetado pela difusão e dano com endurecimentos isotrópico e cinemático na estrutura hierarquica do MPhyScas. Além disto há algumas explicações a respeito da construção de simuladores através do software.

4 Organização Hierárquica do MPhyScas

4.1 Visão Hierárquica do Simulador

Simulações computacionais têm-se tornado uma parte essencial no ramo das ciências e tecnologias. Pesquisadores utilizam desde linguagens de programação básicas a alto nível, para o desenvolvimento de softwares que possam aproximar de forma virtual o que acontece no mundo real. Alguns desses softwares são: Abaqus, COMSOL Multiphysics, MPhyScas, entre outros.

A escolha pelo MPhyScas deve-se ao fato de utilizar um recurso computacional de baixo custo, possibilitando fazer qualquer tipo de alteração nos fenômenos e seus acoplamentos. Além disto, há a possibilidade de conhecer as ferramentas e técnicas numéricas utilizadas.

Abaqus é um conjunto de poderosos programas de simulação da engenharia com base no método dos elementos finitos. O COMSOL Multiphysics é uma plataforma de software de uso geral com base em métodos numéricos para modelar e simular problemas em física, podendo levar em conta fenômenos acoplados. Por fim, o MPhyScas é um ambiente dedicado ao desenvolvimento automático de simuladores baseados no método de elementos finitos.

Dentre os trabalhos feitos com o software Abaqus, Moriconi, Henaff e Halm (2011) simularam o acoplamento entre o comportamento mecânico e a difusão de hidrogênio, mas como este software não apresenta o acoplamento entre estas físicas, foi utilizado o acoplamento temperatura com deslocamento. Algumas ações feitas nas subrotinas do Abaqus foram necessárias para que objetivo fosse atingido. Maciel e Bouchonneau (2014) realizaram um trabalho utilizando o software COMSOL envolvendo as físicas de mecânica estrutural e transferência de calor, para estudar o acoplamento termo-mecânico da tubulação industrial com múltiplas camadas de isolamento. Dos diversos trabalhos realizados com o software MPhyScas, ressalta-se o trabalho feito por Cruz (2012), que simulou problemas com fenômenos acoplados implementando as equações dos modelos e acoplamentos no software.

No âmbito de problemas multifísicas como em problemas envolvendo apenas uma física, os simuladores são aplicativos que conferem ao usuário possibilidades de escolha de resolução do problema, onde podem-se escolher os laços iterativos globais; a articulação dos algoritmos de solução; dos resolvedores dos sistemas lineares e as matrizes e vetores (campos vetoriais discretos) que irão participar do processo de simulação.

Para os problemas multifísicas que utilizam o método de decomposição do operador, sabe-se que os métodos de solução são aplicados à um subconjunto de fenômenos. A articulação destes algoritmos em uma iteração e as suas execuções propriamente ditas podem ser expressas em níveis hierárquicos compostos por camadas, onde cada um dos níveis de camada é responsável por uma determinada função de controle e execução (LENCASTRE, 2004). Por exemplo, a

camada de mais alto nível é a responsável por definir os laços iterativos no tempo e iterações envolvendo algoritmos de solução globais. Desta forma, as tarefas a serem resolvidas em cada instante de tempo são ativadas por esta camada através da solicitação de serviços à camada imediatamente inferior, que é a camada onde as articulações de algoritmos de solução devem estar presentes. Como já foi dito, muitos resolvedores podem ser utilizados pelos algoritmos de solução, que definem operações a serem realizadas com os campos vetoriais incluindo a ação de resolvedores lineares e não-lineares. Descendo hierarquicamente, há a necessidade de uma camada dedicada ao armazenamento de campos vetoriais e à execução propriamente dita de resolvedores. Por fim, há a camada de constituição das matrizes e vetores pelos fenômenos que os compartilham. Desta forma, podem ser definidas quatro camadas, como exposto acima. Camadas em maior número podem ser definidas, mas deve-se ter em mente que, com isso, a complexidade de se montar um simulador pode aumentar desnecessariamente (CRUZ; BARBOSA; SANTOS, 2014).

No domínio de problemas multifísicas é importante que simuladores possam ser reconfigurados e que algumas de suas partes possam ser reutilizadas. Reconfigurações podem ocorrer, por exemplo, quando em um mesmo simulador, deseja-se trocar um ou mais resolvedores lineares ou, ainda, deseja-se trocar algoritmos de solução. A reutilização ocorre quando partes de um simulador são utilizadas em um outro simulador ou em contextos diferentes de um mesmo simulador. Uma boa infraestrutura computacional deve possuir abstrações que minimizem o esforço e complexidade computacionais associados aos processos de reconfiguração e reutilização de peças de software. Um outro aspecto da produção de simuladores multifísicas é a necessidade de trabalho cooperativo, porque frequentemente fenômenos diferentes exigem abordagens diferentes. Assim, se partes de um simulador podem ser realizadas por equipes diferentes em paralelo, obedecendo interfaces acordadas anteriormente, para que depois elas integrem um determinado simulador, podem-se atingir altos níveis de produtividade com excelente qualidade do produto final.

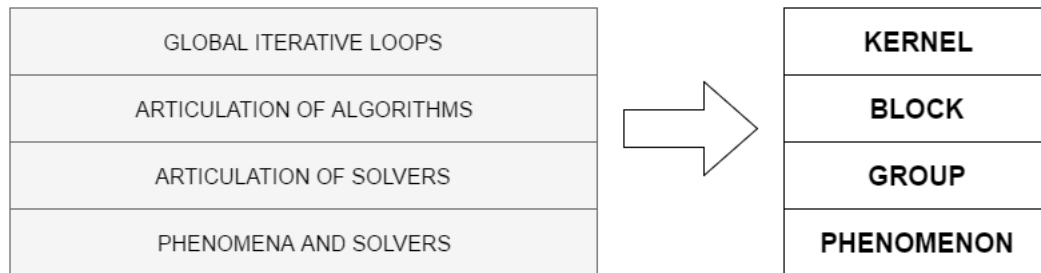
4.2 Arquitetura do MPhyScas

O modelo envolvendo os fenômenos de elasticidade, plasticidade, difusão e dano é um exemplo de um sistema de fenômenos acoplados que também pode ser chamado de sistema multifísicas. Estes sistemas permitem várias formas de solução. Este trabalho focaliza a classe de soluções relacionada aos métodos de decomposição do operador (MDO). Assim o problema é dividido na forma de vários sub problemas permitindo o emprego de algoritmos mais tradicionais nas suas respectivas soluções. No entanto, a organização dos simuladores torna-se mais complexa.

Com base no exposto acima, desenvolveu-se uma arquitetura para problemas multifísicas com as seguintes características: flexibilidade no desenvolvimento de simuladores, possibilidade de extensão do sistema através da integração de componentes, reusabilidade de processo de

dados, entre outras. Esta arquitetura foi utilizada no desenvolvimento de uma infraestrutura computacional chamada de MPhyScas, o qual apresenta um conjunto de abstrações e uma linguagem de padrões para suportar o desenvolvimento de simuladores multifísicas, que são decompostos em quatro camadas hierárquicas de atividade representadas na Figura 3.

Figura 3 – Representação computacional das camadas do Simulador



Fonte: Autor

Assim, foram implementadas representações computacionais para as camadas Kernel, Block, Group e Phenomenon. A linguagem de programação usada é o C++. Esta escolha foi feita pelo fato de suportar abstrações de dados, suportar programação orientada a objeto e é amplamente utilizada na produção científica.

Kernel: camada superior, constituída de um único objeto (Kernel), que comanda toda a simulação e é responsável pela articulação dos algoritmos de solução em seus laços iterativos globais. O Kernel possui um único algoritmo, com um único comando para a sua execução.

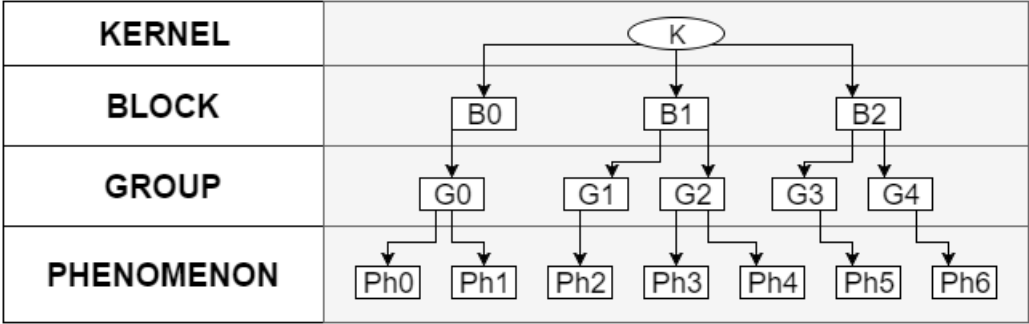
Block: é a segunda camada na hierarquia do simulador e é constituída de um ou mais objetos independentes (Block) entre si e que recebem comandos diretamente do Kernel para execução de atividades relacionadas a seus respectivos algoritmos de solução e outras operações.

Group: é a terceira camada hierárquica e é constituída de um ou mais objetos independentes entre si (Group) e que pertencem à um e somente um objeto Block. Cada objeto Group é capaz de armazenar suas próprias estruturas de dados com escalares, vetores e matrizes e de executar operações com elas. Estes objetos são também responsáveis pela resolução de sistemas algébricos lineares.

Phenomenon: esta camada é constituída de objetos independentes entre si (Phenomenon), que pertencem à um e somente um objeto Group. Estes objetos Phenomenon realizam operações com quantias de sua própria responsabilidade. Estas operações podem depender de malha assim como de quantias de responsabilidade de outros objetos Phenomenon (quantias acopladas).

Com a definição de cada uma das camadas, pode-se representar o MPhyScas em forma de árvore, como apresentado na Figura 4, onde observa-se a interação entre os níveis hierárquicos. As letras *K*, *B*, *G* e *Ph* são relativas a cada um dos objetos pertencentes em cada uma das camadas.

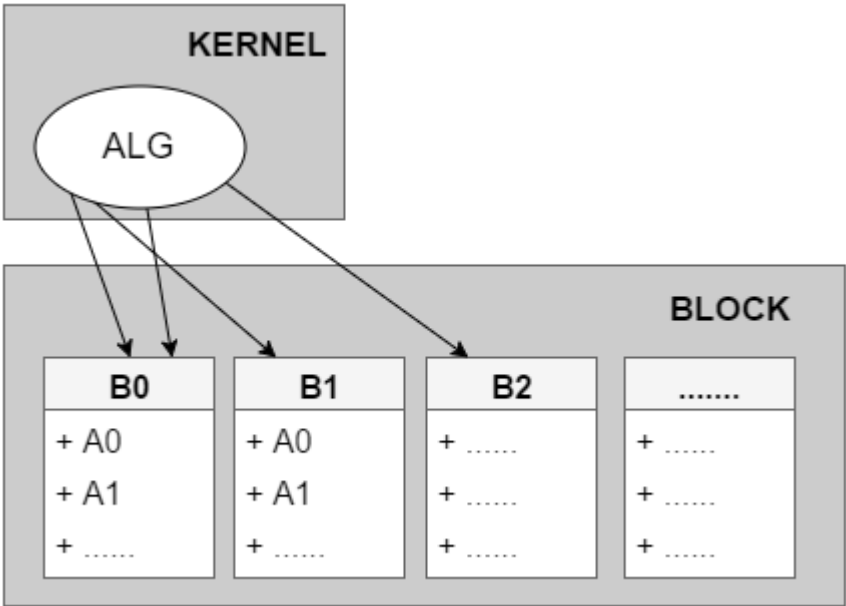
Figura 4 – Hierarquia das camadas



Fonte: Autor

Lembrando que *B0*, *B1*, *B2* são objetos Block distintos, ou seja, cada um é responsável por algum tipo de processamento e pertencem ao mesmo nível hierárquico. Isto também é válido para as camadas Group e Phenomenon. A Figura 5 apresenta a interação entre as camadas Kernel e Block.

Figura 5 – Diagrama relativo ao Algoritmo do Kernel



Fonte: Autor

Quando um simulador do MPhyScas é executado, já com os dados da simulação, ele executa o algoritmo do Kernel (definido por *Alg* na Figura 5), o qual irá solicitar tarefas para os objetos da camada Block, quando necessário, até finalizar a simulação. A demanda do Kernel

para que algum objeto Block realize uma tarefa específica é feita através da solicitação para a execução de um determinado algoritmo (ver Figura 5). Um exemplo pode ser observado abaixo:

Algoritmo 1: Algoritmo do Kernel

```

1 Inicializar tempo
2 Bloco0: execute o seu algoritmo_2
3 Bloco1: execute o seu algoritmo_0
4 while (tempo < Intervalo) do
5   Bloco0: execute o seu algoritmo_6
6   Bloco0: execute o seu algoritmo_0
7   Incrementar o tempo
8   Bloco1: execute o seu algoritmo_3
9 end
  
```

Cada objeto Block pode possuir um algoritmo ou mais. O Kernel pode solicitar a execução de qualquer algoritmo de um determinado Block, sendo esta a única forma de interação direta entre eles. Um algoritmo de um determinado Block pode solicitar a execução de um GroupTask (gT) a alguns de seus objetos Group. Abaixo há um exemplo de como isto pode ser feito:

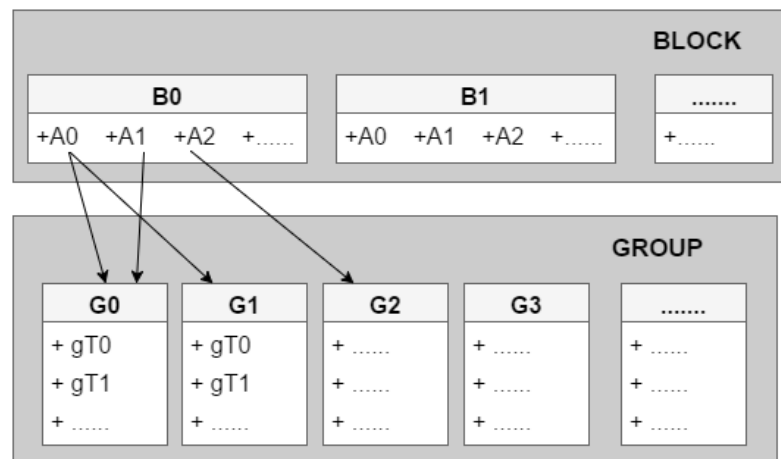
Algoritmo 2: Bloco0: algoritmo_0

```

1 Grupo0: execute a sua GroupTask_0
2 Grupo1: execute a sua GroupTask_3
  
```

Na Figura 6 nota-se que o algoritmo (A0) do Block (B0) solicita a execução de alguma(s) tarefa(s) a seus objetos da camada Group (G0) e (G1).

Figura 6 – Diagrama relativo ao algoritmo do Block

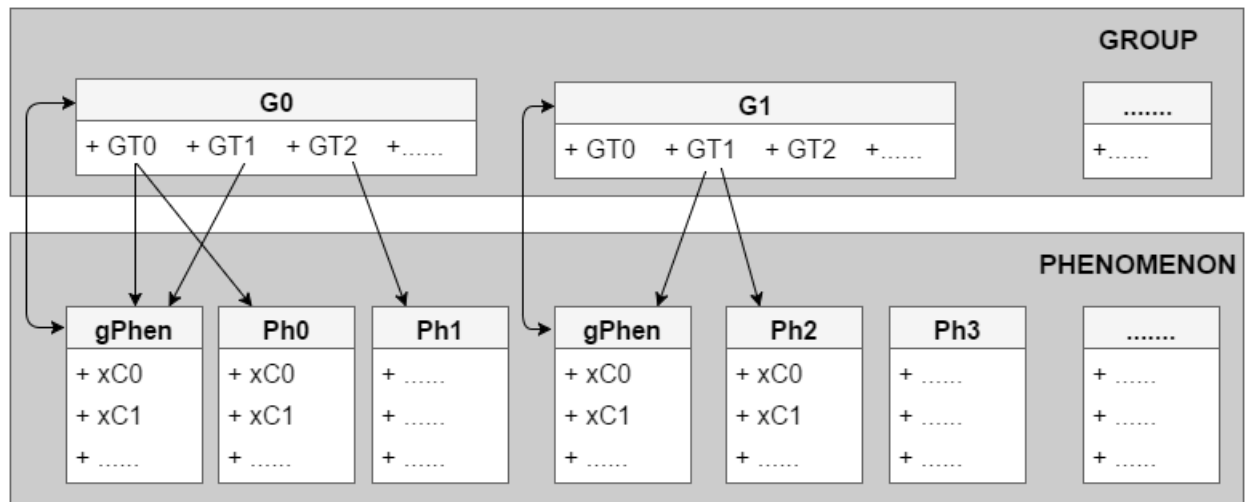


Fonte: Autor

Ao ser instado a executar uma de suas GroupTasks, o Group solicita a um ou mais de seus objetos Phenomenon a realização de um conjunto de tarefas, chamado de execCode (xC). Dentre estas tarefas podem estar atividades próprias do Group (como operações tipo Blas ou

solução de problemas algébricos lineares), que são realizadas por um tipo especial de objeto Phenomenon, que é o gPhen. Cada objeto Group possui um único objeto gPhen, que torna-se seu representante na camada Phenomenon. Um exemplo desta operação está mostrada na Figura 7.

Figura 7 – Diagrama relativo à GroupTask



Fonte: Autor

Abaixo, apresenta-se um algoritmo como exemplo, para mostrar como esta interação é feita:

Algoritmo 3: Grupo0: GroupTask_0

- 1 Solicitar ao objeto Ph0 a execução da execCode 3
 - 2 Solicitar ao objeto Ph1 a execução da execCode 0
 - 3 Solicitar ao gPhen a execução da execCode 2
-

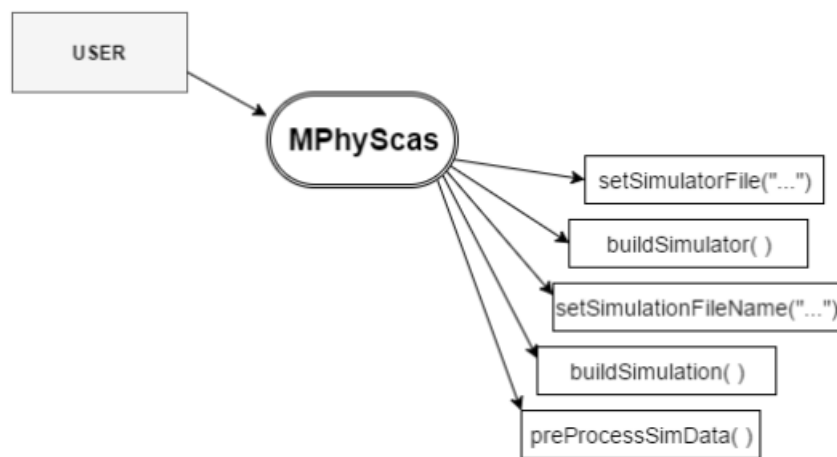
Resta aos objetos Phenomenon a execução das suas execCodes, assim que solicitada pelo seu objeto Group. Uma execCode é, na verdade, um conjunto de tarefas bem definidas chamadas de WeakForms. Um objeto WeakForm pode encapsular atividades próprias de um objeto Phenomenon, como cálculo de matrizes e vetores no nível dos elementos finitos e suas montagens nas estruturas globais, que encontram-se sob responsabilidade do seu objeto Group. Outros exemplos de atividades são: introdução de condições de contorno; gravação de dados para visualização; cálculos de grandezas específicas e que dependam da malha e campos vetoriais relativos ao objeto Phenomenon em questão, dentre outros.

Assim, com este guia estrutural pode-se construir um simulador através da definição dos objetos envolvidos nas interações entre as quatro camadas, como descritas acima, independentemente de uma simulação específica. Os dados de simulação ficam desacoplados da construção do simulador e podem, então, ser introduzidos em um momento posterior. Com isto, há dois grupos de informações que são fornecidas separadamente: dados para a construção do simulador e dados para a definição de uma dada simulação. Com os dados do simulador

toda a constituição das camadas assim como suas relações com as camadas adjacentes e os acoplamentos são construídos pelo MPhyScas. Após esta etapa, os dados de simulação são fornecidos através de outro arquivo, onde cada uma das camadas (já construídas pelo MPhyScas) será preenchida com dados dependentes da simulação específica a ser realizada (parâmetros constitutivos de materiais; dados geométricos e que dependem da geometria, por exemplo). Para um mesmo simulador, pode-se, então, definir quantas simulações diferentes forem necessárias.

Assim, o programa principal ("driver") possui a estrutura apresentada na Figura 8.

Figura 8 – Construção do Simulador e Simulação



Fonte: Autor

4.2.1 Sistema de Dados de Armazenamento

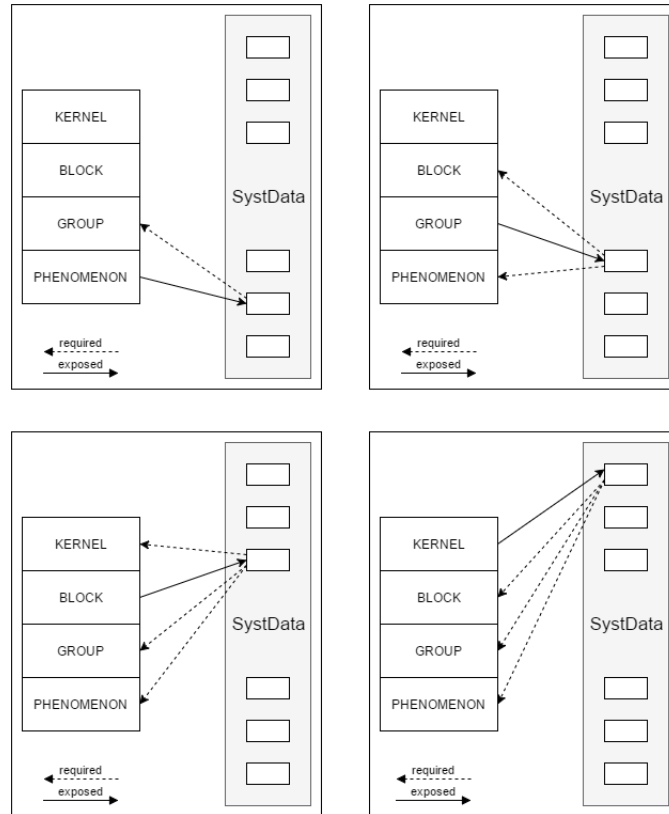
O SystData é uma estrutura com a função de armazenar dados de tal forma que possam ser compartilhados pelos objetos das quatro camadas do simulador. Qualquer objeto de qualquer camada pode expor e/ou requerer dados, sendo que todos os dados expostos devem ser requeridos por algum objeto de outra camada.

Os dados requeridos são expostos por objetos de camadas superiores ou imediatamente inferior, portanto não há troca de informações entre objetos pertencentes à mesma camada. Uma camada pode requerer dados de uma camada imediatamente inferior à ela e/ou qualquer uma das camadas superiores.

Na Figura 9 apresenta-se a forma de disponibilidade dos dados expostos e requeridos. Pode-se observar que um dado exposto pela camada Phenomenon só pode ser requerido pela camada imediatamente superior (Group); um dado exposto pelo Group pode ser requerido por todas as camadas inferiores, ou seja, somente pela camada Phenomenon e pela camada imediatamente superior (Group); um dado exposto pelo Block pode ser requerido por todas as camadas inferiores (Group e Phenomenon) e pela camada imediatamente superior (Kernel); e

por fim, um dado exposto pelo Kernel pode ser requerido por todas as camadas inferiores (Block, Group e Phenomenon)

Figura 9 – Dados do Sistema



Fonte: Autor

4.2.2 Pré-processamento dos dados da simulação

O pré-processamento está dividido em duas partes, a construção do simulador e a construção da simulação. As quatro camadas são constituídas durante a construção do simulador baseado em dados fornecidos em um arquivo XML. Estes dados apresentam particularidades e campos que devem ser compreendidos e preenchidos corretamente. Abaixo, seguem descrições bastante sucintas dos dados necessários para o pré-processamento do MPhyScas, apenas para que se tenha uma ideia da dinâmica, da definição e execução de suas tarefas.

1. Kernel: Um único conjunto de dados para o Kernel

a) Dados do sistema:

- i. expostos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados expostos pelo Kernel;
- ii. requeridos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados requeridos pelo Kernel e que devem ser expostos pela camada Block.

- b) Lista com *ids* dos Blocks: Mapeia o(s) código(s) do(s) objeto(s) Block;
 - c) Algoritmo do Kernel: Há apenas um algoritmo nesta camada;
 - i. Parâmetros do algoritmo do Kernel.
2. Block: Um conjunto de dados para cada Block
- a) Dados do sistema:
 - i. expostos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados expostos pelo Block;
 - ii. requeridos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados requeridos por este Block que sejam expostos pelo Kernel ou por algum Group;
 - b) Para cada algoritmo deste Block:
 - i. *Id* e a definição do algoritmo
 - ii. parâmetros do algoritmo
 - iii. Lista com *ids* dos Groups referenciados por este algoritmo e respectivos Group-Tasks;
 - c) Lista com os *ids* dos Estados Globais pertencentes ao Block;
3. Group: Um conjunto de dados para cada Group
- a) Dados do sistema:
 - i. expostos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados expostos pelo Group;
 - ii. requeridos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados requeridos por este Group que sejam expostos pelo Block ou por algum Phenomenon;
 - b) gPhen: é o objeto Group no nível do Phenomenon
 - i. Resolvedores: Lista de Resolvedores Lineares;
 - ii. Lista com as identificações dos Phenomenon existentes no Group;
 - iii. Lista com código de execução para o gPhen.
 - c) Relação entre os Estados Globais (nível do Block) e Campos Vetoriais (nível do Group)
 - d) Tarefa(s) do Group: Conjunto de tarefas específicas para serem realizadas pelo Phenomenon
4. Phenomenon: Um conjunto de dados para cada Phenomenon
- a) Dados do sistema:
 - i. expostos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados expostos pelo Phenomenon;

- ii. requeridos: é uma estrutura de dados que contém as definições dos dados requeridos por este Phenomenon que sejam expostos por seu Group.
- b) Parâmetros do Phenomenon: definições dos parâmetros para o Phenomenon;
- c) Dimensão espacial e estrutura: Estas dimensões dizem respeito ao espaço no qual a malha geométrica está imersa, assim como a dimensão de sua estrutura;
- d) Campos vetoriais: estão definidos na malha do Phenomenon, podendo ser escalares, vetoriais ou matriciais;
- e) Malha do Phenomenon: define a distribuição da ordem de aproximação para o campo vetorial com respeito a malha geométrica;
- f) Malha Geométrica: é formada por pontos, arestas, faces e/ou volumes;
- g) MasterGeomMesh: é a malha na qual todas as outras estão baseadas;
- h) Gerador da malha geométrica;
- i) Gerador da malha do phenomenon;
- j) Método de integração;
- k) Conjunto de Tarefas: Em cada uma das tarefas são inseridos os dados necessários para sua execução.

A segunda parte do pré-processamento, diz respeito à construção da simulação, assim como da geometria e geração de malhas geométricas e dos Phenomenon. Os dados necessários para a simulação são inseridos através de um arquivo XML, onde os valores dos parâmetros, condições de contorno, dentre outros, são inseridos. Abaixo segue um esquema:

1. Geometria: Dimensões espacial e da estrutura, além do arquivo (XML) que deve conter os dados geométricos;
2. Kernel:
 - a) Algoritmo do Kernel
 - i. Inserção dos valores dos parâmetros existentes no algoritmo do Kernel.
3. Block:
 - a) Algoritmo do Block
 - i. Inserção dos valores dos parâmetros existentes em cada um dos algoritmos do Block.
4. Group:
 - a) gPhen - há apenas um por Group

i. Configuração do(s) resolvido(r)es).

5. Phenomenon:

- a) Inserção dos valores dos parâmetros;
- b) dados para o compartilhamento geométrico;
- c) dados para geração da malha geométrica;
- d) dados para geração da malha do Phenomenon
- e) Conjunto de tarefas: referente à geometria, parâmetros, condições de contorno e iniciais.

O exemplo fornecido neste trabalho é o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano (pEPADD). A formulação matemática é utilizada para construir um algoritmo de solução e está apresentada no Apêndice B. A tarefa relevante para a implementação computacional deste problema é o mapeamento dos procedimentos do algoritmo de solução em componentes e dados das quatro camadas hierárquicas do MPhyScas. Um exemplo disto está apresentado no Algoritmo 4, onde o Kernel solicita ao seu Block_0 executar o Algoritmo_3.

Algoritmo 4: Exemplo: Kernel solicitando ao Block_0 que execute seu Algoritmo_3

Kernel

$t = 0$

Block_0 - Algorithm_3

Group_0 - (Elastic) - phen_0 - gPhen

GroupTask— GT_0

$$\mathbf{U}_e^{K+1} = \mathbf{U}_e$$

$$\mathbf{U}_e^K = \mathbf{U}_e$$

$$\mathbf{K}_e = \mathbf{K}_e^{aux}$$

Group_0 - (Elastic) - phen_1 - Phenomenon

GroupTask— GT_1

$$\mathbf{F}_e = \int_e \Psi_j \cdot \mathbf{b} d\Omega$$

Condições de Contorno Elástico

Group_1 gPhen

GroupTask— GT_0

$$\mathbf{U}_d^K = \mathbf{U}_d^n$$

$$\mathbf{U}_d^K = \frac{2}{\Delta t} \mathbf{U}_d^K$$

$$\mathbf{U}_d^K = \mathbf{U}_d^K + \dot{\mathbf{U}}_d^n$$

$$\mathbf{F}_d^{aux} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{U}_d^K$$

Group_1 Phenomenon

GroupTask— GT_1

$$\mathbf{F}_d^{aux} + = \mathbf{F}_d^n$$

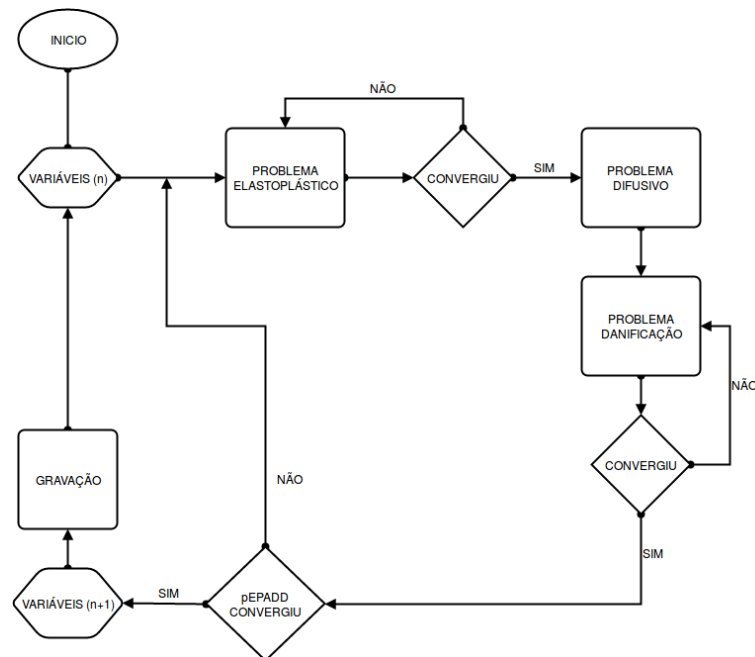
Condições de Contorno difusivo

Primeiramente, as linhas de execução do algoritmo são agrupadas hierarquicamente. Em seguida, definem-se os níveis (Kernel, Block, Group e Phenomenon) em que serão colocados estes conjuntos de atividade. Em terceiro lugar, definem-se os Block's, os Group's e os Phenomenon's, com seus respectivos conjuntos de atividade. Assim, começam a delinear-se o algoritmo do Kernel, os algoritmos de cada Block, os GroupTask's de cada Group e as ExecCode's e WeakForm's de cada Phenomenon. Estes procedimentos de decomposição do algoritmo de solução encontram-se nos Apêndice C, D e E.

Cada conjunto de linhas de execução em determinado nível pode, agora, ser executado com apenas um comando da sua camada imediatamente superior. Assim, a implementação computacional do pEPADD se torna tratável, pois, além de um guia estrutural, obtém-se componentes de software mais simples para serem programados. Esta simplicidade, no entanto, vem com a contrapartida do aumento do número de componentes a medida que se aprofunda na hierarquia das camadas. A camada Kernel é executada por uma sequência de comandos, onde cada um deles demandam outras funções para as camadas inferiores e, assim, enquanto a demanda de uma ação não for resolvida, seguem as demandas para as camadas inferiores. Após a finalização da sequência de comandos existentes no Algoritmo do Kernel (Apêndice C), os resultados do pEPADD podem ser analisados.

O fluxograma de resolução do pEPADD está apresentado na Figura 10, onde podemos observar a separação dos problemas mecânico, difusivo.

Figura 10 – Fluxograma de resolução do pEPADD



Fonte: Autor

O método de decomposição do operador permite subdividir o problema global em vários subproblemas, obtendo-se assim uma solução para cada subproblema de forma individualizada.

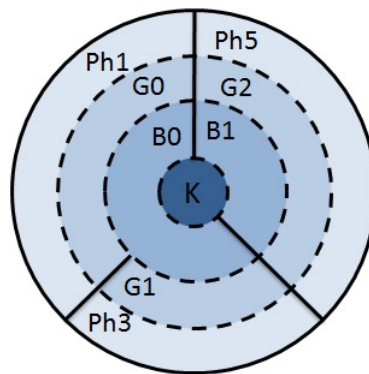
Para que cada um destes subproblemas seja resolvido, pode-se necessitar de dados (resultados) de outros subproblemas, fazendo-se com que a solução de um seja utilizada na resolução de outro subproblema subsequente. Este método de decomposição permite que subproblemas que não são dependentes sejam executadas ao mesmo tempo, reduzindo-se assim o tempo gasto com a simulação.

A sequência de resolução para o pEPADD foi resolver inicialmente o problema elástico e plástico, resolver o problema difusivo e com essas soluções resolver o problema envolvendo a variável dano até sua convergência. Após a solução dos três problemas de forma sequencial, verifica-se se o problema como um todo está satisfeito, em caso afirmativo, faz-se a atualização e gravação dos dados iniciando novamente o problema para novo tempo, em caso negativo, toda a execução é refeita até sua convergência.

4.3 Simulador e Simulação

Sabe-se que os simuladores construídos pelo MPhyScas constitui-se de apenas um Kernel e pelos objetos Block, Group e Phenomenon. Na Figura 11 apresenta-se a escolha feita para a resolução do pEPADD, optando-se pela escolha de dois objetos Block, um deles é responsável pelo pré-processamento dos dados ($B0$) e o outro pelo pós-processamento ($B1$) (gravação dos dados). O $B0$ ainda possui dois objetos Group, um deles está relacionado ao problema elastoplástico e dano ($G0$) e o outro ao problema difusivo ($G1$). A quantidade de objetos referentes em cada uma das camadas fica a critério do usuário, neste caso optou-se por esta quantidade de objetos por se tratar de um problema multifísicas, onde cada uma das físicas pode ser identificada por seu respectivo objeto.

Figura 11 – Problema construído no MPhyScas

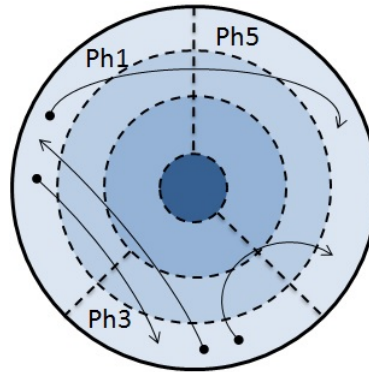


Fonte: Autor

Os campos vetoriais compartilhados são acessados através da construção do Simulador. Este compartilhamento só é possível através da identificação do objeto Phenomenon ao qual o campo vetorial compartilhado pertencer, assim como apresentado na Figura 12. Este campo

vetorial, além de ter seus dados acessados por outros objetos Phenomenon, também pode ter seus dados alterados.

Figura 12 – Acoplamento entre Phenomena



Fonte: Autor

Esta troca e acesso às informações dos campos vetoriais dos objetos Phenomenon só é possível devido a um método implementado no MPhyScas, que possibilita esta interação entre os fenômenos, proporcionando ao usuário simular fenômenos multifísicas.

Pela Figura 12 é possível ver a a troca de informações entre os objetos Phenomenon do problema em questão. Nesta figura apresentam-se setas apontando para o objeto *Ph5*, onde são gravados alguns campos vetoriais pertencentes aos objetos *Ph1* e *Ph3*. Já as setas existentes entre os objetos Phenomenon *Ph1* e *Ph3* são devidas a execução de algumas WeakForms que executam cálculos de acoplamento, sendo necessário ao *Ph1* campos vetoriais difusivos (*Ph3*) e vice-versa.

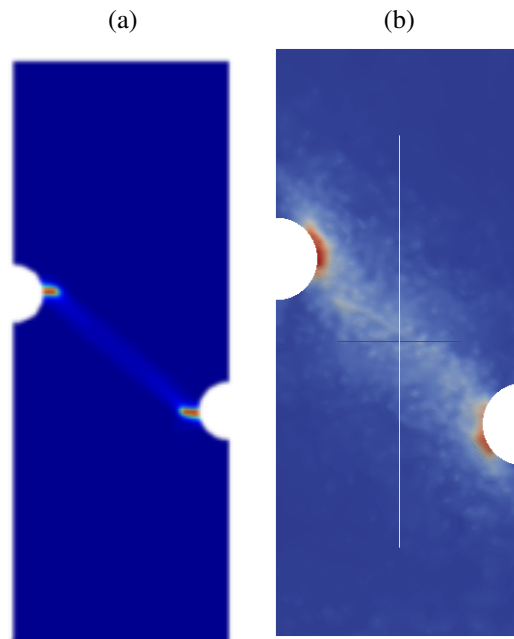
5 Resultados e Discussões

Neste capítulo apresenta-se a validação do modelo e os principais resultados obtidos nas simulações, bem como algumas técnicas utilizadas em algumas implementações.

Para validar o modelo desenvolvido e implementado houve a comparação dos resultados obtidos com outros resultados da literatura. Pela grande variedade de parâmetros, não conseguiu-se encontrar os valores de todos os parâmetros em um mesmo trabalho, portanto a validação do modelo foi feita de forma qualitativa.

No trabalho de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015) foi considerado a placa abaixo possuindo 18mm de largura por 50mm de altura, conforme Figura 13. Em cada uma das arestas laterais foi inserido semi-circunferências cujos centros estão localizados à 30mm e 20mm de altura nas arestas da esquerda e direita, respectivamente. Estas semi-circunferências possuem raio de 2.5mm sendo consideradas como concentradores de tensão. A criação desta configuração foi bastante interessante, pois foi possível observar a interação entre as duas semi-circunferências inseridas nas arestas verticais. Sendo que a aresta inferior está restrita na direção normal e na aresta superior está sendo aplicada uma força normal crescente para cima.

Figura 13 – Distribuição de dano em um instante intermediário: a) resultado extraído de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015); b) resultado simulado no MPhyScas



Fonte: Autor

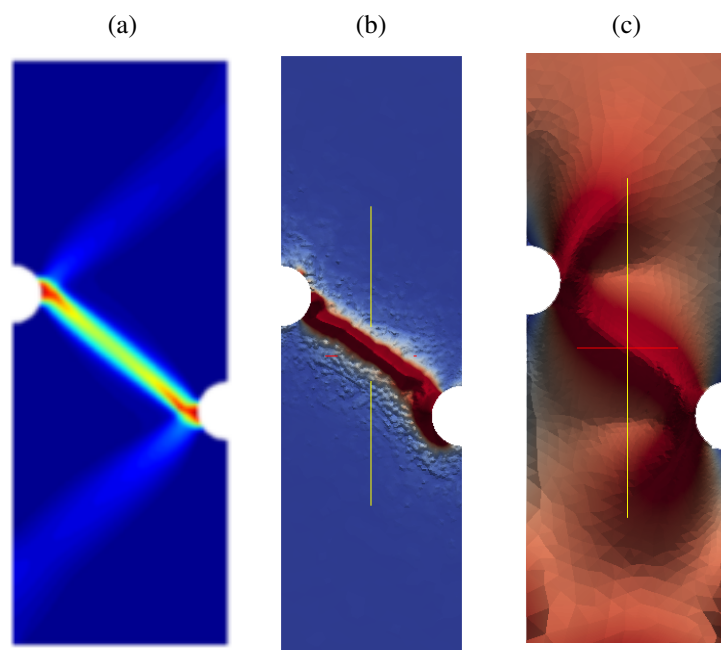
Na Figura 14a encontra-se um resultado obtido no trabalho de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015) e na Figura 13b, apresenta-se um detalhe do resultado obtido para este problema

utilizando o MPhyScas. Este resultado representa a distribuição de dano sobre a placa, em um tempo intermediário, cuja placa está solicitada mecanicamente na aresta superior por uma força axial com intensidade crescente com o tempo e sendo prescrito deslocamento vertical nulo na aresta inferior.

Percebe-se que tanto no trabalho de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015) quanto no resultado encontrado pela simulação no MPhyScas a maior intensidade do dano está localizada nas bordas das duas semi-circunferências. No entanto, apresenta-se na Figura 14b uma região entre as duas semi-circunferências com maior espalhamento de dano, isto deve-se ao valor de parâmetros utilizados, sendo feita uma análise com mais detalhes na próxima seção.

O resultado apresentado na Figura 14 contém três imagens. A primeira é o resultado obtido para a variável dano do trabalho de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015), onde nota-se uma região em destaque que interliga as duas semi-circunferências, este detalhe também pode ser observado nos resultados obtidos através da simulação no MPhyScas, apresentando a variável dano na Figura 14c.

Figura 14 – Distribuição no instante final: a) resultado para a variável dano extraído de Ambati, Gerasimov e Lorenzis (2015); b) resultado para a variável dano simulado no MPhyScas; c) resultado para a variável Tensão de Von Mises simulado no MPhyScas



Fonte: Autor

Outro detalhe retirado da Figura 14a são duas zonas de danificação orientadas a partir das semi-circunferências de forma inclinada, ou seja, a partir da semi-circunferência da esquerda há uma região inclinada para cima e a partir da semi-circunferência da direita há uma região inclinada para baixo. Estes detalhes podem ser observados com mais detalhes nos resultados da tensão de Von Mises, implementado no MPhyScas, conforme Figura 14c. As validações de

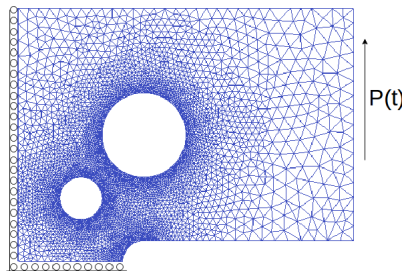
difusão e plastificação foram feitas em (CRUZ, 2012).

Após a validação do modelo e de sua implementação, na próxima seção, faz-se a apresentação do problema, que consiste em uma placa com dois furos descentralizados contendo uma reentrância na parte inferior. O soluto foi considerado estar distribuído em todo o domínio da placa, estando submetida a um carregamento crescente, resultando na migração de soluto no interior da matriz metálica, assim como endurecimento, danificação e regiões plastificadas.

5.1 Apresentação do problema

A simulação foi realizada aplicando-se uma carga (P) tangenciando a aresta lateral, conforme Figura 15. Além disto, foi prescrito deslocamento nulo na direção normal às arestas da esquerda e inferior.

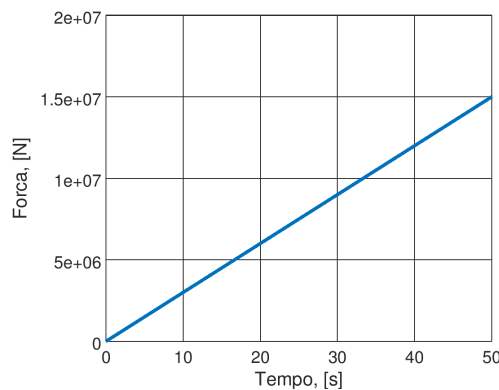
Figura 15 – Problema simulado



Fonte: Autor

A carga prescrita é do tipo: $P(t) = v_0 t$, onde v_0 é um parâmetro relacionado à força, cujo valor está informado na Tabela 1 e o t é a variável relativa ao tempo. Nos programas implementados sempre partiu de tempo inicial igual a zero, portanto a carga inicial é nula e vai crescendo com o passar dos passos da simulação, conforme apresentado na Figura 16.

Figura 16 – Carregamento monotônico



Fonte: Autor

Os valores relacionados às propriedades mecânicas do material e parâmetros relativos à difusão apresentados na Tabela 1 foram tirados do trabalho de Brito (2007), já os parâmetros relacionados ao dano e ao carregamento foram testados e simulados conforme resultados obtidos.

Tabela 1 – Valores relativos ao material e carregamento

Parâmetro	Valor	Definição
E	$2.1e11$	Módulo de elasticidade [Pa]
ν	$0.3e0$	Coefficiente de Poisson
σ_y	$8.0e7$	Tensão de escoamento[Pa]
par_kc	$1.0e-9$	Utilizado para evitar mal-condicionamento
D_0	$3.0e-6$	Dano inicial
D_{max}	$0.85e0$	Dano crítico
C_0	$3.0e-5$	Concentração de soluto
$\bar{e}$	$1.0e0$	Utilizado na definição da deformação química
ν_0	$3.0e5$	Relacionado ao carregamento [N/s]
δ	$1.0e2$	Relacionado à resistência à danificação
par_A3	$10.0e10$	Relacionado à velocidade de dano
$par_DeltaDmax$	$6.0e-3$	Relacionado à velocidade de danificação
$par_Dmgtime$	$1.0e-3$	Relacionado à velocidade de danificação
φ	$2.8e3$	Relacionado ao endurecimento cinemático
a	$1.08e11$	Relacionado ao endurecimento cinemático
b	$6.0e7$	Relacionado ao endurecimento isotrópico
d	$8.0e0$	Relacionado ao endurecimento isotrópico
α	$1.94e10$	Parâmetro relacionado com a energia química

Fonte: Autor

Além disto, foi considerado que a placa possui um dano inicial igualmente distribuído (D_0) em toda sua superfície e uma concentração de soluto inicial (C_0). Os valores utilizados para o material e carga encontram-se na Tabela 1.

Além de possuir concentração de soluto distribuída uniformemente em todo o seu domínio, considerou-se fluxo nulo em todas as arestas externas da placa, resultando em uma migração de átomos de soluto no interior da placa sem haver a entrada e saída de soluto.

Para o cálculo da variável dano foi desenvolvido uma técnica, pois o dano não deve ser maior que 1, significando dizer que o material estaria todo degradado. Foi estipulado um valor para a variável dano, na qual o material se caracterizasse como não resistisse mais aos esforços, denominado de D_{max} . A partir deste valor, o dano deve aumentar de forma bastante lenta, ou seja, com baixa taxa de dano.

Para se obter uma baixa taxa de dano é necessário termos um valor elevado para o parâmetro A3, conforme apresentado na equação final do modelo desenvolvido no Capítulo 3. Estipulou-se a inserção da seguinte função exponencial multiplicando a montagem da matriz

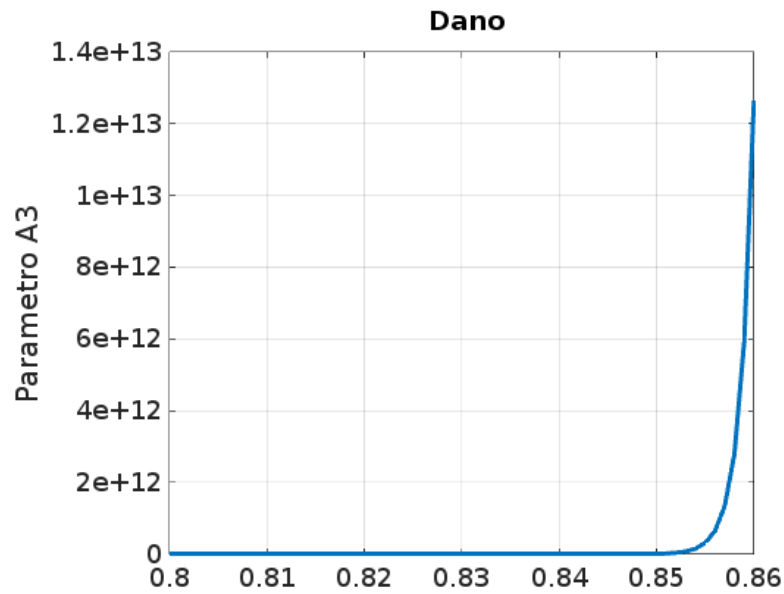
relativa à velocidade de dano, criando-se uma barreira para elevação do dano.

$$A3 = par_A3 \cdot e^{abs(\frac{D-D_{max}}{1-D})\delta} \quad (5.1)$$

A implementação desta técnica proporcionou um limite de crescimento do dano, fazendo com outras regiões resistissem ao carregamento mecânico aplicado.

A função apresentada na Equação 5.1 só é ativada quando o dano atingir o valor de D_{max} . Na Figura 17 apresenta-se o gráfico da função expressa na Equação 5.1 com detalhe na faixa de dano a partir de 0.80.

Figura 17 – Gráfico do detalhe da função exponencial utilizada para dano



Fonte: Autor

Percebe-se que o valor do parâmetro A3 é constante até o dano atingir 0.85 e a partir deste ponto há um brusco crescimento no valor do parâmetro resultando em baixas velocidades de dano, portanto havendo dificuldade para a variável dano se elevar. Isto pode ser melhor entendido baseando-se na equação abaixo:

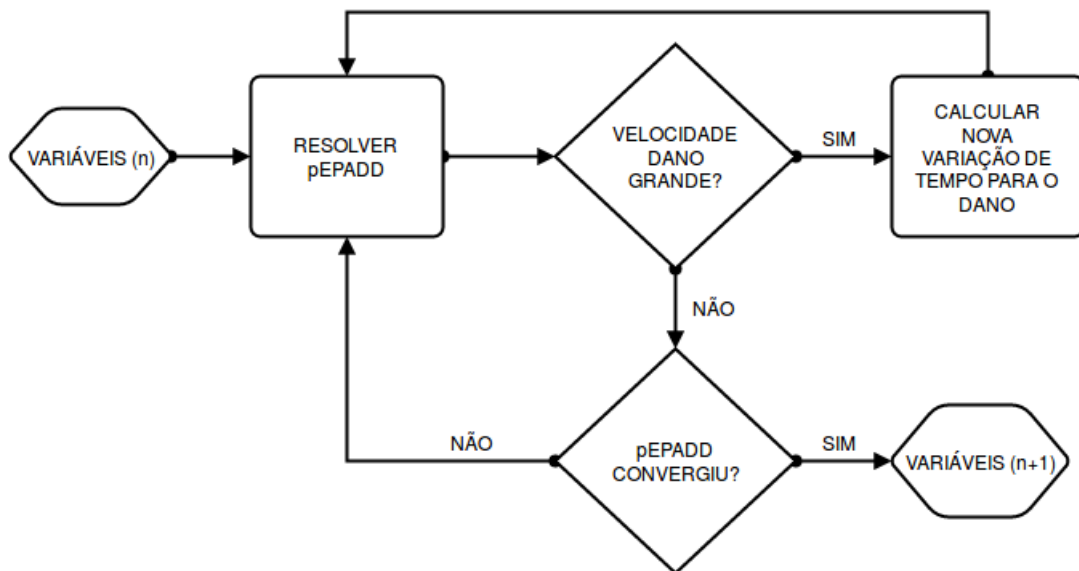
$$\begin{aligned} A3 \int_{\Omega} \dot{D} g d\Omega + \int_{\Omega} D (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot (k_d \nabla D) d\Omega &= \\ = \int_{\Omega} (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega - \int_{\Omega} \omega (1 - \lambda C) g d\Omega \end{aligned} \quad (5.2)$$

O desenvolvimento para a equação acima encontra-se no Apêndice I, assim como a identificação das variáveis, no entanto, nota-se que quanto maior o valor do parâmetro A3, menor deve ser o valor para a velocidade de dano ($\dot{D}$), ou seja, a função representada pela Figura 17 força o crescimento de A3 fazendo com que a velocidade de dano diminua.

Outra técnica utilizada está relacionada com a verificação da taxa de dano. Constatou-se que após uma quantidade de tempo a taxa de dano tinha um crescimento repentino após as soluções elastoplástica e difusiva, resolveu-se então verificar a intensidade da velocidade de dano e caso necessário calcular nova variação de tempo e repetir a solução para o problema naquele instante.

A aplicação desta técnica só foi utilizada após a variável dano atingir determinado valor pré-estabelecido, pois não faria muito sentido ter que ficar calculando as soluções elastoplástica e difusiva para valores muito pequenos de dano. Isto pode ser melhor visualizado no fluxograma apresentado na Figura 18:

Figura 18 – Fluxograma para o cálculo da nova variação de tempo



Fonte: Autor

Alguns outros parâmetros relacionados aos laços de convergência e laços no tempo encontram-se na Tabela 2, seguidos pelo valor e definição.

Tabela 2 – Valores relativos à erros e tempo

Parâmetro	Valor	Definição
<i>iterTol</i>	$1.0e - 4$	Tolerância na iteração
<i>iterMax</i>	$2.0e2$	Número máximo de iterações
<i>plastTol</i>	$1.0e - 5$	Tolerância na plastificação
<i>nIterPmax</i>	$2.0e2$	Número máximo de iterações na plastificação
<i>tol f</i>	$1.0e - 5$	Tolerância para a danificação
<i>iterMaxf</i>	$2.0e2$	Número máximo de iterações no cálculo do dano
<i>npt</i>	$2.5e4$	Número de passos no tempo
<i>interval</i>	$5e1$	Intervalo de tempo [s]

Fonte: Autor

5.1.1 Análise envolvendo os parâmetros relacionados ao gradiente do dano (par_kd) e resistência mecânica (par_A3)

Esta análise consiste em identificar a influência de dois parâmetros nos resultados do problema, esperando-se que o parâmetro par_kd relacione a localização do dano, ou seja, concentrando ou difundindo o dano na região. Já para o parâmetro par_A3 , espera-se que esteja relacionado à dificuldade ou facilidade de evolução do dano.

Estes parâmetros são variáveis que foram criadas e aplicados em equações que representam um fenômeno real. Para o problema em estudo, não foi possível encontrar valores para os parâmetros par_A3 (multiplica a matriz relativa a massa) e par_kd (multiplica a matriz relativa ao gradiente do dano), por isso, fez-se duas combinações mantendo o parâmetro par_A3 constante e alterando o parâmetro par_kd , conforme apresentado abaixo:

$$par_A3 = 1.0e12 \begin{cases} par_kd = 5.0e7 \\ par_kd = 5.0e8 \\ par_kd = 5.0e9 \end{cases} \quad (5.3)$$

e

$$par_A3 = 1.0e11 \begin{cases} par_kd = 5.0e7 \\ par_kd = 5.0e8 \\ par_kd = 5.0e9 \end{cases} \quad (5.4)$$

Estes dois cenários apresentados na Equação 5.4 foram criados para que seja feito um estudo particular para cada um dos dois parâmetros, estando apresentados nas próximas subseções.

Espera-se que a partir destes dois cenários possa-se constatar que quanto maior o parâmetro par_kd mais espalhado seja a região de danificação e; quanto maior o parâmetro par_A3 espera-se uma maior dificuldade de crescimento do dano.

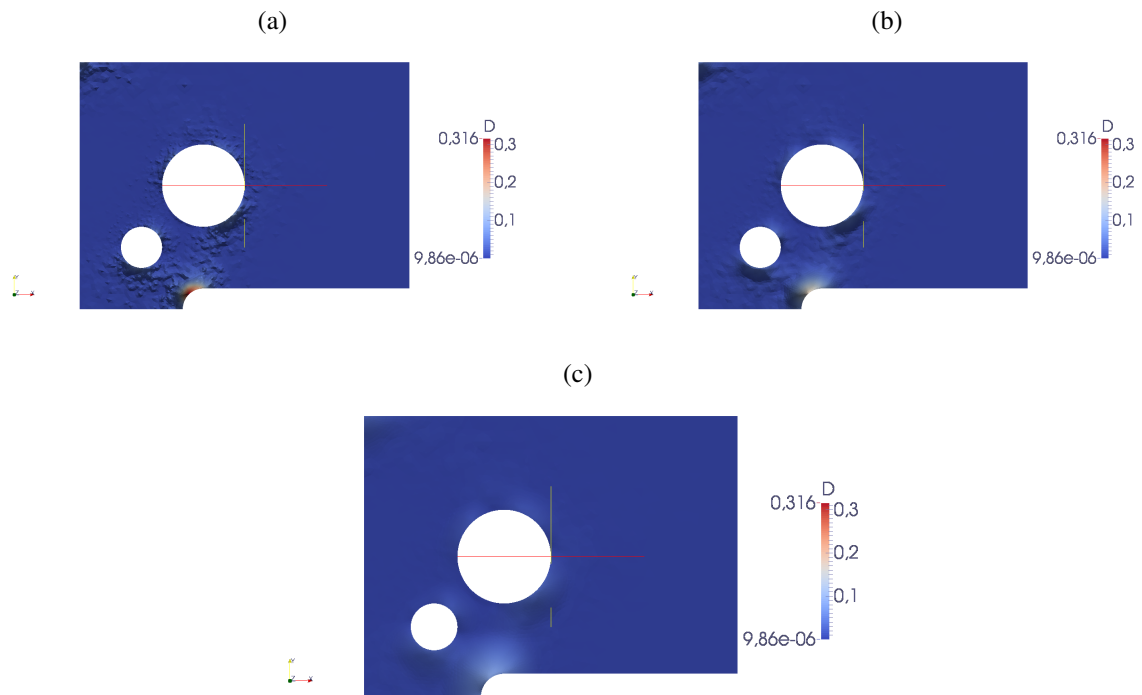
5.1.1.1 Análise do parâmetro par_kd , mantendo o par_A3 constante

Nesta seção apresentam-se os resultados obtidos para o primeiro cenário (Equação 5.3). Os resultados apresentados nas Figuras 19 - 23 representam as variáveis importantes neste trabalho que são: dano, taxa de dano, plastificação acumulada, tensão de Von Mises e concentração de soluto, respectivamente.

Os resultados foram obtidos considerando o valor do parâmetro $par_A3 = 1.0e12$ e as três variações do parâmetro relativo ao gradiente de dano (par_kd), conforme Equação 5.3.

Os primeiros resultados estão apresentados na Figura 19 e está relacionada à variável dano, estando diagramada nas três imagens:

Figura 19 – Resultados para a variável Dano utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$



Fonte: Autor

Pelos resultados observados, conclui-se que a variável dano possui valores maiores para menores valores do parâmetro par_kd . Este fato deve-se à concentração de energia em uma faixa mais estreita fazendo com que o dano local atinja maiores valores.

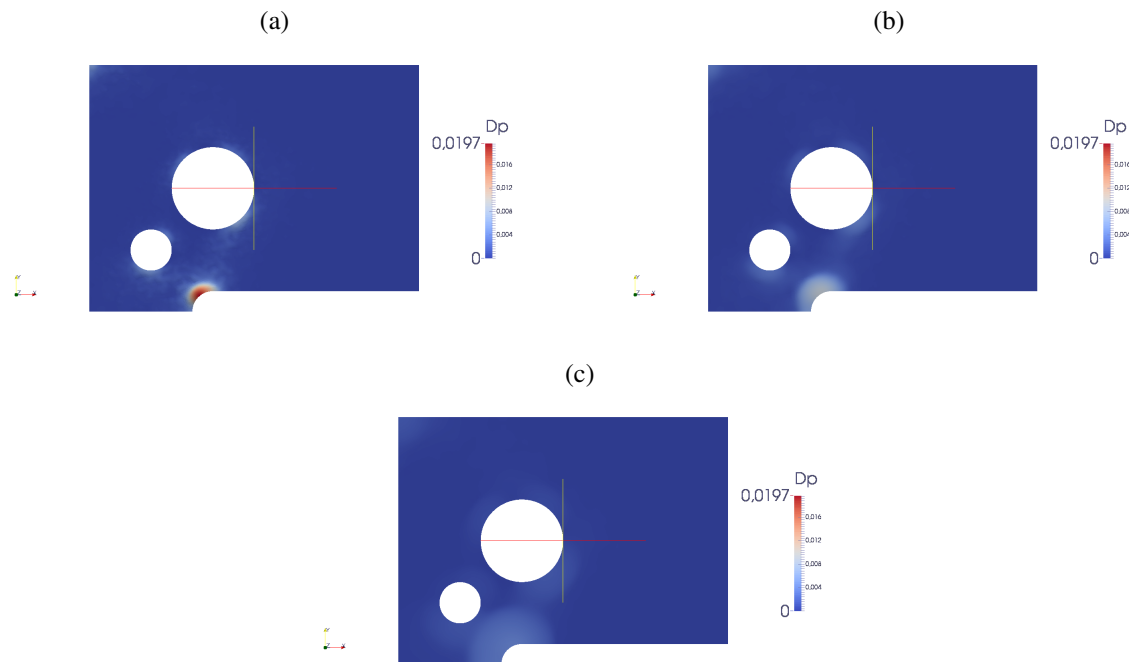
O inverso também é verdadeiro, conforme apresentado na Figura 19, onde tem-se a mesma força aplicada e sendo distribuída para uma região maior resultando em uma quantia para a variável de dano local menor quando comparado com valores de par_kd menores.

Observa-se também que o dano se torna mais suave para maiores valores do parâmetro relativo ao gradiente de dano. Conclui-se que, quanto maior o valor do parâmetro (par_kd), maior a vizinhança e menores valores locais a variável dano atingirá, assim como apresentado na Figura 19 e como era de se esperar.

A suavidade do dano, também pode ser percebida na Figura 20, onde apresenta-se as taxas de dano alterando o valor do parâmetro relativo ao gradiente de dano (par_kd). As taxas de dano são menores (mais suaves) para menores valores de dano e vice-versa.

A taxa de dano para o menor valor do parâmetro par_kd (Figura 20a) se mostra elevada e bastante localizada quando comparada a variável de taxa de dano para o maior valor do parâmetro (Figura 20c), onde a taxa se mostra menos intensa e mais distribuída, obtendo-se o resultado esperado.

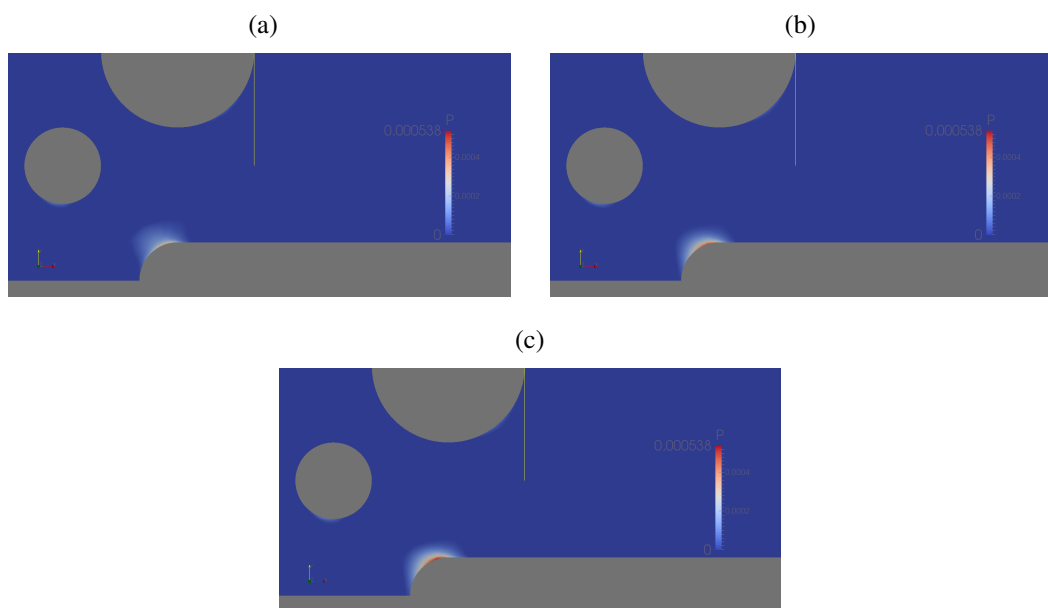
Figura 20 – Resultados para a variável taxa de dano utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$



Fonte: Autor

Os resultados da Figura 21 apresentam em detalhes a região da placa onde a variável da plastificação acumulada atuou.

Figura 21 – Resultados para a variável de plastificação acumulada utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$



Fonte: Autor

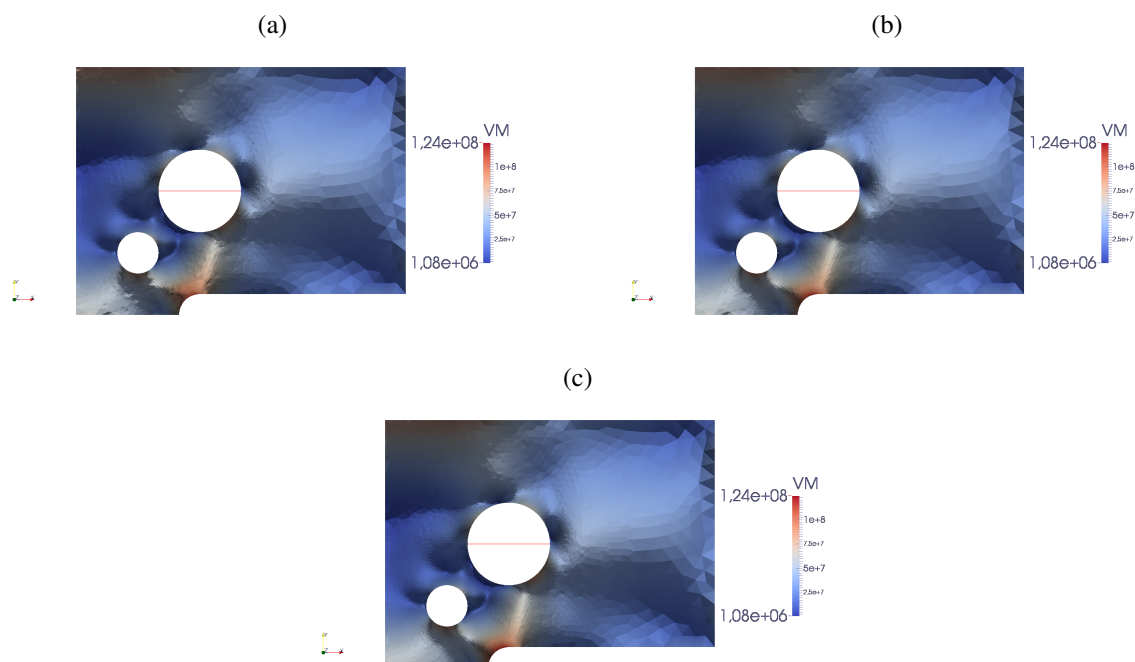
Conforme Figura 21, constata-se que a variável apresenta maiores valores para maiores valores do parâmetro. Sabe-se que a variável está relacionada com a tensão aplicada e consequentemente com o dano no local.

Como o parâmetro é inversamente proporcional ao dano, tem-se neste caso uma menor quantia para a variável de dano, resultando em uma maior tensão aplicada e por fim uma maior plastificação acumulada localmente.

Conforme dito acima, para maiores valores do parâmetro tem-se maiores valores da tensão de Von Mises. Esta conclusão pode ser obtida pela relação entre o dano e a variável, pois quanto maior o valor do parâmetro (par_kd), menor o valor do dano resultando em maiores valores de tensão, ou seja, quanto maior o parâmetro resulta em maiores tensões aplicadas.

Os resultados apresentados na Figura 22, assim como os outros resultados, mostram bastante semelhança, valendo destacar duas regiões que partem da reentrância inferior em direção aos dois furos. Esses furos foram inseridos nesta parte da geometria, próximos à reentrância inferior, justamente para poderem interagir, ou seja, para elevar ainda mais as tensões atuantes no material tornando uma geometria bastante complexa e interessante de se avaliar.

Figura 22 – Resultados para a variável tensão de Von Mises utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$

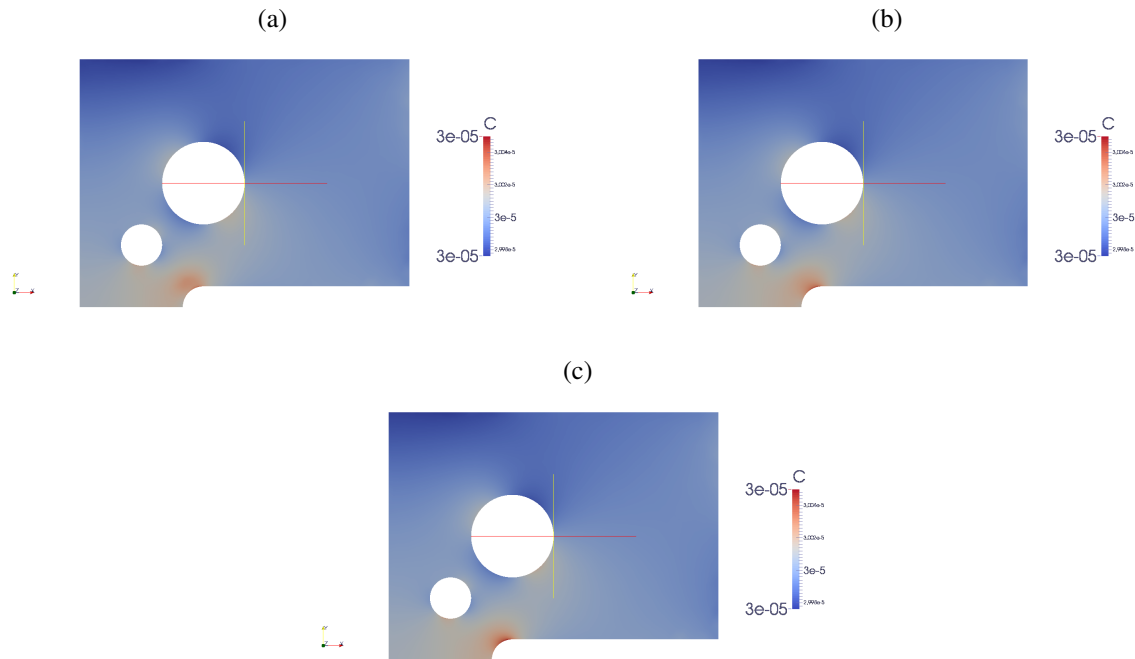


Fonte: Autor

Fazendo a comparação detalhada entre as Figuras 22a e 22c, nota-se uma certa imperfeição nos resultados da tensão de Von Mises utilizando o menor valor para o parâmetro par_kd , isto se deve ao fato da variável dano possuir maiores valores fazendo com que a suavidade nos resultados de tensão de Von Mises sejam abalados.

Por fim, a variável de difusão é totalmente ligada à tensão, então quanto maior o valor do parâmetro, maior o valor da tensão de Von Mises resultando em maiores valores para a concentração de soluto. Este resultado pode ser observado na Figura 23.

Figura 23 – Resultados para a variável concentração de soluto utilizando o MPhyScas: a) $par_kd = 5.0e7$; b) $par_kd = 5.0e8$; c) $par_kd = 5.0e9$



Fonte: Autor

Com os resultados apresentados pode-se notar a influência que cada um destes parâmetros (par_kd e par_A3) exerce sobre os resultados. Uma observação importante é a semelhança que há entre os resultados variando um dos parâmetros e os resultados mostraram que quanto maior o parâmetro relacionado ao gradiente de dano, maior a região afetada.

Já com relação ao parâmetro relativo à resistência mecânica, quanto maior seu valor, mais difícil para o dano evoluir, justamente o que esperava-se analisando as equações do modelo.

Na Tabela 3 apresentam-se os maiores valores numéricos para as variáveis de dano, taxa de dano, plastificação acumulada, tensão de Von Mises e concentração de soluto obtidos através da simulação da placa, utilizando o MPhyScas, variando o parâmetro par_kd e mantendo o $par_A3 = 1.0e12$ constante. Nota-se que a variável dano atingiu maior valor quanto menor o gradiente de dano, ou seja, a degradação do material ficou mais localizada fazendo com que a taxa de dano seja maior, atinja menor valor de tensão de Von Mises, resultando em menores valores de plastificação acumulada e concentração de soluto, conforme era de se esperar.

Tabela 3 – Valores obtidos para as variáveis através da simulação do problema, considerando $par_A3 = 1.0e12$

	<i>par_kd</i>		
	<i>5.0e7</i>	<i>5.0e8</i>	<i>5.0e9</i>
Dano	0.316	0.169	0.078
Taxa de Dano [1/s]	0.0197	0.00872	0.00342
Plastificação acumulada	0.000362	0.000484	0.000538
Tensão de Von Mises [Pa]	$1.17e8$	$1.23e8$	$1.24e8$
Concentração de Soluto	$3.004e-5$	$3.004e-5$	$3.005e-5$

Fonte: Autor

5.1.1.2 Análise do parâmetro par_A3 , mantendo o par_kd constante

Na comparação dos resultados, pode-se perceber que a variável dano é menor para maiores valores do parâmetro. Este parâmetro relaciona a resistência à danificação do material. Tanto que uma das técnicas desenvolvidas neste trabalho foi relacionado ao limite de dano, fazendo com que a variável tivesse um crescimento bastante lento após o dano crítico. Isto foi feito aumentando o valor do parâmetro conforme Equação 5.1.

A partir do escrito acima, pode-se concluir que a plastificação acumulada resulta em maiores valores, assim como a tensão de Von Mises e a concentração de soluto.

5.1.2 Simulação elastoplástica afetada pela difusão e dano

Nesta subseção apresenta-se a simulação completa para o problema multifísica utilizando o modelo desenvolvido aplicado ao MPhyScas. Esta simulação engloba a placa apresentada na Figura 15 com concentração uniforme de soluto e uniformemente danificada. A concentração de soluto inicial foi de $3.0e-5$ e a danificação inicial é de $3.0e-6$.

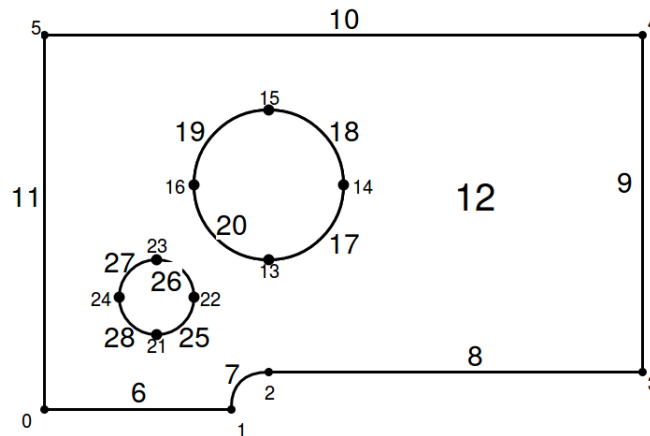
Os valores para os parâmetros estão apresentados nas tabelas anteriores, sendo que o parâmetro relacionada ao gradiente de dano utilizado foi de $5.0e7$ e o parâmetro relativo à resistência mecânica foi de $1.0e11$.

A malha foi contruída através de um arquivo que é lido pelo arquivo da Simulação e nela são fornecidos as quantidades de volumes, superfícies, curvas e pontos. Para o problema em estudo são: 0 volumes, 1 superfície, 14 curvas e 14 pontos.

Além disso, o arquivo produzido para o problema proposto (Figura 24) é subdividido em outras três partes: parte $2D$, parte $1D$ e parte $0D$; onde $2D$, $1D$ e $0D$ representam as estruturas de duas dimensões, uma dimensão e zero dimensão, respectivamente.

Na primeira parte ($2D$) a superfície é definida e nela são inseridos seus filhos, que neste caso são as arestas. Para o problema proposto, há dois tipos de filhos, os filhos que delimitam a superfície, totalizando 6 curvas e os dois furos que são os filhos internos, totalizando oito curvas.

Figura 24 – Problema com entes numerados



Fonte: Autor

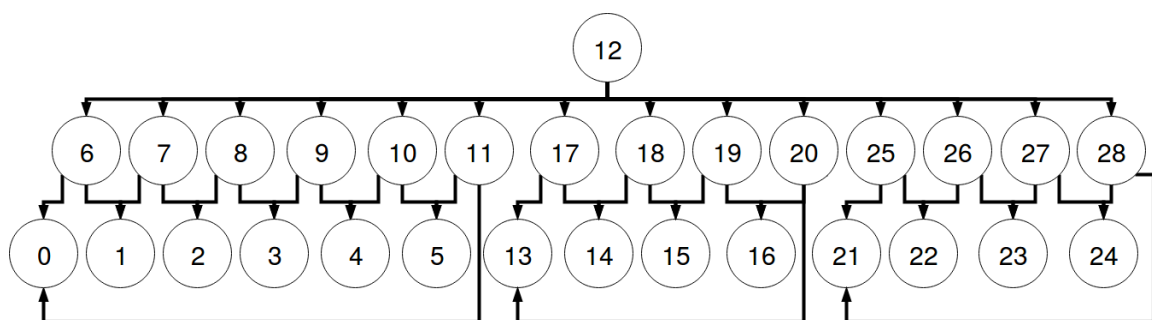
Os filhos externos são identificados pelos seguintes números: 6, 7, 8, 9, 10, 11. Com relação aos filhos internos, há dois furos e cada um dos furos possui quatro filhos (são arcos de circunferência). Para o furo maior tem-se as seguintes identificações: 17, 18, 19 e 20. Para o furo menor tem-se as seguintes identificações: 25, 26, 27 e 28.

Na segunda parte (1D) apresenta-se as curvas, onde o tipo de curva é definido. Para o problema proposto cinco retas e nove arcos de circunferência foram definidos. As retas estão identificadas pelos seguintes números: 6, 8, 9, 10 e 11. Os arcos de circunferência encontram-se na reentrância na parte inferior (identificada pelo número 7) e pelos dois furos, um deles possui as seguintes identificações 17 ao 20 e o outro furo está identificado pela seguinte numeração: 25 ao 28.

Em cada uma das identificações das curvas é fornecido a identificação dos filhos de cada uma delas, ou seja, é necessário a identificação do ponto inicial e final para cada uma das curvas. Esta identificação está detalhada na Figura 25.

A coordenada dos pontos é fornecida na terceira parte (0D).

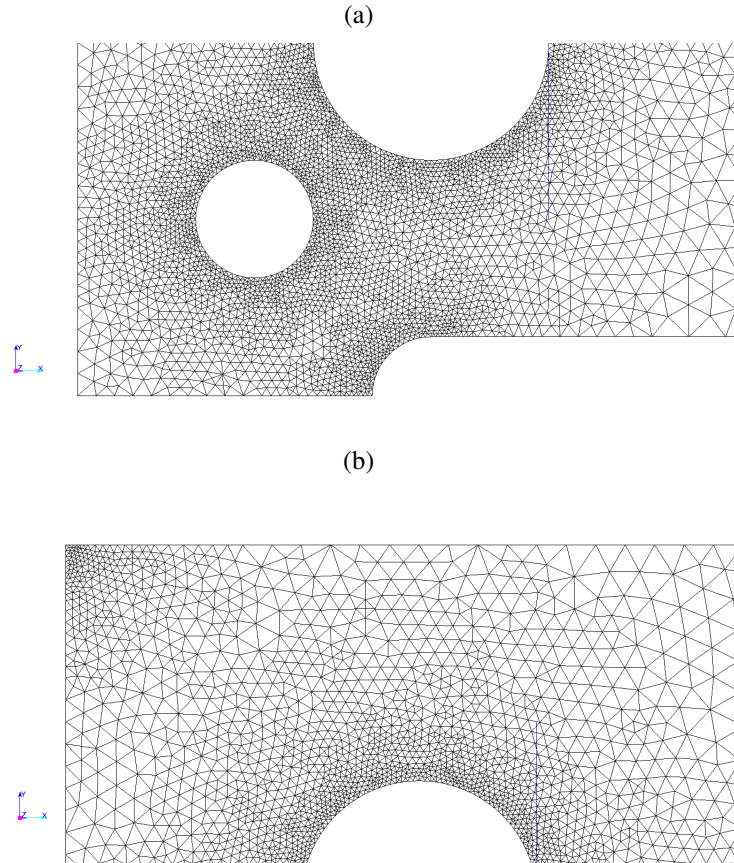
Figura 25 – Identificação dos entes geométricos



Fonte: Autor

A malha gerada apresenta 5559 vértices, 16300 arestas e 10740 faces. Por possuir uma geometria com um certo nível de detalhamento, optou-se em refinar a malha nessas regiões, conforme observado em detalhes na Figura 26.

Figura 26 – Detalhes da malha construída: a) detalhe do refinamento na parte inferior; b) detalhe do refinamento na parte superior



Fonte: Autor

1. As condições de contorno:

a) Deslocamento ($\mathbf{u}$):

i. Tipo Dirichlet:

A. Arestas 6 e 11:

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{u} = 0$$

ii. Tipo Neumann:

A. Aresta 9:

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{t} = 3.0e6t$$

B. Arestas 6, 7, 8, 10, 11, 17, 18, 19, 20, 25, 26, 27 e 28:

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = 0$$

b) Difusão (C):

i. Tipo Neumann:

A. Arestas 6, 7, 8, 9, 10, 11, 17, 18, 19, 20, 25, 26, 27 e 28:

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{J} = 0$$

c) Dano (D):

i. Tipo Neumann:

A. Arestas 6, 7, 8, 9, 10, 11, 17, 18, 19, 20, 25, 26, 27 e 28:

$$\mathbf{n}^T \cdot \nabla D = 0$$

2. As condições iniciais:

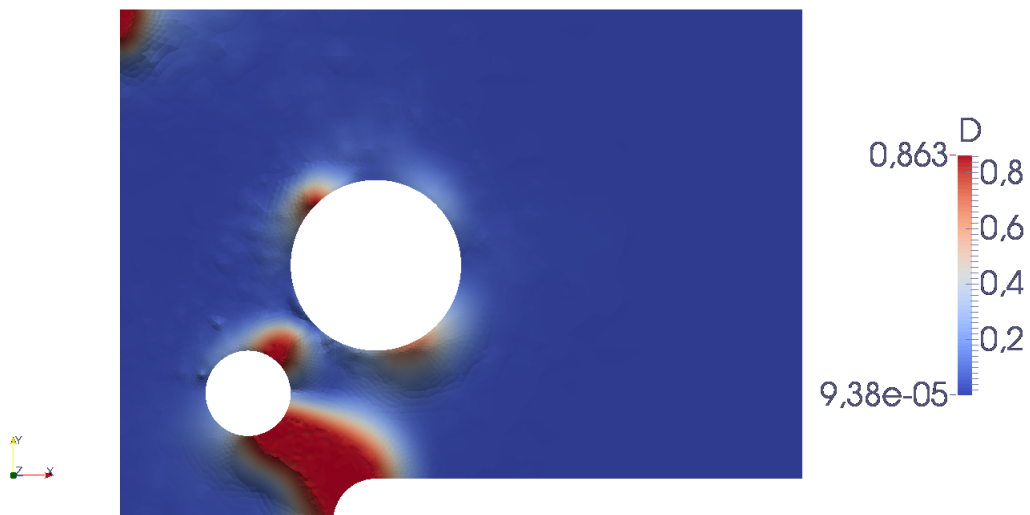
a) Deslocamento ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$, em Ω)

b) Difusão ($C = C_0 = 3.0e - 5$, em Ω):

c) Dano ($D = D_0 = 3.0e - 6$, em Ω):

Nas Figuras 27, 28, 29, 30 e 31 encontram-se os resultados no último passo de tempo para as variáveis: dano, difusão, taxa de dano, plastificação acumulada e tensão de Von Mises, respectivamente.

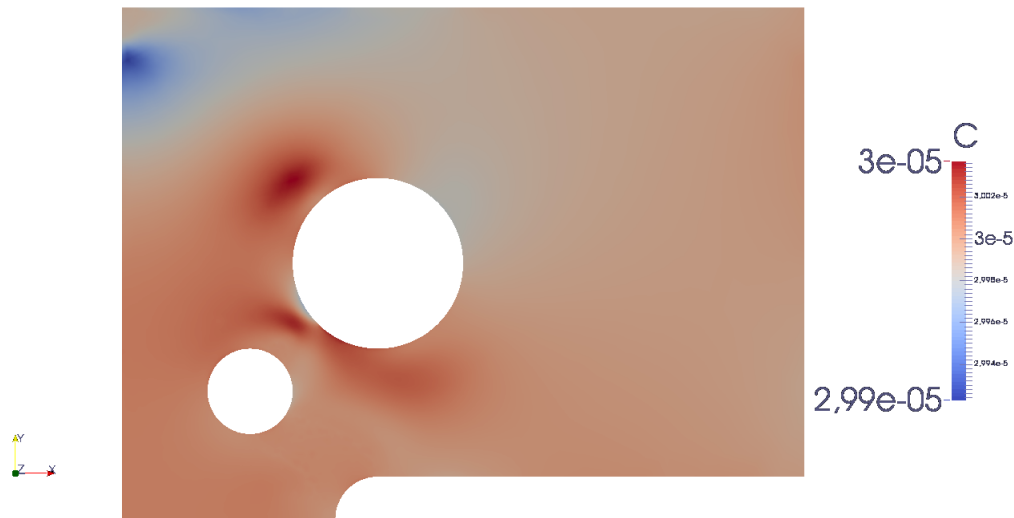
Figura 27 – Resultado obtido para a variável dano, no instante final, utilizando o MPhyScas



Fonte: Autor

Na Figura 27 apresentam-se regiões em vermelho onde o dano ultrapassou o limite configurado ($par_Dmax = 0.85$). Como estas regiões atingiram o dano crítico, pode-se concluir que não há mais material nestas regiões para resistir mecanicamente.

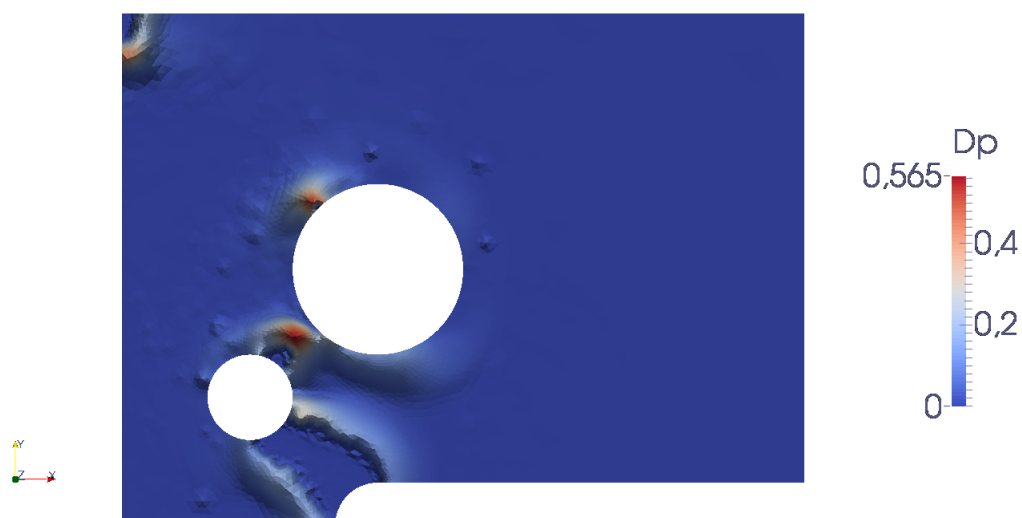
Figura 28 – Resultado obtido para a concentração de soluto, no instante final, utilizando o MPhyScas



Fonte: Autor

Na Figura 28, nota-se duas regiões com tons de vermelho bem acentuado e uma outra em tom azul. Esta região em tom azul diz respeito à uma região onde há pouca concentração de soluto, ou seja, há regiões na placa onde as tensões trativas são maiores. Para o instante capturado, as tensões são maiores, justamente nas frentes de danificação, conforme pode ser observado na Figura 29.

Figura 29 – Resultado obtido para a taxa de dano, no instante final, utilizando o MPhyScas



Fonte: Autor

Observa-se na Figura 29 três regiões em tons de vermelho, ou seja, são regiões onde a taxa de dano está alta, comparando esta figura com a Figura 27 conclui-se que são as frentes de

danificação. Há outras regiões onde o dano atingiu o limite e a taxa de dano é quase nula.

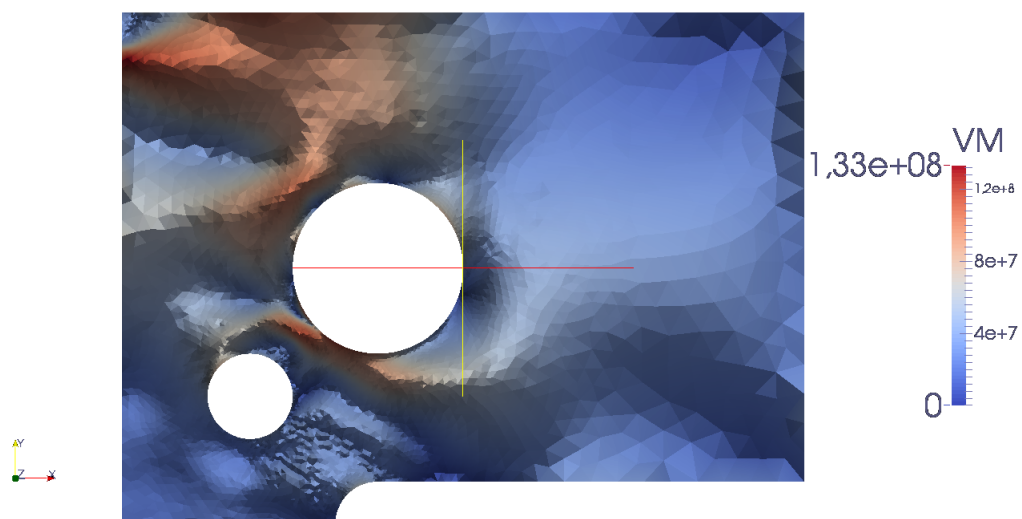
Figura 30 – Resultado obtido para a plastificação acumulada, no instante final, utilizando o MPhyScas



Fonte: Autor

Com relação à plastificação acumulada (Figura 30), pode-se dizer que há uma grande região na parte superior da placa onde está havendo plastificação, assim como uma região isolada entre a reentrância inferior e o furo menor onde houve plastificação. Esta região isolada atingiu limites de tensão maiores que a de escoamento, fazendo com que o material endurecesse e plastificasse, mesmo antes do dano atingir seu valor crítico.

Figura 31 – Resultado obtido para a tensão de Von Mises, no instante final, utilizando o MPhyScas



Fonte: Autor

Por fim, o resultado da simulação envolvendo a tensão de Von Mises está na Figura 31, podendo ser observado regiões com maiores tensões na parte superior da placa e uma certa região entre os dois furos. Na região entre a reentrância e o furo menor, nota-se baixos valores para a tensão, pois conforme resultados apresentados acima, principalmente Figura 27, esta região já foi inteiramente degradada.

Esta simulação foi realizada em uma máquina com a configuração exposta na Tabela 4. O tempo de aplicação da força foi de aproximadamente 40 segundos resultando em um tempo de simulação de aproximadamente 117315 segundos. Além disto, fez-se mais de 20000 gravações com o passar de tempo para cada uma das seis variáveis (Concentração de soluto, dano, taxa de danificação, plastificação acumulada, tensão hidrostática e tensão de Von Mises), totalizando mais de 120000 arquivos gravados.

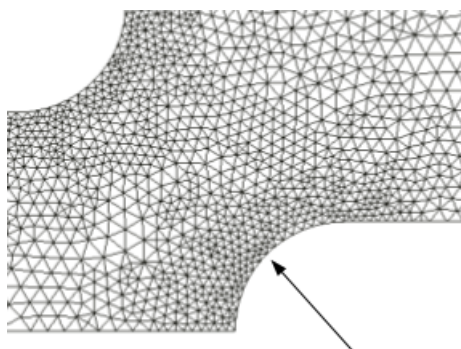
Tabela 4 – Configuração da Máquina

Memory	7,8GiB
Processor	Intel Core i7 – 3930K CPU @3.20GHz x 12
Graphics	Gallium 0.4 on AMD BARTS
OS type	64-bit
Disk	483,7GB

Fonte: Autor

Além dos resultados apresentados para todo o domínio da placa, selecionou-se um ponto de coordenada (0.26828, 0.0386505) localizado no contorno da placa (ver Figura 32) e criou-se gráficos para verificar o comportamento de cada uma das variáveis. A escolha deste ponto se deve ao fato de ser uma região com alta concentração de tensões, sendo uma região susceptível a falha.

Figura 32 – Ponto escolhido para gráficos

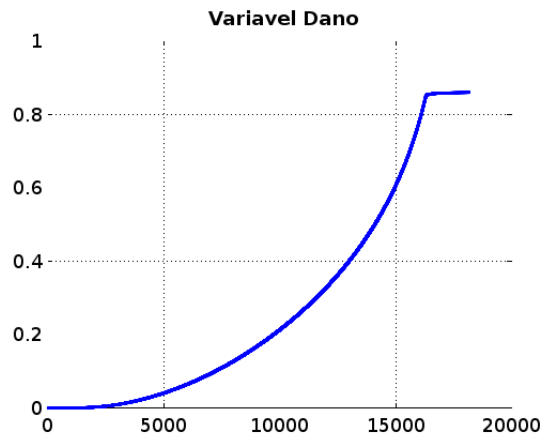


Fonte: Autor

Para este ponto escolhido foram gravados as variáveis de dano, velocidade de dano, concentração de soluto e plasticidade acumulada. Cada uma delas foi gravada em um arquivo diferente, sendo que houve a necessidade de criação de mais uma forma fraca para o fenômeno

da gravação. A variável dano está apresentada na Figura 33 e conforme gráfico percebe-se que o há um aumento do dano de forma acentuada e estagnando próximo ao valor de 0.85, a partir do qual o crescimento é bem lento, isto se deve ao fato da criação de um valor limite para o dano, conforme comentado nos capítulos anteriores.

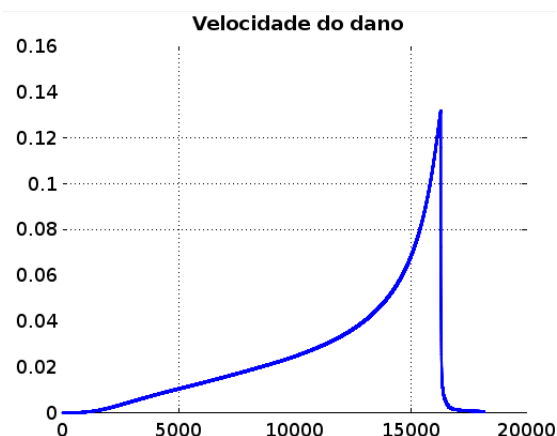
Figura 33 – Valor para a variável dano com aumento da carga monotonicamente



Fonte: Autor

Com relação a velocidade do dano, nota-se da Figura 34 um aumento acentuado até o valor de dano 0.85, justamente quando o dano tem dificuldade em evoluir, pois é considerado um instante no qual o material não resiste mais mecanicamente, havendo uma brusca queda na velocidade.

Figura 34 – Valor para a variável da velocidade do dano com aumento da carga monotonicamente

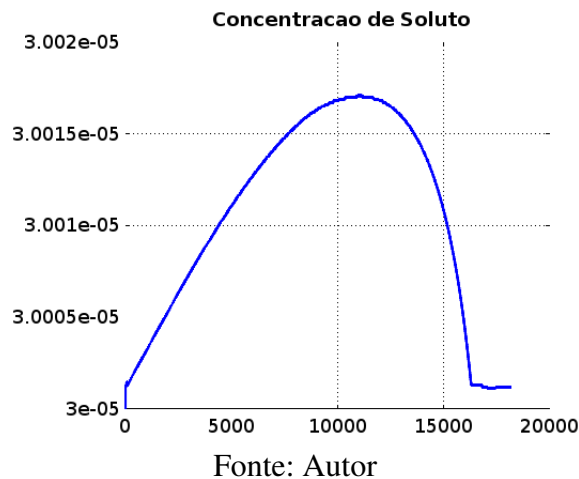


Fonte: Autor

A Figura 35 apresenta o gráfico relacionado à concentração de soluto e sua análise é bastante interessante, pois a concentração tem início justamente no valor estipulado na simulação havendo um crescimento seguido de uma queda. Estas etapas caracterizam que a tensão de Von Mises foi aumentando, fazendo com que a concentração aumentasse e com o passar dos passos no tempo a carga foi aumentando, fazendo com que o dano também aumentasse, resultando

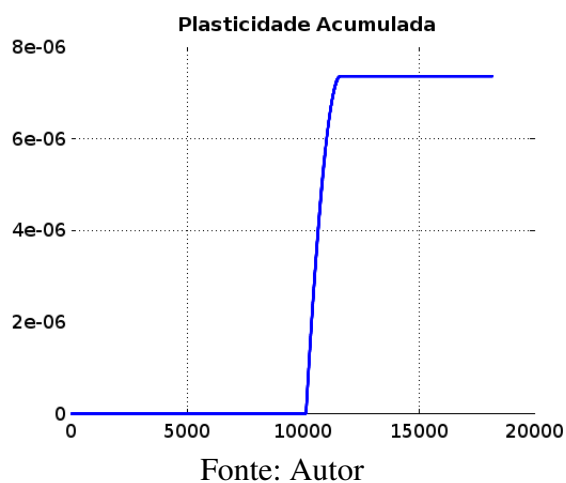
em uma queda na tensão de Von Mises, fazendo com que a concentração de soluto tivesse uma diminuição. Ainda observando este gráfico, nota-se um patamar, caracterizando que o ponto em estudo não está mais sendo afetado pelo aumento da carga.

Figura 35 – Valor para a variável concentração de soluto com aumento da carga monotonicamente



Por fim, o gráfico da plasticidade acumulada esta apresentada na Figura 36, onde percebe-se um patamar inicial igual a zero, justamente nos informando que o material ainda está no regime elástico. Após este patamar, o material começa a plastificar no nó em estudo, atingindo um máximo justamente na concentração de soluto máxima, ou seja, a tensão de Von Mises começa a diminuir no nó fazendo com que o material volte ao regime elástico permanecendo com o valor da plastificação atingido, pois esta variável diz respeito à história do material.

Figura 36 – Valor para a variável da plastificação acumulada com aumento da carga monotonicamente



Após apresentação e discussões sobre os resultados simulados, apresenta-se na próxima seção alguns resultados obtidos com a construção do simulador utilizando o MPhyScas.

5.2 Construção do Simulador Utilizando o MPhyScas

Esta seção está responsável pela apresentação dos resultados relativos ao simulador, ou seja, características de construção realizadas para cada uma das camadas do MPhyScas.

O algoritmo construído para a camada Kernel está no Apêndice C e conforme descrito no Capítulo 4 nota-se que o algoritmo apresenta os laços iterativos no tempo, caracterizado por um único algoritmo.

Para camada Block (articulação dos resolvedores), foram criados dois objetos, um deles responsável pelo pré-processamento e o outro é responsável pelo pós-processamento. Para o objeto Block do pré-processamento foram construídos cinco algoritmos com as seguintes funções:

- Inicializar, alocar e calcular variação de tempo;
- Resolver problema difusivo inicial;
- Atualizar alguns campos vetoriais;
- Resolver problema pEPADD; e
- Atualizar campos vetoriais.

Para o objeto Block do pós-processamento foram construídos dois algoritmos, onde cada um deles é responsável pela gravação dos campos vetoriais. Apresenta-se no Apêndice D os algoritmos construídos para cada um dos objetos Block.

Para a camada Group, foram criados três objetos, sendo dois para o pré-processamento e o outro para o pós-processamento dos dados. Dentre os objetos Group, um deles é responsável pelo fenômeno mecânico, ou seja, as parcelas elástica, plástica e de danificação; o outro é responsável pelo fenômeno difusivo; por fim, o terceiro objeto Group se responsabiliza pelos dados de gravação. Cada um destes objetos Group possuem um conjunto de tarefas que deve ser realizadas. Estas tarefas encontram-se no Apêndice E subdividida para os três grupos. Para o objeto Group elástico foram criados onze conjuntos de tarefas; para o objeto Group Difusivo foram criados cinco conjuntos de tarefas; e por fim, para o objeto Group gravação foram criados dois conjuntos de tarefas.

Para a camada Phenomenon, foram também criados a mesma quantia de objetos da camada Group, estando cada objeto Group relacionado a apenas um objeto na camada Phenomenon. As setenta formas fracas implementadas no MPhyScas constam no Apêndice F, estando identificadas pelo nome, pelo código, pela função e quais são os dados que devem ser fornecidos para sua construção.

Estes resultados são relativos ao pEPADD, mas antes dele ser criado, foram criados outros simuladores envolvendo problemas menos complexos, como por exemplo: o acoplamento entre os fenômenos de elastoplasticidade e difusão.

No próximo capítulo estão descritas as principais conclusões sobre o simulador criado para o pEPADD utilizando o MPhyScas, assim como uma seção indicando trabalhos futuros.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

6.1 Conclusões

Foi apresentado o desenvolvimento matemático da modelagem de um problema de fenômenos acoplados envolvendo elasticidade, plasticidade, difusão, dano e endurecimentos cinemático e isotrópico. O modelo proposto foi implementado no MPhyScas sendo necessário a divisão do algoritmo geral em vários sub-algoritmos.

Construiu-se o algoritmo geral, ou seja, o algoritmo com o passo a passo para a resolução do problema. Após esta construção realizou-se a subdivisão para cada uma das quatro camadas do MPhyScas.

Teve-se o cuidado em organizar o algoritmo para que ele executasse o passo a passo de forma organizada e sequencial, lembrando que os fenômenos são acoplados e há a interação dos campos vetoriais e parâmetros entre eles.

Conforme o andamento das implementações verificou-se a necessidade de alterar alguns desenvolvimentos no algoritmo e por se tratar de um problema multifísica, esperava-se fazer diversas alterações na implementação, mas como o MPhyScas é estruturado em forma de camadas, a reprogramação foi mínima, bastando manipular as peças de software construídas. A partir disto, conclui-se que o MPhyScas é um software ideal para problemas que envolvam acoplamentos entre fenômenos.

A partir do ambiente de simulação construído e da dificuldade em encontrar alguns parâmetros para o material, fez-se um estudo de influência de dois parâmetros: um deles é relativo à resistência mecânica e o outro relaciona-se com gradiente de dano. Concluiu-se que ambos alteram os resultados numéricos obtidos, ou seja, alterações nos valores dos parâmetros resultam em valores numéricos diferentes com comportamentos semelhantes, afetando os resultados com maior ou menor sensibilidade.

A validação do simulador e da implementação foram feitas de forma qualitativa, pois o problema em questão é inovador e de alta complexidade. Além disto, alguns parâmetros não estão disponíveis na literatura, impossibilitando a reprodução numérica de resultados.

Foi simulado o teste em uma placa e notou-se a interação entre cada uma das variáveis. Podendo ser observado regiões inicialmente danificadas que vieram a plastificar; outras regiões que estão plastificando no entorno da danificação; a migração de soluto para as regiões de maiores tensões, deslocando-se juntamente com frentes de danificação; regiões de vale criadas após o dano atingir valor crítico. Concluindo-se que há relações entre todas as variáveis, conforme modelagem matemática.

Com a inserção de cada um dos fenômenos na implementação, observou-se a reusabilidade e adaptabilidade na construção das formas fracas, pois algumas delas eram repetidas, portanto sendo desnecessário a implementação. Neste trabalho foi necessário construir alguns simuladores e foi nítida a melhoria no ganho de tempo gasto nas construções e implementações devido toda a estrutura (peças de software) do primeiro simulador estar construída.

6.2 Trabalhos Futuros

Nesta seção serão abordados alguns trabalhos que estão em andamento assim como sugestões para novos desafios e questionamentos:

- Desenvolver uma interface gráfica para trabalhar com os arquivos dos Simuladores e Simulações;
 - Desenvolver um método capaz de reiniciar a simulação;
 - Fazer a construção da geometria através de outros sistemas;
 - Gerar malhas tridimensionais;
 - Realizar estudo sobre a sensibilidade dos parâmetros;
 - Considerar grandes deformações;
 - Introduzir fenômeno de temperatura;
 - Introduzir fenômeno de fratura;
 - Alterar propriedades do material e soluto;
 - Alterar condição de carregamento para cíclico;
 - Alterar geometria para casos reais.
-

Referências

- AMBATI, M.; GERASIMOV, T.; LORENZIS, L. D. Phase-field modeling of ductile fracture. *Computational Mechanics*, v. 55, n. 5, p. 1017–1040, 2015.
- ARUN, C. O.; RAO, B. N.; SRINIVASAN, S. M. Continuum damage growth analysis using element free galerkin method. *Sadhana*, v. 35, n. 3, p. 279–301, 2010.
- BARBOSA, J. M. A. et al. Simulação da evolução de dano em materiais elásticos com acoplamento de deformação-difusão. In: _____. *8º Congresso Iberoamericano de Engenharia Mecânica*. [S.l.: s.n.], 2007.
- BATE, M. Isotropic plasticity. *Numerical Modelling of Material Deformation Processes*, p. 68–83, 1992.
- BOLOTIN, V.; SHIPKOV, A. A model of the environmentally affected growth of fatigue cracks. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, v. 62, n. 2, p. 289–296, 1998.
- BOLOTIN, V.; SHIPKOV, A. Prediction of the growth of fatigue cracks taking environmental factors into account. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, v. 65, n. 6, p. 1001–1010, 2001.
- BRITO, E. R. R. J. *Desenvolvimento de um Simulador para Problemas Multi-físicas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2007.
- CAPRIZ, G. *Continua with Microstruture*. [S.l.]: Springer, 1989.
- CARLSON, D. E.; FRIED, E.; TORTORELLI, D. A. Geometrically-based consequences of internal constraints. *Journal of Elasticity*, v. 70, n. 1-3, p. 101–109, 2003.
- CHEN, J.; MOROZOV, E.; SHANKAR, K. A combined elastoplastic damage model for progressive failure analysis of composite materials and structures. *Composite Structures*, v. 94, n. 12, p. 3478–3489, 2012.
- COLEMAN, B. D.; NOLL, W. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, v. 13, n. 1, p. 167–178, 1963.
- CRUZ, F. A. *Desenvolvimento de um Simulador para Sistemas com Acoplamento Elastoplástico e Difusivo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2012.
- CRUZ, F. A.; BARBOSA, J. M. A.; SANTOS, F. C. G. Desenvolvimento de um simulador para sistemas com acoplamento elastoplástico e difusivo. In: _____. *VIII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica*. [S.l.: s.n.], 2014.
- CRUZ, F. A.; BARBOSA, J. M. A.; SANTOS, F. C. G. Design and implementation of multiphysics simulators using a computational framework. In: _____. *XXXVIII Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*. [S.l.: s.n.], 2017.
- DUDA, F. P. et al. A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elasticplastic solids. *International Journal of Plasticity*, v. 65, p. 269–296, 2015.

- DUDA, F. P. et al. On the modeling of deformation-diffusion-damage coupling in elastic solids. In: _____. *III European Conference on Computational Mechanics*. [S.l.]: Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering, 2006. p. 34–60.
- DUDA, F. P. et al. A one-dimensional theory of solute diffusion and degradation in elastic solids. *Journal of Elasticity*, v. 97, n. 1, p. 15–30, 2009.
- FEITOSA, J. et al. Stress effects on hydrogen permeation through tubular multilayer membranes: Modeling and simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, n. 47, p. 17031–17037, 2015.
- FICK, A. On liquid diffusion. *Journal of Membrane Science*, n. 100, p. 33–38, 1995.
- FISCHER, F.; SVOBODA, J. Formation of bubbles by hydrogen attack and elastic plastic deformation of the matrix. *International Journal of Plasticity*, v. 63, p. 110–123, 2014.
- FREMOND, M.; NEDJAR, B. Damage, gradient of damage and principle of virtual power. *International Journal of Solids and Structures*, v. 33, n. 8, p. 1083–1103, 1996.
- FU, M.; CHEN, L. On the yield functions in lagrangian stress space of elasticplastic materials with internal constraints. *Acta Mechanica Sinica*, v. 23, n. 3, p. 297–303, 2007.
- GURTIN, M. E.; FRIED, E.; ANAND, L. *The mechanics and thermodynamics of continua*. [S.l.: s.n.], 2013.
- KAPLAN, W. *Advanced Calculus*. [S.l.]: Pearson, 2003.
- KROM, A.; KOERS, R.; BAKKER, A. Hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 47, n. 4, p. 971–992, 1999.
- LAVENDA, B. H. *Thermodynamics of Irreversible Process*. [S.l.]: Dover Publications, 1993.
- LENCASTRE, M. *Conceptualisation of an Environment for the Development of FEM Simulators*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2004.
- MACIEL, D.; BOUCHONNEAU, N. Evaluation of shutdown time of subsea pipeline for oil transportation. In: _____. *COMSOL Conference*. [S.l.]: Anais da COMSOL Conference, 2014.
- MENZEL, A. A framework for multiplicative elastoplasticity with kinematic hardening coupled to anisotropic damage. *International Journal of Plasticity*, v. 21, n. 3, p. 397–434, 2005.
- MIEHE, C.; ALDAKHEEL, F.; RAINA, A. Phase field modeling of ductile fracture at finite strains: A variational gradient-extended plasticity-damage theory. *International Journal of Plasticity*, v. 84, p. 1–32, 2016.
- MORICONI, C.; HENAFF, G.; HALM, D. Influence of hydrogen coverage on the parameters of a cohesive zone model dedicated to fatigue crack propagation. *Procedia Engineering*, v. 10, p. 2657–2662, 2011.
- MORICONI, C.; HÉNAFF, G.; HALM, D. Cohesive zone modeling of fatigue crack propagation assisted by gaseous hydrogen in metals. *International Journal of Fatigue*, v. 68, p. 56–66, 2014.
- NEDJAR, B. Elastoplastic-damage modelling including the gradient of damage: formulation and computational aspects. *International Journal of Solids and Structures*, v. 38, n. 30-31, p. 5421–5451, 2001.

- NOTTA-CUVIER, D. et al. An innovative procedure for characterising a coupled elastoplastic damage model of behaviour using the virtual fields method. *International Journal of Solids and Structures*, v. 69-70, p. 415–427, 2015.
- ROUBICEK, T.; TOMASSETTI, G. Thermomechanics of damageable materials under diffusion: modelling and analysis. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, v. 66, n. 6, p. 3535–3572, 2015.
- SHAO, J. et al. A coupled elastoplastic damage model for semi-brittle materials and extension to unsaturated conditions. *Mechanics of Materials*, v. 38, n. 3, p. 218–232, 2006.
- SOFRONIS, P.; LIANG, Y.; ARAVAS, N. Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, v. 20, n. 6, p. 857–872, 2001.
- SOFRONIS, P.; MCMEEKING, R. Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 37, n. 3, p. 317–350, 1989.
- TAHA, A.; SOFRONIS, P. A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement. *Engineering Fracture Mechanics*, v. 68, n. 6, p. 803–837, 2001.

APÊNDICE A – Desenvolvimento do incremento da plastificação

Neste apêndice apresenta-se o desenvolvimento utilizado para o cálculo do incremento da plastificação. Para isto, apresenta-se as equações utilizadas e as manipulações realizadas. Envolvem as equações de tensão, endurecimento cinemático e isotrópico com incrementos.

- Análise envolvendo o tensor tensão

Abaixo, encontra-se a equação da tensão pré-multiplicada pelo dano.

$$\mathbf{S} = \left((1 - D)^2 + k_c \right) [\lambda \text{tr}(\mathbf{E}^e) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^e] \quad (\text{A.1})$$

Nota-se na equação acima, que a tensão está em função da deformação elástica e como o problema proposto considera pequenas deformações, tem-se que a deformação total é decomposta nos seguintes termos:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^c + \mathbf{E}^p \quad (\text{A.2})$$

Observa-se que a decomposição foi feita em três termos, sendo eles: deformação elástica, química e plástica. Isolando o termo de deformação elástica, tem-se:

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p \quad (\text{A.3})$$

O termo relacionado à deformação química é considerado isotrópico e alterando simplesmente a parcela volumétrica da deformação conforme apresentado abaixo:

$$\mathbf{E}^c = e(C - C_0) \mathbf{I} \quad (\text{A.4})$$

Após a apresentação da tensão e dos termos relativos às deformações, substitui-se o termo de deformação elástica (Equação A.3) na Equação A.1

$$\mathbf{S} = \left((1 - D)^2 + k_c \right) [\lambda \text{tr}(\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \mathbf{I} + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p)] \quad (\text{A.5})$$

Isolando cada um dos termos nas componentes de tensão total, tensão química e tensão plástica. Nota-se que a tensão total está sendo decrescida de duas outras parcelas de tensão, conforme apresentado abaixo:

$$\mathbf{S} = \left((1-D)^2 + k_c \right) [(\lambda tr(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}) - (\lambda tr(\mathbf{E}^c)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}^c) - (\lambda tr(\mathbf{E}^p)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}^p)] \quad (\text{A.6})$$

Fazendo manipulações matemáticas no termo da tensão química e sabendo que o traço do tensor desviador da deformação plástica é nulo, obtém-se a seguinte equação:

$$\mathbf{S} = \left((1-D)^2 + k_c \right) [(\lambda tr(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}) - (3\lambda e(C - C_0)\mathbf{I} + 2\mu e(C - C_0)\mathbf{I}) - (2\mu\mathbf{E}^p)] \quad (\text{A.7})$$

Para o cálculo da tensão desviadora é necessário o cálculo do traço do tensor de tensões (Equação A.7) e está vinculado à alterações no formato da peça.

$$tr(\mathbf{S}) = \left((1-D)^2 + k_c \right) [(3\lambda tr(\mathbf{E}) + 2\mu tr(\mathbf{E})) - (3\lambda e(C - C_0)tr(\mathbf{I}) + 2\mu e(C - C_0)tr(\mathbf{I})) - (2\mu tr(\mathbf{E}^p))] \quad (\text{A.8})$$

$$tr(\mathbf{S}) = \left((1-D)^2 + k_c \right) [(3\lambda tr(\mathbf{E}) + 2\mu tr(\mathbf{E})) - (3 \cdot 3\lambda e(C - C_0) + 3 \cdot 2\mu e(C - C_0)) - (2\mu tr(\mathbf{E}^p))] \quad (\text{A.9})$$

A tensão desviadora é obtida substituindo o tensor de tensões e seu traço na equação abaixo.

$$\mathbf{S}_{dev} = \mathbf{S} - \frac{1}{3}tr(\mathbf{S})\mathbf{I} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{dev} = & \left((1-D)^2 + k_c \right) [(\lambda tr(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}) - (3\lambda e(C - C_0)\mathbf{I} + 2\mu e(C - C_0)\mathbf{I}) - (2\mu\mathbf{E}^p)] - \\ & - \frac{1}{3} \left((1-D)^2 + k_c \right) [(3\lambda tr(\mathbf{E}) + 2\mu tr(\mathbf{E})) - (3 \cdot 3\lambda e(C - C_0) + 3 \cdot 2\mu e(C - C_0)) - \\ & - (2\mu tr(\mathbf{E}^p))] \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{S}_{dev} = \left((1-D)^2 + k_c \right) \left[2\mu\mathbf{E} - 2\mu\mathbf{E}^p - \frac{2}{3}\mu tr(\mathbf{E})\mathbf{I} \right] \quad (\text{A.12})$$

Resultando na seguinte expressão para a tensão desviadora:

$$\mathbf{S}_{dev} = \left((1-D)^2 + k_c \right) \left[2\mu \left(\mathbf{E} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{I} \right) - 2\mu \mathbf{E}^p \right] \quad (\text{A.13})$$

Calculando o incremento da tensão que será utilizado posteriormente.

$$\Delta \mathbf{S}_{dev} = \left((1-D)^2 + k_c \right) \left[2\mu \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} \text{tr}(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right) - 2\mu \Delta \mathbf{E}^p \right] \quad (\text{A.14})$$

- Análise envolvendo o tensor de endurecimento cinemático

$$\mathbf{X} = a\beta \quad (\text{A.15})$$

$$\dot{\mathbf{X}} = a\dot{\beta} \quad (\text{A.16})$$

$$\dot{\beta} = \mathbf{E}^p - \frac{\varphi}{a} \mathbf{X} \dot{p} \quad (\text{A.17})$$

Calculando o incremento do tensor de endurecimento cinemático que será utilizado posteriormente.

$$\Delta \mathbf{X} = a \left(\Delta \mathbf{E}^p - \frac{\varphi}{a} \mathbf{X} \Delta p \right) = a \Delta p \mathbf{N} - \varphi \mathbf{X} \Delta p \quad (\text{A.18})$$

- Análise envolvendo o endurecimento isotrópico

$$Y = \sigma_y + b \left(1 - e^{-dp} \right) \quad (\text{A.19})$$

Calculando o incremento do endurecimento isotrópico que será utilizado posteriormente.

$$\Delta Y = b d e^{-dp} \Delta p \quad (\text{A.20})$$

- Análise da função de plastificação

$$f = \sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})} - Y \quad (\text{A.21})$$

Tensão de Von Mises

$$J = \sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})} \quad (\text{A.22})$$

A função de plastificação relaciona a diferença entre a tensão de Von Mises e o endurecimento isotrópico, conforme apresentado abaixo:

$$f(\mathbf{S}_{dev}, \mathbf{X}, Y) = J - Y \quad (\text{A.23})$$

Calculando as derivadas para cada uma das variáveis :

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_{dev}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}} \right) \frac{3}{2} \cdot 2 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_{dev}} = \frac{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{\sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}} = \frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}} \right) \frac{3}{2} \cdot 2 \cdot (-1) (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) \quad (\text{A.26})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} = - \frac{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{\sqrt{\frac{3}{2} (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X}) : (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}} = - \frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} \quad (\text{A.27})$$

$$\frac{\partial f}{\partial Y} = -1 \quad (\text{A.28})$$

Após todas as derivadas apresentadas, assim como os incrementos, faz-se as substituições na equação abaixo com o objetivo de isolar o incremento da plastificação.

$$f(\mathbf{S}_{dev} + \Delta \mathbf{S}_{dev}, \mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}, Y + \Delta Y) = f(\mathbf{S}_{dev}, \mathbf{X}, Y) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_{dev}} \Delta \mathbf{S}_{dev} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Delta \mathbf{X} + \frac{\partial f}{\partial Y} \Delta Y \quad (\text{A.29})$$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{S}_{dev}, \mathbf{X}, Y) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_{dev}} \Delta \mathbf{S}_{dev} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Delta \mathbf{X} + \frac{\partial f}{\partial Y} \Delta Y &= 0 \\ f + \left(\frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} : \Delta \mathbf{S}_{dev} \right) + \left(- \frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} : \Delta \mathbf{X} \right) + (-1 \cdot \Delta Y) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f + \frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} : \left(\left((1 - D)^2 + k_c \right) \left[2\mu \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} \text{tr}(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right) - 2\mu \Delta \mathbf{E}^p \right] \right) + \\ - \frac{3 (\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{2 J} : (a \Delta p \mathbf{N} - \phi \mathbf{X} \Delta p) - b d e^{-dp} \Delta p = 0 \quad (\text{A.30}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& f + \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right) - \\
& - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \Delta p \mathbf{N} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : (a\mathbf{N} - \phi \mathbf{X}) \Delta p - bde^{-dp} \Delta p = 0 \\
\\
& - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \Delta p \mathbf{N} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : (a\mathbf{N} - \phi \mathbf{X}) \Delta p - bde^{-dp} \Delta p = \\
& - f - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right) \quad (A.31)
\end{aligned}$$

Isolando o incremento do Δp .

$$\Delta p = \frac{f + \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right)}{\frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{N} + \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} : (a\mathbf{N} - \phi \mathbf{X}) + bde^{-dp}} \quad (A.32)$$

$$\mathbf{N} = \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S}_{dev} - \mathbf{X})}{J} \quad (A.33)$$

$$\Delta p = \frac{f + \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{N} : \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right)}{\left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{N} : \mathbf{N} + \mathbf{N} : (a\mathbf{N} - \phi \mathbf{X}) + bde^{-dp}} \quad (A.34)$$

$$\Delta p = \frac{f + \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{N} : \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right)}{\left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \frac{3}{2} + \frac{3}{2} a - \phi \mathbf{N} : \mathbf{X} + bde^{-dp}} \quad (A.35)$$

Resultando no seguinte incremento para a plastificação.

$$\Delta p = \frac{f + \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{N} : \left(\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{3} tr(\Delta \mathbf{E}) \mathbf{I} \right)}{\frac{3}{2} \left(\left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu + a \right) - \phi \mathbf{N} : \mathbf{X} + bde^{-dp}} \quad (A.36)$$

APÊNDICE B – Algoritmo Geral - Problema Elastoplástico Afetado pela Difusão e Dano

Algoritmo 5: Algoritmo para o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano

Inicializar o tempo $t = 0$

Block0 - execute Algorithm0

Grp0 - GTO

gPhen0-xCd-0{

WF_ElgPhenCptSizes

WF_ElgPhenAllocgvf

}

Phen1-xCd-0{

WF_ElPhenSetValue

WF_ElPhenCptDeltatpe00

WF_ElPhenInitDamag

}

gPhen0-xCd1{

WF_ElgPhenAttrib

WF_ElgPhenCptDeltat

}

FIM GTO

Grp1 - GTO

gPhen2-xCd0{

WF_DgPhenCptSizes

WF_DgPhenSizeAllocAll

}

Phen3-xCd0{

WF_DPhenSetValue

WF_DPhenCptUd

WF_DPhenCptDeltatp00

}

gPhen2-xCd1{

WF_DgPhenCptDeltat

}

FIM GTO

Deltat_b = min{Deltat_ge ,Deltat_gd}

Fim Algorithm0

$\Delta t = \Delta t_b$

Block0 - execute Algorithm1

```

Grp1 - GT1
  Phen3-xCd1{
    WF_DPhenCptM
    WF_DPhenCptKd
    WF_DPhenIBC00
  }
  gPhen2-xCd2{
    WF_gPhenDefinitive0
    WF_gPhenDefinitive1
    WF_DgPhenMult
    WF_gPhenDelRealloc0
    WF_DgPhenSolver
  }
FIM GT1

```

Fim Algorithm1

Block1 - execute Algorithm0

```

Grp2 - GT0
  Phen5-xCd0{
    WF_RecPhenAll
  }
FIM GT0

```

Fim Algoritmo0

$t = \Delta t$

while do($t \leq interval$)

Block0 - execute Algorithm2

```

Grp0 - GT1
  gPhen0-xCd2{
    WF_ElgPhenAttrib00
  }
FIM GT1
Grp1 - GT2
  gPhen2-xCd3{
    WF_DgPhenCptUdk
    WF_DgPhenCptFd
  }
  Phen3-xCd2{
    WF_DPhenCptKd1
    WF_DPhenIBC01
  }
FIM GT2

```

Fim Algorithm2

Block0 - execute Algorithm3

```

iterErr = 1
iterCount = 0
WHILE ((iterErr > iterTol) & (iterCount < iterMax))
  Grp0 - GT2
  Phen1-xCd1{
    WF_ElPhenCptFbody
    WF_ElPhenCptFDiff
    WF_ElPhenIBC00
  }
  Fim GT2
  errP = 1
  nIterPcount = 0
  WHILE((errP > plasTol) & (nIterPcount < nIterPmax)){
    Grp0 - GT3
    gPhen0-xCd3{
      WF_ElgPhenAttrib01
    }
    Phen1-xCd2{
      WF_ElPhenCptKe
      WF_ElPhenCptFPlast
      WF_ElPhenIBC01
    }
    gPhen0-xCd4{
      WF_gPhenDefinitive0
      WF_ElgPhenSolver
      WF_ElgPhenDelRealloc0
      WF_ElgPhenCptErr
      WF_ElgPhenAtrrib02
      WF_ElgPhenAtrrib03
    }
    Phen1-xCd3{
      WF_ElPhenCptSig
      WF_ElPhenCptSigDiff
      WF_ElPhenCptTrace
      WF_ElPhenCptPlastic
    }
    Fim GT3

    nIterPcount++
  }(FIM (errP e nIterPmax))
  IF (nIterPcount >= nIterPmax){
    Mensagem Erro nIterPcount
  }END

```

```

Grp0 - GT4
  gPhen0-xCd5{
    WF_ElgPhenCptErrk
    WF_ElgPhenAttrrib04
    WF_gPhenDelRealloc1
  }
Fim GT4
Grp1 - GT3
  Phen3-xCd3{
    WF_DPhenCptKd
    WF_DPhenCptBd
    WF_DPhenCptBdd
  }
  gPhen2-xCd4{
    WF_DgPhenCptKdg
    WF_DgPhenHMK
  }
  Phen3-xCd4{
    WF_DPhenIBC02
  }
  gPhen2-xCd5{
    WF_gPhenDefinitive2
    WF_DgPhenSolver
    WF_gPhenDelRealloc1
    WF_gPhenDelRealloc2
    WF_gPhenDelRealloc3
    WF_gPhenDelRealloc4
    WF_DgPhenCpterrD
    WF_DgPhenAttrrib00
  }
Fim GT3
Grp0 - GT5
  Phen1-xCd4{
    WF_ElPhenCptKf
    WF_ElPhenCptBf
    WF_ElPhenCptF1f
    WF_ElPhenCptF2f
    WF_ElPhenMfA3
  }

```

```

    gPhen0-xCd6{
        WF_gPhenAddMatrix
        WF_ElgPhenAddKB
        WF_gPhenDefinitive1
        WF_gPhenDefinitive2
        WF_gPhenDefinitive
        WF_gPhenSetValue
        WF_ElgPhenCptGf
        WF_ElgPhenAddGF
        WF_ElgPhenSolver
        WF_gPhenSetValue
    }
    Phen1-xCd5{
        WF_ElPhenTestgrk
    }
    gPhen0-xCd7{
        WF_gPhenDelRealloc2
        WF_gPhenDelRealloc3
        WF_gPhenDelRealloc4
        WF_gPhenDelRealloc5
        WF_gPhenDelRealloc6
    }
    FIM GT5
    nCountf = 0
    errdam = 1 ;
    WHILE ((errdam>tolf) && (nCountf) < iterMaxf)){
        Grp0 - GT6
        gPhen0 - xCd8 {
            WF_gPhenSetValue
            WF_ElgPhenCptKfDk
            WF_ElgPhenPrepareGf
            WF_ElgPhenSolver
            WF_gPhenSetValue
        }
        Phen1-xCd6{
            WF_ElPhenTestgrk1
        }
        gPhen0 - xCd9 {
            WF_ElgPhenCpterrDk
            WF_ElgPhenCpterrgrk
        }
    }
    FIM GT6

```

```

        errdam = max{err1, err2}
    Grp0 - GT7
        gPhen0 - xCd10 {
            WF_ElgPhenAttrib02
            WF_ElgPhenAttrib03
        }
    FIM GT7
    nCountf++
END - (WHILE (errdam))
IF(nCountf >= iterMaxf){
    Dano não convergiu !
}
Grp0 - GT8
    gPhen0 - xCd11 {
        WF_ElgPhenCpterrF
        WF_ElgPhenAttrib04
        WF_ElgPhenCptDnp1
        WF_gPhenDelRealloc7
        WF_gPhenDelRealloc8
        WF_gPhenDelRealloc9
        WF_gPhenDelRealloc10
    }
    FIM GT8
    iterErr = max{errK, errD,errF}
    iterCount++
}(FIM (iterErr e iterCount))
IF (iterCount >= iterMax){
    equilibrio mecanico e quimico não convergiu
} END
Grp0 - GT9
    Phen1-xCd7{
        WF_ElPhenCptDeltatDamag
    }
    FIM GT9
IF (Deltat_dam < Deltat_b)
    Deltat_b = Deltat_dam
    diterErr = 1
    diterCount = 0

```

```

WHILE ((diterErr > iterTol) & (diterCount < iterMax))
  Grp0 - GT2
  Phen1-xCd1{
    WF_ElPhenCptFbody
    WF_ElPhenCptFDiff
    WF_ElPhenIBC00
  }
  Fim GT2

  errP = 1
  dnIterPcount = 0
  WHILE((errP > plasTol) & (dnIterPcount < nIterPmax)){
    Grp0 - GT3
    gPhen0-xCd3{
      WF_ElgPhenAttrib01
    }
    Phen1-xCd2{
      WF_ElPhenCptKe
      WF_ElPhenCptFPlast
      WF_ElPhenIBC01
    }
    gPhen0-xCd4{
      WF_gPhenDefinitive0
      WF_ElgPhenSolver
      WF_ElgPhenDelRealloc0
      WF_ElgPhenCptErr
      WF_ElgPhenAttrib02
      WF_ElgPhenAttrib03
    }
    Phen1-xCd3{
      WF_ElPhenCptSigm
      WF_ElPhenCptSigmDiff
      WF_ElPhenCptTrace
      WF_ElPhenCptPlastic
    }
    Fim GT3

    dnIterPcount++

  }(FIM (errP e dnIterPmax))
  IF (dnIterPcount >= nIterPmax){
    Mensagem Erro dnIterPcount
  }END

```

```

Grp0 - GT4
  gPhen0-xCd5{
    WF_ElgPhenCptErrk
    WF_ElgPhenAtrrib04
    WF_gPhenDelRealloc1
  }

```

```

Fim GT4

```

```

Grp1 - GT3
  Phen3-xCd3{
    WF_DPhenCptKd
    WF_DPhenCptBd
    WF_DPhenCptBdd
  }
  gPhen2-xCd4{
    WF_DgPhenCptKdg
    WF_DgPhenHMK
  }
  Phen3-xCd4{
    WF_DPhenIBC02
  }
  gPhen2-xCd5{
    WF_gPhenDefinitive2
    WF_DgPhenSolver
    WF_gPhenDelRealloc1
    WF_gPhenDelRealloc2
    WF_gPhenDelRealloc3
    WF_gPhenDelRealloc4
    WF_DgPhenCpterrD
    WF_DgPhenAtrrib00
  }

```

```

Fim GT3

```

```

Grp0 - GT5
  Phen1-xCd4{
    WF_ElPhenCptKf
    WF_ElPhenCptBf
    WF_ElPhenCptF1f
    WF_ElPhenCptF2f
    WF_ElPhenMfA3
  }

```

```

    gPhen0-xCd6{
        WF_gPhenAddMatrix
        WF_ElgPhenAddKB
        WF_gPhenDefinitive1
        WF_gPhenDefinitive2
        WF_gPhenDefinitive
        WF_gPhenSetValue
        WF_ElgPhenCptGf
        WF_ElgPhenAddGF
        WF_ElgPhenSolver
        WF_gPhenSetValue
    }
    Phen1-xCd5{
        WF_ElPhenTestgrk
    }
    gPhen0-xCd7{
        WF_gPhenDelRealloc2
        WF_gPhenDelRealloc3
        WF_gPhenDelRealloc4
        WF_gPhenDelRealloc5
        WF_gPhenDelRealloc6
    }
    FIM GT5
    dnCountf = 0
    errdam = 1
    WHILE ((errdam>tolf) && (dnCountf) < iterMaxf))
        Grp0 - GT6
        gPhen0 - xCd8 {
            WF_gPhenSetValue
            WF_ElgPhenCptKfDk
            WF_ElgPhenPrepareGf
            WF_ElgPhenSolver
            WF_gPhenSetValue
        }
        Phen1-xCd6{
            WF_ElPhenTestgrk1
        }
        gPhen0 - xCd9 {
            WF_ElgPhenCpterrDk
            WF_ElgPhenCpterrgrk
        }
    FIM GT6

    errdam = max{err1, err2}

```

```

        Grp0 - GT7
        gPhen0 - xCd10 {
            WF_ElgPhenAttrib02
            WF_ElgPhenAttrib03
        }
        FIM GT7
        dnCountf++
    END - (WHILE (errrdam))
    IF(dnCountf >= iterMaxf){
        Dano não convergiu !
    }

    Grp0 - GT8
    gPhen0 - xCd11 {
        WF_ElgPhenCpterrF
        WF_ElgPhenAttrib04
        WF_ElgPhenCptDnp1
        WF_gPhenDelRealloc7
        WF_gPhenDelRealloc8
        WF_gPhenDelRealloc9
        WF_gPhenDelRealloc10
    }
    FIM GT8

    diterErr = max{errK, errD,errF}
    diterCount++
}(FIM (diterErr e diterCount))
IF (diterCount >= iterMax){
    equilibrio mecanico e quimico não convergiu
} END
} END (Deltat_dam < Deltat_b)

```

Fim Algorithm3

Block0 - execute Algorithm4

```

    Grp0 - GT10
    Phen1-xCd8{
        WF_ElPhenCptDeltatpe01
        WF_ElPhenCptDeltatDamag
    }

```

```

        gPhen0-xCd12{
            WF_ElgPhenAttrib05
            WF_ElgPhenAttrib06
            WF_ElgPhenAttrib07
            WF_ElgPhenAttrib08
            WF_ElgPhenAttrib09
            WF_ElgPhenAttrib10
            WF_gPhenCptDeltatNEW
        }
    Fim GT9
    Grp1 - GT4
        Phen3-xCd5{
            WF_DPhenCptDeltat
        }
        gPhen2-xCd6{
            WF_DgPhenCptUdnp1
            WF_DgPhenAttrib01
            WF_DgPhenAttrib02
            WF_DgPhenCptDeltat
        }
    FIM GT4
    Deltat_b = min{Deltat_ge ,Deltat_gd }

    Fim Algorithm4
    Block1 - execute Algorithm1

        Grp2 - GT0
            Phen5-xCd0{
                WF_RecPhenAll
            }
        FIM GT0

    Fim Algorithm1
     $\Delta t = \Delta t_b$ 
     $t = t + \Delta t$ 
end while

```

APÊNDICE C – Algoritmo do Kernel

Neste apêndice apresenta-se o algoritmo do Kernel implementado para resolver o problema elastoplástico afetado pela difusão e dano. Nota-se claramente que esta camada hierárquica se refere aos laços iterativos no tempo, ou seja, só há demanda para a camada imediatamente inferior à ela e comandos relativos ao tempo.

Algoritmo 6: Algoritmo do Kernel

```

 $t = 0$ 
Block0 - execute Algorithm0
 $\Delta t = \Delta t_b$ 
Block0 - execute Algorithm1
Block1 - execute Algorithm0
 $t = \Delta t$ 
while ( $t \leq interval$ ) do
    Block0 - execute Algorithm2
    Block0 - execute Algorithm3
    Block0 - execute Algorithm4
    Block1 - execute Algorithm1
     $\Delta t = \Delta t_b$ 
     $t = t + \Delta t$ 
end while

```

APÊNDICE D – Algoritmo dos Blocks

Neste apêndice apresenta-se os algoritmos criados para cada um dos objetos Block. No primeiro Block (elastoplástico afetado pela difusão e dano), criou-se cinco algoritmos no total. Cada um desses algoritmos pode solicitar que seus objetos Group executem determinadas tarefas. No segundo Block (gravação) criou-se dois algoritmos. Abaixo apresenta-se cada uma das execuções dos algoritmos do objeto:

- Block elastoplástico afetado pela difusão e dano

Algoritmo 7: Algorithm_0 do Block0

Grp0 - GT0 [] FIM GT0

Grp1 - GT0 [] FIM GT0

$\Delta t_b = \min\{\Delta t_{ge}, \Delta t_{gd}\}$

Algoritmo 8: Algorithm_1 do Block0

Grp1 - GT1 [] FIM GT1

Algoritmo 9: Algorithm_2 do Block0

Grp0 - GT1 [] FIM GT1

Grp1 - GT2 [] FIM GT2

Algoritmo 10: Algorithm_3 do Block0

iterErr = 1

iterCount = 0

while (iterErr > iterTol) & (iterCount < iterMax) **do**

Grp0 - GT2 [] Fim GT2

errP = 1

nIterPcount = 0

while (errP > plasTol) & (nIterPcount < nIterPmax) **do**

Grp0 - GT3 [] Fim GT3

nIterPcount++

end while

if (nIterPcount >= nIterPmax) **then**

Mensagem Erro nIterPcount

end if

Grp0 - GT4 [] Fim GT4

```

    Grp1 - GT3 [ ] Fim GT3
    Grp0 - GT5 [ ] FIM GT5
    nCountf = 1
    errdam = 1
    while (errdam>tolf) && (nCountf) < iterMaxf) do
        Grp0 - GT6 [ ] FIM GT6
        errdam = max{err1, err2}
        Grp0 - GT7 [ ] FIM GT7
        nCountf++
    end while
    if (nCountf >= iterMaxf) then
        Dano não convergiu!
    end if
    Grp0 - GT8 [ ] FIM GT8
    iterErr = max{errK, errD,errF}
    iterCount++
end while
if (iterCount >= iterMax) then
    equilibrio mecanico e quimico não convergiu
end if
Grp0 - GT9 [ ] Fim GT9
if ( $\Delta t_{dam} < \Delta t_b$ ) then
    diterErr = 1
    diterCount = 0
    while (diterErr > iterTol) & (diterCount < iterMax) do
        Grp0 - GT2 [ ] Fim GT2
        errP = 1
        dnIterPcount = 0
        while (errP > plasTol) & (dnIterPcount < nIterPmax) do
            Grp0 - GT3 [ ] Fim GT3
            dnIterPcount++
        end while
        if (dnIterPcount >= nIterPmax) then
            Mensagem Erro dnIterPcount
        end if
        Grp0 - GT4 [ ] Fim GT4
        Grp1 - GT3 [ ] Fim GT3
        Grp0 - GT5 [ ] FIM GT5
        dnCountf = 0
        errdam = 1
        while (errdam>tolf) && (dnCountf) < iterMaxf) do
            Grp0 - GT6 [ ] FIM GT6
            errdam = max{err1, err2}
            Grp0 - GT7 [ ] FIM GT7
            dnCountf++
        end while

```

```

if (dnCountf >= iterMaxf) then
    Dano não convergiu
end if
Grp0 - GT8 [ ] FIM GT8
diterErr = max{errK, errD,errF}
diterCount++
end while
if (diterCount >= iterMax) then
    equilibrio mecanico e quimico não convergiu
end if
end if

```

Algoritmo 11: Algorithm_4 do Block0

```

Grp0 - GT10 [ ] FIM GT10
Grp1 - GT4 [ ] FIM GT4
 $\Delta t_b = \min \Delta t_{ge}, \Delta t_{gd}$ 

```

- Block da gravação

Algoritmo 12: Algorithm_0 do Block1

```

Grp2 - GT0 [ ] FIM GT0

```

Algoritmo 13: Algorithm_1 do Block1

```

Grp2 - GT1 [ ] FIM GT1

```

APÊNDICE E – Tarefas dos Groups

Neste apêndice apresenta-se os conjuntos de tarefas que foram criados para cada um dos objetos Group. No primeiro Group (elástico), criou-se onze tarefas no total. Cada uma dessas tarefas pode solicitar que seus objetos gPhen e/ou Phenomenon executem determinadas tarefas. No segundo Group (difusivo) criou-se cinco tarefas no total e duas tarefas foram criadas no terceiro Group (gravação). Abaixo apresenta-se cada conjunto de tarefas criados para o objeto:

- Group elástico

```
GroupTask_0 [
    gPhen0-xCd0{ Calcular tamanho e Alocar campos}
    Phen1-xCd0{ Inicilizar valores e calcular variação de tempo}
    gPhen0-xCd1{ Atualizar campo vetorial e calcular variação de tempo}
] FIM GT0
```

```
GroupTask_1 [
    gPhen0-xCd2{ Atualizar campo elástico}
] FIM GT1
```

```
GroupTask_2 [
    Phen1-xCd1{ Calcular parcelas de força elástica, química e introduzir
                condições de contorno}
] Fim GT2
```

```
GroupTask_3 [
    gPhen0-xCd3{ Atualizar campo vetorial}
    Phen1-xCd2{ Montar matriz rigidez, calcular parcela de força plástica
                e introduzir condições de contorno}
    gPhen0-xCd4{ Resolver sistema linear, calcular erro elástico e atualizar
                campos vetoriais}
    Phen1-xCd3{ Calcular tensão e seu traço; verificar e executar cálculos
                de plastificação}
] Fim GT3
```

```
GroupTask_4 [
    gPhen0-xCd5{ Calcular erro e atualizar campo vetorial}
] Fim GT4
```

```
GroupTask_5 [  
    Phen1-xCd4{ Montar as matrizes e vetores forças relativos à parcela dano}  
    gPhen0-xCd6{ Preparar matrizes e resolver sistema linear}  
    Phen1-xCd5{ Verificar força reativa e calcular o dano}  
    gPhen0-xCd7{ Deletar e realocar alguns campos vetoriais}  
] FIM GT5
```

```
GroupTask_6 [  
    gPhen0 - xCd8 { Preparar vetores e resolver sistema linear}  
    Phen1-xCd6{ Verificar força reativa e calcular o dano}  
    gPhen0 - xCd9 { Calcular erros do dano e da força reativa}  
] FIM GT6
```

```
GroupTask_7 [  
    gPhen0 - xCd10 { Atualizar campos vetoriais}  
] FIM GT7
```

```
GroupTask_8 [  
    gPhen0 - xCd11 { Calcular erro, atualizar campo vetorial de dano e  
                    prever a velocidade de dano}  
] FIM GT8
```

```
GroupTask_9 [  
    Phen1-xCd7{ Calcular a variação de tempo para o dano utilizando a  
                velocidade máxima}  
] Fim GT9
```

```
GroupTask_10 [  
    Phen1-xCd8{ Calcular a variação de tempo}  
    gPhen0-xCd12{ Atualizar campos vetoriais e calcular variação  
                  de tempo}  
] Fim GT10
```

- Group difusivo

```
GroupTask_0 [  
    gPhen2-xCd0{ Calcular tamanho e alocar campos vetoriais}  
    Phen3-xCd0{ Inicializar campos vetoriais com valores e calcular  
                variação de tempo}
```

```
    gPhen2-xCd1{ Calcular variação de tempo}
] FIM GT0
```

```
GroupTask_1 [
    Phen3-xCd1{ Montar matrizes e introduzir condições de contorno}
    gPhen2-xCd2{ Preparar e resolver o sistema linear}
] FIM GT1
```

```
GroupTask_2 [
    gPhen2-xCd3{ Calcular previsão para o campo químico}
    Phen3-xCd2{ Montar matriz e introduzir condição de contorno}
] FIM GT2
```

```
GroupTask_3 [
    Phen3-xCd3{ Montar matrizes relativas ao dano}
    gPhen2-xCd4{ Realizar operações com as matrizes}
    Phen3-xCd4{ Introduzir condições de contorno}
    gPhen2-xCd5{ Preparar e resolver o sistema linear, calcular erro e
                  atualizar campo vetorial}
] Fim GT3
```

```
GroupTask_4 [
    Phen3-xCd5{ Calcular variação de tempo}
    gPhen2-xCd6{ Prever nova velocidade química, atualizar campos vetoriais
                  e calcular variação de tempo}
] Fim GT4
```

- Group gravação

```
GroupTask_0 [
    Phen5-xCd0{ Gravar tempo, malha, tensão de Von Mises, plastificação,
                  dano, velocidade de dano, concentração de soluto}
] FIM GT0
```

```
GroupTask_1 [
    Phen5-xCd1{ Gravar tempo, malha, tensão de Von Mises, plastificação,
                  dano, velocidade de dano, concentração de soluto}
] FIM GT1
```

APÊNDICE F – Formas Fracas

Desenvolvidas

Neste apêndice encontram-se as WeakForms implementadas no MPhyScas com sua respectiva definição e campos necessários para sua montagem. Iniciando pelas WeakForms pertencentes ao gPhen do Grupo Elástico:

- 1- WF_ElgPhenCpteSizes code="37"
Função: Calcular o tamanho dos campos vetoriais.
- 2 - WF_ElgPhenAllocGvf code="38"
Função: Alocar os campos vetoriais.
- 3 - WF_ElgPhenAttrib0x code="65"
Função: Atribuir um campo vetorial à outro campo vetorial.
Construção: Necessita de dois campos vetoriais, sendo o primeiro campo copiado para o segundo campo vetorial.
- 4 - WF_ElgPhenCptDeltat code="52"
Função: Calcular variação de tempo.
Construção: Necessário duas variáveis de tempo, sendo a primeira o dado requerido e a Segundo o dado exposto.
- 5 - WF_gPhenDefinitive0 code="213"
Função: Tornar a matriz definitiva
Construção: Necessário um campo vetorial
- 6 - WF_ElgPhenSolver code="73"
Função: Resolver um sistema linear
Construção: Necessário três campos vetoriais: o primeiro é a matriz dos coeficientes; o segundo é o vetor coluna das incógnitas; e o terceiro é o vetor colunar dos termos independentes
- 7 - WF_ElgPhenDelRealloc0 code="106"
Função: Deletar um campo vetorial existente e realocar um espaço na memória para ele novamente.

Construção: Necessita do campo vetorial

8 - WF_ElgPhenCptErr code="108"

Função: Calcular o erro

Construção: Necessita de 3 dados. O primeiro é o campo exato; o segundo é o campo calculado; e por último o dado exposto.

9 - WF_gPhenAddMatrix code="214"

Função: Somar duas matrizes

Construção: Necessita de três campos vetoriais. O primeiro é a matriz resultado obtida pela soma dos outros dois campos.

10 - WF_ElgPhenAddKB code="111"

Função: Somar matrizes multiplicadas por um valor

Construção: Necessita de quatro campos vetoriais e um dado.

$$\mathbf{M}_{res} = \text{v}lue(\mathbf{M0} + \mathbf{M1}) + \mathbf{M2}$$

11 - WF_gPhenSetValue code="63"

Função: Fornecer um determinado valor à um campo vetorial

Construção: Necessita de um campo vetorial e um dado com o valor.

12 - WF_ElgPhenCptGf code="122"

Função: Auxiliar na montagem do vetor para resolver sistema linear

Construção: Necessário a informação de quatro campos vetoriais e um dado

$$\mathbf{V}_{res} = -\mathbf{M0}(\text{v}lue\mathbf{V0} + \mathbf{V1})$$

13 - WF_ElgPhenAddGF code="114"

Função: Adicionar à um campo vetorial os dados de outro campo vetorial.

Construção: Necessita dois campos vetoriais.

14 - WF_ElgPhenCptKfDk code="203"

Função: Produto negativo entre matriz e vetor

Construção: Necessário fornecer três campos vetoriais

15 - WF_ElgPhenCpterrDk code="121"

Função: Calcular erro

Construção: Necessita de 3 dados. O primeiro é o campo exato; o segundo é o campo calculado; e por último o dado exposto.

16 - WF_ElgPhenCpterrgrk code="121"

Função: Calcular erro

Construção: Necessita de 3 dados. O primeiro é o campo exato; o segundo é o campo calculado; e por último o dado exposto.

17 - WF_ElgPhenCptDnp1 code="116"

Função: Prever nova velocidade de dano, utilizando Crank-Nicolson

Construção: Necessário quatro campos vetoriais e um dado

19 - WF_gPhenCptDeltatNEW code="53"

Função: Calcular variação de tempo.

Construção: Necessário três variáveis de tempo, sendo a primeira o dado de tempo do Phenomenon, a segunda o dado de tempo calculado e ao terceiro será atribuído o menor valor entre os dois anteriores.

Continuando no Grupo elástico, abaixo encontram-se as WeakForms implementadas no Phenomenon:

1 - WF_ElPhenDamInitAll code="100"

Função: Inicializar todos os campos vetoriais com um determinado valor

Construção: Necessário fornecer o valor

2 - WF_ElPhenCptDeltatpe00 code="101"

Função: Calcular a variação de tempo do Phenomenon

Construção: Necessário fornecer o dado de variação de tempo e o intervalo.

3 - WF_ElPhenInitDamag code="122"

Função: Inicializar um campo vetorial com um determinado valor

Construção: necessário fornecer o campo vetorial

4 - WF_ElPhenCptFbody code="102"

Função:

Construção: necessita de três dados. O primeiro é o campo vetorial; o segundo é o dado de tempo; e por fim o outro phenomenon

5 - WF_ElPhenCptFDiff code="103"

Função: Calcular a parcela de força química

Construção: Necessário o campo vetorial força, dano, tempo, além da identificação de outro phenomenon para o campo vetorial acoplado.

6 - WF_ElPhenIBC00 code="104"

Função: Introduzir condições de contorno

Construção: Necessário quatro dados. O primeiro é a matriz rigidez, o segundo o vetor força, o terceiro é o tempo e o quarto está relacionado com informações do outro phenomenon

7 - WF_ElPhenCptKe code="105"

Função: Montar a matriz rigidez

Construção: Necessita da matriz rigidez e do dano

8 - WF_ElPhenCptFPlast code="106"

Função: Construir a parcela de força plástica

Construção: Necessita do vetor força, da deformação plástica e do dano

9 - WF_ElPhenIBC01 code="107"

Função: Introduzir condições de contorno

Construção: Necessário quatro dados. O primeiro é a matriz rigidez, o segundo o vetor força, o terceiro é o tempo e o quarto está relacionado com informações do outro phenomenon

10 - WF_ElPhenCptSigm code="108"

Função: Montar o tensor de tensões

Construção: Necessita do campo de tensões, do campo de deslocamento e do dano

11 - WF_ElPhenCptSigmDiff code="109"

Função: Montar a parcela do campo de tensões química

Construção: Necessita do campo de tensões, do dano, da variável tempo, do phenomenon difusivo e do vetor químico.

12 - WF_ElPhenCptTrace code="110"

Função: Calcular o traço das tensões

Construção: Necessário o campo das tensões o o campo do traço

13 - WF_ElPhenCptPlastic code="112"

Função: Calcular a deformação plástica em cada um dos nós

Construção: Necessita dos campos de tensão, deformação plástica, endurecimento cinemático, da plastificação nos instantes n e $n+1$; além do campo de dano.

14 - WF_ElPhenCptKf code="114"

Função: Montagem da matriz relativa à traços e deformações

Construção: Necessário três campos vetoriais além da identificação do outro Phenomenon para acessar campo vetorial

15 - WF_ElPhenCptBf code="115"

Função: Montagem da matriz relativa ao gradiente de dano

Construção: Necessita da matriz e do campo de dano.

16 - WF_ElPhenCptF1f code="116"

Função: Montagem da parcela de força envolvendo traços e deformações

Construção: Necessário três campos vetoriais além da identificação do outro Phenomenon para acessar campo vetorial

17 - WF_ElPhenCptF2f code="117"

Função: Montagem no vetor força da parcela difusiva

Construção: Necessita do campo vetorial da força, além da identificação do outro Phenomenon para acessar campo vetorial

18 - WF_ElPhenCptMfA3 code="120"

Função: Montagem da matriz dano

Construção: Necessário dois campos vetoriais

19 - WF_ElPhenTestgrk code="123"

Função: Testar a força reativa

Construção: Necessário quatro campos vetoriais e um dado

20 - WF_ElPhenCptDeltatpDamag0 code="124"

Função: Calcular variação de tempo para o dano, levando em conta a velocidade

Construção: Necessário dois campos vetoriais e um dado

21 - WF_ElPhenCptDeltatpe01 code="119"

Função: Calcular a variação de tempo do Phenomenon

Construção: Necessário fornecer o dado de variação de tempo e o intervalo.

A segunda etapa deste apêndice, tem a função de apresentar as WeakForms implementadas no Grupo Difusivo, iniciando pelas implementadas no Group:

1 - WF_DgPhenCpteSizes code="37"

Função: Calcular o tamanho dos campos vetoriais

2 - WF_DgPhenAllocGvf code="38"

Função: Alocar os campos vetoriais

3 - WF_gPhenComputeDeltat0 code="52"

Função: Calcular a variação de tempo

Construção: Necessário duas variáveis de tempo, sendo a primeira o dado requerido e a segunda o dado exposto.

4 - WF_gPhenDefinitive0 code="213"

Função: Tornar a matriz definitiva

Construção: Necessário um campo vetorial

5 - WF_DgPhenMult code="203"

Função: Multiplicar uma matriz por vetor

Construção: Necessita de um campo vetorial resultado, seguido pela matriz e por um vetor, respectivamente.

6 - WF_gPhenDelRealloc0 code="106"

Função: Deletar um campo vetorial existente e realocar um espaço na memória para ele novamente.

Construção: Necessita do campo vetorial

7 - WF_DgPhenSolver code="73"

Função: Resolver um sistema linear

Construção: Necessário três campos vetoriais: o primeiro é a matriz dos coeficientes; o segundo é o vetor coluna das incógnitas; e o terceiro é o vetor colunar dos termos independentes

8 - WF_gPhenSetValue code="63"

Função: Fornecer um determinado valor à um campo vetorial

Construção: Necessita de um campo vetorial e um dado com o valor.

9 - WF_DgPhenCptUdk code="205"

Função: Fazer uma previsão para o campo vetorial químico

Construção: Necessário fornecer o campo vetorial no instante k, a velocidade do campo, o campo no instante n e a variação de tempo

10 - WF_DgPhenCptFd code="206"

Função: Montagem de vetor

Construção: Necessita quatro campos vetoriais e um dado

$$\mathbf{Vres} = \mathbf{M0} \cdot (v_{lue}\mathbf{V0} + \mathbf{v1})$$

11 - WF_DgPhenCptKdg code="207"

Função: Montagem matricial preliminar para resolver sistema linear

Função: Necessita quatro campos vetoriais

$$\mathbf{Mres} = \mathbf{M0} - \mathbf{M1} - \mathbf{M2}$$

12 - WF_DgPhenHMK code="208"

Função: Montagem matricial para resolver sistema linear

Função: Necessita três campos vetoriais e um dado

$$\mathbf{Mres} = v_{lue}\mathbf{M0} + \mathbf{M1}$$

13 - WF_DgPhenCpterrD code="40"

Função: Calcular o erro

Construção: Necessita de 3 dados. O primeiro é o campo exato; o segundo é o campo calculado; e por último o dado exposto.

14 - WF_DgPhenAttrib00 code="65"

Função: Atribuir um campo vetorial à oputro campo vetorial

Construção: Necessita de dois campos vetoriais, sendo o primeiro campo

copiado para o segundo campo vetorial

15 - WF_DgPhenCptUdpnp1 code="212"

Função: Fazer uma previsão para a velocidade do campo vetorial químico

Construção: Necessário fornecer a velocidade do campo vetorial no instante $n+1$, o campo vetorial no instante $n+1$, o campo no instante n , a velocidade do campo no instante n e a variação de tempo

Continuando no Grupo difusivo, abaixo encontram-se as WeakForms implementadas no Phenomenon:

1 - WF_DPhenInitAll00 code="200"

Função: Inicializar todos os campos vetoriais com valor

Construção: Necessário fornecer o valor.

2 - WF_DPhenCptUd code="201"

Função: Inicializar o campo vetorial químico

Construção: Necessário fornecer o campo vetorial e o tempo.

3 - WF_DPhenCptDeltatpd00 code="202"

Função: Calcular a variação de tempo do Phenomenon

Construção: Necessário fornecer o dado de variação de tempo e o intervalo.

4 - WF_DPhenCptM code="203"

Função: Montar a matriz M

Construção: Necessário fornecer o campo vetorial

5 - WF_DPhenCptKd code="204"

Função: Montar a matriz Kd

Construção: Necessário fornecer o campo vetorial

6 - WF_DPhenIBC00 code="205"

Função: Introduzir condições de contorno

Construção: Necessário fornecer a matriz, um vetor, o tempo e o phenomenon elástico

7 - WF_DPhenIBC01 code="206"

Função: Introduzir condições de contorno

Construção: Necessário fornecer a matriz, um vetor, o tempo e

o phenomenon elástico

8 - WF_DPhenCptBd code="208

Função: Montar a matriz Bd

Construção: Necessário fornecer a matriz, o Phenomenon elástico e o campo vetorial relativo ao traço da tensão

9 - WF_DPhenCptBdd code="209

Função: Montar a matriz Bdd

Construção: Necessário fornecer a matriz, o Phenomenon elástico e o campo vetorial relativo ao dano

10 - WF_DPhenIBC02 code="210"

Função: Introduzir condições de contorno

Construção: Necessário fornecer a matriz, um vetor, o tempo e o phenomenon elástico

11 - WF_DPhenCptDeltatpd01 code="211"

Função: Calcular a variação de tempo do Phenomenon

Construção: Necessário fornecer o dado de variação de tempo e o intervalo.

A terceira e última etapa deste apêndice, diz respeito à apresentação das WeakForms implementadas no Phenomenon da gravação e são elas:

1 - WF_ElPhenRecMesh code="0"

Função: Gravar a malha

Construção: Necessita da informação da malha

2 - WF_ElPhenRecU code="1"

Função: Gravar campos vetoriais

Construção: Necessita da informação do Phenomenon e do campo vetorial que se deseja fazer a gravação

3 - WF_ElPhenRect1deltat code="2"

Função: Gravar o tempo e variação de tempo

Construção: Necessário fornecer os dados do tempo e variação de tempo.

4 - WF_ElPhenRecerrU code="3"

Função: Gravar o erro

Construção: Necessário fornecer a variável erro

APÊNDICE G – Lista dos Campos Vetoriais

Neste apêndice apresenta-se todos os campos vetoriais utilizados na implementação do problema proposto neste trabalho assim como sua definição.

Group 0

- <glbSts id="0"/> <!-- Ke - matriz rigidez
- <glbSts id="1"/> <!-- MfA3 - matriz massa utilizada no dano
- <glbSts id="2"/> <!-- Kf - matriz envolvendo termos de traço e deformações
- <glbSts id="3"/> <!-- Bf - matriz envolvendo o gradiente do dano
- <glbSts id="4"/> <!-- Hf - matriz dano auxiliar
- <glbSts id="5"/> <!-- FeAux - vetor força auxiliar
- <glbSts id="6"/> <!-- Fe - vetor força
- <glbSts id="7"/> <!-- Uek - vetor deslocamento para o instante k
- <glbSts id="8"/> <!-- Uekp1 - vetor deslocamento para o instante k+1
- <glbSts id="9"/> <!-- Ue - vetor deslocamento
- <glbSts id="10"/> <!-- Sk - tensor tensão para o instante k
- <glbSts id="11"/> <!-- Sn - tensor tensão para o instante n
- <glbSts id="12"/> <!-- Snp1 - tensor tensão para o instante n+1
- <glbSts id="13"/> <!-- Xk - tensor endurecimento cinemático para instante k
- <glbSts id="14"/> <!-- Xn - tensor endurecimento cinemático para instante n
- <glbSts id="15"/> <!-- Xnp1 - tensor endurecimento cinemático para instante n+1
- <glbSts id="16"/> <!-- epsPn - tensor deformação plástica para instante n
- <glbSts id="17"/> <!-- epsPnp1 - tensor deformação plástica para instante n+1
- <glbSts id="18"/> <!-- Dk - vetor dano instante k
- <glbSts id="19"/> <!-- Dkp1 - vetor dano instante k+1
- <glbSts id="20"/> <!-- Dn - vetor dano instante n

- <glbSts id="21"/> <!-- Dnp1 - vetor dano instante n+1
- <glbSts id="22"/> <!-- Dpn - vetor velocidade de dano instante n
- <glbSts id="23"/> <!-- Dpnp1 - vetor velocidade de dano instante n+1
- <glbSts id="24"/> <!-- Ff - vetor auxiliar utilizado no dano
- <glbSts id="25"/> <!-- Gf - vetor força auxiliar dano
- <glbSts id="26"/> <!-- Trac - escalar traço
- <glbSts id="27"/> <!-- pn - escalar plastificação acumulada instante n
- <glbSts id="28"/> <!-- pnp1 - escalar plastificação acumulada instante n+1
- <glbSts id="29"/> <!-- grk - vetor força reativa instante k
- <glbSts id="30"/> <!-- grkp1 - vetor força reativa instante k+1
- <glbSts id="43"/> <!-- KB - matriz auxiliar dano, soma de Kf e Bf

Group 1

- <glbSts id="31"/> <!-- M - matriz da difusão
- <glbSts id="32"/> <!-- Kd - matriz difusão envolvendo gradiente soluto
- <glbSts id="33"/> <!-- Bd - matriz difusão envolvendo traço da tensão
- <glbSts id="34"/> <!-- Bdd - matriz difusão envolvendo gradiente do dano
- <glbSts id="35"/> <!-- Kdg - matriz difusão auxiliar
- <glbSts id="36"/> <!-- Hdg - matriz final utilizada no solver
- <glbSts id="37"/> <!-- Udk - vetor difusão para instante k
- <glbSts id="38"/> <!-- Udn - vetor difusão para instante n
- <glbSts id="39"/> <!-- Udnp1 - vetor difusão para instante n+1
- <glbSts id="40"/> <!-- Udpn - vetor velocidade de difusão para instante n
- <glbSts id="41"/> <!-- Udpnp1 - vetor velocidade difusão para instante n+1
- <glbSts id="42"/> <!-- Fd - vetor força difusao

APÊNDICE H – Expressões para Matrizes e Vetores

Neste apêndice apresenta-se as equações utilizadas e implementadas no MPhyScas, para cada um dos grupos considerados. No caso em estudo foram considerados 2 grupos: elástico e difusivo. Sendo no grupo elástico considerado os fenômenos elástico, plástico e dano.

- Grupo Elástoplástico com dano

Matrizes:

$$\mathbf{K}e = \int (\boldsymbol{\varepsilon}^T(\boldsymbol{\psi}_i) \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\psi}_j)) d\Omega \quad (\text{H.1})$$

$$\mathbf{M}f = \int (\boldsymbol{\psi}_m^T \cdot \boldsymbol{\psi}_n) \quad (\text{H.2})$$

$$\mathbf{K}f = g_f \int (\boldsymbol{\psi}_m^T \cdot \boldsymbol{\psi}_j) \quad g_f = \lambda b_0 + 2\mu b_1 \quad (\text{H.3})$$

$$\begin{cases} b_0 = (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2 \\ b_1 = \mathbf{E} : \mathbf{E} + 3e^2 (C - C_0)^2 + \mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p - 2e(C - C_0)tr(\mathbf{E}) - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^p \end{cases}$$

$$\mathbf{B}f = \int (\nabla \boldsymbol{\psi}_m^T \cdot \nabla \boldsymbol{\psi}_n) d\Omega \quad (\text{H.4})$$

$$\mathbf{H}f = \mathbf{K}_f + \mathbf{B}_f \quad (\text{H.5})$$

Vetores:

$$\mathbf{F}eaux = \int (\boldsymbol{\psi}_m^T \cdot \mathbf{b}) + \int (z_c \cdot tr(\nabla \boldsymbol{\psi}_m)) \quad \begin{cases} z = 1 + k_c - 2D + D^2 \\ z_c = z(3\lambda + 2\mu)e(C - C_0) \end{cases} \quad (\text{H.6})$$

$$\mathbf{F}e = \mathbf{F}eaux + \int (2\mu \mathbf{E}^p : \nabla \boldsymbol{\psi}_m) \quad (\text{H.7})$$

$$\mathbf{F}f = \int (g_f \cdot \boldsymbol{\psi}_m) - \int (g_c \cdot \boldsymbol{\psi}_m) \quad \begin{cases} g_f = \lambda b_0 + 2\mu b_1 \\ g_c = \omega(1 - \lambda C) \end{cases} \quad (\text{H.8})$$

$$\mathbf{G}f = \mathbf{H}_f \cdot \mathbf{D}^n \quad (\text{H.9})$$

- Matrizes do Grupo Difusivo

Matrizes:

$$M = \int (\psi_m \cdot \psi_n) \quad (\text{H.10})$$

$$Kd = M\alpha \int (\nabla \psi_m^T \cdot \nabla \psi_n) \quad (\text{H.11})$$

$$Bd = \int (\nabla \psi_m^T \cdot \mathbf{g}_d \cdot \psi_n) \quad \mathbf{g}_d = Me\nabla(tr\mathbf{S}) \quad (\text{H.12})$$

$$Bdd = \int (\nabla \psi_m^T \cdot \mathbf{g}_{dd} \cdot \psi_n) \quad \mathbf{g}_{dd} = M\nabla(D\omega\lambda) \quad (\text{H.13})$$

$$Kdg = Kd - Bd - Bdd \quad (\text{H.14})$$

$$Hdg = \frac{2}{\Delta t}M + Kdg \quad (\text{H.15})$$

APÊNDICE I – Desenvolvimento das Formas Fracas

- Forma Fraca

- (i) Difusão

Tem-se:

$$\dot{C} + \nabla \cdot \mathbf{J} - h = 0 \quad (\text{I.1})$$

$$\mathbf{J} = -M(\alpha \nabla C - Ce \nabla (tr(\mathbf{S})) - C \nabla (D\omega\lambda)) \quad (\text{I.2})$$

Substituindo a Equação I.2 na Equação I.1, obtem-se:

$$\dot{C} + \nabla \cdot (-M(\alpha \nabla C - Ce \nabla (tr(\mathbf{S})) - C \nabla (D\omega\lambda))) - h = 0 \quad (\text{I.3})$$

Multiplicando por v e integrando, tem-se:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\int_{\Omega} \dot{C} v d\Omega}_{a_1} - \underbrace{\int_{\Omega} h v d\Omega}_{a_2} - \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (M\alpha \nabla C) v d\Omega}_{a_3} + \\ & + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (M C e \nabla (tr(\mathbf{S}))) v d\Omega}_{a_4} + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (M C \nabla (D\omega\lambda)) v d\Omega}_{a_5} = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

Sendo: $a_1 - a_2 - a_3 + a_4 + a_5 = 0$

- Analisando o termo a_3 :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \nabla \cdot (M\alpha \nabla C) v d\Omega = \\ & = \int_{\Omega} \nabla \cdot ((M\alpha \nabla C) v) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (M\alpha \nabla C) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

Utilizando o teorema da divergência:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \nabla \cdot (M\alpha \nabla C) v d\Omega = \\ & = \int_{\partial\Omega} n^t (M\alpha \nabla C) v dA - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (M\alpha \nabla C) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{I.6})$$

- Analisando o termo a_4 :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \nabla \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S}))) v d\Omega = \\
& = \int_{\Omega} \nabla \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S})) v) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S}))) d\Omega
\end{aligned} \tag{I.7}$$

Utilizando o teorema da divergência:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \nabla \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S}))) v d\Omega = \\
& = \int_{\partial\Omega} n^t \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S})) v) dA - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S}))) d\Omega
\end{aligned} \tag{I.8}$$

- Analisando o termo a_5 :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \nabla \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda)) v d\Omega = \\
& = \int_{\Omega} \nabla \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda) v) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda)) d\Omega
\end{aligned} \tag{I.9}$$

Utilizando o teorema da divergência:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \nabla \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda)) v d\Omega = \\
& = \int_{\partial\Omega} n^t \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda) v) dA - \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (MC \nabla (D\omega\lambda)) d\Omega
\end{aligned} \tag{I.10}$$

Substituindo todos os termos encontrados de forma isolada na Equação I.4 e rearranjando os termos, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \dot{C} v d\Omega - \int_{\Omega} h v d\Omega + \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (M(\alpha \nabla C - C e \nabla (tr(\mathbf{S})) - C \nabla (D\omega\lambda))) d\Omega + \\
& + \int_{\partial\Omega} n^t \cdot (MCe \nabla (tr(\mathbf{S})) + MC \nabla (D\omega\lambda) - M \alpha \nabla C) v dA = 0
\end{aligned} \tag{I.11}$$

(ii) Tensão

$$\nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{b} = 0 \tag{I.12}$$

Multiplicando por $\mathbf{w}$ e integrando, tem-se:

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{S}) \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{w} d\Omega = 0 \tag{I.13}$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{S} \mathbf{w}) d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{w} d\Omega = 0 \tag{I.14}$$

Usando o teorema da divergência, tem-se:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{n}^t \cdot (\mathbf{S}\mathbf{w}) dA - \int_{\Omega} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b}\mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (\text{I.15})$$

então:

$$\int_{\Omega} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{b}\mathbf{w} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{n}^t \cdot (\mathbf{S}\mathbf{w}) dA = 0 \quad (\text{I.16})$$

Relembrando:

$$\mathbf{S} = \left((1-D)^2 + k_c \right) \left((\lambda \text{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}) - (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}^c) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^c) - 2\mu \mathbf{E}^p \right) \quad (\text{I.17})$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 \quad (\text{I.18})$$

sendo:

$$\mathbf{S}_1 = \left((1-D)^2 + k_c \right) (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}) \quad (\text{I.19})$$

$$\mathbf{S}_2 = - \left((1-D)^2 + k_c \right) (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}^c) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^c) \quad (\text{I.20})$$

$$\mathbf{S}_3 = - \left((1-D)^2 + k_c \right) 2\mu \mathbf{E}^p \quad (\text{I.21})$$

então:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{S}_1 : \nabla \mathbf{w} d\Omega &= \int_{\Omega} \mathbf{b}\mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{S}_2 : \nabla \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{S}_3 : \nabla \mathbf{w} d\Omega + \\ &+ \int_{\partial\Omega} \mathbf{n}^t \cdot ((\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3) \mathbf{w}) dA \end{aligned} \quad (\text{I.22})$$

(iii) Dano

$$\begin{aligned} A_3 \dot{D} &= \left\langle (1-D) \left(\lambda (\text{tr}(\mathbf{E}) - \text{tr}(\mathbf{E}^c))^2 + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) - \right. \\ &\quad \left. - \omega (1 - \lambda C) + \nabla \cdot (k \nabla D) - A_1 - A_{2_p} - A_{2_z} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{I.23})$$

Rearranjando:

$$\begin{aligned} \dot{D} - \frac{1}{A_3} \left((1-D) \left(\lambda (\text{tr}(\mathbf{E}) - \text{tr}(\mathbf{E}^c))^2 + 2\mu (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) \right) - \right. \\ \left. - \omega (1 - \lambda C) + \nabla \cdot (k \nabla D) - A_1 - A_{2_p} - A_{2_z} \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

Para simplificações, faz-se:

$$b_0 = (tr(\mathbf{E}) - tr(\mathbf{E}^c))^2$$

$$b_1 = (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p) : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^c - \mathbf{E}^p)$$

$$\begin{aligned} b_1 &= \mathbf{E} : \mathbf{E} + \mathbf{E}^c : \mathbf{E}^c + \mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^c - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^p + 2\mathbf{E}^c : \mathbf{E}^p \\ b_1 &= \mathbf{E} : \mathbf{E} + \mathbf{E}^c : \mathbf{E}^c + \mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^c - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^p \\ b_1 &= \mathbf{E} : \mathbf{E} + e^2(C - C_0)^2 \mathbf{I} : \mathbf{I} + \mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p - 2e(C - C_0)tr(\mathbf{E}) - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^p \\ b_1 &= \mathbf{E} : \mathbf{E} + 3e^2(C - C_0)^2 + \mathbf{E}^p : \mathbf{E}^p - 2e(C - C_0)tr(\mathbf{E}) - 2\mathbf{E} : \mathbf{E}^p \end{aligned}$$

Multiplicando por g e integrando:

$$\begin{aligned} &\underbrace{\int_{\Omega} \dot{D}g d\Omega}_{a_1} - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{A_3} (1 - D) (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega}_{a_2} + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{A_3} \omega (1 - \lambda C) g d\Omega}_{a_3} - \\ &\underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) g d\Omega}_{a_4} - \underbrace{\int_{\Omega} \left(\frac{A_1 + A_{2p} + A_{2z}}{A_3} \right) g d\Omega}_{a_5} = 0 \end{aligned} \quad (I.25)$$

Sendo: $a_1 - a_2 + a_3 - a_4 - a_5 = 0$

Analisando o termo a_4 :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) g d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} g \right) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) d\Omega \quad (I.26)$$

Teorema da divergência:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) g d\Omega = \int_{\partial\Omega} n^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} g \right) dA - \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) d\Omega \quad (I.27)$$

Substituindo o termo a_4 desenvolvido na Equação I.27 na Equação I.25, tem-se:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \dot{D}g d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} (1 - D) (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} \omega (1 - \lambda C) g d\Omega - \\ &\left(\int_{\partial\Omega} n^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} g \right) dA - \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) d\Omega \right) - \\ &\int_{\Omega} \left(\frac{A_1 + A_{2p} + A_{2z}}{A_3} \right) g d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (I.28)$$

então:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \dot{D} g d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} (1-D) (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} \omega (1-\lambda C) g d\Omega - \\
& + \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \left(\frac{A_1 + A_{2_p} + A_{2_z}}{A_3} \right) g d\Omega - \\
& - \int_{\partial\Omega} n^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} g \right) dA = 0
\end{aligned} \tag{I.29}$$

Eliminando os termos que são nulos:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \dot{D} g d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} D (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot \left(\frac{k \nabla D}{A_3} \right) d\Omega - \\
& - \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{A_3} \omega (1-\lambda C) g d\Omega = 0
\end{aligned}$$

RESUMO, FORMAS FRACAS:

DIFUSÃO:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \dot{C} v d\Omega - \int_{\Omega} h v d\Omega + \int_{\Omega} \nabla v^t \cdot (M(\alpha \nabla C - C e \nabla (tr(\mathbf{S})) - C \nabla (D \omega \lambda))) d\Omega + \\
& + \int_{\partial\Omega} n^t \cdot (M C e \nabla (tr(\mathbf{S})) + M C \nabla (D \omega \lambda) - M \alpha \nabla C) v dA = 0
\end{aligned} \tag{I.30}$$

TENSÃO:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbf{S}_1 : \nabla \mathbf{w} d\Omega &= \int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{S}_2 : \nabla \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{S}_3 : \nabla \mathbf{w} d\Omega + \\
& + \int_{\partial\Omega} \mathbf{n}^t \cdot ((\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3) \mathbf{w}) dA
\end{aligned} \tag{I.31}$$

DANO:

$$\begin{aligned}
A_3 \int_{\Omega} \dot{D} g d\Omega + \int_{\Omega} D (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega + \int_{\Omega} \nabla g^t \cdot (k \nabla D) d\Omega &= \\
= \int_{\Omega} (\lambda b_0 + 2\mu b_1) g d\Omega - \int_{\Omega} \omega (1-\lambda C) g d\Omega
\end{aligned} \tag{I.32}$$

$$((1-D)^2 + k_c) = 1 - 2D + D^2 + k_c = (1 + k_c) - 2D + D^2$$

$$D_e = D_i \psi_i + D_j \psi_j + D_k \psi_k$$

$$D^2 = D_e^T \int_e \psi_e \psi_e^T D_e de$$

$$D = \int_e \psi_e^T D_e de$$

$$(1 + k_c) = \int_e de$$

$$\mathbf{K}_e = \int_{\Omega} \left((1-D)^2 + k_c \right) \mathbf{E}(\psi_j) \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{E}(\psi_i) d\Omega$$

DESENVOLVIMENTO COM AS FORMAS FRACAS

$$\mathbf{S}_1 = \mathbf{C}\mathbf{E} \quad (\text{I.33})$$

onde $\mathbf{C}$ é a matriz constitutiva do material

$$\mathbf{E}(\mathbf{u}) = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}}_{\mathbf{D}} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} u_x \\ u_y \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} E_{xx} \\ E_{yy} \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{I.34})$$

A análise de cada um dos termos da Equação I.31, estão apresentados a seguir, iniciando por: $\int_{\Omega} \mathbf{S}_1 : \nabla \mathbf{w} d\Omega$

$$\mathbf{S}_1 : \nabla \mathbf{w} = S_{xx} \frac{\partial w_x}{\partial x} + S_{yy} \frac{\partial w_y}{\partial y} + S_{xy} \left(\frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial w_y}{\partial x} \right) = \mathbf{E}_{(\mathbf{w})}^T \mathbf{S} \quad (\text{I.35})$$

Assim:

$$\mathbf{S}_1 : \nabla \mathbf{w} = (\mathbf{D}\mathbf{w})^T \mathbf{S} \quad (\text{I.36})$$

$$= (\mathbf{D}\mathbf{w})^T \mathbf{C}\mathbf{E} \quad (\text{I.37})$$

$$= (\mathbf{D}\mathbf{w})^T \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{u} \quad (\text{I.38})$$

$$= (\mathbf{D}\mathbf{w})^T \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{B}\Psi \quad (\text{I.39})$$

$$= (\mathbf{D}\Psi)^T \mathbf{C}\mathbf{D}\Psi \quad (\text{I.40})$$

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{B}_{\blacksquare i} \quad (\text{I.41})$$

$$\mathbf{u}_j = \mathbf{B}_{\blacksquare j} \quad (\text{I.42})$$

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{B}_{\blacksquare k} \quad (\text{I.43})$$

$$\mathbf{D}_{\Psi} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \eta} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \xi} & \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Psi_1 & 0 & \Psi_2 & 0 & \Psi_3 & 0 \\ 0 & \Psi_1 & 0 & \Psi_2 & 0 & \Psi_3 \end{bmatrix} \quad (\text{I.44})$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} x_j - x_i & x_k - x_i \\ y_j - y_i & y_k - y_i \end{bmatrix} \quad (\text{I.45})$$

Assumindo:

$$\begin{cases} \Delta x_j = x_j - x_i \\ \Delta x_k = x_k - x_i \\ \Delta y_j = y_j - y_i \\ \Delta y_k = y_k - y_i \end{cases} \quad (\text{I.46})$$

Então:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \Delta x_j & \Delta x_k \\ \Delta y_j & \Delta y_k \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B}^T = \begin{bmatrix} \Delta x_j & \Delta y_j \\ \Delta x_k & \Delta y_k \end{bmatrix} \quad (\text{I.47})$$

Cálculo da inversa de $\mathbf{B}$:

$$\mathbf{B}^{-T} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (\text{I.48})$$

A inversa da matriz $\mathbf{B}$:

$$\mathbf{B}^{-T} = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} \Delta y_k & -\Delta y_j \\ -\Delta x_k & \Delta x_j \end{bmatrix} \quad (\text{I.49})$$

Tem-se: $\mathbf{G}_\psi = \mathbf{B}^{-T} \mathbf{A}_\psi$

então:

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} \Delta y_k & -\Delta y_j \\ -\Delta x_k & \Delta x_j \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{I.50})$$

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} (\Delta y_j - \Delta y_k) & (\Delta y_k) & (-\Delta y_j) \\ (\Delta x_k - \Delta x_j) & (-\Delta x_k) & (\Delta x_j) \end{bmatrix} \quad (\text{I.51})$$

então:

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} (y_j - y_i) - (y_k - y_i) & (y_k - y_i) & (y_i - y_j) \\ (x_k - x_i) - (x_j - x_i) & (x_i - x_k) & (x_j - x_i) \end{bmatrix} \quad (\text{I.52})$$

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} (y_j - y_k) & (y_k - y_i) & (y_i - y_j) \\ (x_k - x_j) & (x_i - x_k) & (x_j - x_i) \end{bmatrix} \quad (\text{I.53})$$

$$\begin{cases} (x_i, y_i) = (0, 0) \\ (x_j, y_j) = (1, 0) \\ (x_k, y_k) = (0, 1) \end{cases} \quad (\text{I.54})$$

então :

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{I.55})$$

$$\mathbf{D}_\Psi = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \eta} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \xi} & \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Psi_1 & 0 & \Psi_2 & 0 & \Psi_3 & 0 \\ 0 & \Psi_1 & 0 & \Psi_2 & 0 & \Psi_3 \end{bmatrix} \quad (\text{I.56})$$

Sendo:

$$\begin{cases} \Psi_1 = 1 - \eta - \xi \\ \Psi_2 = \eta \\ \Psi_3 = \xi \end{cases} \quad (\text{I.57})$$

$$\mathbf{G}_\psi = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{I.58})$$

$$\mathbf{D}_\Psi = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.59})$$

MATRIZ RIGIDEZ

$$\int_e \mathbf{E}^T \mathbf{C} \mathbf{E} dA \quad (\text{I.60})$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \mathbf{D} \mathbf{u} \quad (\text{I.61})$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (\text{I.62})$$

$$\mathbf{u}_{2 \times 1} = \underbrace{\begin{bmatrix} \Psi_1 & \Psi_2 & \Psi_3 \end{bmatrix}}_{\mathbf{D}} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i \\ \mathbf{u}_j \\ \mathbf{u}_k \end{bmatrix}_{6 \times 1} \quad (\text{I.63})$$

$$\mathbf{D} \mathbf{u} = \mathbf{D} \mathbf{U}_e \quad (\text{I.64})$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{D} \mathbf{U}_e \quad (\text{I.65})$$

$$\mathbf{U}_e^T \underbrace{\int_e (\mathbf{D} \mathbf{U}_e)^T \mathbf{C} (\mathbf{D} \mathbf{U}_e) d\mathbf{B} d\xi d\eta}_{\mathbf{K}_e} \mathbf{U}_e \quad (\text{I.66})$$

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}} \quad (\text{I.67})$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i & \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_j - x_i & x_k - x_i \\ y_j - y_i & y_k - y_i \end{bmatrix} \quad (\text{I.68})$$

$$\mathbf{x}(\xi) = \mathbf{B} \xi + \mathbf{x}_i \quad (\text{I.69})$$

$$\xi = \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (\text{I.70})$$

então:

$$\frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1} \quad (\text{I.71})$$

Fazendo a substituição na Equação I.67, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} = \nabla_{\xi}(\cdot) \mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}^{-T} \nabla_{\xi}(\cdot) = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (\text{I.72})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (\text{I.73})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (\text{I.74})$$

$$\mathbf{A}_m = \mathbf{D}\Psi_m = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_m & 0 \\ 0 & \Psi_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_m}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \Psi_m}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_m}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_m}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (\text{I.75})$$

$$\begin{cases} D_{11} = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \nabla_{\xi}() & D_{12} = 0 \\ D_{21} = 0 & D_{11} = \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \nabla_{\xi}() \\ D_{31} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \nabla_{\xi}() & D_{32} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \nabla_{\xi}() \end{cases} \quad (\text{I.76})$$

$$\begin{cases} A_{11}^m = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_m & A_{12} = 0 \\ A_{21} = 0 & A_{22} = \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_m \\ A_{31} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} c & d \end{bmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_m & A_{32} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_m \end{cases} \quad (\text{I.77})$$

$$\mathbf{A}_{3 \times 6} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^i & \mathbf{A}^j & \mathbf{A}^k \end{bmatrix} \quad (\text{I.78})$$

$$\mathbf{A}_{3 \times 6} = \begin{bmatrix} -(a+b) & 0 & a & 0 & b & 0 \\ 0 & -(c+d) & 0 & c & 0 & d \\ -\frac{(c+d)}{2} & -\frac{(a+b)}{2} & \frac{c}{2} & \frac{a}{2} & \frac{d}{2} & \frac{b}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{I.79})$$

$$\mathbf{K}_e = \frac{\det(\mathbf{B})}{2} \mathbf{A}^T \mathbf{C} \mathbf{A} \quad (\text{I.80})$$

onde a matriz $\mathbf{A}$ está definida abaixo, sabendo que $\mathbf{B}$ é definido por:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{I.81})$$

$$\det(\mathbf{B}) = B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21} \quad (\text{I.82})$$

$$\mathbf{B}^{-T} = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} B_{22} & -B_{21} \\ -B_{12} & B_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (\text{I.83})$$

$$a = \frac{B_{22}}{\det(\mathbf{B})}; \quad b = -\frac{B_{21}}{\det(\mathbf{B})}; \quad c = -\frac{B_{12}}{\det(\mathbf{B})}; \quad d = \frac{B_{11}}{\det(\mathbf{B})} \quad (\text{I.84})$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\det(\mathbf{B})} \begin{bmatrix} B_{21} - B_{22} & 0 & B_{22} & 0 & -B_{21} & 0 \\ 0 & B_{12} - B_{11} & 0 & -B_{12} & 0 & B_{11} \\ \frac{B_{12} - B_{11}}{2} & \frac{B_{21} - B_{22}}{2} & -\frac{B_{12}}{2} & \frac{B_{22}}{2} & \frac{B_{11}}{2} & -\frac{B_{21}}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{I.85})$$

- Análise da FORÇA (Segunda integral da forma fraca apresentada na tensão, Equação I.31)

$$w_x = \psi_1 q_1 + \psi_2 q_3 + \psi_3 q_5 \quad (\text{I.86})$$

$$w_y = \psi_1 q_2 + \psi_2 q_4 + \psi_3 q_6 \quad (\text{I.87})$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{w}^T \mathbf{b} d\Omega = \int_{\Omega} (w_x b_x + w_y b_y) d\Omega \quad (\text{I.88})$$

$$\begin{aligned} &= q_1 t b_x \int_e \psi_1 dA + q_3 t b_x \int_e \psi_2 dA + q_5 t b_x \int_e \psi_3 dA + \\ &+ q_2 t b_y \int_e \psi_1 dA + q_4 t b_y \int_e \psi_2 dA + q_6 t b_y \int_e \psi_3 dA \end{aligned} \quad (\text{I.89})$$

Sabe-se que: $\int_e \psi_i dA = \frac{1}{3} A_e$

$$\int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{w}^T \mathbf{b} d\Omega = \mathbf{q}^T \mathbf{f}^e \quad (\text{I.90})$$

$$\mathbf{f}^e = \frac{t A_e}{3} \begin{bmatrix} f_x^i & f_y^i & f_x^j & f_y^j & f_x^k & f_y^k \end{bmatrix}^T \quad (\text{I.91})$$

Essas forças nodais no elemento contribuem com o vetor força global. Através da conectividade entre os elementos e nós, a força calculada na equação acima, deve ser adicionada na respectiva posição no vetor de força global.

Análise da FORÇA (Terceira integral da forma fraca apresentada na tensão, Equação I.31)

$$\mathbf{S}_2 = - \left((1 - D)^2 + k_c \right) (\lambda \text{tr}(\mathbf{E}^c) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}^c) \quad (\text{I.92})$$

$$\mathbf{S}_2 = - \left((1 - D)^2 + k_c \right) (3\lambda + 2\mu) e (C - C_0) \mathbf{I} \quad (\text{I.93})$$

$$\mathbf{S}_2 = -\varsigma (C - C_0) \mathbf{I} \quad (\text{I.94})$$

onde: $\varsigma = \left((1 - D)^2 + k_c \right) (3\lambda + 2\mu) e$

$$\int_{\Omega} \mathbf{S}_2 : \nabla \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{I.95})$$

$$\int_{\Omega} \varsigma (C - C_0) \mathbf{I} : \nabla \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \varsigma (C - C_0) \text{tr}(\nabla \mathbf{w}) d\Omega \quad (\text{I.96})$$

$$= \int_{\Omega} \varsigma (C - C_0) \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{I.97})$$

$$C = C_i \psi_i + C_j \psi_j + C_k \psi_k \quad (\text{I.98})$$

$$C - C_0 = (C_i - C_0) \psi_i + (C_j - C_0) \psi_j + (C_k - C_0) \psi_k \quad (\text{I.99})$$

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} \psi_m & 0 \\ 0 & \psi_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \quad (\text{I.100})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \psi_m}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \psi_m}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \quad (\text{I.101})$$

$$\mathbf{F}_e = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_i \\ \mathbf{F}_j \\ \mathbf{F}_k \end{bmatrix} \quad (\text{I.102})$$

$$\mathbf{F}_m = \varsigma \int \begin{bmatrix} \frac{\partial \psi_m}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi_m}{\partial y} \end{bmatrix} \sum_{n=1,2,3} (C_n - C_0) \psi_n d\Omega \quad (\text{I.103})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_m &= \varsigma \nabla \psi_m \int_e ((C_i - C_0) \psi_i + (C_j - C_0) \psi_j + (C_k - C_0) \psi_k) d\Omega \\ &= \frac{\varsigma \nabla \psi_m \det(\mathbf{B})}{6} ((C_i - C_0) \psi_i + (C_j - C_0) \psi_j + (C_k - C_0) \psi_k) \end{aligned} \quad (\text{I.104})$$

$$\mathbf{F}_e = \frac{\varsigma \det(\mathbf{B}) (C_i + C_j + C_k - 3C_0)}{6} \begin{bmatrix} \mathbf{B}^{-T} \nabla \psi_1 \\ \mathbf{B}^{-T} \nabla \psi_2 \\ \mathbf{B}^{-T} \nabla \psi_3 \end{bmatrix} \quad (\text{I.105})$$

Análise da FORÇA (Quarta integral da forma fraca apresentada na tensão, Equação I.31)

$$\int_{\Omega} \mathbf{S}_3 : \nabla \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{I.106})$$

$$\mathbf{S}_3 = - \left((1 - D)^2 + k_c \right) (2\mu \mathbf{E}^p) \quad (\text{I.107})$$

MONTAGEM MATRIZES

$$\Psi^T \cdot \Psi = \begin{bmatrix} \psi_i \\ \psi_j \\ \psi_k \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_i & \psi_j & \psi_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_i \psi_i & \psi_i \psi_j & \psi_i \psi_k \\ \psi_j \psi_i & \psi_j \psi_j & \psi_j \psi_k \\ \psi_k \psi_i & \psi_k \psi_j & \psi_k \psi_k \end{bmatrix} \quad (\text{I.108})$$

Segue desenvolvimento para os termos da diagonal principal da matriz acima: $\psi_i \psi_i$, $\psi_j \psi_j$ e $\psi_k \psi_k$

$$\begin{aligned} \psi_i \psi_i &= \int_0^1 \int_0^{1-\eta} (1-\eta-\xi)^2 d\xi d\eta = \\ &= \int_0^1 \int_0^{1-\eta} (1+\eta^2+\xi^2-2\eta-2\xi+2\xi\eta) d\xi d\eta = \\ &= \int_0^1 \left(\xi + \eta^2 \xi + \frac{\xi^3}{3} - 2\eta\xi - \xi^2 + \xi^2 \eta \right) \Big|_0^{1-\eta} d\eta = \\ &= \int_0^1 \left((1-\eta) + \eta^2(1-\eta) + \frac{(1-\eta)^3}{3} - 2\eta(1-\eta) - (1-\eta)^2 + (1-\eta)^2 \eta \right) d\eta = \\ &= \left(\eta - \frac{\eta^2}{2} + \frac{\eta^3}{3} - \frac{\eta^4}{4} + \frac{\eta}{3} - \frac{3\eta^2}{6} + \frac{\eta^3}{3} - \frac{\eta^4}{12} - \eta^2 + \frac{2\eta}{3} - \eta + \eta^2 - \frac{\eta^3}{3} + \frac{\eta^2}{2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\eta^3}{3} + \frac{\eta^4}{4} \right) \Big|_0^1 = \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{3} - \frac{3}{6} + \frac{1}{3} - \frac{1}{12} - 1 + \frac{1}{3} - 1 + 1 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3} + \frac{1}{2} - \frac{2}{3} + \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{12} \end{aligned} \quad (\text{I.109})$$

$$\begin{aligned} \psi_j \psi_j &= \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \eta^2 d\eta d\xi = \int_0^1 \frac{\eta^3}{3} \Big|_0^{1-\xi} d\xi = \int_0^1 \frac{(1-\xi)^3 - 0}{3} d\xi = \\ &= \int_0^1 \left(\frac{1-3\xi+3\xi^2-\xi^3}{3} \right) d\xi = \frac{1}{3} \left(\xi - \frac{3\xi^2}{2} + \xi^3 - \frac{\xi^4}{4} \right) \Big|_0^1 = \\ &= \frac{1}{3} \left(1 - \frac{3}{2} + 1 - \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{12} \end{aligned} \quad (\text{I.110})$$

$$\begin{aligned} \psi_k \psi_k &= \int_0^1 \int_0^{1-\eta} \xi^2 d\xi d\eta = \int_0^1 \frac{\xi^3}{3} \Big|_0^{1-\eta} d\eta = \int_0^1 \frac{(1-\eta)^3 - 0}{3} d\eta = \\ &= \int_0^1 \left(\frac{1-3\eta+3\eta^2-\eta^3}{3} \right) d\eta = \frac{1}{3} \left(\eta - \frac{3\eta^2}{2} + \eta^3 - \frac{\eta^4}{4} \right) \Big|_0^1 = \\ &= \frac{1}{3} \left(1 - \frac{3}{2} + 1 - \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{12} \end{aligned} \quad (\text{I.111})$$

Abaixo, segue o desenvolvimento dos termos fora da diagonal principal apresentado na Equação I.108.

$$\begin{aligned}
\psi_i \psi_j &= \int_0^1 \int_0^{1-\eta} (1-\eta-\xi) \eta d\xi d\eta = \int_0^1 \int_0^{1-\eta} (\eta - \eta^2 - \eta\xi) d\xi d\eta = \\
&= \int_0^1 \left(\eta\xi - \eta^2\xi - \eta\frac{\xi^2}{2} \right) \Big|_0^{1-\eta} d\eta = \\
&= \int_0^1 \left(\eta(1-\eta) - \eta^2(1-\eta) - \eta\frac{(1-\eta)^2}{2} \right) d\eta = \\
&= \int_0^1 \left(\eta - \eta^2 - \eta^2 + \eta^3 - \frac{(\eta - 2\eta^2 + \eta^3)}{2} \right) d\eta = \\
&= \left(\frac{\eta^2}{2} - \frac{\eta^3}{3} - \frac{\eta^3}{3} + \frac{\eta^4}{4} - \frac{1}{2} \left(\frac{\eta^2}{2} - \frac{2\eta^3}{3} + \frac{\eta^4}{4} \right) \right) \Big|_0^1 = \\
&= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} - \frac{1}{3} + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} + \frac{1}{4} \right) \right) = \\
&= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} - \frac{1}{3} + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} + \frac{1}{3} - \frac{1}{8} \right) = \frac{1}{24}
\end{aligned} \tag{I.112}$$

$$\begin{aligned}
\psi_i \psi_k &= \int_0^1 \int_0^{1-\xi} (1-\eta-\xi) \xi d\eta d\xi = \int_0^1 \int_0^{1-\xi} (\xi - \xi\eta - \xi^2) d\eta d\xi = \\
&= \int_0^1 \left(\xi\eta - \xi\frac{\eta^2}{2} - \xi^2\eta \right) \Big|_0^{1-\xi} d\xi = \\
&= \int_0^1 \left(\xi(1-\xi) - \xi\frac{(1-\xi)^2}{2} - \xi^2(1-\xi) \right) d\xi = \\
&= \int_0^1 \left(\xi - \xi^2 - \frac{(\xi - 2\xi^2 + \xi^3)}{2} - \xi^2 + \xi^3 \right) d\xi = \\
&= \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi^3}{3} - \frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{2\xi^3}{3} + \frac{\xi^4}{4} \right) - \frac{\xi^3}{3} + \frac{\xi^4}{4} \right) \Big|_0^1 = \\
&= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} + \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \right) = \\
&= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{3} - \frac{1}{8} - \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{24}
\end{aligned} \tag{I.113}$$

$$\psi_j \psi_k = \int_0^1 \int_0^{1-\xi} \eta \xi d\eta d\xi = \int_0^1 \left(\frac{\eta^2}{2} \xi \right) \Big|_0^{1-\xi} d\xi = \tag{I.114}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^1 \left(\frac{(1-\xi)^2}{2} \xi \right) d\xi = \int_0^1 \left(\frac{(\xi - 2\xi^2 + \xi^3)}{2} \right) d\xi = \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{2\xi^3}{3} + \frac{\xi^4}{4} \right) \Big|_0^1 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} + \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{24}
\end{aligned} \tag{I.115}$$

Então, a matriz pode ser escrita da seguinte forma:

$$\Psi^T \cdot \Psi = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (\text{I.116})$$