

**Análise do Comportamento Elasto-plástico de Materiais  
Dúcteis baseada em Homogeneização Computacional**

Rodrigo Pinto Carvalho

*Orientador:*

Prof. Francisco Manuel Andrade Pires

*Co-Orientador:*

Eng. Igor André Rodrigues Lopes

Dissertação realizada no âmbito do  
Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica

---

Porto, Junho 2015

*Página intencionalmente deixada em branco*

*Dedicado aos meus pais,  
Ilídio e Leonor*

*Página intencionalmente deixada em branco*

## Resumo

### Análise do Comportamento Elasto-plástico de Materiais Dúcteis baseada em Homogeneização Computacional

**Palavras-chave:** Micro-mecânica; Homogeneização; Propriedades efetivas; Função de cedência.

Ao longo da última década, a utilização de ferramentas analíticas e numéricas para a previsão do comportamento constitutivo dos materiais a várias escalas tem despertado o interesse da comunidade científica.

O objetivo deste trabalho é a determinação, por homogeneização computacional e na hipótese de grandes deformações, das propriedades efetivas de materiais dúcteis que, resultado da sua degradação interna, possuem vazios com geometrias variadas na sua microestrutura.

Em primeiro lugar, são determinadas, através da análise de RVE's 3D, as propriedades elásticas efetivas de materiais com vazios geometricamente parametrizáveis tais como esféricos, esferoidais e elipsoidais. Os resultados obtidos são comparados com a solução teórica de Kachanov, Tsukrov et al. (1994) e também com a solução estocástica de Drach et al. (2014). Constata-se que o aumento da fração volúmica de vazios provoca uma diminuição generalizada das propriedades elásticas do material e também, à exceção do caso da esfera, um aumento do grau de anisotropia. Verifica-se também uma boa correlação dos resultados obtidos com as previsões analítica e estocástica.

É depois analisado o início da cedência plástica, avaliando-se o efeito da geometria dos vazios nas curvas de cedência. É proposto um critério de cedência macroscópica, baseado na evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado. São analisados materiais dúcteis com vazios cilíndricos, comparando-se as curvas de cedência obtidas com as do modelo de *Gurson* (1977) e GTN (Tvergaard e A. Needleman, 1984). São também considerados vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais, avaliando-se o modelo proposto por Madou e Leblond (2012a,b) (ML) e também o *Modelo 'Variacional' Modificado* (MVAR) de Danas e Aravas (2012).

No caso dos vazios cilíndricos, observa-se que, à exceção da solicitação de corte puro, as curvas do modelo de *Gurson* (1977) e GTN (Tvergaard e A. Needleman, 1984) aparentam sobrestimar a resposta do material. No entanto, as curvas calculadas são conservadoras, uma vez que o vazio cresce até ao momento em que é verificado o critério de cedência. Nos caso dos vazios elipsoidais, é verificado que o modelo ML prevê com boa exatidão o limite superior da resposta do material. O modelo MVAR, para frações volúmicas elevadas, prevê com relativa precisão o limite inferior, embora não seja verificada essa correlação para toda a gama de solicitações analisada.

*Página intencionalmente deixada em branco*

# Abstract

## An Elasto-plastic Analysis of Ductile Materials based on Computational Homogenization

**Keywords:** Micro-mechanics; Homogenization; Effective properties; Yield function.

Over the past decade, the use of analytical and computational tools for the prediction of the constitutive behaviour of materials at several scales has been the subject of increasing interest of the scientific community.

The aim of this work is the determination, based on computational homogenization at large strains, of the effective properties of ductile materials which, as a result of its internal degradation, contain voids with distinct geometries.

In the first place, effective elastic properties of materials with geometrically parametrized voids, such as spheric, spheroidal, and ellipsoidal, are determined, considering 3D RVEs. The obtained results are compared with the theoretical solution of Kachanov, Tsukrov et al. (1994) and also with the stochastic solution of Drach et al. (2014). It is observed that the increase of the void volume fraction causes a generalized decrease of the effective elastic properties and also, excluding the case of the sphere, an increase of the degree of the anisotropy. It is also observed a good correlation with both theoretical and stochastic solutions.

Secondly the onset of plastic yielding is studied, evaluating the effect of voids geometry on the yield curves. A macroscopic yield criteria is proposed, based on the evolution of the square root of the double contraction of the homogenized first *Piola-Kirchhoff* tensor. Ductile materials with cylindrical voids are analysed, comparing the obtained yield curves with *Gurson* (1977) and GTN (Tvergaard and Needleman, 1984) counterparts. Spherical, spheroidal and ellipsoidal voids are also considered, evaluating the recent model proposed by Madou and Leblond (2012a,b) (ML) and the *Modified 'Variational' Model* (MVAR) introduced by Darnas and Aravas (2012).

Excluding pure shear loading, for the case of cylindrical voids the curves from *Gurson* (1977) and GTN (Tvergaard and Needleman, 1984) models seem to overestimate the material response. Although the determined curves are conservative, the voids grow until the yield criteria is verified. For ellipsoidal voids it is observed that the ML model predicts with good accuracy the upper bound of the material response. For high volume fractions, a relative precision with the lower bound is verified with the MVAR model, albeit that relation is not valid for the entire range of imposed deformation gradient.

*Página intencionalmente deixada em branco*

## Agradecimentos

Ao meu orientador, Professor Dr. Francisco Manuel Andrade Pires, agradeço todo o apoio, incentivo e espírito crítico. Não posso deixar de me sentir grato pela oportunidade de trabalhar numa área que gosto, com a orientação de uma pessoa tão dedicada, profissional e sempre bem-disposta.

Ao Engenheiro Igor Lopes agradeço toda a disponibilidade, paciência e partilha de conhecimento. Todas as sugestões e conselhos foram um fator preponderante no desenrolar deste trabalho, especialmente nos aspetos mais exigentes a nível de programação.

Gostaria também de agradecer aos meus colegas de gabinete, Fernando Macedo, Shengua Wu e Mohsen Mirkhalaf, por me terem recebido de forma tão simpática e por todos os conselhos.

Agradeço ao Professor João Gorito a ajuda na revisão deste documento.

Não posso também deixar de agradecer a todos os bons amigos que fiz durante estes anos, por todos uns bons momentos inesquecíveis que vivi. Em especial, agradeço ao Rodrigo Tavares, Luís Máximo e Jorge Moreira todo o companheirismo e amizade que tornaram todo este percurso mais fácil e animado.

Por último, quero agradecer e dedicar todo este trabalho à minha família. Às minhas irmãs, Juliana e Renata, agradeço todo o carinho e paciência. Também dirijo uma palavra de apreço ao Rafael e ao Bruno Sá, por todo o apoio e boa disposição. Finalmente, aos meus pais, Ilídio e Leonor, agradeço o incentivo permanente e, acima de tudo, todo o esforço que fizeram para que ao longo de todos estes anos nunca me faltasse nada.

O meu muito obrigado a todos.

Rodrigo Carvalho

*Página intencionalmente deixada em branco*

# Conteúdo

---

Resumo . . . . .	v
Abstract . . . . .	vii
Agradecimentos . . . . .	ix
Lista de Figuras . . . . .	xviii
Lista de Tabelas . . . . .	xix
Notação . . . . .	xxi
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	2
1.2 Revisão bibliográfica . . . . .	2
1.2.1 Modelos Multi-Escala . . . . .	2
1.2.2 Propriedades elásticas efetivas de materiais porosos . . . . .	3
1.2.3 Fratura dúctil . . . . .	4
1.3 Estrutura do documento . . . . .	5
<b>2 Mecânica dos Meios Contínuos e Método dos Elementos Finitos</b>	<b>7</b>
2.1 Cinemática da deformação . . . . .	7
2.1.1 Gradiente de deformação . . . . .	9
2.2 Tensores de deformações . . . . .	11
2.3 Tensores de tensões . . . . .	12
2.3.1 Tensor de <i>Cauchy</i> . . . . .	12
2.3.2 Primeiro tensor das tensões de <i>Piola-Kirchhoff</i> . . . . .	13
2.3.3 Tensor das tensões de <i>Kirchhoff</i> . . . . .	13
2.4 Princípios fundamentais de conservação . . . . .	13
2.4.1 Conservação da massa . . . . .	13
2.4.2 Balanço de momento linear . . . . .	13
2.5 <i>Princípio dos Trabalhos Virtuais</i> . . . . .	14
2.5.1 Versão espacial . . . . .	14
2.5.2 Versão material . . . . .	15
2.5.3 Formulação <i>quasi-estática</i> . . . . .	15
2.6 <i>Método dos Elementos Finitos</i> . . . . .	15
2.6.1 Formulação integral do problema . . . . .	16

2.6.2	Discretização espacial . . . . .	16
2.6.3	Discretização temporal . . . . .	20
2.6.4	Método de <i>Newton-Raphson</i> . . . . .	21
2.6.5	Pseudo-código do <i>Método dos Elementos Finitos</i> . . . . .	21
2.7	Conclusões . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Modelos Multi-Escala</b>	<b>23</b>
3.1	Elemento de Volume Representativo . . . . .	24
3.2	Modelo . . . . .	25
3.2.1	Homogeneização . . . . .	25
3.3	Formulação variacional . . . . .	26
3.3.1	Aplicação do gradiente de deformação macroscópico ao RVE	26
3.3.2	Deslocamentos admissíveis no RVE . . . . .	27
3.3.3	Equilíbrio no RVE . . . . .	28
3.3.4	Homogeneização das tensões . . . . .	29
3.3.5	Princípio de <i>Hill-Mandel</i> . . . . .	30
3.3.6	Equilíbrio microscópico . . . . .	32
3.4	Condições de fronteira . . . . .	32
3.4.1	Hipótese de <i>Taylor</i> . . . . .	33
3.4.2	Condição de fronteira linear . . . . .	34
3.4.3	Condição de fronteira periódica . . . . .	34
3.4.4	Tração uniforme na fronteira . . . . .	36
3.5	Aproximação numérica . . . . .	37
3.5.1	Discretização temporal . . . . .	37
3.5.2	Discretização espacial . . . . .	38
3.5.3	Condição de fronteira linear . . . . .	40
3.5.4	Condição de fronteira periódica . . . . .	40
3.5.5	Tração uniforme na fronteira . . . . .	41
3.5.6	Discretização do tensor das tensões homogeneizado . . . . .	44
3.5.7	Pseudo-código do programa <i>MSP</i> . . . . .	45
3.6	Conclusões . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Fratura dúctil a várias escalas</b>	<b>47</b>
4.1	Aspectos fenomenológicos . . . . .	48
4.1.1	Mecanismos microscópicos . . . . .	48
4.1.2	Evidências macroscópicas . . . . .	51
4.2	Critérios de cedência . . . . .	51
4.2.1	Modelo de <i>Gurson</i> . . . . .	53
4.2.2	Modelo de <i>Gurson-Tvergaard-Needleman</i> . . . . .	55
4.2.3	Modelo de <i>Golaganu-Leblond-Deveaux</i> . . . . .	56
4.2.4	Modelo de <i>Madou-Leblond</i> . . . . .	58
4.2.5	Modelo Variacional Modificado . . . . .	60

4.2.6	Comparação entre os vários critérios de cedência . . . . .	64
4.3	Conclusões . . . . .	72
<b>5</b>	<b>Determinação das propriedades elásticas efetivas</b>	<b>73</b>
5.1	Lei de <i>Hooke</i> . . . . .	73
5.1.1	Materiais ortotrópicos . . . . .	74
5.1.2	Materiais transversalmente isotrópicos . . . . .	76
5.1.3	Materiais isotrópicos . . . . .	77
5.2	Métodos analíticos . . . . .	78
5.2.1	Solução exata . . . . .	79
5.3	Métodos estocásticos . . . . .	83
5.4	Métodos numéricos . . . . .	85
5.4.1	Geometria do RVE . . . . .	86
5.4.2	Propriedades da matriz . . . . .	88
5.4.3	Determinação das constantes elásticas . . . . .	88
5.5	Resultados obtidos . . . . .	92
5.6	Análise de resultados . . . . .	97
5.7	Malha refinada . . . . .	98
5.7.1	Resultados obtidos . . . . .	98
5.8	Conclusões . . . . .	99
<b>6</b>	<b>Análise do início da cedência plástica em materiais dúcteis</b>	<b>101</b>
6.1	Vazio cilíndrico . . . . .	102
6.1.1	Modelação 2D do problema . . . . .	102
6.1.2	Estabelecimento do critério de cedência macroscópica . . .	104
6.1.3	Curvas de cedência . . . . .	106
6.1.4	Análise de resultados . . . . .	109
6.1.5	Malha refinada . . . . .	111
6.1.6	Modelação 3D do problema . . . . .	112
6.1.7	Resultados obtidos . . . . .	113
6.1.8	Análise de resultados . . . . .	115
6.2	Vazio elipsoidal . . . . .	117
6.2.1	Modelação 3D do problema . . . . .	117
6.2.2	Curvas de cedência . . . . .	118
6.2.3	Análise de resultados . . . . .	124
6.2.4	Refinamento da discretização ‘pseudo-temporal’ . . . . .	124
6.2.5	Estudo preliminar da resposta do material em regime de compressão . . . . .	140
6.3	Conclusões . . . . .	143

---

<b>7</b>	<b>Conclusões gerais e perspectivas de trabalhos futuros</b>	<b>145</b>
7.1	Perspectivas de trabalhos futuros . . . . .	147
<b>Anexos</b>		
<b>A</b>	<b>Parâmetros do critério <i>Golaganu-Leblond-Deveaux</i></b>	<b>149</b>
<b>B</b>	<b>Parâmetros do critério <i>Madou-Leblond</i></b>	<b>151</b>
<b>C</b>	<b>Modelo ‘Variacional’: cálculo do tensor microestrutural</b>	<b>155</b>
<b>D</b>	<b>Problema de <i>Eshelby</i>: inclusão elipsoidal</b>	<b>159</b>
<b>E</b>	<b>Lei de <i>Hooke</i> na forma matricial: Notação de <i>Voigt</i></b>	<b>163</b>
<b>F</b>	<b>Decomposição espectral</b>	<b>167</b>
<b>G</b>	<b>Estudo preliminar da evolução do primeiro tensor de <i>Piola-Kirchhoff</i></b>	<b>171</b>
	<b>Referências</b>	<b>185</b>

## Lista de Figuras

---

2.1	Deformação de um corpo. . . . .	8
2.2	Gradiente de deformação (adaptado de Souza Neto, Peric et al., 2011). . . . .	10
2.3	Interpolação no elemento finito: função de forma global (Souza Neto, Peric et al., 2011). . . . .	17
3.1	<i>Elemento de Volume Representativo</i> (RVE). . . . .	24
3.2	Representação esquemática de um modelo multi-escala. . . . .	25
3.3	Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira de <i>Taylor</i> . . . . .	33
3.4	Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira linear. . . . .	34
3.5	Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira periódica. . . . .	36
3.6	Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de tração uniforme na fronteira. . . . .	37
4.1	Fenómenos de nucleação observados num alumínio 6061 reforçado com partículas de óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ), solicitado na direção horizontal (Kanetake et al., 1995). . . . .	49
4.2	Reconstrução tridimensional da população de cavidades em dois estágios de deformação distintos, com direção de carregamento vertical (Babout et al., 2001). . . . .	50
4.3	Modelos para os modos de coalescência, obtidos através de chapas perfuradas a <i>laser</i> e solicitadas na direção vertical (Weck e Wilkinson, 2008). . . . .	50
4.4	Representação esquemática dos mecanismos microscópicos de nucleação, crescimento e coalescência de vazios e a respetiva relação com os aspetos fenomenológicos macroscópicos em provetes axisimétricos entalhados de aço de alta resistência (adaptado de Benzerga, 2000). . . . .	52

4.5	Representação do modelo de coalescência introduzido por (Tvergaard e A. Needleman, 1984). . . . .	56
4.6	Elemento de volume representativo considerado no modelo de <i>Golaganu-Leblond-Deveaux</i> (GLD). . . . .	57
4.7	Representação geométrica das tensões principais, desviadoras, tensão equivalente e parâmetro de <i>Lode</i> no plano desviador (também designado por plano II) (Bai e Wierzbicki, 2010). . . . .	65
4.8	Tensões principais normalizadas $3\sigma_i/(2\sigma_{eq})$ em função do parâmetro de <i>Lode</i> (adaptado de Danas e Aravas 2012). . . . .	66
4.9	Curvas de cedência dos modelos de <i>Gurson</i> , GTN, ML e MVAR, considerando vazios esféricos com diferentes frações volúmicas ( $f = 0.1, 1$ e $10\%$ ). . . . .	67
4.10	Curvas de cedência dos modelos ML e MVAR, para vazios com diferentes geometrias com fração volúmica $f = 1\%$ e $L = -1$ . . . . .	70
4.11	Curvas de cedência dos modelos ML e MVAR para vazios com diferentes geometrias com fração volúmica $f = 1\%$ , considerando-se diferentes parâmetros de <i>Lode</i> : $L = -1, 0, 1$ . . . . .	71
5.1	Representação da geometria de um vazio elipsoidal de raios $a_1, a_2, a_3$ orientados com os versores $\mathbf{k}, \mathbf{l}, \mathbf{m}$ , respetivamente. . . . .	80
5.2	Representação esquemática das áreas projetadas de um vazio (Drach et al., 2014). . . . .	85
5.3	Módulo de <i>Young</i> efetivo nas três direções para um vazio esferoidal prolato ( $a_1 = 2a_3, a_2 = a_3$ ). . . . .	86
5.4	Metodologia de discretização espacial do RVE, indicando-se a verde a superfície de concordância entre a superfície curva do vazio (superfície azul) e a lateral do RVE. . . . .	88
5.5	Malhas de elementos finitos com vazios de diferentes proporções ( $w_1, w_2$ ) e fração volúmica $f = 2\%$ (é representado apenas 1/8 do RVE). . . . .	90
5.6	Resultados obtidos para o vazio elipsoidal. . . . .	93
5.7	Resultados obtidos para o vazio esferoidal prolato. . . . .	94
5.8	Resultados obtidos para o vazio esferoidal oblato. . . . .	95
5.9	Resultados obtidos para o vazio esférico. . . . .	96
5.10	Vazio irregular aproximado por um elipsoide (Drach, Tsukrov et al., 2011). . . . .	98
5.11	Malhas refinadas com vazios com diferentes proporções ( $w_1, w_2$ ) e fração volúmica $f = 2\%$ (é representado apenas 1/8 do RVE). . . . .	99
6.1	Malhas de elementos finitos do RVE 2D com vazio circular. . . . .	103
6.2	Representação esquemática da relação entre o parâmetro $\alpha$ e a deformação imposta ao RVE. . . . .	104

6.3	Evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de <i>Piola-Kirchhoff</i> até ao fator incremental total $\lambda = 0.02$ , para diferentes solicitações e condições de fronteira. O gráfico superior corresponde ao caso $f = 0.1\%$ e o inferior a $f = 2\%$ . . . . .	105
6.4	Resultados obtidos até ao fator incremental total $\lambda = 0.02$ , para a fração volúmica $f = 2\%$ e condição de fronteira linear. São também assinalados os pontos em que é verificado o critério de cedência proposto. . . . .	107
6.5	Curvas de cedência obtidas com o modelo 2D, juntamente com as previsões do modelo de <i>Gurson</i> e GTN. . . . .	108
6.6	Deformação plástica equivalente na cedência plástica, para a fração volúmica $f = 0.1\%$ e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ). . . . .	110
6.7	Deformação plástica equivalente na cedência plástica, para a fração volúmica $f = 2\%$ e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ). . . . .	110
6.8	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a solicitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ), considerando as frações volúmicas $f = 0.1\%$ e $f = 2\%$ , com a condição de tração uniforme na fronteira. . . . .	111
6.9	Malhas refinadas do RVE 2D com vazio circular. . . . .	111
6.10	Malhas de elementos finitos do RVE 3D com vazio cilíndrico. . . . .	113
6.11	Comparação entre o modelo de <i>Gurson</i> , GTN, os resultados do modelo 3D e as curvas de cedência obtidas na análise 2D. . . . .	114
6.12	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica $f = 0.1\%$ e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ). . . . .	116
6.13	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica $f = 0.1\%$ e solicitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ). . . . .	116
6.14	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica $f = 2\%$ e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ). . . . .	117
6.15	Representação esquemática da relação entre o parâmetro $\alpha$ e a deformação imposta ao RVE. . . . .	118
6.16	Vazio esférico: curvas de cedência calculadas e as respetivas soluções teóricas ( <i>Gurson</i> , GTN, ML e MVAR). . . . .	120
6.17	Vazio esferoidal prolato ( $w_1 = 2$ , $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas e as respetivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	121
6.18	Vazio esferoidal oblato ( $w_1 = 0.5$ , $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas e as respetivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	122
6.19	Vazio elipsoidal ( $w_1 = 2$ , $w_2 = 1.5$ ): curvas de cedência calculadas e as respetivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	123
6.20	Evolução da variação da fração volúmica em relação ao valor inicial, desde a configuração inicial até ao ponto em que é verificado o critério de cedência proposto, para o caso do esferoide oblato. O gráfico superior corresponde à fração volúmica $f = 0.1\%$ e o inferior a $f = 2\%$ . . . . .	127

6.21	Vazio esférico: curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas ( <i>Gurson</i> , GTN, ML e MVAR). . . . .	128
6.22	Vazio esferoidal prolato ( $w_1 = 2$ , $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	129
6.23	Vazio esferoidal oblato ( $w_1 = 0.5$ , $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	130
6.24	Vazio elipsoidal ( $w_1 = 2$ , $w_2 = 1.5$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR). . . . .	131
6.25	Deformação plástica equivalente na cedência plástica na solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ) para o vazão esferoidal oblato e fração volúmica $f_0 = 0.1\%$ . . . . .	136
6.26	Deformação plástica equivalente na cedência plástica na solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ) para o vazão esferoidal oblato e fração volúmica $f_0 = 2\%$ . . . . .	137
6.27	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para todas as geometrias analisadas, com a solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ), fração volúmica $f_0 = 2\%$ e condição de tração uniforme na fronteira.138	
6.28	Deformação plástica equivalente na cedência plástica para todas as geometrias analisadas, com a solicitação de tração triaxial ( $\alpha = 1$ ), fração volúmica $f_0 = 2\%$ e condição de tração uniforme na fronteira.139	
6.29	Representação esquemática da relação entre o parâmetro $\alpha$ e a deformação imposta ao RVE. . . . .	141
6.30	Evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de <i>Piola-Kirchhoff</i> para diferentes solicitações e condições de fronteira, até ao fator incremental total em que ocorre inter-penetração de elementos. O gráfico superior corresponde ao caso $f = 0.1\%$ e o inferior a $f = 2\%$ . . . . .	142

## Lista de Tabelas

---

2.1	Algoritmo do método de <i>Newton-Raphson</i> para a solução do <i>Método dos Elementos Finitos incremental</i> (Souza Neto, Peric et al., 2011).	22
3.1	Algoritmo do programa <i>MSP</i> .	46
4.1	Parâmetros preponderantes no mecanismo de nucleação e respectivas tendências com o aumento do respectivo parâmetro (Benzerga e Leblond, 2010).	49
5.1	Variações dos valores da área projetada normalizada dos vazios medidos do compósito carbono/carbono (Drach et al., 2014).	86
5.2	Geometrias dos vazios analisados.	87
5.3	Número de elementos de todas as malhas.	89
5.4	Propriedades mecânicas da matriz.	89
5.5	Gradientes de deformação impostos para a determinação da matriz de rigidez coluna a coluna.	92

*Página intencionalmente deixada em branco*

# Notação

---

## Notação geral

- $a$  Escalar;
- $\mathbf{a}$  Tensor de segunda ordem;
- $\mathbf{a}$  Tensor de quarta ordem.

## Acrónimos

- 3D Tridimensional;
- 2D Bidimensional;
- GLD Modelo *Golaganu-Leblond-Deveaux*;
- MEF Método dos Elementos Finitos;
- ML Modelo *Madou-Leblond*;
- MVAR Modelo ‘Variacional’ Modificado;
- RVE Elemento de Volume Representativo  
(do inglês *Representative Volume Element*).

## Índices

- $(\cdot)^b$  Graus de liberdade na fronteira do RVE;
- $(\cdot)^d$  Domínio discretizado; Graus de liberdade dependentes;
- $(\cdot)^{dg}$  Componentes normais;
- $(\cdot)^f$  Graus de liberdade livres;
- $(\cdot)^g$  Domínio global;
- $^h(\cdot)$  Campo interpolado;
- $(\cdot)^i$  Graus de liberdade interiores no RVE;
- $(\cdot)_{iso}$  Componente isocórica;
- $(\cdot)^{(j)}$  Iteração genérica do Método de *Newton-Raphson*;
- $(\cdot)^{offdg}$  Componentes de corte;
- $(\cdot)^p$  Graus de liberdade prescritos;
- $(\cdot)^P$  Componente plástica;
- $(\cdot)^s$  Sub-domínio material do RVE;

$(\cdot)_s$	Componente desviadora;
$(\cdot)^v$	Sub-domínio do RVE referente aos vazios;
$(\cdot)_v$	Componente volumétrica;
$(\cdot)_0$	Configuração de referência; Propriedade da matriz;
$(\cdot)_\mu$	Domínio microscópico;
$(\cdot)^{+/-}$	Parte positiva/negativa da fronteira periódica do RVE.

## Simbologia e operadores

$\text{avg}(\cdot)$	Média;
$\mathbf{A}(\cdot)$	Assemblagem de <i>elementos finitos</i> ;
$\text{mid}(\cdot)$	Amplitude média;
$\det(\cdot)$	Determinante;
$\text{div}_p(\cdot)$	Divergência material;
$\text{div}_x(\cdot)$	Divergência espacial;
$\ln(\cdot)$	Logaritmo natural;
$\text{tr}(\cdot)$	Traço;
$\bigcup(\cdot)$	Assemblagem;
$\Delta(\cdot)$	Incremento, $\Delta(\cdot) = (\cdot)_{n+1} - (\cdot)_n$ ;
$\delta(\cdot)$	Incremento iterativo;
$\nabla(\cdot)$	Gradiente;
$\nabla_p(\cdot)$	Gradiente material;
$\nabla_x(\cdot)$	Gradiente espacial;
$\nabla^s(\cdot)$	Gradiente simétrico correspondente;
$\partial(\cdot)$	Fronteira do domínio;
$\partial(\cdot)/\partial a$	Derivada em ordem a $a$ ;
$\dot{(\cdot)}$	Derivada temporal material;
$(\cdot) : (\cdot)$	Dupla contração de tensores;
$(\cdot) \cdot (\cdot)$	Contração simples de tensores;
$(\cdot) \times (\cdot)$	Produto vetorial;
$(\cdot) \otimes (\cdot)$	Produto tensorial de tensores ou vetores;
$ \cdot $	Norma (valor absoluto) do escalar $(\cdot)$ ;
$\ (\cdot)\ $	Norma euclidiana de tensores e vetores;
$\llbracket(\cdot)\rrbracket$	'salto' (descontinuidade) de um campo.

## Variáveis

<b>A</b>	Módulo tangente material;
$\mathbb{A}$	Tensor de concentração do modelo MVAR;
$A_1, A_2, A_3$	Área projetada do vazio;
$\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \tilde{A}_3$	Área projetada do vazio normalizada;
$\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$	Desvio médio da amplitude da área projetada do vazio normalizada;
$a_1, a_2, a_3$	Semi-eixo de um elipsoide;
$\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$	Semi-eixo do elipsoide achatado associado ao modelo ML;
<b>B</b>	Tensor de deformação de <i>Cauchy-Green</i> esquerdo;
<b>B</b>	Operador gradiente simétrico discretizado (matriz de deformação);
$\mathcal{B}$	Corpo genérico;
<b>b</b>	Força de volume;
$\bar{\mathbf{b}}$	Força de volume de referência;
$B$	Módulo de compressibilidade;
<b>C</b>	Tensor de rigidez;
$\mathbf{C}$	Tensor de deformação de <i>Cauchy-Green</i> direito;
<b>C</b>	Matriz de restrição;
$C$	Constante do modelo GLD;
$c$	Rácio de contração/dilatação numa deformação volumétrica;
$c_G$	Constante do modelo GLD;
$\mathbb{D}_b$	Matriz das coordenadas nodais iniciais da fronteira do RVE;
<b>E</b>	Tensor do modelo MVAR;
$\mathbf{E}$	Tensor das deformações de <i>Hencky</i> ;
$E$	Módulo de <i>Young</i> ;
$\tilde{E}_i$	Parâmetro adimensional relacionado com o módulo de <i>Young</i> efetivo;
$e, \mathcal{E}$	Excentricidades de um elipsoide;
$\mathcal{E}_{el}$	Segundo integral elíptico incompleto;
$\mathcal{E}$	Espaço euclidiano tri-dimensional;
<b>F</b>	Gradiente de deformação;
$\mathbb{F}_b^{\text{int}}$	Vetor das forças nodais internas na fronteira do RVE;
$\mathcal{F}_{el}$	Primeiro integral elíptico incompleto;
$\bar{F}$	Constante do modelo ML;
$\mathbf{f}^{\text{ext}}$	Vetor global de forças externas;
$\mathbf{f}_e^{\text{ext}}$	Vetor de forças externas do elemento;
$\mathbf{f}^{\text{int}}$	Vetor global de forças internas;
$\mathbf{f}_e^{\text{int}}$	Vetor de forças internas do elemento;
$f$	Fração volúmica de vazios;
$f^*$	Fração volúmica de vazios corrigida;

$f_c$	Fração volúmica de vazios a partir da qual há coalescência;
$f_f$	Fração volúmica de vazios no momento último da fratura;
$f_n$	Fração volúmica de vazios a nuclear;
$f_u^*$	Fração volúmica de vazios corrigida no momento último da fratura;
$\mathbf{G}$	Operador gradiente material completo discretizado;
$G$	Módulo de rigidez transversal (segundo parâmetro de <i>Lamé</i> );
$g$	Porosidade secundária;
$g_1, g_f$	Constantes do modelo GLD e ML;
$\mathbf{H}$	Tensor de flexibilidade da cavidade;
$\mathbb{H}, h$	Coefficientes para a construção do tensor de flexibilidade da cavidade;
$H_x, H_y, H_z$ $H_x^{\text{prol}}, H_x^{\text{obl}}$ $H_y^{\text{prol}}, H_y^{\text{obl}}$	Constantes do modelo ML;
$\mathbf{I}$	Tensor identidade simétrico de quarta ordem;
$\mathbf{I}$	Tensor identidade de segunda ordem;
$I$	Integral do cálculo do tensor microestrutural $\mathbf{Q}$ ;
$I_1, I_2, I_3$	Invariantes de um tensor;
$\mathcal{I}_{ij}, \mathcal{I}_i$	Integrais de <i>Eshelby</i> ;
$\mathbf{J}$	Componentes hidrostática do tensor identidade simétrico $\mathbf{I}$ ;
$j$	Determinante do jacobiano;
$J$	Determinante do gradiente de deformação: $J \equiv \det \mathbf{F}$ ;
$\mathbf{K}$	Componente de corte do tensor identidade simétrico $\mathbf{I}$ ;
$\mathbf{K}_T$	Matriz de rigidez global tangente;
$\mathcal{K}_\mu$	Conjunto de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringidos;
$\tilde{\mathcal{K}}_\mu$	Conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringidos;
$\mathbf{k}$	Versor do elipsoide correspondente ao raio $a_1$ ;
$k$	Parâmetro de forma do elipsoide achatado associado ao modelo ML;
$k_{\text{el}}$	Argumento do integral elíptico incompleto;
$\mathbf{L}_i$	Autoprojeção ( <i>eigenprojection</i> );
$\mathbf{l}_i$	Vetor próprio;
$\mathbf{l}$	Versor do elipsoide correspondente ao raio $a_2$ ;
$L$	Parâmetro de <i>Lode</i> ;
$\mathcal{L}$	Constante do modelo ML;
$l_{\text{het}}$	Comprimento característico das heterogeneidades do RVE;
$l_{\text{macro}}$	Comprimento característico do domínio macroscópico;
$l_{\text{RVE}}$	Comprimento característico do RVE;
$\mathbf{m}$	Tensor do modelo MVAR;
$\mathbf{m}^{\text{VAR}}$	Tensor do modelo ‘variacional’ original;

$\mathbf{M}$	Tensor associado à forma quadrática de <i>Willis</i> ;
$\mathbf{m}$	Versor do elipsoide correspondente ao raio $a_3$ ;
$m$	Constante da definição dos tensores de deformação;
$\mathbf{N}$	Normal à superfície de referência;
$\mathbf{N}$	Matriz de funções de forma;
$n_b$	Número de nós da fronteira do RVE;
$n_{\text{dim}}$	Número de graus de liberdade;
$n_{\text{elem}}$	Número de <i>elementos finitos</i> ;
$n_{\text{gauss}}$	Número de pontos de <i>Gauss</i> ;
$n_{\text{nós}}$	Número de nós do <i>elemento finito</i> ;
$n_{\text{pontos}}$	Número de nós total da malha de <i>elementos finitos</i> ;
$N_i^e$	Função de forma no elemento associada ao nó $i$ ;
$N_i^g$	Função de forma global associada ao nó $i$ ;
$\mathbf{n}$	Normal à superfície;
$\mathbf{0}$	Tensor nulo;
$\mathbf{P}$	Primeiro tensor das tensões de <i>Piolla-Kirchhoff</i> ;
$\hat{\mathbf{P}}$	Funcional constitutivo incremental;
$\mathbf{p}$	Ponto material genérico na configuração de referência;
$\mathcal{P}$	Raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de <i>Piola-Kirchhoff</i> ;
$p$	Pressão hidrostática (tensão média);
$p_\gamma$	Tensão média transversal;
$\mathbf{Q}$	Tensor microestrutural;
$\mathbf{Q}$	Tensor transversalmente isotrópico do modelo GLD;
$\mathcal{Q}, \mathcal{Q}^W$	Constantes do modelo ML;
$Q_\lambda$	Constante para o cálculo dos valores próprios;
$q_J$	Fator de correção do modelo MVAR;
$q_1, q_2, q_3$	Constantes do modelo GTN;
$\mathbf{r}$	Vetor resíduo global;
$\mathbf{R}$	Tensor de rotação;
$\mathbf{R}$	Matriz de relação entre o campo de flutuação de deslocamentos dependentes e livres;
$r$	Raio do vazio;
$R_1, R_2, R_3$	Semi-eixos do elipsoide associado ao RVE;
$\mathbf{S}$	Tensor de flexibilidade;
$\mathbb{S}$	Tensor de <i>Eshelby</i> ;
$\mathbf{s}$	Tensões desviadoras;
$S$	Constante do modelo GLD;
$s_G$	Constante do modelo GLD;

$s_N$	Valor médio da distribuição normal;
$s_\alpha$	Conjunto de variáveis microestruturais;
$\mathbf{T}$	Tensor associado ao modelo ML;
$\mathbf{t}$	Tração na superfície;
$\bar{\mathbf{t}}$	Tração na superfície de referência;
$T$	Triaxilidade;
$\mathbf{U}$	Tensor de alongação direito;
$\mathbf{u}$	Campo vetorial de deslocamentos;
$\tilde{\mathbf{u}}$	Campo vetorial de flutuações de deslocamentos;
$\mathbf{V}$	Tensor de alongação esquerdo;
$\mathcal{V}$	Espaço de deslocamentos virtuais;
$\mathbf{v}$	Campo de velocidades espacial;
$V$	Volume;
$\mathbf{W}$	Tensor de rotação total material;
$W_i$	Peso do ponto de <i>Gauss</i> de coordenada isoparamétrica $i$ ;
$w$	Proporcionalidade de um esferoide;
$w_1$	Proporcionalidade de um elipsoide na direção $x$ ;
$w_2$	Proporcionalidade de um elipsoide na direção $y$ ;
$\mathbf{X}$	Tensor transversalmente isotrópico do modelo GLD;
$\mathbf{x}$	Ponto infinitesimal no domínio macroscópico;
$\mathbf{Y}$	Ponto infinitesimal no domínio microscópico, associado ao RVE não deformado;
$\mathbf{y}$	Ponto infinitesimal no domínio microscópico;
$\mathbf{Z}$	Tensor do modelo MVAR, representativo da forma do vazio;
$\alpha$	Conjunto de variáveis internas à macro-escala;
$\alpha$	Parâmetro que caracteriza o tipo de deformação imposta ao RVE;
$\alpha_w$	Fator de correção do modelo MVAR;
$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1^G$	Constantes do modelo GLD;
$\alpha_{ML}$	Constante do modelo ML;
$\beta$	Conjunto de variáveis internas à micro-escala;
$\beta_{ML}$	Constante do modelo ML;
$\Gamma$	Fronteira periódica do RVE;
$\gamma$	Multiplicador plástico;
$\delta$	Desvio relativo entre duas entidades;
$\delta_f$	Desvio da fração volúmica em relação ao valor inicial;
$\delta_{ij}$	Delta de <i>Kronecker</i> ;
$\Delta$	Determinante da matriz de rigidez;
$\varepsilon$	Tensor de deformações infinitesimais;

---

$\varepsilon^*$	Deformação permanente ( <i>eigenstrain</i> );
$\varepsilon_N$	Desvio-padrão da distribuição normal;
$\boldsymbol{\eta}$	Campo de deslocamentos virtuais;
$\eta$	Constante do modelo GLD;
$\kappa$	Constante do modelo GLD e ML;
$\Lambda$	Constante envolvida na determinação dos coeficientes $\mathbb{H}_{ijkl}$ ;
$\Lambda_{ML}$	Constante do modelo ML;
$\lambda$	Fator de carga incremental;
$\lambda_L$	Primeiro parâmetro de <i>Lamé</i> ;
$\lambda_i$	Valor próprio;
$\zeta$	Coordenadas isoparamétricas do elemento finito;
$\Theta$	Constante para a determinação das constantes elásticas;
$\theta$	Ângulo de <i>Lode</i> ;
$\theta_{el}$	Argumento do integral elíptico incompleto;
$\theta_\lambda$	Constante para o cálculo dos valores próprios;
$\nu$	Coefficiente de <i>Poisson</i> ;
$\boldsymbol{\xi}$	Tensor do modelo MVAR;
$\rho$	Densidade;
$\bar{\rho}$	Densidade de referência;
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor das tensões de <i>Cauchy</i> ;
$\sigma_{eq}$	Tensão equivalente de <i>von Mises</i> ;
$\hat{\sigma}_e$	Tensão efetiva do modelo MVAR;
$\sigma_h$	Média ponderada das tensões normais;
$\sigma_y$	Tensão de cedência;
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor das tensões de <i>Kirchhoff</i> ;
$\Upsilon$	Domínio normalizado da integração de <i>Gauss</i> ;
$\Phi$	Função de cedência;
$\varphi$	Deformação; Movimento;
$\phi$	Domínio de integração do integral $I_m$ ;
$\chi$	Domínio de integração do integral $I_m$ ;
$\psi$	Densidade de energia de deformação;
$[\Psi]$	Matriz com os vetores próprios normalizados agrupados por colunas;
$\Omega$	Domínio de um corpo genérico na configuração de referência;
$\Omega^e$	Domínio do elemento finito na configuração de referência;
$\Omega_\mu$	Domínio do RVE;
$\Omega_\mu^i$	Sub-domínio do RVE referente às inclusões;
$\boldsymbol{\omega}$	Tensor antisimétrico de rotação microestrutural.

*Página intencionalmente deixada em branco*

# Capítulo 1

## Introdução

---

Ao longo das últimas décadas, a utilização de métodos numéricos para resolver o conjunto de equações associado a diversos problemas físicos, tipicamente denominada por simulação, tornou-se uma das ferramentas mais importantes no desenvolvimento de estruturas e sistemas complexos. Esta evolução deveu-se ao crescimento notável da capacidade computacional, aliado ao facto das comunidades científica e industrial estarem cada vez mais cientes do potencial das ferramentas de simulação. O desenvolvimento de projetos cada vez mais desafiantes, quer a nível tecnológico quer económico, apenas é possível através da utilização das técnicas de simulação.

Em aplicações em que o material é sujeito a níveis de plasticidade próximos da rotura, desenvolvem-se fenómenos microscópicos de degradação interna que provocam uma diminuição generalizada da sua capacidade de carga. Nessas situações, os modelos constitutivos tradicionais como, por exemplo, o modelo de *von Mises*, não conseguem prever de forma satisfatória a resposta do material, uma vez que não contemplam os mecanismos de dano. Para ser possível modelar o comportamento do material até níveis de plasticidade próximos da rotura, desde a década de 50 que engenheiros e cientistas procuram desenvolver modelos constitutivos contínuos capazes de prever a evolução da deterioração interna do material. Surgiu assim a *Mecânica do Dano Contínuo* que, ao longo dos anos, se tornou umas das disciplinas mais importantes da *Mecânica dos Meios Contínuos*.

Embora sejam atualmente a estratégia mais utilizada na indústria para a modelação do comportamento do material, os modelos constitutivos contínuos encontram-se próximos dos seus limites de aplicabilidade. Isto deve-se, principalmente, ao facto das considerações fenomenológicas e micromecânicas, subjacentes à sua formulação, não permitirem contemplar todos os fenómenos que ocorrem na microestrutura. Como resposta a estas limitações, recentemente, uma nova abordagem tem vindo a ser desenvolvida: *Modelação Multi-Escala*. O comportamento do material, em vez de ser caracterizado por um conjunto de equações constitutivas, é modelado através de um *Elemento de Volume Representativo* que contém a informação relativa à sua microestrutura. O modelo final contém informação

a várias escalas, uma vez que ao problema original à macro-escala, é acoplado o problema à micro-escala. A ligação entre os dois domínios é estabelecida com base nas técnicas de *Homogeneização*.

Com o contínuo desenvolvimento tecnológico, cada vez mais surgem novos materiais que, desenhados a partir da sua microestrutura, possuem propriedades específicas para a sua aplicação final. A *Modelação Multi-Escala* apresenta nesse aspeto um grande potencial, na medida em que possibilita a modelação do comportamento da microestrutura com grande flexibilidade e precisão. É, no entanto, uma ferramenta numérica com grande margem de desenvolvimento, tratando-se de um dos temas em aberto na área da *Mecânica Computacional*.

## 1.1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é a determinação, por homogeneização computacional, das propriedades efetivas de materiais que, resultado da sua degradação interna, possuem vazios com geometrias variadas na sua microestrutura.

Em primeiro lugar são determinadas, através de modelos 3D à microescala, as propriedades elásticas efetivas de materiais porosos, considerando-se vazios geometricamente parametrizáveis tais como vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais. Os resultados obtidos são depois comparados com a solução teórica de Kachanov, Tsukrov et al. (1994) e também com a solução estocástica de Drach et al. (2014).

É depois analisado o início da cedência plástica, tendo-se como objetivo o estudo do efeito da geometria dos vazios nas curvas de cedência. Juntamente com os modelos utilizados, é proposto um critério de cedência macroscópica, baseado na evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado. Em primeiro lugar são analisados materiais porosos com vazios cilíndricos, comparando-se as curvas de cedência obtidas com as do modelo de *Gurson* (1977) e GTN (Tvergaard e A. Needleman, 1984). São depois analisados vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais, avaliando-se o modelo proposto por Madou e Leblond (2012a,b) e também o *Modelo 'Variacional' Modificado* de Danas e Aravas (2012).

## 1.2 Revisão bibliográfica

Nesta secção efetua-se uma breve revisão bibliográfica dos principais temas abordados neste trabalho.

### 1.2.1 Modelos Multi-Escala

Apesar de ser uma área de investigação recente, muitos dos fundamentos dos *Modelos Multi-Escala* já foram introduzidos há algumas décadas. Um dos primeiros

conceitos a ser introduzido foi a homogeneização, destacando-se os trabalhos pioneiros de Hill (1963) e Hashin (1983) na análise de materiais compósitos. É através da homogeneização que são transmitidas as propriedades microscópicas para as suas correspondentes à macro-escala, estando subjacente, normalmente, a regra das misturas (Molina, 2007; Reis, 2014).

Em Miehe e Koch (2002) é proposta uma família de algoritmos e representações matriciais para o cálculo das tensões homogeneizadas e do módulo tangente global, na hipótese de pequenas deformações. Em Miehe (2003) o trabalho é estendido para grandes deformações.

Na publicação Souza Neto e Feijóo (2006) é apresentada uma formulação geral variacional de primeira ordem de um *Modelo Multi-Escala*, para pequenas e grandes deformações. A formulação é baseada na média volumétrica dos campos de deformação e tensão microscópicos, ao longo de um *Elemento de Volume Representativo*, sendo ainda desenvolvida a versão discretizada do modelo para a sua implementação em elementos finitos. É também demonstrado que, sob determinadas restrições cinemáticas, o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado a partir da configuração de referência é equivalente ao tensor de *Cauchy* homogeneizado a partir da configuração deformada.

### 1.2.2 Propriedades elásticas efetivas de materiais porosos

Um dos trabalhos com maior impacto no problema da determinação do comportamento elástico de materiais com inclusões elipsoidais é a solução para o problema da inclusão de Eshelby (1957). Nesta publicação, são estabelecidas soluções analíticas para o campo de deslocamentos, deformações e tensões de um corpo infinito com uma inclusão elipsoidal sujeita a uma deformação permanente (designada por Mura (1987) pelo termo *eigenstrain*). Além disso, é também demonstrado que o campo de deformações e tensões é constante no interior da inclusão.

As soluções analíticas do comportamento efetivo de materiais porosos podem ser estabelecidas com base nos limites inferior e superior das propriedades gerais (Hashin e Shtrikman (1963) e posteriores publicações) ou através do cálculo direto a partir das soluções de elasticidade existentes. Uma dessas soluções é proposta em Kachanov, Tsukrov et al. (1994), onde são desenvolvidas expressões analíticas para o comportamento elástico efetivo de materiais com cavidades de várias geometrias, quer em 2D como em 3D. A contribuição do vazio na resposta efetiva do material é estabelecida através do *tensor de flexibilidade da cavidade*.

Em Tsukrov e Novak (2002) é proposta uma estratégia numérica para a determinação das constantes elásticas, aplicável a vazios 2D com formas irregulares. São utilizados dois métodos computacionais, nomeadamente o *Método dos Elementos Finitos* e o *Mapeamento Conformal*.

Através de uma metodologia estocástica, em Drach et al. (2013) é estabelecida uma correlação entre os momentos principais de inércia do vazio e o módulo de

*Young* efetivo. Um trabalho semelhante é apresentado em Drach et al. (2014), considerando no entanto como parâmetro geométrico da correlação as áreas projetadas do vazio.

### 1.2.3 Fratura dúctil

Desde a década de 50 que vários investigadores procuram desenvolver modelos constitutivos contínuos capazes de incorporar, através de uma variável de dano, a degradação interna do material. Um dos modelos com maior impacto na literatura é o modelo de *Gurson* (1977). Trata-se de um modelo micromecânico, onde é assumida uma distribuição periódica de vazios esféricos, representados por um RVE com a forma de uma esfera com um vazio esférico concêntrico. Mais tarde em Tvergaard e A. Needleman (1984) são propostas alterações no modelo de *Gurson*, introduzindo-se o efeito da nucleação e coalescência de vazios.

Um aspeto importante do modelo de *Gurson* é que está implícito o comportamento isotrópico do material, dado que é assumido que os vazios permanecem esféricos ao longo do processo de evolução do dano. Embora para solicitações puramente hidrostáticas isto seja consistente com os fenómenos de dano observados no material, para solicitações com componente de corte o modelo de *Gurson* não é realista, uma vez que não é considerada a anisotropia ‘morfológica’ resultante da evolução da forma dos vazios (Danas e Aravas, 2012). Por este motivo, vários investigadores procuraram estender o campo de aplicabilidade do modelo de *Gurson*, considerando vazios com formas mais complexas.

Em Gologanu et al. (1997) é proposto um modelo que assume que os vazios são esferoidais. Na sua formulação é adotada a mesma estratégia do modelo de *Gurson*, utilizando-se, porém, novos campos de velocidades. Recentemente, em Madou e Leblond (2012a,b) é proposta uma generalização deste modelo para vazios elipsoidais genéricos, desenvolvendo-se ainda em Madou, Leblond e Morin (2013) as respetivas leis de evolução das variáveis microestruturais.

Em Monchiet et al. (2014) é proposta uma função de cedência para vazios esferoidais, utilizando-se campos de velocidade do tipo *Eshelby*.

Uma abordagem alternativa aos modelos micromecânicos são os modelos desenvolvidos a partir de técnicas de homogeneização avançadas. Em Castañeda e Zaidman (1994) e Kailasam, Castañeda e Willis (1997) é proposto um modelo constitutivo para materiais dúcteis porosos, considerando-se vazios elipsoidais genéricos. Na sua formulação é utilizado o método de homogeneização comparativa linear ‘variacional’ de Castañeda (1991) e as estimativas para materiais linear-elásticos com microestruturas elipsoidais de Castañeda e Willis (1995). A sua implementação numérica é descrita em Aravas e Castañeda (2004). Em Danas e Aravas (2012) é proposta uma modificação deste modelo, de forma a que seja reproduzida, para solicitações hidrostáticas, a solução exata para os vazios esféricos e cilíndricos (dada pelo modelo de *Gurson*) e também para que seja capaz de

prever, por calibração, a evolução das variáveis microestruturais de acordo com o recente modelo de ‘segunda-ordem’ de Danas e Castañeda (2009b,a). Este último modelo é baseado no método de homogeneização não-linear de segunda ordem de Castañeda (2002).

Recorrendo a técnicas de homogeneização computacional, em Giusti et al. (2009) é avaliado o modelo de *Gurson* e, através da correlação estatística dos resultados obtidos, é proposta uma função de cedência. São analisados vazios cilíndricos, modelados numa estratégia multi-escala através de um RVE 2D em estado plano de deformação. Em Fritzen et al. (2012) é realizada uma análise semelhante, considerando-se no entanto RVE’s 3D com múltiplos vazios esféricos. Recentemente, Khdir et al. (2015) realiza uma análise semelhante, considerando no entanto múltiplos vazios esferoidais orientados aleatoriamente.

### 1.3 Estrutura do documento

Este documento encontra-se organizado por capítulos, incluindo-se, no final, um conjunto de anexos e as referências bibliográficas.

#### Capítulo 2

No Capítulo 2 são introduzidos alguns dos conceitos fundamentais da *Mecânica dos Meios Contínuos* e do *Método dos Elementos Finitos*. Em primeiro lugar, são apresentadas as entidades e relações físicas necessárias à implementação de um modelo capaz de simular o comportamento de um sólido em deformação, seguindo-se uma descrição das várias etapas associadas à aplicação do *Método dos Elementos Finitos*.

#### Capítulo 3

O Capítulo 3 é dedicado à descrição dos *Modelos Multi-Escala*. Iniciando-se pela introdução do conceito de *Elemento de Volume Representativo*, é depois apresentado o conceito geral de um *Modelo Multi-Escala*. Segue-se a formulação de um problema à micro-escala, baseada no *Teorema dos Trabalhos Virtuais*, e a caracterização das várias restrições cinemáticas associadas a diferentes condições de fronteira. Por fim, é descrita a estratégia de resolução numérica do problema à micro-escala, recorrendo ao *Método dos Elementos Finitos*.

#### Capítulo 4

No Capítulo 4 são apresentados, numa perspetiva a várias escalas, os vários conceitos teóricos relacionados com a fratura dúctil. Em primeiro lugar, são introduzidos os aspetos fenomenológicos, nomeadamente os mecanismos microscópicos envolvidos e as respetivas evidências macroscópicas. São depois apresentados alguns dos

modelos teóricos existentes na literatura, dando-se especial atenção aos modelos que incorporam o efeito da geometria dos vazios no critério de cedência plástica. No final, é realizado um estudo paramétrico das curvas de cedência dos modelos teóricos, avaliando-se o efeito da geometria dos vazios e do parâmetro de *Lode*.

## Capítulo 5

No Capítulo 5 são descritas várias metodologias para a determinação das propriedades elásticas efetivas de materiais porosos. Em primeiro lugar, é introduzida a lei de *Hooke* generalizada, apresentando-se as relações elásticas para materiais com diferentes tipos de isotropia. É depois introduzida a solução exata de *Kachanov, Tsukrov et al. (1994)* para o comportamento elástico efetivo de materiais porosos com vazios elipsoidais, que tem como base a solução para o problema de *Eshelby (1957)*. É também descrita a solução proposta por *Drach et al. (2014)*, que estabelece com base em modelação estatística uma correlação entre a área projetada do vazio e o módulo de *Young* efetivo. No final, é proposta uma metodologia numérica para a determinação das propriedades elásticas efetivas a partir do problema a partir do programa à micro-escala utilizado, comparando-se os resultados obtidos com as previsões teóricas.

## Capítulo 6

No Capítulo 6 são obtidas, por homogeneização computacional, as curvas de cedência para materiais porosos com vazios com diversas geometrias e frações volumicas, comparando-se depois com as respetivas previsões teóricas. É proposta uma estratégia para a imposição do gradiente de deformação, de forma a que seja realizado um varrimento dos vários estados de tensão compreendidos entre a solitação puramente hidrostática e de corte puro. É também proposto um critério de cedência macroscópica, baseado na evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

Em primeiro lugar, é analisado o início da cedência em materiais porosos com vazios cilíndricos, utilizando-se um modelo 2D em estado plano de deformação e um modelo 3D. As curvas de cedência obtidas são comparadas com as curvas teóricas do modelo de *Gurson (1977)* e GTN (*Tvergaard e A. Needleman, 1984*).

São depois considerados, em análises 3D, vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais, avaliando-se as previsões teóricas do modelo proposto por *Madou e Leblond (2012a,b)* e também do Modelo ‘*Variacional*’ Modificado de *Danas e Aravas (2012)*.

## Capítulo 7

No Capítulo 7 é apresentada uma síntese do trabalho desenvolvido e as principais conclusões. São também indicadas algumas sugestões de trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# Mecânica dos Meios Contínuos e Método dos Elementos Finitos

---

Intrínseco à formulação dos *Modelos Multi-Escala* encontram-se os conceitos teóricos da *Mecânica dos Meios Contínuos*, que estabelecem as entidades e relações físicas necessárias à implementação de um modelo capaz de simular o comportamento de um sólido.

Devido à complexidade inerente aos problemas de mecânica dos sólidos, é necessário recorrer a ferramentas numéricas que, através de apropriadas aproximações, são capazes de resolver os mais diversos tipos de modelos. Um dos métodos numéricos mais populares, e enquadrado no contexto deste trabalho, é o *Método dos Elementos Finitos*. Este método permite obter uma aproximação para vários tipos de problemas governados por um conjunto de equações diferenciais, baseando-se na divisão do domínio do problema num número finito de sub-domínios e na interpolação sistemática do campo de variáveis. Atualmente, é globalmente aceite como uma das ferramentas numéricas mais poderosas, em virtude da sua flexibilidade e capacidade de implementação computacional.

Neste capítulo são introduzidos alguns dos tópicos fundamentais aos conceitos introduzidos acima, tendo como base Souza Neto, Peric et al. (2011). Para uma consulta mais detalhada sobre o tema da *Mecânica dos Meios Contínuos* sugerem-se as referências Shabana (2011), Holzapfel (2000) e Gurtin (1982). Relativamente ao *Método dos Elementos Finitos* sugerem-se os livros Zienkiewicz, Taylor e Zhu (2013) e Zienkiewicz e Taylor (2013).

### 2.1 Cinemática da deformação

Considere-se um corpo  $\mathcal{B}$  ocupando a região  $\Omega$  do espaço *Euclidiano* tri-dimensional  $\mathcal{E}$  e com uma fronteira regular  $\partial\Omega$ . A deformação é uma função, unívoca e suave, que descreve a posição de cada ponto material  $\mathbf{x}$  de  $\mathcal{B}$  relativamente à configuração de referência,

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{p}) . \quad (2.1)$$

Um movimento (ver Figura 2.1) é definido como sendo uma deformação de  $\mathcal{B}$  dependente da variável tempo. Desta forma, durante o movimento  $\varphi$  a posição espacial  $\mathbf{x}$  da partícula material  $\mathbf{p}$  (relativa à configuração de referência) no instante de tempo  $t$  é dada por

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{p}, t) . \quad (2.2)$$

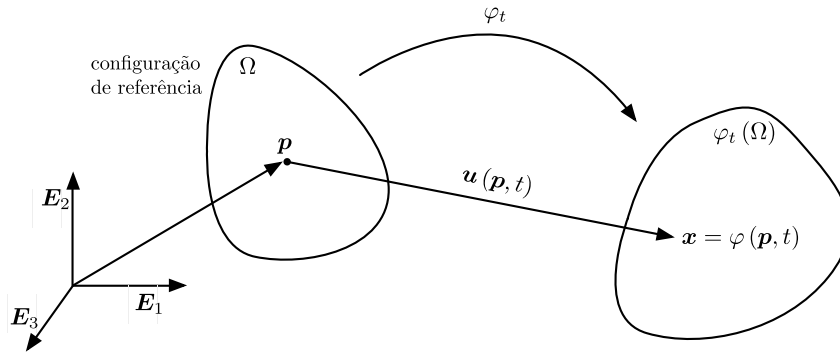


Figura 2.1: Deformação de um corpo.

O campo de deslocamentos é, por definição, dado por

$$\mathbf{u}\{\mathbf{p}, t\} = \varphi(\mathbf{p}, t) - \mathbf{p} . \quad (2.3)$$

É possível então exprimir a posição da partícula  $\mathbf{p}$  na configuração deformada do sólido  $\mathcal{B}$  na forma

$$\mathbf{x} = \mathbf{p} + \mathbf{u}\{\mathbf{p}, t\} . \quad (2.4)$$

A velocidade da partícula material  $\mathbf{p}$  é definida como sendo a derivada em ordem ao tempo do movimento  $\varphi$ ,

$$\dot{\mathbf{x}}\{\mathbf{p}, t\} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{p}, t)}{\partial t} . \quad (2.5)$$

Assumindo que  $\varphi(\mathbf{p}, t)$  é invertível, para qualquer instante  $t$ , é possível exprimir os pontos materiais  $\mathbf{p}$  a partir da sua configuração deformada,

$$\mathbf{p} = \varphi^{-1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} - \mathbf{u}\{\varphi^{-1}(\mathbf{x}, t), t\} , \quad (2.6)$$

onde  $\varphi^{-1}(\mathbf{x}, t)$  é a função de mapeamento da configuração de referência. Com base nesta função é possível definir a velocidade espacial

$$\mathbf{v}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \dot{\mathbf{x}}\{\varphi^{-1}(\mathbf{x}, t), t\} . \quad (2.7)$$

Ambos os campos  $\dot{\mathbf{x}}$  e  $\mathbf{v}$  representam a velocidade do sólido durante a deformação. No entanto, encontram-se subjacentes à sua definição referenciais diferentes, resultando desse facto significados físicos distintos. À luz destes diferentes tipos de análise é possível definir dois tipos de descrição do movimento do corpo: formulação material e espacial.

A descrição material, também designada por formulação de *Lagrange*, tem como variável as partículas materiais na sua configuração de referência. Do ponto de vista conceptual, esta descrição consiste na fixação de um ponto material  $\mathbf{p}$  do sólido ao longo do movimento e na observação da evolução das variáveis.

A descrição espacial, também conhecida por formulação de *Euler*, tem a posição espacial  $\mathbf{x}$  como variável. Esta descrição pode ser imaginada como a observação da evolução de uma variável num ponto fixo do espaço.

### 2.1.1 Gradiente de deformação

O gradiente de deformação do movimento  $\varphi$  é o tensor de segunda ordem  $\mathbf{F}$  definido (com base na descrição material) como

$$\mathbf{F}\{\mathbf{p}, t\} = \nabla_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}, t) = \frac{\partial \mathbf{x}_t}{\partial \mathbf{p}} . \quad (2.8)$$

Considerando a relação (2.4), a expressão anterior pode ser escrita na forma

$$\mathbf{F} \equiv \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{u} , \quad (2.9)$$

onde  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade de segunda ordem.

Em termos da descrição espacial, o gradiente de deformação  $\mathbf{F}$  pode ser igualmente expresso como

$$\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \left[ \nabla_{\mathbf{x}} \varphi^{-1}(\mathbf{x}, t) \right]^{-1} \equiv [\mathbf{I} - \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}]^{-1} . \quad (2.10)$$

Nas expressões anteriores os operadores  $\nabla_{\mathbf{p}}$  e  $\nabla_{\mathbf{x}}$  denotam o operador gradiente da formulação material e espacial, respetivamente.

Para a compreensão do significado físico do gradiente de deformação considere-se uma fibra material infinitesimal  $d\mathbf{p}$ , que liga duas partículas materiais vizinhas:  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$  (Figura 2.2). Após a deformação  $\varphi_t$ , estas partículas são mapeadas para as posições  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ . O gradiente de deformação é o operador linear que relaciona as fibras infinitesimais  $d\mathbf{p}$  com o seu homólogo na configuração deformada  $d\mathbf{x}$ , ou seja:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{p} . \quad (2.11)$$

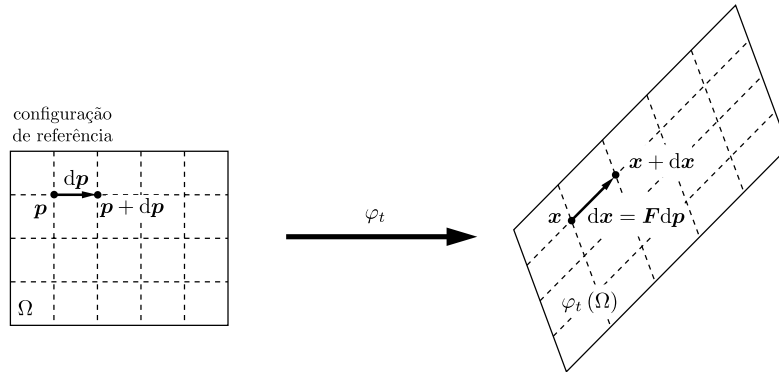


Figura 2.2: Gradiente de deformação (adaptado de Souza Neto, Peric et al., 2011).

### Decomposição isocórica e volumétrica do gradiente de deformação

Uma deformação volumétrica consiste na contração ou dilatação pura e uniforme em todas as direções do sólido, ou seja

$$\mathbf{F} = c \mathbf{I} , \quad (2.12)$$

onde o escalar  $c$  corresponde ao rácio de contração/dilatação.

O determinante do gradiente de deformação  $\mathbf{F}$

$$J = \det \mathbf{F} , \quad (2.13)$$

representa, localmente, o volume após deformação por unidade de volume de referência. Uma deformação isocórica é caracterizada pela condição de conservação de volume, podendo-se exprimir matematicamente como

$$J = 1 .$$

Com base nos dois tipos de deformação apresentados, qualquer deformação pode ser decomposta localmente como uma deformação volumétrica seguida de uma deformação isocórica, ou vice-versa. Tem-se então que

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{iso}} \mathbf{F}_{\text{v}} = \mathbf{F}_{\text{v}} \mathbf{F}_{\text{iso}} , \quad (2.14)$$

onde

$$\mathbf{F}_{\text{v}} \equiv (\det \mathbf{F})^{\frac{1}{3}} \mathbf{I} \quad (2.15)$$

é a componente volumétrica de  $\mathbf{F}$  e

$$\mathbf{F}_{\text{iso}} \equiv (\det \mathbf{F})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} \quad (2.16)$$

a componente isocórica, associada à distorção local.

### Decomposição polar do gradiente de deformação

A decomposição polar do gradiente de deformação permite a distinção entre rotações e alongações puras. Define-se então

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} , \quad (2.17)$$

onde  $\mathbf{R}$  denota o tensor de rotação e os tensores  $\mathbf{U}$  e  $\mathbf{V}$  a alongação direito e esquerdo (*right/left stretch tensors*), respetivamente. Note-se que estes dois últimos tensores são simétricos definidos positivos, expressos por

$$\mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{C}} , \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{B}} , \quad (2.18b)$$

onde  $\mathbf{C}$  e  $\mathbf{B}$  são, respetivamente, os tensores de deformação de *Cauchy-Green* direito e esquerdo, matematicamente dados por

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} , \quad (2.19a)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T . \quad (2.19b)$$

## 2.2 Tensores de deformações

A deformação de um sólido pode ser expressa por diferentes quantidades e, embora todas representem o mesmo fenómeno físico, a sua seleção baseia-se principalmente no compromisso entre o aspeto fenomenológico que se pretende modelar e o seu enquadramento matemático.

Das várias alternativas existentes para a quantificação da deformação, destacam-se duas famílias: tensores de deformação de *Lagrange* e de *Euler*. O tensor de deformação de *Lagrange* é definido por

$$\mathbf{E}^{(m)} = \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{U}^m - \mathbf{I}) & m \neq 0 \\ \ln[\mathbf{U}] & m = 0 , \end{cases} \quad (2.20)$$

onde  $m$  é um número real e  $\ln[\cdot]$  denota o tensor logarítmico de  $[\cdot]$ . O tensor de deformação de *Euler* é semelhante ao da família de *Lagrange*, sendo este função do tensor de alongação esquerdo  $\mathbf{V}$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(m)} = \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{V}^m - \mathbf{I}) & m \neq 0 \\ \ln[\mathbf{V}] & m = 0 . \end{cases} \quad (2.21)$$

O programa utilizado no âmbito desta dissertação encontra-se implementado para grandes deformações, considerando-se no modelo constitutivo material o tensor de deformação logarítmico de *Lagrange* ( $m = 0$ ). Este é também denominado por tensor de *Hencky*, e é matematicamente definido por

$$\mathbf{E} = \ln(\mathbf{U}) \equiv \ln\left(\sqrt{\mathbf{F}^T \mathbf{F}}\right) . \quad (2.22)$$

Um aspeto importante dos tensores de deformação até agora apresentados reside no facto destes serem nulos para movimentos de corpo rígido (rotação e/ou translação).

## 2.3 Tensores de tensões

Num corpo em deformação desenvolvem-se tensões no seu interior, podendo estas ser caracterizadas por diferentes quantidades. São apresentados nesta secção os tensores enquadrados no trabalho desenvolvido.

### 2.3.1 Tensor de *Cauchy*

O tensor das tensões de *Cauchy* é, por definição, dado por

$$\mathbf{t}\{\mathbf{x}, \mathbf{n}\} = \boldsymbol{\sigma}\{\mathbf{x}\}\mathbf{n} , \quad (2.23)$$

onde  $\mathbf{t}$  é a tração na superfície e  $\mathbf{n}$  o vetor normal à superfície. Na literatura é frequentemente denominado por tensor das tensões verdadeiras, uma vez que é definido com base na configuração deformada do sólido. Resultado do equilíbrio de momento angular tem-se que o tensor de *Cauchy* é simétrico,

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T . \quad (2.24)$$

À semelhança da decomposição do gradiente de deformação nas componentes volumétrica e isocórica, o tensor das tensões de *Cauchy* pode ser decomposto na parte hidrostática e desviadora. A primeira, também designada por pressão hidrostática ou tensão média, é definida como

$$p = \frac{1}{3} \text{tr } \boldsymbol{\sigma} . \quad (2.25)$$

As tensões desviadoras são expressas por

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - p \mathbf{I} . \quad (2.26)$$

### 2.3.2 Primeiro tensor das tensões de *Piola-Kirchhoff*

O primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*, na notação utilizada representado por  $\mathbf{P}$ , é a versão material do tensor das tensões de *Cauchy*. Assim sendo, as tensões são quantificadas relativamente à configuração não deformada do sólido. Matematicamente é expresso por

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-\text{T}} . \quad (2.27)$$

Contrariamente ao tensor de *Cauchy*, o primeiro tensor das tensões de *Piola-Kirchhoff* não é necessariamente simétrico.

### 2.3.3 Tensor das tensões de *Kirchhoff*

Utilizando o tensor de *Cauchy* e o determinante do gradiente de deformação é possível definir o tensor das tensões de *Kirchhoff*:

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} . \quad (2.28)$$

Dada a simetria do tensor de *Cauchy*, o tensor das tensões de *Kirchhoff* é também simétrico.

## 2.4 Princípios fundamentais de conservação

Até ao momento foram introduzidas algumas das variáveis que caracterizam a deformação e movimento, bem como as medidas da deformação e da tensão desenvolvidas no interior de um sólido contínuo. No entanto, é fundamental que sejam respeitadas um conjunto de leis que impõem o comportamento destas variáveis. Os princípios fundamentais têm como base as leis e princípios termodinâmicos e dinâmicos, sendo nos tópicos seguintes indicados, de forma sintética, alguns deles.

### 2.4.1 Conservação da massa

O princípio da conservação da massa pode ser expresso matematicamente na forma

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div}_x \dot{\mathbf{u}} = 0 , \quad (2.29)$$

onde  $\rho$  é a densidade do material do sólido e  $\operatorname{div}_x(\cdot)$  denota o operador divergência espacial.

### 2.4.2 Balanço de momento linear

Considerando a formulação espacial do movimento de um sólido, o balanço de momento linear, resultado do teorema de *Cauchy*, pode ser definido pelo sistema de equações

$$\begin{cases} \operatorname{div}_x \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \rho \ddot{\mathbf{u}} & , \text{ em } \varphi(\Omega) , \\ \mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} & , \text{ em } \varphi(\partial\Omega) , \end{cases} \quad (2.30)$$

onde  $\mathbf{t}$  é o campo vetorial de tração na fronteira do sólido na configuração deformada  $\varphi(\partial\Omega)$ ,  $\mathbf{n}$  o vetor unitário normal à superfície definida por  $\varphi(\partial\Omega)$  e  $\mathbf{b}$  o vetor das forças de volume por unidade de volume deformado  $\varphi(\Omega)$ .

Considerando a formulação material (*Lagrange*), o sistema de equações anterior pode ser expresso a partir da configuração de referência,

$$\begin{cases} \operatorname{div}_p \mathbf{P} + \bar{\mathbf{b}} = \bar{\rho} \ddot{\mathbf{u}} & , \text{ em } \Omega , \\ \bar{\mathbf{t}} = \mathbf{P}\mathbf{N} & , \text{ em } \partial\Omega , \end{cases} \quad (2.31)$$

onde

$$\bar{\mathbf{b}} = J\mathbf{b} \quad (2.32)$$

é a força de volume de referência (força de volume por unidade de volume na configuração não deformada), o termo

$$\bar{\rho} = J\rho \quad (2.33)$$

é a densidade de referência (massa por unidade de volume na configuração de referência),  $\bar{\mathbf{t}}$  a tração na superfície de referência (força de superfície por unidade de área de referência) e  $\mathbf{N}$  o vetor unitário normal à superfície não deformada  $\partial\Omega$ . Na notação adotada  $\operatorname{div}_p(\cdot)$  denota o operador divergência material de  $(\cdot)$ .

As equações acima indicadas são também designadas como *forma forte* das equações de equilíbrio.

## 2.5 Princípio dos Trabalhos Virtuais

Nesta secção são introduzidas as equações de equilíbrio na forma fraca, obtidas da aplicação do *Princípio dos Trabalhos Virtuais* (o qual se encontra subjacente à sua definição o *Princípio da Energia Mínima*).

Considere-se novamente um sólido genérico  $\mathcal{B}$ , que ocupa a região  $\Omega \subset \mathcal{E}$ , com fronteira  $\partial\Omega$  na sua configuração de referência, sujeito a forças de volume no seu interior e a forças de tração na sua fronteira.

### 2.5.1 Versão espacial

A versão espacial do *Princípio dos Trabalhos Virtuais* estabelece o equilíbrio do sólido se e apenas se for satisfeita a equação

$$\int_{\varphi(\Omega)} [\boldsymbol{\sigma} : \nabla_x \boldsymbol{\eta} - (\mathbf{b} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \boldsymbol{\eta}] \, dV - \int_{\varphi(\partial\Omega)} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}, \quad (2.34)$$

onde  $\boldsymbol{\eta}$  é o deslocamento virtual admissível, pertencente ao espaço de deslocamentos virtuais  $\mathcal{V}$ .

### 2.5.2 Versão material

A versão material estabelece o equilíbrio do sólido em relação à configuração de referência de  $\mathcal{B}$ , sendo necessário que o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*,  $\mathbf{P}$ , satisfaça a equação

$$\int_{\Omega} [\mathbf{P} : \nabla_p \boldsymbol{\eta} - (\bar{\mathbf{b}} - \bar{\rho} \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \boldsymbol{\eta}] \, dV - \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}. \quad (2.35)$$

A versão material da aplicação do *Princípio dos Trabalhos Virtuais* é obtida a partir da versão espacial através das identidades

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{P} \mathbf{F}^T, \quad (2.36a)$$

$$\nabla_x \mathbf{a} = \nabla_p \mathbf{a} \mathbf{F}^{-1}, \quad (2.36b)$$

onde a relação (2.36b) é válida para um campo vetorial genérico  $\mathbf{a}$ . Na passagem da versão espacial para material é também utilizada a relação (Gurtin, 1982)

$$\int_{\varphi(\Omega)} a(\mathbf{x}) \, dV = \int_{\Omega} J(\mathbf{p}) a(\varphi(\mathbf{p})) \, dV, \quad (2.37)$$

válida para qualquer campo escalar  $a$ .

### 2.5.3 Formulação *quasi-estática*

Os efeitos de inércia do sólido podem ser desprezados em certos modelos (por exemplo, sob a aplicação de uma carga de forma lenta e incremental), designando-se este tipo de análise por formulação *Quasi-Estática*.

Desprezados os termos de inércia as equações de equilíbrio vêm simplificadas. A descrição espacial do *Princípio dos Trabalhos Virtuais* vem

$$\int_{\varphi(\Omega)} [\boldsymbol{\sigma} : \nabla_x \boldsymbol{\eta} - \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\eta}] \, dV - \int_{\varphi(\partial\Omega)} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}, \quad (2.38)$$

e a descrição material

$$\int_{\Omega} [\mathbf{P} : \nabla_p \boldsymbol{\eta} - \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\eta}] \, dV - \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}. \quad (2.39)$$

## 2.6 Método dos Elementos Finitos

As equações de equilíbrio apresentadas anteriormente, aplicáveis ao problema de deformação de um sólido, apresentam um grau de complexidade elevado. Isto impossibilita a obtenção de soluções puramente analíticas para sólidos com modelos

constitutivos ou geometrias de maior complexidade, tornando-se então necessária a utilização de métodos numéricos para a resolução do problema. O processo mais utilizado por excelência na indústria e comunidade científica é o *Método dos Elementos Finitos*. Embora a solução obtida não seja exata, desde que o erro associado à solução aproximada seja desprezável, no contexto da aplicação, possibilita a análise de modelos complexos de forma expedita.

A aplicação do *Método dos Elementos Finitos* pode-se resumir às seguintes etapas:

1. Formulação integral do problema;
2. Discretização espacial;
3. Discretização temporal;
4. Resolução do sistema de equações originado pela discretização espacial e temporal.

Nos tópicos seguintes são introduzidas de forma sintética as várias etapas enumeradas acima.

### 2.6.1 Formulação integral do problema

A formulação integral do problema pode ser obtida através de diferentes métodos, tais como o *Princípio Variacional de Hamilton*, o *Método dos Resíduos Pesados* ou o *Princípio dos Trabalhos Virtuais*. Neste documento a forma fraca do problema (formulação integral) é obtida através do *Princípio dos Trabalhos Virtuais*, encontrando-se em (2.38) e (2.39) a formulação espacial e material, respectivamente, para problemas considerados como *Quasi-Estáticos*.

### 2.6.2 Discretização espacial

A discretização espacial é a base do *Método dos Elementos Finitos* e consiste na divisão do domínio contínuo do problema num conjunto finito de sub-domínios designados por *elementos finitos*,  $\Omega_e$ . O domínio discretizado vem

$$\Omega \approx \Omega^d = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{elem}}} \Omega_e, \quad (2.40)$$

onde  $(\cdot)^d$  designa a entidade discretizada,  $n_{\text{elem}}$  o número de elementos e  $\bigcup$  a operação de assemblagem.

### Interpolação das variáveis

Uma vez discretizado o domínio, as variáveis do problema são calculadas por interpolação no interior do elemento. Considere-se um campo vetorial genérico  $\mathbf{a}(\mathbf{x})$  definido sobre o domínio do elemento finito  $\Omega_e$ . A sua interpolação no elemento vem

$$\mathbf{a}\{\mathbf{x}\} \approx {}^h\mathbf{a}\{\mathbf{x}\} \equiv \sum_{i=1}^{n_{\text{nós}}} \mathbf{a}\{\mathbf{x}_i\} N_i^e(\mathbf{x}), \quad (2.41)$$

onde  ${}^h\mathbf{a}\{\mathbf{x}\}$  designa o campo  $\mathbf{a}\{\mathbf{x}\}$  interpolado,  $n_{\text{nós}}$  o número de nós,  $\mathbf{a}\{\mathbf{x}_i\}$  o valor de  $\mathbf{a}\{\mathbf{x}\}$  no nó  $i$  e  $N_i^e(\mathbf{x})$  a função de interpolação associada ao nó  $i$  no ponto  $\mathbf{x}$ .

As funções de interpolação, também designadas por *funções de forma*, dependem do tipo de elemento utilizado na discretização e possuem, entre outras (Zienkiewicz, Taylor e Zhu, 2013), a propriedade de delta de *Kronecker*,

$$N_i^e(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}, \quad (2.42)$$

onde  $\delta_{ij}$  é a função de delta de *Kronecker*,

$$\begin{cases} \delta_{ij} = 1 & , \text{ para } i = j, \\ \delta_{ij} = 0 & , \text{ para } i \neq j. \end{cases} \quad (2.43)$$

Para a interpolação no domínio global discretizado  $\Omega^d$  em  $n_{\text{pontos}}$  o processo é semelhante:

$${}^h\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{\text{pontos}}} \mathbf{a}\{\mathbf{x}_i\} N_i^g(\mathbf{x}). \quad (2.44)$$

No entanto, neste caso, a *função de forma*  $N_i^g(\mathbf{x})$  encontra-se definida no domínio do problema e não apenas no domínio do elemento (Figura 2.3).

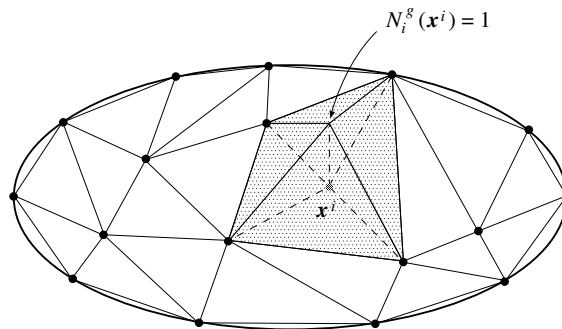


Figura 2.3: Interpolação no elemento finito: função de forma global (Souza Neto, Peric et al., 2011).

As *funções de forma* podem ser representadas matricialmente na forma

$$\mathbf{N}^g\{\mathbf{x}\} = \left[ \text{diag}[N_1^g(\mathbf{x})] \quad \text{diag}[N_2^g(\mathbf{x})] \quad \cdots \quad \text{diag}[N_{n_{\text{pontos}}}^g(\mathbf{x})] \right], \quad (2.45)$$

onde  $\text{diag}[N_i^g(\mathbf{x})]$  é a matriz diagonal de dimensões  $n_{\text{dim}} \times n_{\text{dim}}$  ( $n_{\text{dim}}$  é o número de graus de liberdade do problema) que contém a função de forma do nó  $i$ . Desta forma a interpolação é dada por

$${}^h\mathbf{a}\{\mathbf{x}\} = \mathbf{N}^g \mathbf{a}, \quad (2.46)$$

onde  $\mathbf{a}$  é o vetor global com os valores nodais do campo vetorial,

$$\mathbf{a} = \left[ a_1^1, \dots, a_{n_{\text{dim}}}^1, \dots, a_1^{n_{\text{pontos}}}, \dots, a_{n_{\text{dim}}}^{n_{\text{pontos}}} \right]^T, \quad (2.47)$$

onde o elemento genérico  $a_i^j$  é a componente  $i$  do campo vetorial no nó global  $j$ .

A discretização espacial requer a introdução do operador gradiente discreto,  $\mathbf{G}^g$ , e do operador gradiente simétrico discreto,  $\mathbf{B}^g$ , que correspondem à versão discretizada dos operadores  $\nabla_p(\cdot)$  e  $\nabla_x(\cdot)$ , respetivamente. Ambas as matrizes (também designadas por matrizes de deformação) precisam de ser estabelecidas conforme o tipo de problema (i.e. problemas bi-dimensionais ou tri-dimensionais). Para problemas bi-dimensionais em estado plano de deformação a matriz  $\mathbf{G}^g$  assume a forma

$$\mathbf{G}^g = \left[ \begin{array}{cc|cc|c|c} \frac{\partial N_1^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial y} \end{array} \right], \quad (2.48)$$

e  $\mathbf{B}^g$ ,

$$\mathbf{B}^g = \left[ \begin{array}{cc|cc|c|c} \frac{\partial N_1^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2^g}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1^g}{\partial y} & \frac{\partial N_1^g}{\partial x} & \frac{\partial N_2^g}{\partial y} & \frac{\partial N_2^g}{\partial x} & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial y} & \frac{\partial N_{n_{\text{pontos}}}^g}{\partial x} \end{array} \right]. \quad (2.49)$$

### Discretização espacial das equações de equilíbrio

Com os elementos acima descritos as equações de equilíbrio podem ser expressas na versão discretizada.

Com base na formulação espacial, a equação (2.38) discretizada resulta

$$\left\{ \int_{\varphi(\Omega^d)} [(\mathbf{B}^g)^T \boldsymbol{\sigma} - (\mathbf{N}^g)^T \mathbf{b}] \, dV - \int_{\varphi(\partial\Omega^d)} (\mathbf{N}^g)^T \mathbf{t} \, dA \right\}^T \boldsymbol{\eta} = 0, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}^d, \quad (2.50)$$

onde  $\mathcal{V}^d$  denota a versão discretizada do espaço de deslocamentos virtuais,  $\mathcal{V}$ .

A equação (2.39), correspondente à versão material, vem

$$\left\{ \int_{\Omega^d} [(\mathbf{G}^g)^T \mathbf{P} - (\mathbf{N}^g)^T \bar{\mathbf{b}}] dV - \int_{\partial\Omega^d} (\mathbf{N}^g)^T \bar{\mathbf{t}} dA \right\}^T \boldsymbol{\eta} = 0, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}^d. \quad (2.51)$$

Como as equações indicadas têm que ser verificadas para qualquer vetor de deslocamentos virtuais  $\boldsymbol{\eta}$ , os termos no interior das chavetas têm que se anular. Logo, após algumas substituições e manipulação algébrica, pode-se estabelecer a equação de equilíbrio na forma fraca como

$$\mathbf{f}^{\text{int}} - \mathbf{f}^{\text{ext}} = \mathbf{0}, \quad (2.52)$$

onde  $\mathbf{f}^{\text{int}}$  e  $\mathbf{f}^{\text{ext}}$  denotam, respetivamente, os vetores globais de forças internas e externas. No procedimento do *Método dos Elementos Finitos* estes vetores globais são normalmente obtidos através da assemblagem dos vetores elementares,

$$\mathbf{f}^{\text{int}} = \mathbf{A} \begin{matrix} n_{\text{elem}} \\ \mathbf{f}_e^{\text{int}} \end{matrix}, \quad (2.53a)$$

$$\mathbf{f}^{\text{ext}} = \mathbf{A} \begin{matrix} n_{\text{elem}} \\ \mathbf{f}_e^{\text{ext}} \end{matrix}. \quad (2.53b)$$

O operador  $\mathbf{A}$  denota a assemblagem dos elementos finitos, onde cada componente do vetor de forças global associado a um nó em particular é obtida do somatório das respetivas contribuições dos vetores elementares que partilhem esse mesmo nó.

Segundo a formulação espacial os vetores elementares de forças internas e externas vêm, respetivamente,

$$\mathbf{f}_e^{\text{int}} = \int_{\varphi(\Omega_e)} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} dV, \quad (2.54a)$$

$$\mathbf{f}_e^{\text{ext}} = \int_{\varphi(\Omega_e)} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{b}} dV + \int_{\varphi(\partial\Omega_e)} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{t}} dA. \quad (2.54b)$$

A versão material é dada por

$$\mathbf{f}_e^{\text{int}} = \int_{\Omega_e} \mathbf{G}^T \mathbf{P} dV, \quad (2.55a)$$

$$\mathbf{f}_e^{\text{ext}} = \int_{\Omega_e} \mathbf{G}^T \bar{\mathbf{b}} dV + \int_{\partial\Omega_e} \mathbf{G}^T \bar{\mathbf{t}} dA. \quad (2.55b)$$

### Quadratura de Gauss

Como indicado nas expressões acima, os vetores elementares de forças internas e externas são obtidos por integração. Um dos métodos mais utilizados para a

avaliação numérica dos integrais é a quadratura de *Gauss*: seja  $a(\mathbf{x})$  um campo genérico, definido no domínio do elemento  $\Omega_e$ , e seja  $\mathbf{x} : \Upsilon \rightarrow \Omega_e$  o mapeamento do domínio normalizado  $\Upsilon$  em  $\Omega_e$ . O integral de  $a(\mathbf{x})$  sobre  $\Omega_e$  é obtido por

$$\int_{\Omega_e} a(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \equiv \int_{\Upsilon} a(\mathbf{x}\{\boldsymbol{\zeta}\}) j(\boldsymbol{\zeta}) \, d\boldsymbol{\zeta} \approx \sum_{i=1}^{n_{\text{gauss}}} W_i a(\mathbf{x}\{\boldsymbol{\zeta}_i\}) j(\boldsymbol{\zeta}_i), \quad (2.56)$$

onde  $\boldsymbol{\zeta}_i$  ( $i = 1, \dots, n_{\text{gauss}}$ ) são as posições dos  $n_{\text{gauss}}$  pontos de gauss no domínio normalizado  $\Upsilon$ ,  $W_i$  os respectivos pesos e

$$j(\boldsymbol{\zeta}) = \det [\partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\zeta}], \quad (2.57)$$

o determinante do jacobiano da transformação  $\mathbf{x}$ .

### 2.6.3 Discretização temporal

Muitos dos materiais apresentam um comportamento que depende do histórico de deformação (por exemplo, materiais dependentes da trajetória de deformação ou dependentes da taxa de deformação). Este aspeto de maior complexidade no comportamento do material é implementado nos modelos de *Elementos Finitos* através de uma estratégia incremental. Isto significa que é realizada uma discretização temporal: o intervalo de tempo total  $[t_0, t]$  é dividido em  $(n + 1)$  passos sequenciais no tempo, nos quais as equações de equilíbrio têm que ser satisfeitas.

De forma a incluir o histórico de deformação nas equações constitutivas, que caracterizam o tensor das tensões, é introduzido um conjunto de variáveis internas  $\boldsymbol{\alpha}$ , intrínsecas ao tipo de material.

Considerando, por exemplo, o primeiro tensor das tensões de *Piola-Kirchhoff*, tem-se que no instante  $t_{n+1}$ ,

$$\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_n \}, \quad (2.58)$$

onde  $\hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_n \}$  é o funcional constitutivo incremental. Introduzindo este funcional na equação (2.39) e levando em consideração a discretização temporal das forças externas, é possível definir o *problema incremental quasi-estático de valor inicial*:

---

*Dado um conjunto de variáveis internas  $\boldsymbol{\alpha}_n$  e o campo de deslocamentos  $\mathbf{u}_n$  no instante de tempo  $t_n$ , bem como as forças externas  $\bar{\mathbf{b}}_{n+1}$  e  $\bar{\mathbf{t}}_{n+1}$  no instante de tempo  $t_{n+1}$ , procura-se o campo de deslocamentos  $\mathbf{u}_{n+1}$  que satisfaça*

$$\int_{\Omega} \left[ \hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_n \} : \nabla_p \boldsymbol{\eta} - \bar{\mathbf{b}}_{n+1} \cdot \boldsymbol{\eta} \right] \, dV - \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}}_{n+1} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}, \quad (2.59)$$

para qualquer  $\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}$ .

---

### 2.6.4 Método de *Newton-Raphson*

Estabelecida a equação de equilíbrio, de carácter não linear, é necessário utilizar um método numérico suficientemente robusto e eficiente para a sua resolução. Um dos métodos mais populares, e implementado no código de elementos finitos utilizado, é o método de *Newton-Raphson*. Através deste método é garantida, quando devidamente implementado, uma taxa de convergência quadrática.

Uma iteração  $j$  genérica do método de *Newton-Raphson* consiste na resolução da versão linearizada da equação de equilíbrio do problema em ordem ao vetor de deslocamentos global iterativo  $\delta \mathbf{u}^{(j)}$ ,

$$\mathbf{K}_T^{(j)} \delta \mathbf{u}^{(j+1)} = -\mathbf{r}^{(j)}, \quad (2.60)$$

onde  $\mathbf{r}^{(j)}$  denota o vetor resíduo,

$$\mathbf{r}^{(j)} = \mathbf{f}^{\text{int}} \left\{ \mathbf{u}_{n+1}^{(j)} \right\} - \mathbf{f}_{n+1}^{\text{ext}}, \quad (2.61)$$

e  $\mathbf{K}_T$  a matriz global tangente, que na versão material vem

$$\mathbf{K}_T = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} \Big|_{\mathbf{u}_{n+1}^{(j)}} = \sum_{e=1}^{n_{\text{elem}}} \int_{\Omega_e} \mathbf{G}^T \mathbf{A} \mathbf{G} \, dV. \quad (2.62)$$

O tensor de quarta ordem  $\mathbf{A}$  consiste na versão material do módulo tangente,

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}}. \quad (2.63)$$

O processo iterativo ocorre até que um critério de convergência imposto seja satisfeito.

### 2.6.5 Pseudo-código do *Método dos Elementos Finitos*

Em conclusão da apresentação do *Método dos Elementos Finitos*, encontra-se na Tabela 2.1 a estrutura global do código de elementos finitos utilizado em formato de pseudo-código. Para maior detalhe é possível encontrar em Souza Neto, Peric et al. (2011) uma descrição da implementação computacional de todas as metodologias.

## 2.7 Conclusões

Neste capítulo são introduzidos os conceitos básicos sobre a mecânica dos meios contínuos e a aplicação do *Método dos Elementos Finitos* para a resolução de problemas da mecânica dos sólidos.

Tabela 2.1: Algoritmo do método de *Newton-Raphson* para a solução do *Método dos Elementos Finitos incremental* (Souza Neto, Peric et al., 2011).

1. Inicialização de variáveis para  $j = 1$ ;

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(j)} = \mathbf{u}_n \quad \mathbf{r}^{(j)} = \mathbf{f}_{n+1}^{\text{int}}(\mathbf{u}_n) - \lambda_{n+1} \mathbf{f}^{\text{ext}}$$

onde  $\mathbf{r}$  é o resíduo e  $\lambda_{n+1}$  o fator de carga prescrito no instante  $t_{n+1}$ .

2. Incrementação do contador:  $j = j + 1$

3. Cálculo da matriz de rigidez;

$$\mathbf{K}_T^{(j)} = \frac{\partial \mathbf{r}^{(j)}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{(j)}}$$

4. Cálculo do vetor de deslocamentos iterativo,  $\delta \mathbf{u}^{(j+1)}$ ;

$$\mathbf{K}_T^{(j)} \delta \mathbf{u}^{(j+1)} = -\mathbf{r}^{(j)}$$

5. Atualização dos deslocamentos globais,  $\mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)}$ ;

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} = \mathbf{u}_{n+1}^{(j)} + \delta \mathbf{u}^{(j+1)}$$

6. Atualização do gradiente de deformação,  $\mathbf{F}_{n+1}^{(j+1)}$ ;

$$\mathbf{F}_{n+1}^{(j+1)} = \left( \mathbf{I} - \nabla_x \mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} \right)^{-1}$$

7. Atualização das tensões e variáveis internas;

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{(j+1)} = \boldsymbol{\sigma} \left\{ \mathbf{F}_{n+1}^{(j+1)}, \boldsymbol{\alpha}_n \right\} \quad \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{(j+1)} = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \left\{ \mathbf{F}_{n+1}^{(j+1)}, \boldsymbol{\alpha}_n \right\}$$

onde  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$  denota o funcional incremental que governa a evolução de  $\boldsymbol{\alpha}$ .

8. Cálculo do vetor de forças internas,  $\mathbf{f}^{\text{int}} \left\{ \mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} \right\}$ ;

$$\mathbf{f}^{\text{int}} \left\{ \mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} \right\} = \sum_{e=1}^{n_{\text{elem}}} \mathbf{f}_e^{\text{int}} \left\{ \mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} \right\}$$

9. Cálculo do vetor resíduo,  $\mathbf{r}^{(j+1)}$ ;

$$\mathbf{r}^{(j+1)} = \mathbf{f}^{\text{int}} \left\{ \mathbf{u}_{n+1}^{(j+1)} \right\} - \lambda_{n+1} \mathbf{f}^{\text{ext}}$$

10. Verificação da convergência.

IF CONV<TOL THEN Novo incremento ELSE ir para 2) END IF

## Capítulo 3

# Modelos Multi-Escala

---

Independentemente do tipo de material, o seu comportamento e propriedades são profundamente dependentes da sua microestrutura. Esta dependência acentua-se quando o material se encontra sujeito a solicitações severas, onde as singularidades e heterogeneidades da microestrutura, tais como inclusões e vazios, desempenham um papel importante na caracterização da resposta. Os modelos constitutivos macroscópicos, baseados em considerações fenomenológicas e micromecânicas, assumem que o material é homogêneo (sendo ainda geralmente considerada a hipótese de isotropia). Logo, em aplicações onde é exigido um elevado grau de precisão na descrição da resposta do material, os modelos macroscópicos podem apresentar algumas limitações, uma vez que não conseguem incorporar, de forma flexível e precisa, o comportamento da sua microestrutura.

Com o objetivo de introduzir os efeitos da microestrutura nas propriedades globais do material, várias aproximações e metodologias foram desenvolvidas. Um desses métodos, que tem vindo a ganhar cada vez mais popularidade na comunidade científica e académica, é o *Método Multi-Escala Acoplado*. Este método difere dos habituais modelos macroscópicos, na medida em que é analisada não uma, mas duas escalas em simultâneo. Ao problema à macro-escala é acoplado o problema à micro-escala, relativo à microestrutura do material. O sucesso desta abordagem reside no facto de ser genérica e universal para todos os tipos de material. Refira-se ainda que os *Modelos Multi-Escala*, além apresentarem um grande potencial de aplicação na simulação de processos que envolvam solicitações complexas, podem ser utilizados no desenvolvimento, verificação ou otimização de modelos constitutivos macroscópicos (ver por exemplo Giusti et al., 2009).

Este capítulo é baseado principalmente em Souza Neto, Peric et al. (2011) e Reis (2014). Em primeiro lugar, é apresentado o conceito de *Elemento de Volume Representativo* (RVE), seguindo-se a formulação variacional do modelo matemático que define o problema microscópico de um sólido em deformação. Posteriormente, são detalhados os vários aspetos inerentes aos vários tipos de condições de fronteira aplicáveis ao RVE, concluindo-se com a implementação do *Método dos Elementos Finitos* à resolução do problema microscópico.

### 3.1 Elemento de Volume Representativo

O conceito de *Elemento de Volume Representativo* foi introduzido pela primeira vez por *Hill* (1963), com o objetivo de caracterizar sistematicamente, através de uma sub-região representativa, a microestrutura do material. O RVE encontra-se associado a um ponto do domínio macroscópico e segundo a definição de *Hill*, apenas caracteriza apropriadamente a microestrutura caso seja estatisticamente representativo. Noutras palavras, o RVE deve ter uma dimensão que inclua o maior número de heterogeneidades que representam, em termos médios, a microestrutura do material (Nemat-Nasser e Hori, 2013).

Na Figura 3.1 encontra-se uma representação esquemática de um RVE genérico, constituído por vazios de domínio  $\Omega_\mu^v$  e fronteira  $\partial\Omega_\mu^v$ , bem como inclusões, de domínio genérico  $\Omega_\mu^i$  e fronteira  $\partial\Omega_\mu^i$ . Com base na sua definição, o domínio do RVE pode ser dividido no sub-domínio material  $\Omega_\mu^s$  (constituintes sólidos, tais como a matriz material, inclusões, etc.) e no sub-domínio  $\Omega_\mu^v$ , relativo aos vazios.

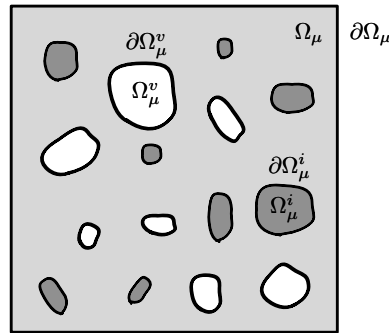


Figura 3.1: *Elemento de Volume Representativo* (RVE).

No contexto dos modelos multi-escala, onde no modelo constitutivo são envolvidas diferentes escalas, o tamanho do RVE é um parâmetro importante. Como tal, o comprimento característico do RVE,  $l_{\text{RVE}}$ , deve ser muito superior ao comprimento característico das heterogeneidades,  $l_{\text{het}}$ , mas muito inferior à dimensão do domínio macroscópico,  $l_{\text{macro}}$ , ou seja:

$$l_{\text{het}} \ll l_{\text{RVE}} \ll l_{\text{macro}}. \quad (3.1)$$

A relação anterior é geralmente denominada por *Princípio da Separação de Escalas* (Hashin, 1983).

Relativamente à constituição do RVE, refira-se ainda que no modelo descrito é adotada uma abordagem de primeira ordem, onde apenas proporcionalidade entre os diversos constituintes tem influência nos resultados. No caso de abordagens de segunda ordem, o tamanho do RVE é preponderante nos resultados obtidos (Kouznetsova et al., 2004).

### 3.2 Modelo

Considerando um ponto material genérico  $\mathbf{x}$  à macro-escala, a descrição das heterogeneidades da microestrutura é modelada através de um RVE. A perturbação ao equilíbrio do RVE é definida pela deformação local no ponto  $\mathbf{x}$ , à macro-escala. Na hipótese de deformações finitas, o tensor que faz o mapeamento da configuração de referência para a configuração deformada é o gradiente de deformação e o tensor de deformações utilizado é o tensor de *Hencky*. À micro-escala, as equações de equilíbrio são resolvidas de acordo com as restrições cinemáticas impostas na fronteira do RVE, obtendo-se, por homogeneização, o tensor de tensões macroscópico. No programa utilizado é utilizado o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*, uma vez que se trata do conjugado da taxa do gradiente de deformação. Na Figura 3.2 é representado esquematicamente o modelo descrito.

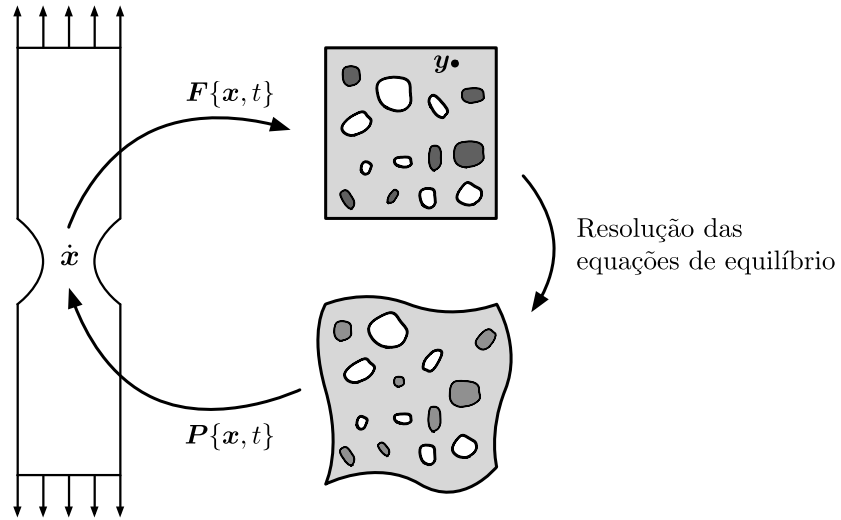


Figura 3.2: Representação esquemática de um modelo multi-escala.

#### 3.2.1 Homogeneização

A homogeneização é um dos conceitos basilares dos modelos multi-escala, uma vez que permite a transição de entidades definidas à micro-escala para a macro-escala (Nemat-Nasser e Hori, 2013). Considerando um campo genérico  $\mathbf{A}\{\mathbf{y}\}$  no domínio do RVE,  $\Omega_\mu$ , a sua média volumétrica é definida como

$$\mathbf{A}\{\mathbf{x}\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{A}\{\mathbf{y}\} dV. \quad (3.2)$$

Na expressão anterior  $V_\mu$  denota o volume total do RVE e  $\mathbf{y}$  um ponto genérico do RVE (micro-escala). Note-se que o domínio  $\Omega_\mu$  é relativo à configuração não

deformada do RVE (configuração de referência).

Na secção seguinte são detalhadas as várias etapas para o estabelecimento de um modelo multi-escala, na hipótese de deformações finitas. A formulação variacional utilizada, nomeadamente o *Princípio dos Trabalhos Virtuais*, é definida na configuração de referência. Logo, todas as quantidades homogeneizadas são definidas como sendo a média volumétrica do respetivo campo, considerando a configuração não deformada do RVE.

### 3.3 Formulação variacional

O problema à micro-escala é formulado a partir de um princípio variacional, nomeadamente o *Princípio dos Trabalhos Virtuais*. É admitida a hipótese de grandes deformações, utilizando-se, como tal, o tensor de deformações de *Hencky* e o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* para as tensões. A formulação variacional apresentada encontra-se organizada nos seguintes tópicos:

- Aplicação do gradiente de deformação macroscópico ao RVE;
- Definição dos deslocamentos admissíveis no RVE;
- Equilíbrio no RVE;
- Homogeneização das tensões;
- O Princípio de *Hill-Mandel*.

Na notação adotada,  $\mathbf{x}$  denota um ponto infinitesimal genérico à macro-escala, ao qual se encontra associado um RVE de domínio  $\Omega_\mu$  e fronteira  $\partial\Omega_\mu$  na configuração de referência. À micro-escala,  $\mathbf{y}$  representa um ponto infinitesimal do RVE na configuração deformada, e  $\mathbf{Y}$  as coordenadas na configuração não deformada.

#### 3.3.1 Aplicação do gradiente de deformação macroscópico ao RVE

Como já mencionado, em modelos baseados na hipótese de deformações finitas, a deformação do RVE é imposta a partir do gradiente de deformação. Isto significa que o gradiente de deformação macroscópico tem que ser igual ao gradiente de deformação microscópico homogeneizado, ou seja:

$$\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}\{\mathbf{y}\} dV . \quad (3.3)$$

Recordando a expressão (2.9),

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla_p \mathbf{u} ,$$

pode-se reescrever (3.3) na forma

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} &\equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{I} + \nabla_p \mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \, dV \\ &\equiv \mathbf{I} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \nabla_p \mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \, dV . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Aplicando o Teorema de *Gauss* (ou Teorema da *Divergência*), pode-se transformar o integral da expressão anterior num integral ao longo da fronteira  $\partial\Omega_\mu$ ,

$$\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \mathbf{I} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA , \quad (3.5)$$

sendo que  $\mathbf{N}\{\mathbf{Y}\}$  é o vetor unitário na direção exterior da fronteira não deformada  $\partial\Omega_\mu$  do RVE.

### 3.3.2 Deslocamentos admissíveis no RVE

Considerando a restrição descrita pela expressão (3.5), introduz-se o conceito de *conjunto de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringidos*:

$$\mathcal{K}_\mu \equiv \left\{ \mathbf{u}, \text{suficientemente regular} \mid V_\mu(\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I}) = \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA \right\} . \quad (3.6)$$

Sem perda de generalidade, o campo de deslocamentos pode ser decomposto na seguinte forma:

$$\mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \equiv (\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I}) \mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} . \quad (3.7)$$

A primeira componente é o deslocamento linear (varia linearmente com  $\mathbf{Y}$  - *coordenadas de referência* do RVE) e a segunda componente,  $\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\}$ , denota a flutuação de deslocamentos. Assim sendo, o gradiente de deformação pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\{\mathbf{y}, t\} &\equiv \mathbf{I} + \nabla_p \mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} \\ &\equiv \mathbf{I} + \nabla_p [(\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I}) \mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\}] \\ &\equiv \mathbf{I} + (\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I}) \mathbf{I} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \\ &\equiv \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Como se pode observar na expressão anterior, o gradiente de deformação microscópico pode ser decomposto em duas componentes: a deformação homogênea

imposta  $\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\}$  e a flutuação do campo de deslocamentos microscópicos  $\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\}$ . Substituindo (3.8) em (3.3) obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} &\equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \, dV \\ &\equiv \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \, dV . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Simplificando, e utilizando uma vez mais o Teorema de *Gauss*, tem-se que

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA = \mathbf{0} . \quad (3.10)$$

A expressão anterior introduz o conceito de *conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringido*:

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu \equiv \left\{ \tilde{\mathbf{u}}, \text{suficientemente regular} \mid \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA = \mathbf{0} \right\} . \quad (3.11)$$

É também possível definir o conjunto de *deslocamentos virtuais*  $\mathcal{V}_\mu$ , necessário à aplicação do *Princípio dos Trabalhos Virtuais* na obtenção da forma fraca da equação de equilíbrio. O deslocamento virtual tem que ser consistente com os conjuntos já estabelecidos, podendo ser dado pela diferença entre dois deslocamentos admissíveis,

$$\mathcal{V}_\mu \equiv \{ \boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 \mid \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \mathcal{K}_\mu \} . \quad (3.12)$$

Uma vez que a condição de restrição mínima tem que ser verificada, o conjunto de deslocamentos virtuais no RVE coincide com o conjunto de flutuação de deslocamentos minimamente restringido:

$$\mathcal{V}_\mu = \tilde{\mathcal{K}}_\mu . \quad (3.13)$$

É, por hipótese, assumido que o *conjunto de velocidades de flutuação cinematicamente admissíveis* pertence ao conjunto de deslocamentos virtuais, isto é,

$$\dot{\tilde{\mathbf{u}}} \in \mathcal{V}_\mu . \quad (3.14)$$

### 3.3.3 Equilíbrio no RVE

As equações de equilíbrio que definem a forma forte do problema, considerando deformações finitas, são as seguintes:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} + \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{0} , & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^s , \\ \operatorname{div} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} + \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{0} , & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^v , \\ \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} + \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{0} , & \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu , \\ \|\mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\}\| = \mathbf{0} , & \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu^v , \end{array} \right. \quad (3.15)$$

onde  $\bar{\mathbf{b}}_\mu$  é a força de volume por unidade de volume de referência (configuração não deformada) e  $\bar{\mathbf{t}}_\mu$  é a tração externa por unidade de área de referência na fronteira do RVE. As duas primeiras equações exprimem a conservação da quantidade de movimento angular em  $\Omega_\mu$ , sendo a primeira equação referente ao sub-domínio material do RVE,  $\Omega_\mu^s$ , e a segunda referente aos vazios,  $\Omega_\mu^v$ . Esta última é trivialmente satisfeita na situação de não existir qualquer fluido pressurizado no interior do vazio. A terceira equação define o equilíbrio na fronteira do RVE,  $\partial\Omega_\mu$ , e a última equação garante a continuidade do campo vetorial  $\mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\}$ , sendo imposto que o ‘salto’, isto é, a descontinuidade do campo, é nulo na interface sólido-vazio.

A formulação fraca pode ser obtida da aplicação do *Princípio dos Trabalhos Virtuais*, considerando-se neste caso a equação (2.59), estabelecida a partir da configuração de referência. A expressão obtida traduz o equilíbrio entre as forças internas devidas à deformação do sólido (primeira parcela) e as forças de volume e de fronteira:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\Omega_\mu^s} \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA \\ - \int_{\partial\Omega_\mu^v} \bar{\mathbf{t}}_\mu^v\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Na expressão anterior,  $\bar{\mathbf{t}}_\mu^v$  define a tração nas superfícies internas (interface sólido-vazio) por unidade de área não deformada. Note-se que este termo se anula na situação de vazios sem qualquer fluido pressurizado no seu interior.

### 3.3.4 Homogeneização das tensões

Utilizando o princípio de homogeneização descrito pela equação (3.2), também já utilizado para a homogeneização do gradiente de deformação, o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado é dado por

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \, dV, \quad (3.17)$$

podendo ser reescrito na forma

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} &\equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \mathbf{I} \, dV \\ &\equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} (\nabla_p \mathbf{Y})^T \, dV. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Considerando a relação (Gurtin, 1982)

$$\int_{\Omega} \mathbf{A}(\nabla \mathbf{a})^T \, dV = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{A}\mathbf{n}) \otimes \mathbf{a} \, dA - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{A} \otimes \mathbf{a} \, dV, \quad (3.19)$$

válida para qualquer campo tensorial regular  $\mathbf{A}$  e campo vetorial  $\mathbf{a}$  num domínio  $\Omega$ , onde  $\mathbf{n}$  denota o vetor unitário normal à fronteira  $\partial\Omega$ , é possível desenvolver (3.18) em

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \frac{1}{V_\mu} \left[ \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \otimes \mathbf{Y} \, dA - \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{Y} \, dV \right]. \quad (3.20)$$

Considerando as relações de equilíbrio no RVE, agrupadas em (3.15), pode-se escrever

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \frac{1}{V_\mu} \left[ \int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{Y} \, dA - \int_{\Omega_\mu^s} \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{Y} \, dV \right]. \quad (3.21)$$

Recordando a expressão (2.27), que relaciona o tensor das tensões de *Cauchy* e o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*, tem-se que

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\det \mathbf{F}} \mathbf{P} \mathbf{F}^T. \quad (3.22)$$

O tensor de *Cauchy*  $\boldsymbol{\sigma}$  deve ser calculado pela expressão acima, uma vez que o resultado não é garantidamente igual ao obtido por homogeneização do tensor de *Cauchy* microscópico (Souza Neto e Feijóo, 2008), isto é,

$$\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}\{\mathbf{y}, t\} \, dV \neq \frac{1}{\det \mathbf{F}} \mathbf{P} \mathbf{F}^T. \quad (3.23)$$

### 3.3.5 Princípio de *Hill-Mandel*

O princípio de *Hill-Mandel* permite estabelecer a ligação entre as duas escalas, tendo como base a consideração energética da conservação do fluxo de energia (potência) entre ambas as escalas. Considerando os tensores até agora detalhados, obtidos com base na consideração de deformações finitas, o princípio de *Hill-Mandel* pode-se exprimir da seguinte forma:

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{y}, t\} \, dV. \quad (3.24)$$

A expressão anterior tem que ser verificada para qualquer taxa de gradiente de deformação admissível,

$$\dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{y}, t\} = \nabla \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} = \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} + \nabla \dot{\tilde{\mathbf{u}}}\{\mathbf{y}, t\}, \quad (3.25)$$

bem como para qualquer campo de tensões microscópicas  $\mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\}$  em equilíbrio. Substituindo a relação anterior em (3.24) resulta

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} &\equiv \frac{1}{V_\mu} \left[ \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} \, dV + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\tilde{\mathbf{u}}}\{\mathbf{y}, t\} \, dV \right] \\ &\equiv \frac{1}{V_\mu} \left[ \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} : \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \, dV + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\tilde{\mathbf{u}}}\{\mathbf{y}, t\} \, dV \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

De acordo com a definição do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado, equação (3.17), tem-se que

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} \equiv \mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} : \dot{\mathbf{F}}\{\mathbf{x}, t\} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV, \quad (3.27)$$

concluindo-se então que a aplicação do princípio de *Hill-Mandel* impõe a verificação da seguinte condição:

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV = 0. \quad (3.28)$$

Integrando por partes o primeiro membro da equação anterior, e considerando a existência de vazios no domínio, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV &\equiv \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dA \\ &\quad - \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV \\ &\quad + \int_{\partial\Omega_\mu^v} \|\mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\}\| \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dA \\ &\quad - \int_{\Omega_\mu^v} \operatorname{div} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Considerando as equações de equilíbrio na forma forte, equação (3.15), e assumindo que no interior dos vazios,  $\Omega_\mu^v$ , as forças de volume  $\bar{\mathbf{b}}_\mu$  são nulas, a expressão anterior pode ser escrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV &\equiv \int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dA \\ &\quad - \int_{\Omega_\mu^s} \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como é possível observar, a equação anterior é composta por dois integrais distintos. Uma vez que os dois termos são independentes, a condição imposta pela expressão (3.28) é verificada se e somente se

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dA = 0, \quad (3.31a)$$

$$\int_{\Omega_\mu^s} \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \dot{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} dV = 0. \quad (3.31b)$$

Com base na definição do campo de *flutuações de velocidade cinematicamente admissíveis*, equação (3.14), chega-se finalmente à principal conclusão do princípio

de *Hill-Mandel*: as forças de volume e de tração correspondem às reações necessárias às restrições cinemáticas impostas pelas condições de fronteira, ou seja,

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad (3.32a)$$

$$\int_{\Omega_\mu^s} \bar{\mathbf{b}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV = 0. \quad (3.32b)$$

### 3.3.6 Equilíbrio microscópico

Com base no princípio de *Hill-Mandel*, os termos associados às forças de volume e de tração anulam-se na equação variacional que governa o equilíbrio à micro-escala (equação 3.16). Logo, o problema à micro-escala é definido por:

---

*Dado um gradiente de deformação  $\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\}$  à macro-escala, encontre-se o campo de flutuações de deslocamentos admissíveis  $\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\}$  que satisfaça a equação*

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\partial\Omega_\mu^v} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.33)$$


---

Assumindo que os vazios não se encontram sujeitos a qualquer pressão interna, a equação de equilíbrio na forma fraca simplifica-se na condição

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} : \nabla \boldsymbol{\eta} \, dV = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.34)$$

## 3.4 Condições de fronteira

Um dos aspetos mais importantes nos modelos multi-escala é o tipo de condição de fronteira imposta ao RVE. O seu efeito nos resultados obtidos é profundo, uma vez que os deslocamentos são diretamente dependentes do tipo de restrições impostas na fronteira. Assim sendo, é essencial garantir uma boa conformidade com o tipo de problema, material e natureza de distribuição de heterogeneidades na microestrutura, de forma a que o modelo consiga reproduzir da melhor forma possível o comportamento real do sólido.

Na caracterização das condições de fronteira é necessário garantir a conformidade com a formulação até agora descrita. Logo, a restrição cinemática, dada pela equação (3.10), bem como as condições resultantes da aplicação do princípio

de *Hill-Mandel*, equações (3.32a) e (3.32b), têm que ser verificadas. Na literatura é habitual encontrarem-se quatro tipos de condições de fronteira:

- Hipótese de *Taylor*;
- Condição de fronteira linear;
- Condição de fronteira periódica;
- Tração uniforme na fronteira.

Os quatro tipos de condições de fronteira são de seguida detalhados.

### 3.4.1 Hipótese de *Taylor*

A hipótese de *Taylor* é a condição de fronteira mais simples e restritiva. Esta condição assume o campo de deslocamentos à micro-escala é linear em  $\mathbf{Y}$ , ou seja,

$$\mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} = (\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I})\mathbf{Y}. \quad (3.35)$$

Como consequência, o campo de flutuação de deslocamentos é nulo,

$$\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{0}. \quad (3.36)$$

Note-se que, com base nesta condição de fronteira, são automaticamente satisfeitas as condições (3.10) e (3.32). Atendendo à definição de gradiente de deformação, equação (3.4), conclui-se também que o gradiente de deformação microscópico coincide com o macroscópico,

$$\mathbf{F}\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\}. \quad (3.37)$$

Encontra-se na Figura 3.3 uma representação esquemática da deformação do RVE.

Esta condição de fronteira, apesar da sua simplicidade, apresenta algumas limitações: não é capaz de caracterizar as interações mecânicas entre diferentes heterogeneidades do RVE e, devido à forte restrição de deslocamentos, tende a sobrestimar a rigidez do material (Molina, 2007; Speirs, 2007).

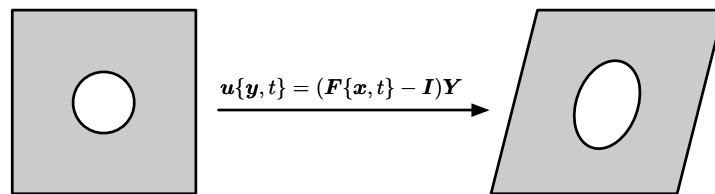


Figura 3.3: Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira de *Taylor*.

### 3.4.2 Condição de fronteira linear

A condição de fronteira linear assume que os deslocamentos na fronteira do RVE são lineares em  $\mathbf{Y}$ ,

$$\mathbf{u}\{\mathbf{y}, t\} = (\mathbf{F}\{\mathbf{x}, t\} - \mathbf{I})\mathbf{Y}, \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.38)$$

Isto significa que o campo de flutuação dos deslocamentos é nulo na fronteira

$$\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.39)$$

De acordo com a definição de flutuação de deslocamentos, a condição de fronteira linear verifica automaticamente a equação (3.10). Assim sendo, é possível definir o conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicas cinematicamente admissíveis na condição de fronteira linear:

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{\text{Lin.}} \equiv \{\tilde{\mathbf{u}}, \text{suficientemente regular} \mid \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{Y}, t\} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{Y} \in \partial\Omega_\mu\}. \quad (3.40)$$

Note-se que a primeira expressão da aplicação do princípio de *Hill-Mandel*, equação (3.32a), é também satisfeita. Por outro lado, a relação (3.32b) apenas é verificada na ausência de forças de volume e acelerações. Contudo, a deformação de um sólido pode ser analisada como um problema *Quasi-Estático*, anulando-se portanto os termos de inércia. Encontra-se na Figura 3.4 uma representação do modo de deformação genérico de um RVE sujeito a condição de fronteira linear.

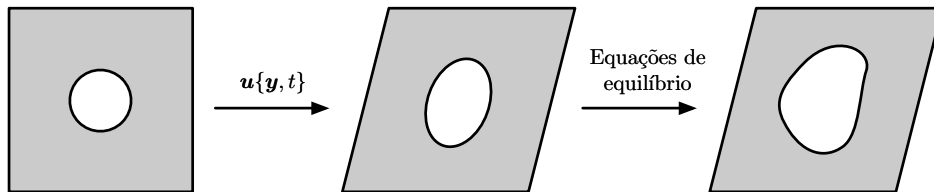


Figura 3.4: Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira linear.

### 3.4.3 Condição de fronteira periódica

A condição de fronteira periódica trata-se de uma das mais utilizadas na comunidade científica, uma vez que apresenta uma excelente capacidade de reproduzir o comportamento de materiais que apresentem uma microestrutura periódica (ou quase-periódica). Repare-se no entanto que, embora a distribuição da microestrutura apresente um padrão, não é necessário que o RVE possua heterogeneidades com distribuição periódicas.

Esta condição de fronteira estabelece que a fronteira que define os limites do RVE pode ser dividida em  $d$  grupos iguais tais que,

$$\partial\Omega_\mu = (\Gamma_i^- \cup \Gamma_i^+) . \quad (3.41)$$

Isto significa que cada ponto da parte positiva  $\mathbf{y}^+ \in \Gamma_i^+$  tem o seu par na parte negativa  $\mathbf{y}^- \in \Gamma_i^-$ . Além disso, é necessário garantir que o vetor normal unitário a  $\Gamma_i^+$  e  $\Gamma_i^-$  nos pontos  $\mathbf{y}^+$  e  $\mathbf{y}^-$ , respetivamente, satisfaz a condição

$$\mathbf{N}^+ = -\mathbf{N}^- . \quad (3.42)$$

Na Figura 3.5 encontra-se uma representação esquemática do modo de deformação de um RVE quando assumida a condição de fronteira periódica, que ilustra a condição de simetria descrita.

Considerando a expressão (3.10), que define o *conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringido*, e com base nas condições introduzidas acima, tem-se que

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA &\equiv \sum_{i=1}^d \int_{\partial\Omega_{\mu,i}} \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}_i\{\mathbf{Y}\} \, dA_i \\ &\equiv \sum_{i=1}^d \left[ \int_{\Gamma_i^+} \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^+, t\} \otimes \mathbf{N}_i^+\{\mathbf{Y}^+\} \, d\Gamma_i^+ \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Gamma_i^-} \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^-, t\} \otimes \mathbf{N}_i^-\{\mathbf{Y}^-\} \, d\Gamma_i^- \right] \\ &= \mathbf{0} . \end{aligned} \quad (3.43)$$

Tendo em conta a relação entre os vetores normais unitários dada pela relação (3.42), a expressão anterior resulta

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA &\equiv \sum_{i=1}^d \left[ \int_{\Gamma_i^+} \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^+, t\} \otimes \mathbf{N}_i^+\{\mathbf{Y}^+\} \, d\Gamma_i^+ \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Gamma_i^+} \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^+, t\} \otimes \mathbf{N}_i^+\{\mathbf{Y}^+\} \, d\Gamma_i^+ \right] \\ &= \mathbf{0} . \end{aligned} \quad (3.44)$$

Logo, pode-se concluir que só é verificada a condição indicada caso a flutuação de deslocamentos seja igual na parte positiva e negativa da fronteira:

$$\tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^+, t\} = \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^-, t\} . \quad (3.45)$$

É possível então definir o *conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis* na condição de fronteira periódica:

$$\tilde{\mathcal{X}}_\mu^{\text{Per.}} \equiv \left\{ \tilde{\mathbf{u}}, \text{suficientemente regular} \mid \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^+, t\} = \tilde{\mathbf{u}}_i\{\mathbf{y}^-, t\} \quad \forall \text{ par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \right\} . \quad (3.46)$$

Tal como na condição de fronteira linear, a condição de *Hill-Mandel* inerente às forças de volume, equação (3.32b), apenas é verificada na ausência de forças de volume e acelerações. A equação (3.32a) apenas é satisfeita caso o campo de trações seja anti-periódico, ou seja,

$$\bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{Y}^+, t\} = -\bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{Y}^-, t\}. \quad (3.47)$$

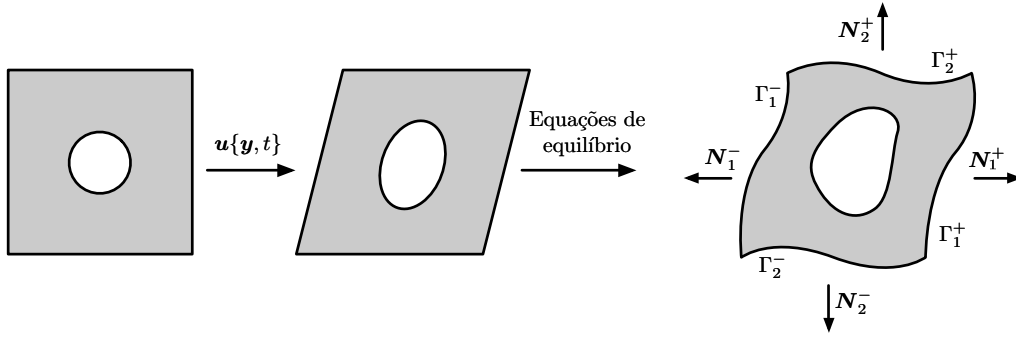


Figura 3.5: Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de fronteira periódica.

### 3.4.4 Tração uniforme na fronteira

A condição de tração uniforme na fronteira é baseada no conceito de *conjunto de flutuações de deslocamentos microscópicos cinematicamente admissíveis minimamente restringido*:

$$\tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Trac.}} = \tilde{\mathcal{H}}_\mu \equiv \left\{ \tilde{\mathbf{u}}, \text{suficientemente regular} \mid \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA = \mathbf{0} \right\}. \quad (3.48)$$

Trata-se portanto da condição de fronteira que menos restringe a cinemática do RVE. Tal como nos casos anteriores, a equação (3.32b) apenas é verificada na ausência de forças de volume e acelerações. Da condição (3.32a) conclui-se que a tração ao longo da fronteira do RVE é uniforme e igual à tração da tensão homogeneizada:

$$\mathbf{P}\{\mathbf{y}, t\} \mathbf{n}\{\mathbf{y}, t\} = \mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} \mathbf{n}\{\mathbf{y}, t\}. \quad (3.49)$$

Na Figura 3.6 encontra-se uma representação da deformação de um RVE quando assumida a condição de tração uniforme na fronteira.

As condições de fronteira introduzidas podem ser ordenadas hierarquicamente em função do grau de restrição ao campo de flutuação de deslocamentos. Desta forma tem-se que

$$\tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Trac.}} \supset \tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Per.}} \supset \tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Lin.}} \supset \tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Taylor}}. \quad (3.50)$$

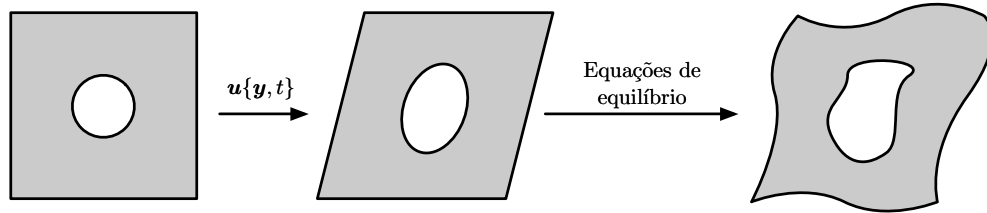


Figura 3.6: Representação esquemática da deformação do RVE quando assumida a condição de tração uniforme na fronteira.

Esta relação é importante na análise de simulações com diferentes condições de fronteira, na medida em que a restrição de menor grau do RVE constitui o inferior do comportamento do material e vice-versa.

### 3.5 Aproximação numérica

Até ao momento foram introduzidos os conceitos teóricos inerentes à formulação do problema de fronteira microscópico. Nesta secção é descrita a estratégia de resolução numérica do problema, utilizando-se como ferramenta numérica o *Método dos Elementos Finitos*. No entanto, é preciso incorporar na sua formulação numérica as várias restrições associadas ao problema microscópico. Uma possibilidade é a incorporação das restrições no sistema de equações global através dos *Multiplicadores de Lagrange* (Miehe, 2003). Porém, é utilizado um método mais recente, nomeadamente o método da *Condensação*, que consiste na eliminação de linhas e colunas do sistema de equações global associadas a graus de liberdade prescritos. Comparando os dois métodos, o método da *condensação* resulta num sistema de equações mais pequeno e, desta forma, mais eficiente do ponto de vista computacional (Reis, 2014).

O programa de elementos finitos utilizado é o **MSP** (*Microscale Problem*), desenvolvido por Reis (2014), e resolve o problema à micro-escala na hipótese de grandes deformações. O principal *'input'* é o gradiente de deformação macroscópico e, como resultado final, além da configuração deformada do RVE e os valores discretos das variáveis do problema (por exemplo as componentes dos tensores de deformação e tensão), é calculado o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

#### 3.5.1 Discretização temporal

Como já foi referido, a estratégia utilizada para a resolução de problemas dependentes do histórico de deformação é a discretização temporal. Do ponto de vista do problema microscópico, a estratégia incremental passa pela discretização do gradiente de deformação imposto ao RVE num conjunto finito de incrementos,

sendo necessário resolver em cada incremento o problema de equilíbrio microscópico.

Considere-se um incremento genérico  $(n + 1)$ , no qual é prescrito o gradiente de deformação microscópico,  $\mathbf{F}_{n+1}\{\mathbf{y}\}$ . Sendo conhecido o conjunto de variáveis internas no instante anterior,  $\beta_n\{\mathbf{y}\}$ , e o algoritmo intrínseco ao modelo constitutivo aplicável ao RVE,  $\hat{\mathbf{P}}$ , o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* microscópico atualizado é dado por

$$\mathbf{P}_{n+1}\{\mathbf{y}\} = \hat{\mathbf{P}}\{\mathbf{F}_{n+1}\{\mathbf{y}\}, \beta_n\{\mathbf{y}\}\} . \quad (3.51)$$

De acordo com o conceito de homogeneização, o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado vem

$$\mathbf{P}_{n+1}\{\mathbf{x}\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \hat{\mathbf{P}}\{\mathbf{F}_{n+1}\{\mathbf{y}\}, \beta_n\{\mathbf{y}\}\} dV , \quad (3.52)$$

e considerando a definição de gradiente de deformação tem-se que

$$\mathbf{P}_{n+1}\{\mathbf{x}\} \equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \hat{\mathbf{P}}\{\mathbf{I} + \nabla_p \mathbf{u}_{n+1}\{\mathbf{y}\}, \beta_n\{\mathbf{y}\}\} dV . \quad (3.53)$$

Aplicando o operador gradiente material à expressão (3.7), que define o campo de deslocamentos com base na sua decomposição na componente linear e de flutuação de deslocamentos, conclui-se que

$$\mathbf{P}_{n+1}\{\mathbf{x}\} \equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \hat{\mathbf{P}}\{\mathbf{F}_{n+1}\{\mathbf{x}\} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}\{\mathbf{y}\}, \beta_n\{\mathbf{y}\}\} dV . \quad (3.54)$$

Assim sendo, a equação de equilíbrio do problema microscópico na versão incremental, considerando um RVE com vazios sem qualquer tipo de pressão interna, resulta:

$$\int_{\Omega_\mu} \hat{\mathbf{P}}\{\mathbf{F}_{n+1}\{\mathbf{x}\} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}\{\mathbf{y}\}, \beta_n\{\mathbf{y}\}\} : \nabla \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu . \quad (3.55)$$

### 3.5.2 Discretização espacial

Um dos conceitos fundamentais do *Método dos Elementos Finitos* é a discretização espacial do domínio do problema num conjunto finito de sub-domínios elementares, tendo já sido introduzidos na Secção 2.6.2 os vários conceitos inerentes à sua implementação. Em termos matemáticos, a discretização espacial caracteriza-se pela seguinte substituição de conjuntos funcionais:

$$\begin{aligned} \Omega_\mu &\longrightarrow \Omega_\mu^d , \\ \mathcal{V}_\mu &\longrightarrow \mathcal{V}_\mu^d , \end{aligned} \quad (3.56)$$

onde o índice  $(\cdot)^d$  denota a entidade discretizada. Note-se que o domínio discretizado  $\Omega_\mu^d$  é composto pela assemblagem dos domínios elementares dos elementos finitos. Assim, a versão discretizada da expressão (3.55) vem

$$\int_{\Omega_\mu^d} \hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1} \{ \mathbf{x} \} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \}, \beta_n \{ \mathbf{y} \} \} \mathbf{G}^g \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu^d, \quad (3.57)$$

podendo ser convenientemente rearranjada na forma

$$\left[ \int_{\Omega_\mu^d} (\mathbf{G}^g)^T \hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1} \{ \mathbf{x} \} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \}, \beta_n \{ \mathbf{y} \} \} \, dV \right]^T \cdot \boldsymbol{\eta} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu^d. \quad (3.58)$$

A matriz  $\mathbf{G}^g$  é o operador gradiente global aplicado a um domínio discreto, sendo constituída pelas derivadas das funções de forma correspondentes ao tipo de elemento utilizado. Uma vez que a expressão anterior tem que ser verificada para qualquer vetor de deslocamentos virtuais admissíveis, conclui-se que:

$$\int_{\Omega_\mu^d} (\mathbf{G}^g)^T \hat{\mathbf{P}} \{ \mathbf{F}_{n+1} \{ \mathbf{x} \} + \nabla_p \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \}, \beta_n \{ \mathbf{y} \} \} \, dV = 0. \quad (3.59)$$

A expressão anterior representa o equilíbrio de forças internas no RVE, podendo ser escrita como

$$\mathbf{f}^{\text{int}} \{ \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \} = \mathbf{0}. \quad (3.60)$$

O método utilizado para a resolução da equação de equilíbrio microscópico é o método de *Newton-Raphson*, que tal como já referido é capaz de resolver problemas não lineares com uma taxa de convergência quadrática. Porém, a sua aplicação requer a linearização da equação variacional de equilíbrio microscópico discretizada, que resulta em

$$\mathbf{f}^{\text{int}} \{ \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \}^{(j)} + \mathbf{K}_T \{ \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \}^{(j)} \delta \tilde{\mathbf{u}} \{ \mathbf{y} \}^{(j+1)} = \mathbf{0}, \quad (3.61)$$

onde  $\mathbf{K}_T \{ \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \}^{(j)}$  denota a matriz de rigidez global do RVE. O índice  $(\cdot)^{(j)}$  é referente à iteração genérica  $(j)$  do método de *Newton-Raphson* e  $\delta \tilde{\mathbf{u}}^{(j+1)}$  representa o vetor de flutuação de deslocamentos iterativo.

Uma vez calculado  $\delta \tilde{\mathbf{u}}^{(j+1)}$ , a atualização do campo de flutuação de deslocamentos total na iteração  $(j+1)$  é da forma

$$\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^{(j+1)} \{ \mathbf{y} \} = \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^{(j)} \{ \mathbf{y} \} + \delta \tilde{\mathbf{u}}^{(j+1)} \{ \mathbf{y} \}. \quad (3.62)$$

Em termos de implementação computacional, o vetor global de forças internas  $\mathbf{f}^{\text{int}}$  é obtido por assemblagem dos vetores de forças internas elementares,

$$\mathbf{f}^{\text{int}} \{ \tilde{\mathbf{u}}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \} = \sum_{e=1}^{n_{\text{elem}}} \int_{\Omega_\mu^d} \mathbf{G}^T \mathbf{P}_{n+1} \{ \mathbf{y} \} \, dV, \quad (3.63)$$

tal como a matriz de rigidez global,

$$\mathbf{K}_T \{\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}\{\mathbf{y}\}\} = \mathbf{A} \int_{\Omega_\mu^d} \mathbf{G}^T \mathbf{A} \mathbf{G} \, dV, \quad (3.64)$$

onde o tensor de quarta ordem  $\mathbf{A}$  é o módulo tangente material, obtido pela expressão (2.63).

É importante reparar que a equação (3.61) é genérica, não incluindo portanto nenhuma consideração relativamente ao tipo de condição de fronteira selecionada. Nas secções seguintes são introduzidas as particularidades resultantes da aplicação das condições de fronteira, nomeadamente a condição de fronteira linear, periódica e de tração uniforme na fronteira.<sup>1</sup>

### 3.5.3 Condição de fronteira linear

Recordando o conceito de condição de fronteira linear, tem-se que a flutuação de deslocamentos na fronteira do RVE é nula. Assim sendo, o campo de flutuação de deslocamentos pode ser decomposto em duas componentes distintas:

$$\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} = \begin{Bmatrix} \tilde{\mathbf{u}}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}^b \end{Bmatrix}, \quad (3.65)$$

onde  $i$  denota os graus de liberdade no interior do RVE e  $b$  os graus de liberdade na fronteira. Analogamente, a matriz de rigidez global do RVE também pode ser dividida em sub-matrizes, pelo que a expressão (3.61) pode ser reescrita como:

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{f}^i \\ \mathbf{f}^b \end{Bmatrix}^{(j)} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ii} & \mathbf{k}^{ib} \\ \mathbf{k}^{bi} & \mathbf{k}^{bb} \end{bmatrix}^{(j)} \begin{Bmatrix} \delta \tilde{\mathbf{u}}^i \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^b \end{Bmatrix}^{(j+1)} = \mathbf{0}. \quad (3.66)$$

Como é imposto que a flutuação de deslocamentos é nula na fronteira do RVE, a expressão simplifica-se na seguinte forma:

$$\{\mathbf{f}^i\}^{(j)} + [\mathbf{k}^{ii}]^{(j)} \{\delta \tilde{\mathbf{u}}^i\}^{(j+1)} = \mathbf{0}. \quad (3.67)$$

### 3.5.4 Condição de fronteira periódica

A condição de fronteira periódica impõe que a flutuação de deslocamentos é igual em lados adjacentes. Por conseguinte, o campo de flutuação de deslocamentos pode ser convenientemente dividido em três sub-conjuntos,

$$\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} = \begin{Bmatrix} \tilde{\mathbf{u}}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}^+ \\ \tilde{\mathbf{u}}^- \end{Bmatrix}, \quad (3.68)$$

<sup>1</sup>A condição de fronteira de *Taylor* não requer a resolução da equação (3.61), uma vez que impõe que o conjunto de flutuações de deslocamentos no RVE é nulo.

onde  $\tilde{\mathbf{u}}^+$  e  $\tilde{\mathbf{u}}^-$  denotam a flutuação de deslocamentos dos graus de liberdade na parte positiva e negativa da fronteira do RVE, respetivamente. Com base nesta decomposição, a expressão (3.61) pode ser escrita na forma

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{f}^i \\ \mathbf{f}^+ \\ \mathbf{f}^- \end{Bmatrix}^{(j)} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ii} & \mathbf{k}^{i+} & \mathbf{k}^{i-} \\ \mathbf{k}^{+i} & \mathbf{k}^{++} & \mathbf{k}^{+-} \\ \mathbf{k}^{-i} & \mathbf{k}^{-+} & \mathbf{k}^{--} \end{bmatrix}^{(j)} \begin{Bmatrix} \delta\tilde{\mathbf{u}}^i \\ \delta\tilde{\mathbf{u}}^+ \\ \delta\tilde{\mathbf{u}}^- \end{Bmatrix}^{(j+1)} = \mathbf{0}. \quad (3.69)$$

De acordo com o espaço de flutuações de deslocamentos admissíveis da condição de fronteira periódica, tem-se que

$$\tilde{\mathbf{u}}^+ = \tilde{\mathbf{u}}^-, \quad (3.70)$$

sendo possível simplificar (3.69) em

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{f}^i \\ \mathbf{f}^+ + \mathbf{f}^- \end{Bmatrix}^{(j)} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ii} & \mathbf{k}^{i+} + \mathbf{k}^{i-} \\ \mathbf{k}^{+i} + \mathbf{k}^{-i} & \mathbf{k}^{++} + \mathbf{k}^{+-} + \mathbf{k}^{--} \end{bmatrix}^{(j)} \begin{Bmatrix} \delta\tilde{\mathbf{u}}^i \\ \delta\tilde{\mathbf{u}}^+ \end{Bmatrix}^{(j+1)} = \mathbf{0}. \quad (3.71)$$

De modo a evitar movimentos de corpo rígido, é necessário adicionar restrições, sendo que, no caso particular de um RVE 2D com geometria quadrangular (ou cúbica no caso 3D), uma solução possível passa pela fixação completa dos vértices do RVE. Note-se que esta manipulação é válida nas hipóteses da condição de fronteira periódica.

### 3.5.5 Tração uniforme na fronteira

De acordo com a condição de tração uniforme na fronteira, a equação que define as restrições cinemáticas, bem como o conjunto de flutuações dos deslocamentos, é dada por

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{N}\{\mathbf{Y}\} \, dA = \mathbf{0}. \quad (3.72)$$

De forma a incorporar a expressão anterior no sistema de equações global microscópico é necessário discretizar o integral, resultando

$$\mathbf{C} \tilde{\mathbf{u}}^b = \mathbf{0}, \quad (3.73)$$

onde a matriz  $\mathbf{C}$  é a *matriz de restrição* dos graus de liberdade ao longo da fronteira do RVE. Em problemas tri-dimensionais, a matriz  $\mathbf{C}$  assume a forma

$$\mathbf{C} = \left[ \begin{array}{ccc|ccc} \int N_1 \mathbf{N}_1 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_1 dA & 0 & 0 \\ 0 & \int N_1 \mathbf{N}_1 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_1 dA & 0 \\ 0 & 0 & \int N_1 \mathbf{N}_1 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_1 dA \\ \int N_1 \mathbf{N}_2 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_2 dA & 0 & 0 \\ \int N_1 \mathbf{N}_3 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_3 dA & 0 & 0 \\ 0 & \int N_1 \mathbf{N}_2 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_2 dA & 0 \\ 0 & \int N_1 \mathbf{N}_3 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_3 dA & 0 \\ 0 & 0 & \int N_1 \mathbf{N}_2 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_2 dA \\ 0 & 0 & \int N_1 \mathbf{N}_3 dA & 0 & 0 & \int N_n \mathbf{N}_3 dA \end{array} \right] \quad (3.74)$$

e em problemas bi-dimensionais:

$$\mathbf{C} = \left[ \begin{array}{cc|cc|cc} \int N_1 \mathbf{N}_1 dA & 0 & \int N_2 \mathbf{N}_1 dA & 0 & \int N_n \mathbf{N}_1 dA & 0 \\ 0 & \int N_1 \mathbf{N}_2 dA & 0 & \int N_2 \mathbf{N}_1 dA & 0 & \int N_n \mathbf{N}_2 dA \\ \int N_1 \mathbf{N}_2 dA & 0 & \int N_2 \mathbf{N}_2 dA & 0 & \int N_n \mathbf{N}_2 dA & 0 \\ 0 & \int N_1 \mathbf{N}_1 dA & 0 & \int N_2 \mathbf{N}_1 dA & 0 & \int N_n \mathbf{N}_1 dA \end{array} \right] \quad (3.75)$$

Nas expressões anteriores  $N_i$  denota o valor da função de forma  $i$  e  $\mathbf{N}_i$  a direção  $i$  vetor normal exterior à fronteira do RVE,  $\partial\Omega_\mu$ .

No contexto do *Método dos Elementos Finitos*, a matriz de restrição global é obtida através da assemblagem das matrizes elementares  $\mathbf{C}^e$ ,

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^{n_{\text{elem}}} \mathbf{C}^e. \quad (3.76)$$

Até ao momento, o campo de flutuação de deslocamentos foi dividido em duas componentes: a primeira inerente aos nós no interior do RVE,  $\tilde{\mathbf{u}}^i$ , e a segunda relativa aos nós da fronteira,  $\tilde{\mathbf{u}}^b$ . No entanto, é ainda necessário decompor  $\tilde{\mathbf{u}}^b$  na forma

$$\tilde{\mathbf{u}}^b = \begin{Bmatrix} \tilde{\mathbf{u}}^f \\ \tilde{\mathbf{u}}^d \\ \tilde{\mathbf{u}}^p \end{Bmatrix}, \quad (3.77)$$

onde os índices  $f$ ,  $d$  e  $p$  dizem respeito aos nós da fronteira *livres*, *dependentes* e *prescritos*, respetivamente. Esta decomposição também é estendida à matriz de restrição,

$$\mathbf{C} = \left[ \mathbf{C}^f \mid \mathbf{C}^d \mid \mathbf{C}^p \right], \quad (3.78)$$

podendo-se escrever (3.73) na forma

$$\left[ \mathbf{C}^f \mid \mathbf{C}^d \mid \mathbf{C}^p \right] \begin{Bmatrix} \tilde{\mathbf{u}}^f \\ \tilde{\mathbf{u}}^d \\ \tilde{\mathbf{u}}^p \end{Bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (3.79)$$

De modo a evitar movimentos de corpo rígido é necessário prescrever os deslocamentos de alguns graus de liberdade.<sup>2</sup> Impondo-se que

$$\tilde{\mathbf{u}}^p = \mathbf{0}, \quad (3.80)$$

a expressão (3.79) simplifica-se na forma

$$\left[ \mathbf{C}^f \mid \mathbf{C}^d \right] \begin{Bmatrix} \tilde{\mathbf{u}}^f \\ \tilde{\mathbf{u}}^d \end{Bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (3.81)$$

A última expressão permite introduzir o conceito de graus de liberdade dependentes:

$$\tilde{\mathbf{u}}^d = \mathbf{R} \tilde{\mathbf{u}}^f, \quad (3.82)$$

onde

$$\mathbf{R} = \left[ \mathbf{C}^d \right]^{-1} \mathbf{C}^f. \quad (3.83)$$

Note-se que os graus de liberdade dependentes devem ser selecionados de forma a garantir que a matriz  $\mathbf{C}^d$  é invertível. Caso o RVE seja um quadrado, é possível considerar como dependentes os graus de liberdade dos cantos da aresta superior.

Introduzindo as diferentes relações previamente analisadas na equação (3.61) tem-se que

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{f}^i \\ \mathbf{f}^f \\ \mathbf{f}^d \end{Bmatrix}^{(j)} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ii} & \mathbf{k}^{if} & \mathbf{k}^{id} \\ \mathbf{k}^{fi} & \mathbf{k}^{ff} & \mathbf{k}^{fd} \\ \mathbf{k}^{di} & \mathbf{k}^{df} & \mathbf{k}^{dd} \end{bmatrix}^{(j)} \begin{Bmatrix} \delta \tilde{\mathbf{u}}^i \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^f \\ \mathbf{R} \delta \tilde{\mathbf{u}}^f \end{Bmatrix}^{(j+1)} = \mathbf{0}, \quad (3.84)$$

que após condensação, resulta no seguinte sistema de equações:

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{f}^i \\ \mathbf{f}^f + \mathbf{R}^T \mathbf{f}^d \end{Bmatrix}^{(j)} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ii} & \mathbf{k}^{if} + \mathbf{k}^{id} \mathbf{R} \\ \mathbf{k}^{fi} \mathbf{R}^T \mathbf{k}^{di} & \mathbf{k}^{ff} \mathbf{k}^{fd} \mathbf{R} + \mathbf{R}^T \mathbf{k}^{df} + \mathbf{R}^T \mathbf{k}^{dd} \mathbf{R} \end{bmatrix}^{(j)} \begin{Bmatrix} \delta \tilde{\mathbf{u}}^i \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^f \end{Bmatrix}^{(j+1)} = \mathbf{0}, \quad (3.85)$$

<sup>2</sup>Três graus de liberdade em problemas bi-dimensionais e seis graus de liberdade em problemas tri-dimensionais.

### 3.5.6 Discretização do tensor das tensões homogeneizado

Uma vez estabelecido o equilíbrio microscópico, para completar o modelo multi-escala é necessário calcular o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado, para assim caracterizar o estado tensorial no ponto infinitesimal macroscópico. Existem duas alternativas possíveis, sendo que na primeira o tensor homogeneizado é calculado a partir da média volumétrica do tensor microscópico ao longo da configuração não deformada do RVE. A segunda alternativa, mais simples e eficiente do ponto de vista computacional, é o cálculo através da relação (3.21). Esta expressão pode ser simplificada, uma vez que nas condições de fronteira linear, periódica e de tração uniforme na fronteira, a aplicação do princípio de *Hill-Mandel* impõe que  $\bar{\mathbf{b}}_\mu = \mathbf{0}$ , resultando

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{Y} \, dA. \quad (3.86)$$

No entanto, no contexto do *Método dos Elementos Finitos*, é necessário adaptar a expressão anterior. É demonstrado em Miehe (2003) que

$$\bar{\mathbf{t}}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \, dA = \mathbf{t}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \, da, \quad (3.87)$$

onde  $\mathbf{t}_\mu$  denota a tração a atuar na fronteira do RVE na configuração deformada. Assim sendo, o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado pode ser calculado a partir de

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}, t\} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{t}_\mu\{\mathbf{y}, t\} \otimes \mathbf{Y} \, da. \quad (3.88)$$

A implementação numérica da expressão anterior é dada por

$$\mathbf{P}\{\mathbf{x}\} = \frac{1}{V_\mu} \mathbb{D}_b \mathbb{F}_b^{\text{int}}, \quad (3.89)$$

onde  $\mathbb{D}_b$  é a matriz de coordenadas de referência de todos os  $n_b$  nós da fronteira do RVE,

$$\mathbb{D}_b = \begin{bmatrix} \mathbb{D}_1 & \mathbb{D}_2 & \cdots & \mathbb{D}_{n_b} \end{bmatrix}, \quad (3.90)$$

sendo que a sub-matriz genérica  $\mathbb{D}_i$ , correspondente a cada nó da fronteira, é definida como

$$\mathbb{D}_{n_b} = \begin{bmatrix} Y_1 & 0 \\ 0 & Y_1 \\ Y_2 & 0 \\ 0 & Y_2 \end{bmatrix}_i. \quad (3.91)$$

O termo  $\mathbb{F}_b^{\text{int}}$  é o vetor das forças nodais internas na fronteira do RVE.

### 3.5.7 Pseudo-código do programa *MSP*

Em conclusão da apresentação dos conceitos inerentes a modelos multi-escala, encontra-se na Tabela 3.1 a estrutura global do programa utilizado (*MSP*), em formato de pseudo-código. O programa encontra-se totalmente implementado em *Fortran 90*<sup>®</sup>, e permite a resolução de problemas de fronteira à micro-escala, na hipótese de grandes deformações, calculando o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

## 3.6 Conclusões

Neste capítulo são introduzidos os conceitos essenciais relativos a modelos multi-escala, desde a formulação do modelo até à sua implementação computacional através do *Método dos Elementos Finitos*.

Tabela 3.1: Algoritmo do programa *MSP*.

- 
1. Leitura do ficheiro de dados com informação relativa a:
    - Malha;
    - Propriedades do material e modelos constitutivos;
    - Tipo de problema: estado plano de tensão, deformação e axissimétrico;
    - Número de incrementos ( $n_{inc}$ );
    - Condição de fronteira;
    - Gradiente de deformação macroscópico.
  2. Identificação dos nós interiores, nas arestas e vértices do RVE:
 

```
IF UNIFORM TRACTION CONDITION SELECTED THEN
  Cálculo da matriz  $\mathbf{C}$ ;
ELSE
  Ir para 3.
ENDIF
```
  3. Definição do gradiente de deformação incremental

$$\Delta\lambda = \frac{1}{n_{inc}} \quad ; \quad \lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda \quad ; \quad \mathbf{F}_{n+1} = \Delta\mathbf{F}\mathbf{F}_n = \lambda_{n+1}\sqrt{\mathbf{F}_{prescrito}}$$

4. Cálculo do deslocamento linear incremental:

$$\Delta\mathbf{u}^*\{\mathbf{y}\}_{n+1} = \frac{1}{n_{inc}} (\mathbf{F}\{\mathbf{x}\} - \mathbf{I}) \mathbf{Y}$$

5. Inicialização do vetor de flutuação de deslocamentos,  $\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}\} = \mathbf{0}$ ;
6. Ciclo incremental: enquanto  $n \leq n_{inc}$ , atualizar incremento  $n = n + 1$  e:
  - (a) Atualizar o vetor de deslocamentos:

$$\mathbf{u}\{\mathbf{y}\} = \Delta\mathbf{u}_{n+1}^*\{\mathbf{y}\} + \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}\}$$

- (b) Cálculo do vetor de forças internas;
- (c) Verificação da convergência:
 

```
IF CONV<TOL THEN
  Cálculo e armazenamento do tensor de tensões macroscópico;
ELSE
  Ir para 6.
ENDIF
```
- (d) Resolução do sistema de equações:
  - Condição de fronteira linear: Equação (3.67);
  - Condição de fronteira periódica: Equação (3.71);
  - Condição de tração uniforme na fronteira: Equação (3.85).
- (e) Atualização dos deslocamentos

$$\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}\} = \tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}\} + \delta\tilde{\mathbf{u}}\{\mathbf{y}\}$$

voltar para (a).

---

## Capítulo 4

# Fratura dúctil a várias escalas

---

Em diversas aplicações de engenharia, e principalmente naquelas em que os componentes estruturais e mecânicos são sujeitos a condições de serviço desfavoráveis, é crucial conhecer o tempo de vida útil dos componentes. De igual forma, também nas operações de conformação plástica é importante a capacidade de prever o estado último de colapso dos componentes, dada a severidade do processo do ponto de vista metalúrgico. Procurando evitar a inconveniência de ensaiar de forma sistemática modelos reais em laboratório, desde a década de 50 que engenheiros e cientistas investigam os mecanismos de iniciação e evolução do dano no material, responsáveis pelo colapso dos componentes. Surgiu então um ramo da *Mecânica dos Meios Contínuos* designado por *Mecânica do Dano Contínuo*, que tem como objetivo a formulação de modelos constitutivos contínuos capazes de prever a evolução da deterioração interna do material. Embora tratando-se de um fenômeno microscópico, o efeito do dano à macro-escala é modelado através da introdução de uma variável de dano (e respetiva lei de evolução) no modelo constitutivo contínuo do material. A *Mecânica do Dano Contínuo* está diretamente relacionada com *Mecânica da Fratura*, visto que ambas estudam o comportamento efetivo de sólidos danificados, com o objetivo de avaliar a sua segurança e capacidade de serviço. No entanto, as abordagens das duas disciplinas são distintas. Na *Mecânica do Dano Contínuo*, os defeitos existem à micro-escala, mas à macro-escala o material é modelado como um meio contínuo. Na *Mecânica da Fratura* surgem descontinuidades no domínio macroscópico, relacionadas com a presença de fendas.

Neste capítulo são introduzidos os aspetos fenomenológicos da fratura dúctil, nomeadamente os mecanismos microscópicos envolvidos e as respetivas evidências macroscópicas. São depois apresentados alguns dos modelos existentes na literatura, especialmente aqueles que incorporam o efeito da geometria dos vazios existentes na microestrutura dos materiais, associados à presença de dano. No final é ainda realizado um pequeno estudo paramétrico das curvas de cedência dos vários modelos apresentados.

## 4.1 Aspetos fenomenológicos

A fratura dúctil é o resultado da nucleação, crescimento e coalescência de vazios na microestrutura do material (Benzerga e Leblond, 2010). É através da nucleação que surgem vazios, tratando-se de um mecanismo intimamente relacionado com a existência de inclusões e partículas de fase diferente. Com a aplicação contínua de deformação plástica a nucleação mantém-se, acompanhada pelo crescimento dos vazios existentes. Num determinado estágio de deformação plástica acumulada, os vazios mais próximos entre si começam a interagir, desencadeando-se o processo de coalescência que, eventualmente, levará à formação de uma macro-fenda e conseqüente rotura por fratura dúctil. Nesta secção são indicadas algumas evidências dos mecanismos microscópicos acima referidos, bem como o seu impacto na resposta macroscópica do componente.

É importante referir que, embora as etapas de evolução do dano sejam bem definidas e aparentemente independentes entre si, na realidade, os vários mecanismos encontram-se interligados e relacionados com outros fatores adicionais, tais como a distribuição de heterogeneidades na microestrutura, geometria dos vazios, estado de tensão, taxa de deformação, encruamento do material e temperatura (Horstemeyer et al., 2003).

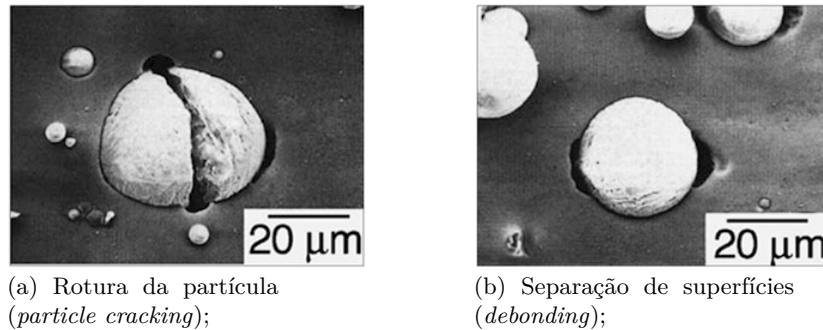
### 4.1.1 Mecanismos microscópicos

Com o desenvolvimento de técnicas de microscopia mais avançadas, tais como a microscopia de varrimento e a tomografia computadorizada, foi possível aos investigadores observarem de perto os vários mecanismos envolvidos no processo de evolução do dano dúctil do material. Nos tópicos seguintes são indicadas algumas observações microscópicas dos fenómenos envolvidos.

#### Nucleação

Como já referido, a nucleação está diretamente associada à presença de partículas de segunda fase e inclusões, localizadas tanto no interior como nos limites dos grãos. Durante o processo de deformação plástica, o mecanismo de nucleação pode ocorrer através da rotura (*cracking*) das partículas ou inclusões (Figura 4.1a) ou pela separação (*debonding*) de superfícies na interface entre as partículas e a matriz (Figura 4.1b).

O mecanismo de nucleação é um processo influenciado por vários fatores, entre os quais: a forma e dimensões das partículas/inclusões, as propriedades mecânicas da matriz e a direção de carregamento (Benzerga e Leblond, 2010). Na Tabela 4.1 são indicados alguns parâmetros, juntamente com o seu efeito no tipo de mecanismo de nucleação.



(a) Rotura da partícula  
(*particle cracking*);

(b) Separação de superfícies  
(*debonding*);

Figura 4.1: Fenômenos de nucleação observados num alumínio 6061 reforçado com partículas de óxido de alumínio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), solicitado na direção horizontal (Kanetake et al., 1995).

Tabela 4.1: Parâmetros preponderantes no mecanismo de nucleação e respectivas tendências com o aumento do respectivo parâmetro (Benzerga e Leblond, 2010).

Parâmetro	Tendência	
	<i>Debonding</i>	<i>Cracking</i>
Resistência da matriz	↘	↗
Coefficiente de encruamento da matriz	↘	↗
Elongação da partícula	↘	↗
Rigidez da partícula	↗	↘
Carga na direção axial	↘	↗
Carga na direção transversal	↗	↘
Parâmetro de <i>Lode</i>	↗	↘

## Crescimento

O crescimento de vazios é um processo contínuo e estável, controlado essencialmente pela deformação plástica aplicada. Os vazios originados por *particle cracking* são propícios a abrir e a tornarem-se arredondados com o aumento da deformação, enquanto que os vazios gerados por *debonding* (inicialmente arredondados) tendem a alongar-se ao longo da direção principal da carga aplicada. Na Figura 4.2 é apresentada uma reconstrução tridimensional de uma população de cavidades em dois estágios de deformação diferentes, sendo evidente o crescimento dos vazios existentes (Babout et al., 2001).<sup>1</sup>

<sup>1</sup>É importante notar que na passagem entre os dois estágios de deformação, além do crescimento dos vazios, houveram também fenômenos de nucleação e coalescência, visto que estes mecanismos não são independentes entre si.

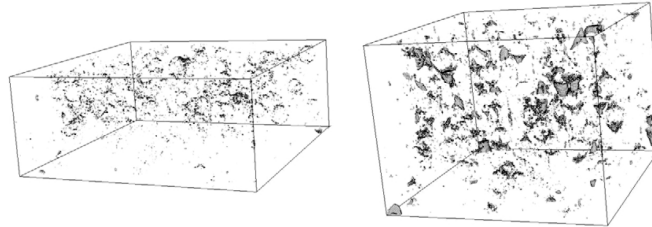
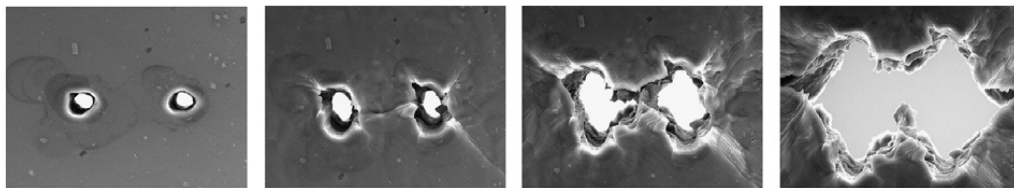


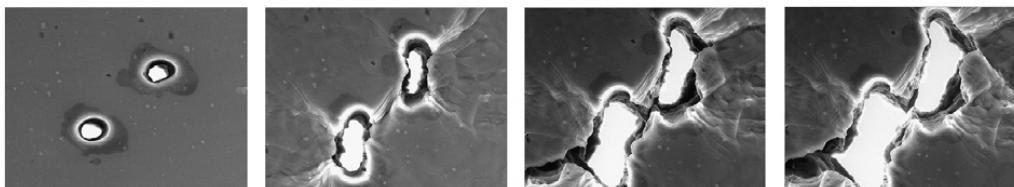
Figura 4.2: Reconstrução tridimensional da população de cavidades em dois estágios de deformação distintos, com direção de carregamento vertical (Babout et al., 2001).

### Coalescência

A coalescência é um fenômeno súbito, que ocorre quando os vazios atingem uma determinada dimensão e se ligam entre si, formando uma micro-fenda que se propaga ao longo da microestrutura. Este processo terminal pode desenrolar-se sob vários modos, dependendo dos fatores microestruturais, condições de carregamento e propriedades de escoamento plástico da matriz (Benzerga e Leblond, 2010). O modo de coalescência mais observado corresponde à coalescência por estrição interna localizada (Figura 4.3a), onde a ligação entre dois vazios adjacentes vai diminuindo (por estrição) até que os vazios se unam. Outro modo de coalescência, também normalmente observado, é a formação de bandas de corte microscópicas localizadas (Figura 4.3b). Neste modo a posição relativa dos vazios é um fator importante, caracterizando a direção da banda de corte.



(a) Coalescência por estrição;



(b) Coalescência por corte localizado;

Figura 4.3: Modelos para os modos de coalescência, obtidos através de chapas perfuradas a *laser* e solicitadas na direção vertical (Weck e Wilkinson, 2008).

É ainda documentado em (Benzerga, 2000) outro modo de coalescência designado por ‘*necklace coalescence*’, caracterizado pela formação de colunas de vazios. Este modo é observado em *clusters* alongados de vazios e o fenómeno ocorre numa direção paralela à direção de aplicação da carga.

Este fenómeno é um assunto discutido atualmente na comunidade científica, devido acima de tudo à influência que o tipo de carregamento tem no modo de coalescência. Na recente publicação Wong e Guo (2015) é analisado este tema do ponto de vista energético, considerando-se múltiplos estados de tensão.

#### 4.1.2 Evidências macroscópicas

Dos mecanismos descritos acima, apenas o processo de coalescência provoca alterações significativas no comportamento do componente (Benzerga e Leblond, 2010). Do ponto de vista geral dos vários estágios de evolução do dano, a principal evidência macroscópica é a formação de uma fenda macroscópica, originada pela coalescência dos vazios de maiores dimensões, que conduz à rotura final por fratura dúctil.

Na Figura 4.4 é representado de forma esquemática os mecanismos microscópicos de nucleação, crescimento e coalescência de vazios, juntamente com o seu efeito em termos médios na curva de resposta de um provete axisimétrico entalhado. São também indicadas algumas observações obtidas por Benzerga (2000), que demonstram a evolução do dano numa secção do provete na região do entalhe. Na fase anterior ao ponto (c) o processo de acumulação de dano desencadeia-se gradualmente pelos mecanismos de nucleação e crescimento de vazios (acompanhados também por alguns eventos isolados de coalescência). A alteração na resposta assinalada pelo ponto (c) corresponde à formação da fenda macroscópica, resultado da coalescência dos vazios de maiores dimensões. A parte final da curva de resposta corresponde à propagação da fenda ao longo do provete, observando-se ainda um ligeiro aumento da inclinação, resultante do avanço da fenda ao longo de bandas de corte. O ponto (f) corresponde à rotura final do provete.

## 4.2 Critérios de cedência

Existem disponíveis na literatura vários modelos matemáticos para os mecanismos introduzidos na secção anterior. Contudo, é necessário acoplar nestes modelos um critério de cedência que reproduza da melhor forma o efeito dos vazios no amaciamento material e respetiva evolução do estado de tensão.

Uma das referências com maior impacto na literatura é o modelo micromecânico de Gurson (1977). Este modelo serviu de base a vários autores (Tvergaard, 1981; Tvergaard e A. Needleman, 1984; Gologanu et al., 1997; Madou e Leblond, 2012a,b, 2013; Madou, Leblond e Morin, 2013; Monchiet et al., 2014), que procuraram melhorar a sua precisão e estender o seu campo de aplicabilidade. A

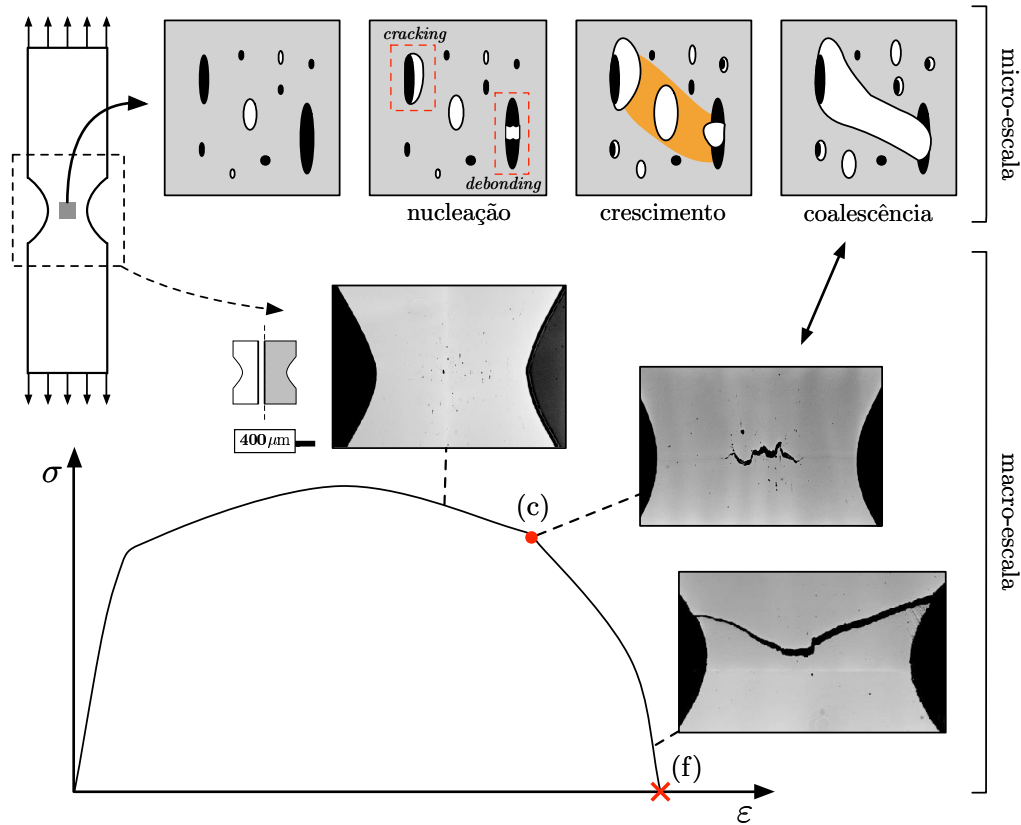


Figura 4.4: Representação esquemática dos mecanismos microscópicos de nucleação, crescimento e coalescência de vazios e a respectiva relação com os aspetos fenomenológicos macroscópicos em provetes axisimétricos entalhados de aço de alta resistência (adaptado de Benzerga, 2000).

estrutura base é geralmente semelhante, invocando-se o princípio da conservação da massa e a hipótese de lei de fluxo plástico associativa.

Alternativamente, recorrendo a métodos de homogeneização avançados, vários autores (Castañeda e Zaidman, 1994; Kailasam, Castañeda e Willis, 1997; Danas e Castañeda, 2009b; Danas e Aravas, 2012) desenvolveram modelos constitutivos para materiais elastoplásticos e viscoplásticos porosos. Estes modelos, comparativamente aos micromecânicos, apresentam uma maior robustez e coerência interna, mas são mais complexos de implementar.

De seguida são apresentados alguns dos critérios de cedência com maior impacto na literatura e que, enquadrados no contexto deste trabalho, incorporam o efeito da geometria dos vazios.

### 4.2.1 Modelo de *Gurson*

*Gurson* (1977) na sua publicação propôs um modelo micromecânico capaz de reproduzir o efeito do dano na deformação de um sólido. O modelo é representativo do estágio de crescimento dos vazios e tem como base os limites superiores da teoria da plasticidade. Na dedução da função de cedência é assumido uma distribuição periódica de vazios esféricos, representados por um RVE com a forma de uma esfera com um vazio esférico concêntrico. Assim sendo, a única variável microestrutural deste modelo é a fração volúmica de vazios,

$$f = \frac{V_\mu^v}{V_\mu}, \quad (4.1)$$

onde  $V_\mu^v$  denota o volume de vazios e  $V_\mu$  o volume total. A matriz é isotrópica e perfeitamente plástica (caracterizada pelo modelo constitutivo de *von Mises*) e o campo de velocidades imposto consiste em duas componentes: um campo de expansão isotrópica e incompressível e um campo linear, correspondente a um campo de deformação uniforme. É imposta ainda a condição de taxa de deformação homogênea na fronteira. A função de cedência é dada por:

$$\Phi_G(\boldsymbol{\sigma}, f) = \left( \frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma_y} \right)^2 + 2f \cosh \left( \frac{3}{2} \frac{p}{\sigma_y} \right) - (1 + f^2). \quad (4.2)$$

Nesta expressão  $p$  é a tensão média (pressão hidrostática),  $\sigma_y$  a tensão de cedência do material e  $\sigma_{\text{eq}}$  é a tensão equivalente de *von Mises*,

$$\sigma_{\text{eq}} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s} : \mathbf{s}}, \quad (4.3)$$

onde  $\mathbf{s}$  denota o tensor das tensões desviadoras.

*Gurson* também estabeleceu, através de uma análise semelhante, a curva de cedência para vazios cilíndricos:

$$\Phi_G(\boldsymbol{\sigma}, f) = \left( \frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma_y} \right)^2 + 2f \cosh \left( \sqrt{3} \frac{p_\gamma}{\sigma_y} \right) - (1 + f^2). \quad (4.4)$$

Neste caso, o material é transversalmente isotrópico e  $p_\gamma$  é a tensão média no plano. Por exemplo, caso o plano  $xy$  seja o plano de isotropia tem-se que

$$p_\gamma = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2}. \quad (4.5)$$

Essencialmente o modelo de *Gurson* introduz o efeito da pressão hidrostática na cedência do material. Este parâmetro é decisivo na evolução do dano do material, uma vez que influencia diretamente a dilatação/contração dos vazios. Note-se ainda que, na condição de não existir vazios,  $f = 0$ , o modelo de *Gurson*

é coincidente com o modelo de *von Mises*. Outro aspeto importante é que no modelo de *Gurson* está implícito o comportamento isotrópico do material, pois é assumido que os vazios permanecem esféricos ao longo do processo de evolução do dano. Embora em solicitações hidrostáticas (elevada triaxilidade) esta hipótese seja consistente com os mecanismos de crescimento de vazios, em solicitações de corte (baixa triaxilidade) o modelo de *Gurson* não é capaz de prever de forma precisa o comportamento do material, uma vez que não é considerada a anisotropia ‘morfológica’ resultante da evolução da forma dos vazios (Danas e Aravas, 2012).

### Evolução da microestrutura

Tal como já referido, a única variável microestrutural do modelo de *Gurson* é a fração volúmica de vazios. A dedução da respetiva lei de evolução baseia-se no princípio da conservação da massa e no pressuposto da deformação volumétrica elástica ser desprezável. A densidade de um material poroso pode-se escrever na forma

$$\rho = \rho_0(1 - f) , \quad (4.6)$$

onde  $\rho_0$  representa a massa volúmica da matriz. Derivando em ordem ao tempo e considerando a matriz incompressível ( $\dot{\rho}_0 = 0$ ) tem-se que

$$\dot{f} = -\frac{\dot{\rho}}{\rho} (1 - f) . \quad (4.7)$$

O princípio da conservação da massa traduz-se na relação

$$\dot{\epsilon}_v = -\frac{\dot{\rho}}{\rho} , \quad (4.8)$$

onde  $\dot{\epsilon}_v$  denota a taxa de deformação volumétrica total. Assumindo que a deformação volumétrica elástica é desprezável, tem-se então que

$$\dot{f} = (1 - f)\dot{\epsilon}_v^p , \quad (4.9)$$

em que  $\dot{\epsilon}_v^p$  representa a componente plástica da taxa de deformação volumétrica. Admitindo que a lei de fluxo plástico é associativa tem-se que

$$\dot{\epsilon} = \dot{\gamma} \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \equiv \dot{\gamma} \left\{ \mathbf{s} + \frac{1}{3} f \sigma_y \sinh \left( \frac{3}{2} \frac{p}{\sigma_y} \right) \mathbf{I} \right\} , \quad (4.10)$$

onde  $\dot{\gamma}$  é a taxa do multiplicador plástico. Assim sendo, a componente volumétrica é dada por

$$\dot{\epsilon}_v^p \equiv \text{tr } \dot{\epsilon} \equiv \dot{\gamma} f \sigma_y \sinh \left( \frac{3}{2} \frac{p}{\sigma_y} \right) . \quad (4.11)$$

A taxa de evolução do dano pode então ser calculada a partir da expressão

$$\dot{f} \equiv \dot{\gamma} (f - f^2) \sigma_y \sinh \left( \frac{3}{2} \frac{p}{\sigma_y} \right). \quad (4.12)$$

Note-se que esta lei de evolução de dano não está associada a qualquer fenómeno dissipativo. Um aspeto importante a ter em atenção é a necessidade de ser definido um valor inicial não nulo para a fração volúmica de vazios. Isto dificulta a definição das propriedades materiais, uma vez que não é fácil definir a porosidade inicial de um material.

#### 4.2.2 Modelo de *Gurson-Tvergaard-Needleman*

Baseando-se em estudos micromecânicos de materiais com vazios esféricos e cilíndricos distribuídos de forma periódica, *Tvergaard* (1981) introduziu os fatores  $q_1$ ,  $q_2$  e  $q_3$  no critério original de *Gurson*, com o intuito de melhorar a sua precisão global. Uma possível interpretação física destes parâmetros é que estes representam o efeito da interação entre os vazios (*Benzerga e Leblond*, 2010). Para a maioria dos materiais dúcteis  $q_1 \approx 1.5$ ,  $q_2 \approx 1$  e  $q_3 = q_1^2$  são valores recomendados (*Chen e Butcher*, 2013). Mais tarde em *Tvergaard e A. Needleman* (1984) é ainda incorporado o efeito da coalescência de vazios, através da modificação da lei de evolução da fração volúmica de vazios. A função de cedência resultante é

$$\Phi_{\text{GTN}}(\boldsymbol{\sigma}, f) = \left( \frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma_y} \right)^2 + 2q_1 f^* \cosh \left( q_2 \frac{3}{2} \frac{p}{\sigma_y} \right) - [1 + q_3 (f^*)^2]. \quad (4.13)$$

Na expressão anterior  $f^*$  representa a fração volúmica de vazios corrigida. A modificação consiste em admitir uma variação da taxa de crescimento da fração volúmica de vazios, quando atingido um determinado valor crítico (Figura 4.5), ou seja:

$$f^*(f) = \begin{cases} f & , f < f_c , \\ f_c + \frac{(f_u^* - f_c)(f - f_c)}{(f_f - f_c)} & , f \geq f_c . \end{cases} \quad (4.14)$$

A constante  $f_u^* = 1/q_1$  consiste no valor de  $f^*$  no momento último da fratura (correspondente à fração volúmica  $f_f$ ) e a fração volúmica  $f_c$  define o momento a partir da qual ocorre coalescência.

#### Efeito da nucleação de vazios

O efeito da nucleação de vazios pode ser incorporado no modelo até agora descrito admitindo a decomposição

$$\dot{f} = \dot{f}_{\text{crescimento}} + \dot{f}_{\text{nucleação}} , \quad (4.15)$$

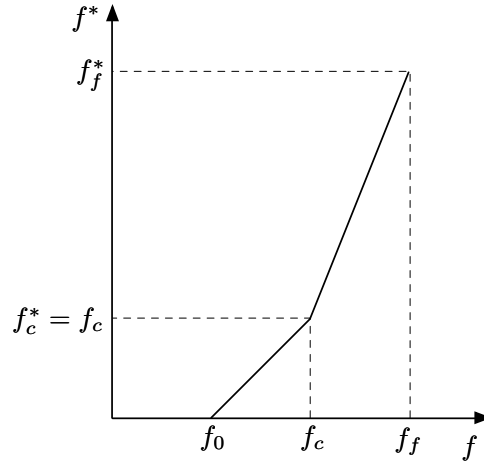


Figura 4.5: Representação do modelo de coalescência introduzido por (Tvergaard e A. Needleman, 1984).

onde o termo  $\dot{f}_{\text{crescimento}}$  representa o crescimento dos vazios, calculado através da expressão (4.12). Existem modelos de nucleação, representada pelo termo  $\dot{f}_{\text{nucleação}}$ , controlados pela tensão ou pela deformação, sendo implementado normalmente em códigos de elementos finitos os modelos controlados pela deformação. Em Chu e A Needleman (1980) é proposto um dos modelos mais utilizados, que consiste em admitir que a deformação necessária à nucleação segue uma distribuição normal, ou seja,

$$\dot{f}_{\text{nucleação}} = \frac{f_n}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\bar{\varepsilon}^P - \varepsilon_N}{s_N} \right)^2 \right] \dot{\varepsilon}^P . \quad (4.16)$$

Na expressão anterior  $f_n$  é a fração volúmica de vazios a nuclear,  $\varepsilon_N$  o valor médio e  $s_N$  o desvio padrão da distribuição normal.

### 4.2.3 Modelo de *Golaganu-Leblond-Deveaux*

O modelo de *Golaganu-Leblond-Deveaux* (GLD) é uma extensão do modelo de *Gurson*, que incorpora a anisotropia resultante da geometria dos vazios (Golaganu et al., 1997). O RVE considerado neste modelo, representado na Figura 4.6, consiste num esferoide,

$$a_1 = a_2 = a \neq a_3 , \quad (4.17)$$

com um vazio da mesma geometria concêntrico no seu interior.

O conjunto de variáveis microestruturais neste modelo é a fração volúmica  $f$ , a proporcionalidade do esferoide,

$$w = \frac{a_3}{a} , \quad (4.18)$$

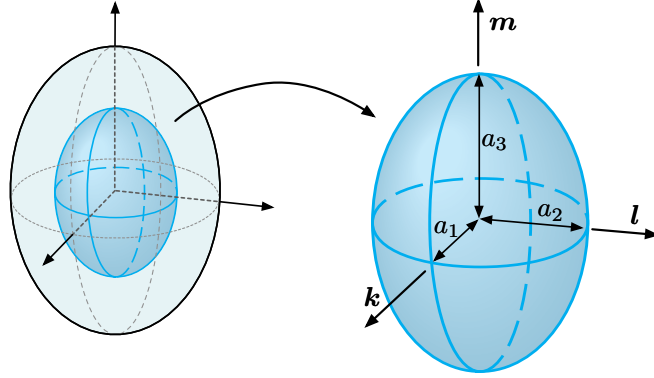


Figura 4.6: Elemento de volume representativo considerado no modelo de Golaganu-Leblond-Deveaux (GLD).

e o versor  $\mathbf{m}$  do eixo principal do esferoide, ou seja:

$$s_\alpha = \{f, w, \mathbf{m}\} . \quad (4.19)$$

Tal como no modelo de *Gurson*, o modelo material da matriz obedece à teoria de fluxo plástico  $J_2$  associativa e o campo de velocidades é constituído por duas componentes. Porém, o campo de velocidades isotrópico é substituído por um que descreve a expansão do vazio. A função de cedência do modelo GLD é dada pela expressão:

$$\Phi_{\text{GLD}} = C \left( \frac{\|\mathbf{s} + \eta \sigma_h \mathbf{Q}\|}{\sigma_y} \right)^2 + 2(g+1)(g+f) \cosh \left( \kappa \frac{\sigma_h}{\sigma_y} \right) - (g+1)^2 - (g+f)^2 . \quad (4.20)$$

O tensor  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{X}$  são os tensores transversalmente isotrópicos, dados por:<sup>2</sup>

$$\mathbf{X} \equiv \alpha_2 (\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} + \mathbf{l} \otimes \mathbf{l}) + (1 - 2\alpha_2) \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} , \quad (4.21)$$

$$\mathbf{Q} \equiv -\frac{1}{3} (\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} + \mathbf{l} \otimes \mathbf{l}) + \frac{2}{3} \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} . \quad (4.22)$$

O termo  $\sigma_h$  denota a média ponderada das tensões normais ao longo dos eixos principais do vazio,

$$\sigma_h = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{X} , \quad (4.23)$$

e os termos  $\kappa$ ,  $\alpha_2$ ,  $g$ ,  $C$  e  $\eta$  são constantes, expressas em função dos parâmetros microestruturais que caracterizam a geometria do vazio ( $f$  e  $w$ ) através das expressões indicadas no Anexo A.

<sup>2</sup>Embora sejam indicados os versores  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{l}$ , estes podem ser substituídos por quaisquer outros versores transversais.

O modelo GLD possui particularidades importantes para os casos limite convencionais. No limite de um vazio esférico ( $w \rightarrow 1$ ) e cilíndrico ( $w \rightarrow \infty$ ), o critério (4.20) reduz-se ao critério de *Gurson*. O modelo GLD também se reduz à condição de cedência de *von Mises* quando  $f = 0$ , mas apenas para o caso dos vazios prolatos ( $w > 1$ ). Nos vazios oblatos ( $w < 1$ ) o limite  $f \rightarrow 0$  corresponde a um material com uma distribuição de fendas circulares.

### Evolução da microestrutura

Em Gologanu et al. (1997) são estabelecidas as leis de evolução das variáveis microestruturais. A porosidade  $f$  obedece à lei de evolução já considerada no modelo de *Gurson*, vindo neste caso

$$\dot{f} = (1 - f) \dot{\gamma} \frac{\partial \Phi_{\text{GLD}}}{\partial p} . \quad (4.24)$$

A evolução da geometria do vazio, nomeadamente o fator de proporcionalidade do esferoide  $w$ , é estabelecida através do parâmetro

$$S \equiv \ln w , \quad (4.25)$$

cuja lei de evolução é

$$\begin{aligned} \dot{S} = & \frac{3}{2} \left[ 1 + \left( \frac{9}{2} - \frac{T^2 + T^4}{2} \right) (1 - \sqrt{f}) \left( \frac{\alpha_1 - \alpha_1^G}{1 - 3\alpha_1} \right) \right] \mathbf{m} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_s^p \cdot \mathbf{m} \\ & + \left( \frac{1 - 3\alpha_1}{f} + 3\alpha_2 - 1 + 3\alpha_2 - 1 \right) \mathbf{I} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p , \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde  $T$  denota a triaxilidade,

$$T = \frac{p}{\sigma_{\text{eq}}} , \quad (4.27)$$

e  $\alpha_1$  e  $\alpha_1^G$  são constantes que dependem da geometria do vazio, encontrando-se também no Anexo A as respetivas expressões. O tensor  $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p$  é a taxa de deformação plástica, cuja componente desviadora é indicada por  $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_s^p$ .

Por último, assumindo que os vazios rodam em conformidade com o material, a lei de evolução para o eixo do esferoide é dada por

$$\dot{\mathbf{m}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{m} , \quad (4.28)$$

onde  $\mathbf{W}$  é o tensor de rotação total material.

#### 4.2.4 Modelo de *Madou-Leblond*

O recente modelo de *Madou-Leblond* (ML) trata-se de uma generalização do modelo GLD para vazios elipsoidais genéricos (Madou e Leblond, 2012a,b, 2013;

Madou, Leblond e Morin, 2013). O RVE considerado neste modelo consiste num elipsoide com uma cavidade elipsoidal concêntrica (ver Figura 4.6, sendo que neste caso  $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ ) e a matriz, tal como nos modelos anteriores, é perfeitamente plástica e obedece à lei constitutiva do modelo de *von Mises*. O conjunto de variáveis microestruturais neste caso inclui ambas as proporcionalidades do elipsoide e respetivos eixos principais, ou seja,

$$s_\alpha = \{f, w_1, w_2, \mathbf{k}, \mathbf{l}\}, \quad (4.29)$$

onde

$$w_1 = \frac{a_1}{a_3}, \quad w_2 = \frac{a_2}{a_3}. \quad (4.30)$$

A formulação deste modelo segue a mesma estratégia utilizada no modelo GLD, introduzindo-se contudo novos elementos. Em Madou e Leblond (2012a) é obtida a expressão do critério de cedência deste modelo (com estrutura semelhante à do modelo de *Gurson*), utilizando-se o campo de velocidades incompressível introduzido por Leblond e Gologanu (2008), juntamente com a condição de taxa de deformação homogênea na fronteira. No entanto, este campo de velocidades introduz imprecisões para alguns casos particulares, nomeadamente em vazios esféricos extremamente oblatos (Madou e Leblond, 2012a). Como solução para este problema, em Madou e Leblond (2012b) os autores adotam uma estratégia ‘híbrida’ para a determinação dos termos da função de cedência. Para solicitações hidrostáticas, uma componente do campo de velocidades de Leblond e Gologanu (2008) é substituída pelo campo calculado numericamente a partir do *Método dos Elementos Finitos*. Para solicitações desviadoras a estratégia adotada é mais expedita, utilizando-se os limites rigorosos para compósitos não lineares propostos por Castañeda (1991), Willis (1991) e Michel e Suquet (1992). O critério de cedência do modelo de *Madou-Leblond* é dado por:

$$\Phi_{\text{ML}} = \frac{Q\{\boldsymbol{\sigma}\}}{\sigma_y^2} + 2(1+g)(f+g) \cosh\left(\frac{\mathcal{L}\{\boldsymbol{\sigma}\}}{\sigma_y}\right) - (g+1)^2 - (g+f)^2. \quad (4.31)$$

Na expressão anterior  $g$  é a porosidade secundária, que depende da geometria do vazio. A constante  $Q\{\boldsymbol{\sigma}\}$  encontra-se relacionada com a forma quadrática de *Willis*,  $Q^{\text{W}}\{\boldsymbol{\sigma}\}$ , através da expressão

$$Q\{\boldsymbol{\sigma}\} \equiv Q^{\text{W}}\{\boldsymbol{\sigma}\} - (1+g)(f+g)\kappa^2\sigma_h^2. \quad (4.32)$$

A constante  $\mathcal{L}\{\boldsymbol{\sigma}\}$  é dada por

$$\mathcal{L}\{\boldsymbol{\sigma}\} \equiv \kappa\sigma_h. \quad (4.33)$$

Encontram-se no Anexo B as expressões para o cálculo de todos os termos envolvidos no critério de cedência.

No caso particular do vazio esférico, o critério de cedência (4.31) reduz-se à expressão

$$\Phi_{\text{ML}} = \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \left(\frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma_y}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{3}{2}\frac{p}{\sigma_y}\right) - (1 + f^2), \quad (4.34)$$

que é igual ao critério proposto em Leblond, Perrin et al. (1994). No caso do vazio cilíndrico circular, o critério de cedência vem

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{ML}} = & \left(\frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma_y}\right)^2 + 3f \left[ \frac{(\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 / 4 + \sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2}{\sigma_y} \right]^2 \\ & + 2f \cosh\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sigma_y}\right) - (1 + f^2). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Para estados de tensão axisimétricos ( $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{xy} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0$ ) esta expressão reproduz a solução de *Gurson* (expressão 4.4). Ambos os casos particulares indicados (vazios esféricos e cilíndricos) possuem a propriedade de respeitar o limite não linear de *Hashin-Shtrikman*. Outro caso particular de interesse são os vazios esferoidais, sendo que neste caso o critério de *Madou-Leblond* é praticamente coincidente com o critério de *Golaganu-Leblond-Deveaux* (Madou e Leblond, 2012b).

### Evolução da microestrutura

Nas publicações Madou e Leblond (2013) e Madou, Leblond e Morin (2013) os autores completam o modelo proposto, desenvolvendo as leis de evolução para as variáveis microestruturais. A estratégia adotada é contudo diferente da utilizada no modelo GLD. É considerado modelo constitutivo para materiais elásticos de Castañeda e Zaidman (1994), introduzindo-se fatores de correção heurísticos, determinados numericamente, para levar em conta os efeitos de plasticidade. Um aspeto relevante a ter em atenção é que as soluções obtidas não são restritas ao modelo de *Madou-Leblond*, podendo ser incorporadas em qualquer outro critério que tenha em consideração a forma dos vazios. Dado o objetivo deste trabalho e o grau de complexidade das expressões envolvidas, não são aqui indicadas as leis de evolução, podendo ser consultadas nos artigos acima referidos.

#### 4.2.5 Modelo Variacional Modificado

Tal como já referido, uma abordagem diferente dos modelos micromecânicos até agora descritos são os modelos constitutivos desenvolvidos a partir de técnicas de homogeneização avançadas. Dos vários modelos propostos na literatura, é descrito neste trabalho o *Modelo ‘Variacional’ Modificado* de Danas e Aravas (2012). Este modelo trata-se de uma modificação do modelo constitutivo ‘variacional’ proposto

por Castañeda e Zaidman (1994), Kailasam, Castañeda e Willis (1997) e Kailasam e Castañeda (1997), de forma a que este reproduza, para solicitações hidrostáticas, a solução exata de vazios esféricos e cilíndricos e também para que seja capaz de prever, por calibração, a evolução da forma do vazio de acordo com o recente modelo de ‘segunda ordem’ de Danas e Castañeda (2009b,a). Este último modelo tem como base o método de homogeneização não-linear de segunda ordem de Castañeda (2002). O modelo de ‘segunda ordem’, embora seja mais preciso, não é descrito neste trabalho. Isto porque o *Modelo ‘Variacional’ Modificado* é mais simples de ser implementado, demonstrando-se ainda em Danas e Aravas (2012) uma boa correlação entre ambos os modelos.

O modelo ‘variacional’ original trata-se de um modelo constitutivo desenvolvido para materiais dúcteis porosos sujeitos a qualquer tipo de carregamento tridimensional, contemplando também a evolução da forma e orientação dos vazios. Na sua formulação é utilizado o método de homogeneização comparativa linear ‘variacional’ (Castañeda, 1991), juntamente com as estimativas para materiais linear-elásticos com microestruturas elipsoidais (Castañeda e Willis, 1995). A matriz é considerada isotrópica, elasto-plástica segundo modelo constitutivo de *von Mises* e independente da taxa de deformação. A porosidade do material é modelada através da consideração de uma distribuição uniforme de vazios elipsoidais orientados de igual forma ao longo da microestrutura, sendo assumida a hipótese simplificativa da função de distribuição dos centros dos elipsoides ser igual à forma dos próprios vazios. Esta simplificação traduz-se numa generalização da microestrutura em regime diluído de *Eshelby* (1957) para o regime não diluído, demonstrando-se em Danas e Castañeda (2009a) que a precisão dos resultados não é afetada de forma significativa pela distribuição dos vazios (especialmente para porosidades reduzidas). Com base nas hipóteses estabelecidas, o conjunto de variáveis internas relevantes que descrevem o estado da microestrutura são

$$s_\alpha = \{\varepsilon^P, f, w_1, w_2, \mathbf{k}, \mathbf{l}\} , \quad (4.36)$$

onde  $\varepsilon^P$  é a deformação plástica acumulada na matriz.

**Nota.** *Chama-se à atenção o facto da nomenclatura adotada ser ligeiramente diferente da utilizada pelos autores nas respetivas publicações. A variável  $w$  também denota proporcionalidade do elipsoide, mas o seu significado é o inverso da variável definida neste trabalho. Esta modificação tem o intuito de manter a simbologia coerente entre os diversos modelos apresentados.*

O critério de cedência do *Modelo ‘Variacional’ Modificado* (MVAR) é expresso por

$$\Phi_{\text{MVAR}}(\boldsymbol{\sigma}, s_\alpha) = \hat{\sigma}_e - \sigma_y , \quad (4.37)$$

sendo a tensão efetiva  $\hat{\sigma}_e$  definida como

$$\hat{\sigma}_e = \sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m} : \boldsymbol{\sigma}}{1 - f}} . \quad (4.38)$$

O tensor de quarta ordem  $\mathbf{m}$  é obtido a partir da modificação do tensor do modelo ‘variacional’ original (VAR),  $\mathbf{m}^{\text{VAR}}$ . Este tensor é função do tensor microestrutural  $\mathbf{Q}$ , definindo-se na forma

$$\mathbf{m}^{\text{VAR}} = \frac{3}{2}\mathbf{K} + \frac{3f}{1-f} \lim_{K \rightarrow \infty} G \mathbf{Q}^{-1}. \quad (4.39)$$

Na expressão anterior o tensor de quarta ordem  $\mathbf{K}$ , definido como

$$\mathbf{K} = \mathbf{I} - \mathbf{J}, \quad (4.40)$$

denota as componentes de corte do tensor identidade de quarta ordem simétrico,

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (4.41)$$

e  $\mathbf{J}$  é a respetiva componente hidrostática,

$$J_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (4.42)$$

Representando-se por  $\mathbb{S}$  o tensor de *Eshelby* (ver Anexo D), o tensor microestrutural  $\mathbf{Q}$  é definido como

$$\mathbf{Q} \equiv \mathbf{C} : (\mathbf{I} - \mathbb{S}\{\nu\}), \quad (4.43)$$

onde  $\mathbf{C}$  é o tensor de rigidez, que pode ser expresso em função do módulo de rigidez transversal,  $G$ , e do módulo de compressibilidade,  $K$ , através da seguinte manipulação:

$$\mathbf{C} = 2G\mathbf{K} + 3K\mathbf{J}. \quad (4.44)$$

O limite de  $K \rightarrow \infty$  na expressão (4.39) traduz a condição de incompressibilidade da matriz, calculando-se o tensor microestrutural  $\mathbf{Q}$  através das expressões dadas no Anexo C. Isto porque através da definição (4.43), a componente hidrostática do tensor de rigidez  $\mathbf{C}$ , equação (4.44), se anula na condição de incompressibilidade.

A modificação introduzida no modelo MVAR consiste em modificar a parte hidrostática do tensor original  $\mathbf{m}^{\text{VAR}}$  através da expressão

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}^{\text{VAR}} + (q_J^2 - 1) \mathbf{J} : \mathbf{m}^{\text{VAR}} : \mathbf{J}. \quad (4.45)$$

O fator escalar  $q_J$  é definido como

$$q_J = \frac{1-f}{\sqrt{f} \ln(1/f)}. \quad (4.46)$$

O fator de correção  $q_J$  garante que:

- No caso particular de vazios esféricos e cilíndricos, para solicitações hidrostáticas o modelo MVAR é coincidente com a solução exata dada pelo modelo de *Gurson*;

- Para qualquer outra combinação de variáveis microestruturais são reproduzidos os resultados obtidos a partir da formulação de ‘segunda ordem’;
- É corrigido o facto da formulação ‘variacional’ sobre-estimar a rigidez do material em regimes de baixa triaxialidade (especialmente para baixas porosidades).

Note-se, no entanto, que este modelo não se trata de um limite superior, mas sim uma estimativa do comportamento efetivo de materiais porosos.

### Evolução da microestrutura

A evolução das variáveis microestruturais do modelo ‘variacional’ depende apenas da evolução da deformação plástica acumulada na matriz, sendo desprezada (tal como nos casos anteriores) a componente elástica de deformação.

Utilizando-se apenas nesta secção, por comodidade, a seguinte notação

$$\mathbf{n}^{(1)} \equiv \mathbf{k}, \quad \mathbf{n}^{(2)} \equiv \mathbf{l}, \quad \mathbf{n}^{(3)} \equiv \mathbf{m}, \quad (4.47)$$

a evolução dos fatores de proporcionalidade é dada por

$$\dot{w}_s = \left[ \dot{\gamma} \alpha_w w_s^{-1} \left( \mathbf{n}^{(3)} \mathbf{n}^{(3)} - \mathbf{n}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)} \right) \mathbb{A} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P \right]^{-1} \quad s = 1, 2, \quad (4.48)$$

onde  $\alpha_w$  é um fator escalar (heurístico), introduzido para melhorar a sua precisão. No âmbito do estudo de materiais plásticos independentes da taxa de deformação,  $\alpha_w = 7/4$  é um valor recomendado (Danas e Aravas, 2012). O tensor de concentração  $\mathbb{A}$  é definido como

$$\mathbb{A} = \frac{1}{f} \left( \mathbf{I} - \frac{1}{2} \mathbf{K} : \mathbf{m}^{-1} \right). \quad (4.49)$$

A evolução da orientação dos eixos principais vem

$$\dot{\mathbf{n}}^{(i)} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}^{(i)}, \quad (4.50)$$

onde  $\boldsymbol{\omega}$  denota o tensor (antisimétrico) de rotação microestrutural,

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{W} - \dot{\gamma} \left[ \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j \\ w_i \neq w_j}}^3 \frac{w_i^{-2} + w_j^{-2}}{w_i^{-2} - w_j^{-2}} \left[ \left( \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{n}^{(j)} + \mathbf{n}^{(j)} \mathbf{n}^{(i)} \right) : \mathbf{A} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P \right] \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{n}^{(j)} \right]. \quad (4.51)$$

É importante ter em atenção que nos casos particulares dos vazios esféricos e esferoidais há componentes do tensor de rotação do material que são nulas.

**Nota.** Nas expressões anteriores os termos  $w_i$  surgem com o expoente negativo, uma vez que vêm de acordo com a nomenclatura aqui utilizada.

### 4.2.6 Comparação entre os vários critérios de cedência

Apresentados alguns dos modelos com maior impacto na literatura que incorporam o efeito da geometria do vazão da resposta do material, é de seguida apresentado um breve estudo paramétrico das respetivas curvas de cedência. No entanto, é primeiro introduzida a definição de parâmetro de *Lode*, uma vez que se trata de um parâmetro importante no fenómeno de fratura dúctil.

#### Parâmetro de *Lode*

Baseando-se em evidências experimentais, vários autores chegaram à conclusão que, em regimes de baixa triaxialidade, o parâmetro de *Lode* (representado pela variável  $L$ ) desempenha um papel importante no mecanismo de colapso plástico do material (Barsoum e Faleskog, 2007).

O parâmetro de *Lode* (ou de forma equivalente o ângulo de *Lode*,  $\theta$ ) é por definição

$$L = -\cos(3\theta) = -\frac{27}{2} \frac{I_3}{\sigma_{\text{eq}}^3}, \quad (4.52)$$

onde  $I_3$  denota o terceiro invariante das tensões desviadoras,

$$I_3 = \det \mathbf{s}. \quad (4.53)$$

Em termos conceptuais o parâmetro de *Lode* permite a distinção entre diferentes estados de tensão de corte, encontrando-se na Figura 4.7 a sua interpretação geométrica no plano desviador.

No contexto do estudo do comportamento plástico de materiais porosos, torna-se cómodo exprimir as condições de carregamento tri-axiais através de medidas de tensão diferentes das tensões principais. Considerando a tensão média, a tensão equivalente de *von Mises* e o terceiro invariante das tensões desviadoras, as tensões principais podem, depois de alguma manipulação algébrica, ser expressas na seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{3}{2} \frac{\sigma_1}{\sigma_{\text{eq}}} \equiv -\cos\left(\theta + \frac{\pi}{3}\right) + \frac{3}{2}T, \\ \frac{3}{2} \frac{\sigma_2}{\sigma_{\text{eq}}} \equiv -\cos\left(\theta - \frac{\pi}{3}\right) + \frac{3}{2}T, \\ \frac{3}{2} \frac{\sigma_3}{\sigma_{\text{eq}}} \equiv \cos\theta + \frac{3}{2}T. \end{cases} \quad (4.54)$$

Na Figura 4.8 encontra-se a representação gráfica da evolução das tensões principais adimensionalizadas,  $3\sigma_i/(2\sigma_{\text{eq}})$ , em função do parâmetro de *Lode*, considerando a triaxialidade nula ( $T = 0$ , ou seja  $p = 0$ ). Com base nesta representação constata-se que:

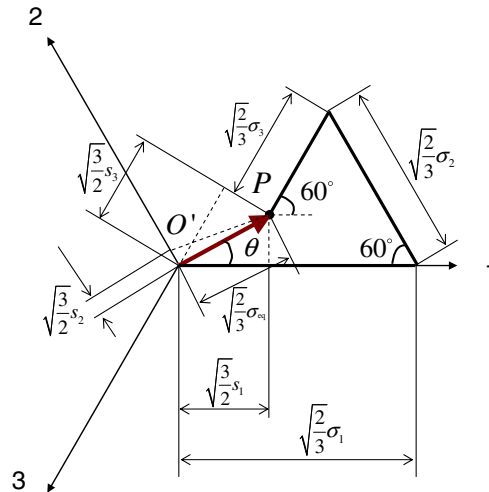


Figura 4.7: Representação geométrica das tensões principais, desviadoras, tensão equivalente e parâmetro de *Lode* no plano desviador (também designado por plano II) (Bai e Wierzbicki, 2010).

- Para  $L = -1$  (ou  $\theta = 0$ ) o estado de tensão é axisimétrico, com uma tensão positiva e duas negativas (tensão axisimétrica);
- Quando  $L = 1$  ( $\theta = \pi/3$ ) o estado de tensão é também axisimétrico, mas composto por duas tensões positivas e uma negativa (tração biaxial com compressão axisimétrica);
- Para  $L = 0$  ( $\theta = \pi/6$ ) o estado de tensão é caracterizado por tensões de corte no plano, uma vez que uma das tensões principais se anula (por exemplo: estado plano de tensão);
- Para os restantes valores do parâmetro de *Lode*, o estado de tensão é uma combinação entre corte no plano e estado de tensão axisimétrico.

Como nota final, note-se que para valores de triaxilidade não nulos, as curvas transladam na direção vertical (quando  $T > 0$  as curvas deslocam-se para cima e vice-versa).

### Microestrutura isotrópica: vazios esféricos

Na Figura 4.9 encontram-se representadas no plano  $(\sigma_{eq}/\sigma_y, p/\sigma_y)$  as curvas de cedência dos modelos de *Gurson*, *GTN* (com  $q_1 = 1.5$ ,  $q_2 = 1$  e  $q_3 = q_1^2$ ), *ML* e *MVAR*, para vazios esféricos com diferentes frações volúmicas:  $f = 0.1, 1$  e  $10\%$ . É também indicado, como referência, a curva de cedência de *von Mises*, que corresponde à situação de porosidade nula ( $f = 0$ ). O parâmetro de *Lode* não tem qualquer efeito nas curvas de cedência no caso dos vazios esféricos.

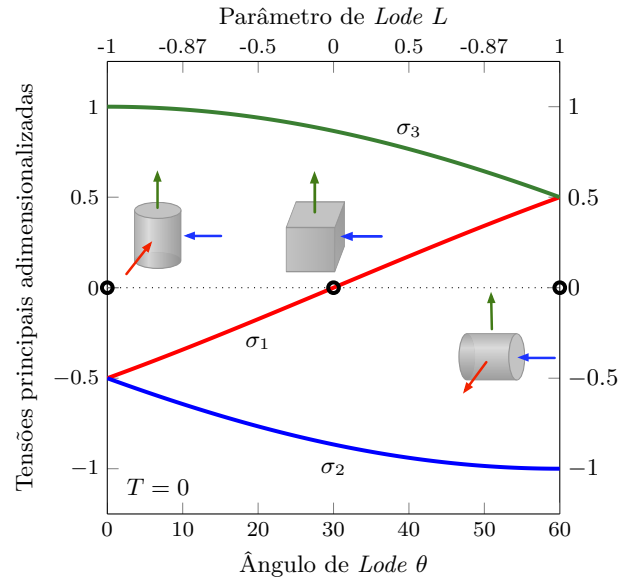


Figura 4.8: Tensões principais normalizadas  $3\sigma_i/(2\sigma_{eq})$  em função do parâmetro de Lode (adaptado de Danas e Aravas 2012).

Analisando as várias curvas de cedência, constata-se que o aumento da fração volúmica provoca uma diminuição generalizada da resistência mecânica do material. Este facto é coerente com a deterioração do material associada à evolução do dano. Para estados de tensão puramente hidrostáticos ( $\sigma_{eq} = 0$ ), os modelos ML e MVAR, tal como já referido, são coincidentes com o modelo de Gurson, que é a solução analítica para este tipo de solicitações. Para tensões puramente desviadoras ( $p = 0$ ), ou seja, quando a triaxialidade é nula, verifica-se uma boa correlação entre os vários modelos, observando-se contudo diferenças com o aumento da fração volúmica. Quando  $f = 10\%$  é facilmente visível que o modelo de Gurson corresponde ao limite superior, seguindo-se os modelos ML e MVAR e GTN. Esta propriedade é coerente com o facto do modelo de Gurson ser baseado nos limites superiores da teoria da plasticidade. É importante notar também que para este tipo de solicitações os modelos ML e MVAR são coincidentes, o que reflete o facto da formulação subjacente a ambos os modelos ser semelhante para este tipo de solicitações. Para valores de triaxialidade intermédios e para as frações volúmicas  $f = 0.1$  e  $1\%$  o modelo ML é praticamente coincidente com o modelo de Gurson, distinguindo-se apenas para a fração volúmica  $f = 10\%$ . O modelo MVAR é aquele que apresenta maiores diferenças com o modelo de Gurson, tratando-se na generalidade de um modelo mais conservador. Relativamente às previsões para os regimes de compressão,  $p < 0$ , são observadas as mesmas propriedades, uma vez que as curvas são simétricas em relação ao eixo vertical  $p = 0$ .

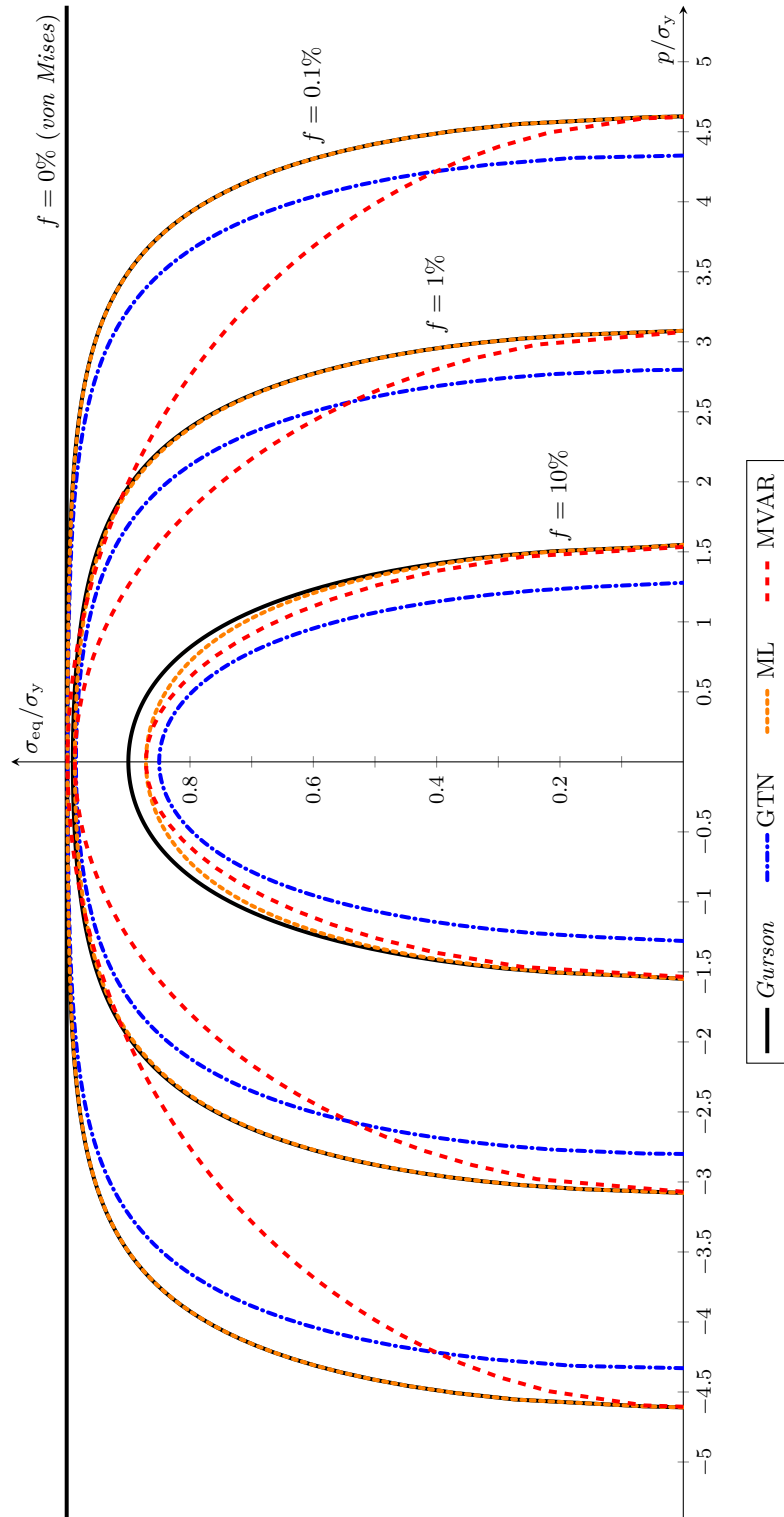


Figura 4.9: Curvas de cedência dos modelos de *Gurson*, *GTN*, *ML* e *MVAR*, considerando vazios esféricos com diferentes frações volumicas ( $f = 0.1, 1$  e  $10\%$ ).

### Microestrutura anisotrópica: vazios elipsoidais

Na Figura 4.10 encontram-se representadas as curvas de cedência dos modelos ML e MVAR, para vazios com diferentes geometrias com fração volúmica  $f = 1\%$ . É admitido que  $L = -1$ , que corresponde a solicitações axisimétricas em torno do eixo  $x_3$ . São consideradas quatro geometrias: esfera ( $w_1 = 1, w_2 = 1$ ); esferoide prolato ( $w_1 = 4, w_2 = 1$ ); esferoide oblato ( $w_1 = 0.25, w_2 = 1$ ); elipsoide ( $w_1 = 4, w_2 = 0.25$ ).

Como se pode observar, a geometria do vazio tem um grande impacto na resposta do material. Dos casos analisados, os materiais porosos com vazios esféricos apresentam a maior resistência, seguindo-se os vazios esferoidais prolatos, oblatos e, por último, o vazio elipsoidal. Comparando os dois modelos, constata-se que apenas são aproximadamente coincidentes para solicitações puramente desviadoras. No entanto, à exceção do caso da esfera, para solicitações puramente hidrostáticas os modelos preveem diferentes comportamentos do material, especialmente nos casos do esferoide oblato e do elipsoide, verificando-se que o modelo MVAR é mais conservador que o ML.

No regime de compressão, à exceção do caso da esfera, constata-se que o modelo ML é o que apresenta maiores diferenças relativamente ao regime de tração. As curvas não são simétricas, observando-se que em compressão a curva de cedência não é tão suave como em tração. Logo, pode-se concluir que o modelo ML prevê que o material é mais resistente à compressão do que à tração, o que intuitivamente vai de encontro ao o comportamento real do material. Repare-se ainda que na gama  $-1.25 < p < 0$  a geometria do vazio não tem praticamente qualquer efeito. Embora as diferenças sejam menores comparativamente ao modelo ML, as curvas do modelo MVAR também não são simétricas, tendo-se registado ainda uma tendência contrária ao modelo ML. No caso do elipsoide é facilmente visível que a curva de cedência se ‘inclina’ para o lado da tração, prevendo maior resistência do material à tração do que à compressão. Esta propriedade, do ponto de vista físico, foge à realidade, podendo-se apontar como uma possível imprecisão deste modelo.

### Efeito do parâmetro de *Lode*

Na Figura 4.11 são apresentadas as curvas de cedência dos modelos ML e MVAR para as mesmas geometrias até agora analisadas (com  $f = 1\%$ ), mas considerando agora diferentes valores do parâmetro de *Lode*:  $L = -1, 0, 1$ .

Como se pode observar, na generalidade, o efeito parâmetro de *Lode* na cedência do material é mais pronunciado no modelo ML, com maior impacto no caso do vazio elipsoidal. Neste modelo, o aumento do parâmetro de *Lode* provoca um aumento da capacidade de resistência do material em regimes de tração, acompanhado de uma diminuição na compressão. No modelo MVAR, embora na generalidade com menor amplitude, o impacto do parâmetro de *Lode* é mais acen-

tuado para o eferoide oblato, observando-se ainda que, neste caso particular, ao contrário da tendência do modelo ML, o aumento do parâmetro de *Lode* provoca uma diminuição da capacidade de resistência à tração e um aumento no regime de compressão. Existem também, para ambos os modelos, pontos em que o parâmetro de *Lode* não tem qualquer efeito na resposta do material, nomeadamente para solicitações puramente hidrostáticas ( $\sigma_{eq} = 0$ ) e para solicitações puramente desviadoras. Contudo, neste último caso regista-se com o vazio elipsoidal um ligeiro desvio, para o lado da compressão no modelo ML e para a tração no modelo MVAR, do ponto de interseção das curvas.

Nas publicações Danas e Castañeda (2012) e Hutchinson e Tvergaard (2012) é estudado o efeito do parâmetro de *Lode* na evolução das variáveis microestruturais, considerando-se toda a gama de deformação até ao estado último da rotura. No entanto, não foi estudada ainda a influência do parâmetro de *Lode* na superfície de cedência dos modelos apresentados, tratando-se de um possível trabalho futuro a ser desenvolvido.

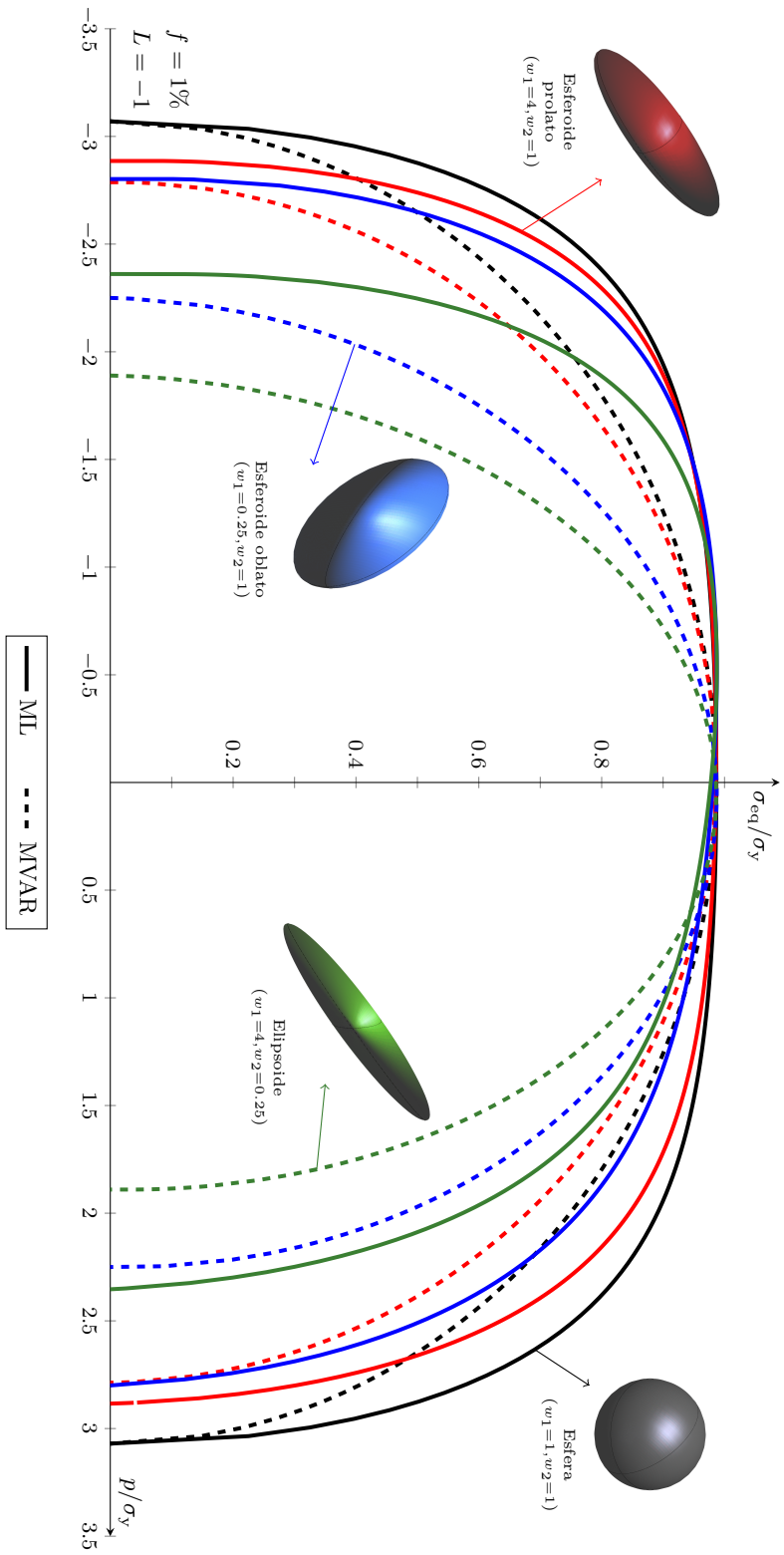


Figura 4.10: Curvas de cedência dos modelos ML e MVAR, para vazios com diferentes geometrias com fração volumica  $f = 1\%$  e  $L = -1$ .

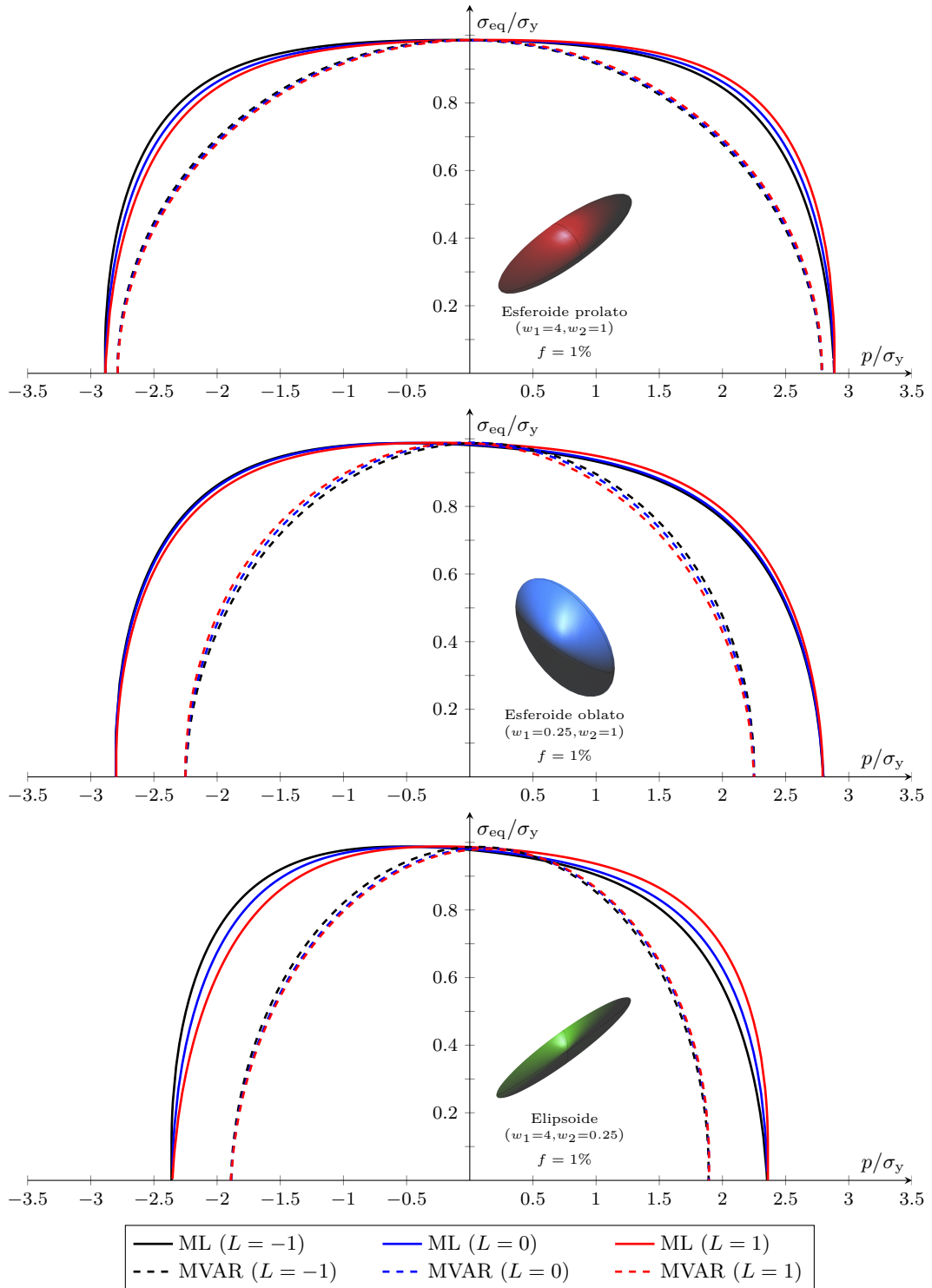


Figura 4.11: Curvas de cedência dos modelos ML e MVAR para vazios com diferentes geometrias com fração volúmica  $f = 1\%$ , considerando-se diferentes parâmetros de *Lode*:  $L = -1, 0, 1$ .

### 4.3 Conclusões

Neste capítulo são introduzidos os vários aspetos fenomenológicos da fratura dúctil, descrevendo-se os mecanismos microscópicos e as respetivas evidências macroscópicas. Focando-se a atenção no efeito da geometria dos vazios na resposta do material, são também descritos alguns dos modelos existentes na literatura.

O estudo paramétrico realizado permitiu concluir que o aumento da fração volúmica de vazios provoca uma diminuição da resistência do material. Além disso, verificou-se também que a geometria dos vazios tem um grande impacto na resposta do material, constatando-se que o material apresenta maior resistência no caso do vazio esférico. Qualquer distorção da esfera para um esferoide ou elipsoide provoca uma diminuição do domínio elástico do material. O parâmetro de *Lode* também afeta ligeiramente as curvas de cedência no caso dos esferoides e elipsoides, à exceção das solitações puramente hidrostáticas ( $\sigma_{\text{eq}} = 0$ ) ou, de forma aproximada, puramente desviadoras ( $p = 0$ ). Comparando os modelos apresentados, observou-se que o modelo MVAR é, na generalidade, um modelo mais conservador.

## Capítulo 5

# Determinação das propriedades elásticas efetivas

---

Um sólido em deformação, antes de qualquer fenómeno de dissipação irreversível, possui sempre um determinado domínio em que a deformação é totalmente reversível, ou seja, elástica. É o ponto de partida da história da deformação, tratando-se de um regime bem definido para a grande maioria dos materiais homogêneos. No caso dos materiais porosos, o seu comportamento elástico vem afetado pela presença dos vazios, sendo necessário desenvolver metodologias capazes de prever de forma precisa o comportamento efetivo do material. Neste capítulo são descritas algumas estratégias para o tratamento deste tipo de problema.

Inicia-se o capítulo pela introdução dos aspetos gerais da lei de *Hooke* generalizada, descrevendo-se com maior detalhe as relações elásticas de materiais ortotrópicos, transversalmente isotrópicos e isotrópicos. É depois apresentada a metodologia analítica para a previsão do comportamento linear elástico efetivo de materiais porosos, dando-se ênfase ao caso dos vazios elipsoidais. É também apresentada uma metodologia estocástica, bem como a estratégia numérica utilizada para a determinação das constantes elásticas, através do programa à micro-escala utilizado no âmbito deste trabalho. No final são analisados exemplos numéricos, comparando-se os resultados obtidos com a solução analítica.

### 5.1 Lei de *Hooke*

A relação matemática que descreve o comportamento elástico de um material na hipótese de pequenas deformações é a lei de *Hooke* que, na forma generalizada, é dada por

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma} , \quad (5.1)$$

onde o tensor de quarta ordem  $\mathbf{S}$  representa o tensor de flexibilidade. A mesma relação pode ser escrita em termos do tensor de rigidez  $\mathbf{C}$  na forma

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} . \quad (5.2)$$

Devido às relações de simetria do tensor das deformações e tensões,  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$  e  $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^T$ , ambos os tensores constitutivos  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{C}$  possuem simetria menor,

$$(\cdot)_{ijkl} = (\cdot)_{jikl} = (\cdot)_{ijlk} . \quad (5.3)$$

Logo, das 81 componentes do tensor constitutivo, apenas 36 são independentes.

Considerando a função densidade de energia de deformação,

$$\psi = \frac{1}{2} \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} , \quad (5.4)$$

e admitindo a propriedade

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} , \quad (5.5)$$

é possível provar que os tensores constitutivos possuem também simetria maior,

$$(\cdot)_{ijkl} = (\cdot)_{klij} . \quad (5.6)$$

Por conseguinte, o número de constantes elásticas independentes é reduzido para 21, característico de um material com comportamento anisotrópico generalizado.

Com base nas propriedades de simetria dos tensores constitutivos, torna-se possível escrever a lei de *Hooke* na forma matricial, utilizando a notação de *Voigt*:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ \text{sim.} & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} . \quad (5.7)$$

Encontra-se no Anexo E a descrição detalhada da obtenção da expressão anterior.

Além das simetrias já indicadas, é ainda habitual admitir-se que o material possui propriedades de *simetria elástica*, reduzindo-se assim o número total de constantes elásticas independentes. Esta hipótese tem como base os planos de simetria da estrutura cristalina e o tipo de microestrutura do material. Por exemplo, em materiais com sistema cristalino monoclinico, caracterizado por um plano de simetria, o número de constantes elásticas reduz-se para 13. Nas secções seguintes são descritas com maior detalhe as relações de elasticidade de materiais com comportamento ortotrópico, transversalmente isotrópico e isotrópico.

### 5.1.1 Materiais ortotrópicos

Os materiais ortotrópicos são caracterizados por possuírem dois planos de simetria elástica ortogonais. Nesta condição, é possível provar que o material apresenta também simetria em relação a um terceiro plano, mutuamente ortogonal aos dois

primeiros. Assim sendo, o número de constantes elásticas independentes é reduzido para 9 e a matriz de rigidez pode ser escrita na forma

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

O tensor de rigidez encontra-se relacionado com as 9 constantes elásticas, relativas às direções normais aos planos de simetria. Considerando o módulo de rigidez,  $E_i$ , o módulo de rigidez transversal,  $G_{ij}$ , e o coeficiente de *Poisson*,  $\nu_{ij}$ , a matriz de rigidez pode ser escrita na forma<sup>1</sup>

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1 - \nu_{23} \nu_{32}}{E_2 E_3 \Delta} & \frac{\nu_{21} + \nu_{23} \nu_{31}}{E_2 E_3 \Delta} & \frac{\nu_{31} + \nu_{21} \nu_{32}}{E_2 E_3 \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & \frac{1 - \nu_{13} \nu_{31}}{E_1 E_3 \Delta} & \frac{\nu_{32} + \nu_{12} \nu_{31}}{E_1 E_3 \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & & \frac{1 - \nu_{12} \nu_{21}}{E_1 E_2 \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & & & G_{23} & 0 & 0 \\ & & & & G_{13} & 0 \\ \text{sim.} & & & & & G_{12} \end{bmatrix}, \quad (5.9)$$

onde  $\Delta$  é o determinante da matriz de rigidez, dado por

$$\Delta = \frac{(1 - \nu_{23} \nu_{32} - \nu_{13} \nu_{31} - \nu_{12} \nu_{21} - 2 \nu_{32} \nu_{13} \nu_{21})}{E_1 E_2 E_3}. \quad (5.10)$$

Tratando-se de uma matriz simétrica, é possível estabelecer a relação

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{21} + \nu_{31} \nu_{23}}{E_2 E_3 \Delta} &= \frac{\nu_{12} + \nu_{32} \nu_{13}}{E_1 E_3 \Delta}, \\ \frac{\nu_{31} + \nu_{21} \nu_{32}}{E_2 E_3 \Delta} &= \frac{\nu_{13} + \nu_{12} \nu_{23}}{E_1 E_2 \Delta}, \\ \frac{\nu_{32} + \nu_{12} \nu_{31}}{E_1 E_3 \Delta} &= \frac{\nu_{23} + \nu_{21} \nu_{13}}{E_1 E_2 \Delta}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Do mesmo modo, com base na propriedade de simetria da matriz de flexibilidade tem-se que

$$\frac{\nu_{ij}}{E_i} = \frac{\nu_{ji}}{E_j}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j. \quad (5.12)$$

<sup>1</sup>A partir das constantes elásticas indicadas é possível obter as restantes, encontrando-se na Tabela E.1 do Anexo E as respetivas relações.

As constantes elásticas expressas em função dos termos da matriz de rigidez vêm:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \frac{\Theta}{C_{22}C_{33} - (C_{23})^2}, & E_2 &= \frac{\Theta}{C_{11}C_{33} - (C_{13})^2}, & E_3 &= \frac{\Theta}{C_{11}C_{22} - (C_{12})^2}, \\
 \nu_{12} &= \frac{C_{12}C_{33} - C_{13}C_{23}}{C_{22}C_{33} - (C_{23})^2}, & \nu_{13} &= \frac{C_{13}C_{22} - C_{12}C_{23}}{C_{22}C_{33} - (C_{23})^2}, & \nu_{23} &= \frac{C_{23}C_{11} - C_{12}C_{13}}{C_{11}C_{33} - (C_{13})^2}, \\
 G_{23} &= C_{44}, & G_{13} &= C_{55}, & G_{12} &= C_{66},
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

onde a constante  $\Theta$  é dada por

$$\Theta = C_{11}C_{22}C_{33} + 2C_{23}C_{13}C_{12} - C_{11}C_{23}^2 - C_{22}C_{13}^2 - C_{33}C_{12}^2. \tag{5.14}$$

### 5.1.2 Materiais transversalmente isotrópicos

Os materiais transversalmente isotrópicos podem ser compreendidos como um caso particular de isotropia ortotrópica, onde as propriedades de elasticidade num dos planos de simetria é independente da direção: o material possui um eixo de simetria. No total, o tensor constitutivo é caracterizado por 5 constantes elásticas, vindo neste caso<sup>2</sup>

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix}. \tag{5.15}$$

A constantes elásticas admitem as propriedades,

$$\begin{aligned}
 E_1 &= E_2, \\
 \nu_{13} &= \nu_{23}, \\
 G_{13} &= G_{23},
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

que permitem estabelecer a igualdade

$$G_{12} = \frac{E_1}{2(1 + \nu_{12})}. \tag{5.17}$$

<sup>2</sup>Admitindo como plano de isotropia o plano ortogonal à direção da terceira componente do sistema de eixos (direção 3).

Assim sendo, utilizando a notação

$$\begin{aligned} E_1 = E_2 = E_p, \quad E_3 = E_t, \\ \nu_{13} = \nu_{23} = \nu_{pt}, \quad \nu_{12} = \nu_p, \\ G_{13} = G_{23} = G_t, \quad G_{12} = G_p, \end{aligned} \quad (5.18)$$

a matriz de rigidez pode então ser escrita na forma

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1 - \nu_{pt}\nu_{tp}}{E_p E_t \Delta} & \frac{\nu_p + \nu_{pt}\nu_{tp}}{E_p E_t \Delta} & \frac{\nu_{tp} + \nu_p\nu_{tp}}{E_p E_t \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & \frac{1 - \nu_{pt}\nu_{tp}}{E_p E_t \Delta} & \frac{\nu_{tp} + \nu_p\nu_{tp}}{E_p E_t \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & & \frac{1 - \nu_p^2}{E_p^2 \Delta} & 0 & 0 & 0 \\ & & & G_{pt} & 0 & 0 \\ & & & & G_{pt} & 0 \\ \text{sim.} & & & & & G_p \end{bmatrix}. \quad (5.19)$$

As constantes elásticas em função dos termos da matriz de rigidez são dadas por:

$$\begin{aligned} E_p &= \frac{\Theta}{C_{11}C_{33} - (C_{13})^2}, \quad E_t = \frac{\Theta}{(C_{11})^2 - (C_{12})^2}, \\ \nu_p &= \frac{C_{12}C_{33} - (C_{13})^2}{C_{11}C_{33} - (C_{13})^2}, \quad \nu_{pt} = \frac{C_{11}C_{13} - C_{12}C_{13}}{C_{11}C_{33} - (C_{13})^2}, \\ G_{pt} &= C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \end{aligned} \quad (5.20)$$

onde neste caso a constante  $\Theta$  vale

$$\Theta = C_{33}(C_{11})^2 + 2C_{12}(C_{13})^2 - 2C_{11}(C_{13})^2 - C_{33}(C_{12})^2. \quad (5.21)$$

### 5.1.3 Materiais isotrópicos

Nos materiais isotrópicos o comportamento elástico é indiferente da direção, podendo-se escrever a matriz de rigidez na forma

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \quad (5.22)$$

É o tipo de comportamento elástico mais simples, verificando-se as relações

$$\begin{aligned} E_1 &= E_2 = E_3 = E ; \\ \nu_{12} &= \nu_{13} = \nu_{23} = \nu ; \\ G_{12} &= G_{13} = G_{23} = G . \end{aligned} \tag{5.23}$$

No total, o comportamento elástico de um material isotrópico é caracterizado por 2 constantes elásticas, uma vez que

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} . \tag{5.24}$$

As constantes elásticas expressas em função dos termos da matriz de rigidez vêm:

$$\begin{aligned} E &= \frac{(C_{11})^2 + C_{12}C_{11} - 2(C_{12})^2}{C_{11} + C_{12}} , \\ \nu &= \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} . \end{aligned} \tag{5.25}$$

## 5.2 Métodos analíticos

Na secção anterior são introduzidos os aspetos gerais de elasticidade, na hipótese do material ser totalmente homogéneo. No entanto, no caso de materiais porosos a relação entre as deformações e as tensões vem afetada pela presença dos vazios. As soluções analíticas para o problema podem ser estabelecidas com base nos limites superior e inferior das propriedades gerais (Hashin e Shtrikman (1963) e posteriores publicações) ou através do cálculo direto utilizando as soluções de elasticidade existentes.

Um dos principais marcos da micromecânica é a solução para o problema de *Eshelby* (1957), que descreve o comportamento elástico efetivo de um sólido com uma inclusão elipsoidal (ver Anexo D). Baseando-se nesta solução, *Kachanov*, *Tsukrov et al.* (1994) desenvolveram soluções exatas para o comportamento elástico efetivo de materiais porosos com vazios elipsoidais, descrevendo-se de seguida os resultados obtidos por este autor.

Uma vez que para o tipo de cavidades estudadas neste trabalho existe disponível na literatura a solução exata, não são indicadas soluções para os limites superior e inferior das propriedades elásticas efetivas, sugerindo-se a referência *Torquato* (2002) para uma consulta pormenorizada do assunto.

### 5.2.1 Solução exata

O problema da determinação do comportamento elástico efetivo de materiais com cavidades de determinadas geometrias é analisado com grande detalhe em Kachanov, Tsukrov et al. (1994). Nesta publicação são obtidas soluções analíticas para vazios de diversas geometrias, quer em 2D como em 3D, na hipótese do material possuir comportamento linear elástico. Isto significa que não é contemplada qualquer não linearidade resultante da compressão e possível fecho das cavidades. Além disso, é também assumido que não existe interação entre vazios, embora as soluções obtidas com base nessa hipótese sirvam de base a alguns dos modelos que já consideram a interação entre vazios (Kachanov, Tsukrov et al., 1994).

A análise de Kachanov, Tsukrov et al. (1994) tem como ponto de partida a deformação total efetiva num sólido com uma cavidade sujeito a uma tensão remota  $\boldsymbol{\sigma}$ , que é dada pela soma

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{S}_0 : \boldsymbol{\sigma} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon} , \quad (5.26)$$

onde  $\mathbf{S}_0$  é o tensor de flexibilidade da matriz. A deformação adicional  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$  devida à presença do vazio é, com base na aplicação do teorema da divergência, definida como

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = -\frac{1}{2V_\mu} \int_\Gamma (\mathbf{u}\mathbf{n} + \mathbf{n}\mathbf{u}) \, d\Gamma , \quad (5.27)$$

onde  $\mathbf{u}$  denota os deslocamentos da fronteira da cavidade,  $\Gamma = \partial\Omega_\mu^v$ ,  $\mathbf{n}$  o vetor normal unitário na direção interior ao vazio e  $V_\mu$  o volume total do RVE (incluindo a cavidade).

A deformação adicional  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$  pode ser escrita como uma função linear da tensão aplicada através da relação

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{H} : \boldsymbol{\sigma} , \quad (5.28)$$

onde o tensor de quarta ordem  $\mathbf{H}$  é o *tensor de flexibilidade da cavidade*. A construção deste tensor vem em função da geometria do vazio, caracterizando o seu efeito no comportamento efetivo do material.

Para a obtenção das propriedades elásticas efetivas, o problema é formulado em termos do potencial elástico

$$\psi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{S}_0 : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{H} : \boldsymbol{\sigma} \equiv \psi_0 + \Delta\psi , \quad (5.29)$$

onde  $\psi_0$  é o potencial elástico da matriz e  $\Delta\psi$  é a alteração do potencial devido à presença do vazio. Com base na expressão anterior, pode-se concluir que o tensor de flexibilidade da cavidade  $\mathbf{H}$  possui as relações de simetria menor e maior do tensor de flexibilidade da matriz  $\mathbf{S}_0$ , ou seja,

$$\mathbf{H}_{ijkl} = \mathbf{H}_{jikl} = \mathbf{H}_{ijlk} = \mathbf{H}_{klij} . \quad (5.30)$$

Admitindo a presença de mais do que uma cavidade, a condição de não existir interação entre vazios considera que o campo de tensão na região envolvente de cada vazio não é afetado pela presença de outros defeitos. Assim sendo, a alteração do potencial elástico  $\Delta\psi$  pode ser expressa por

$$\Delta\psi = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \sum \mathbf{H}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} , \quad (5.31)$$

onde  $\mathbf{H}^{(k)}$  é o tensor de flexibilidade da cavidade genérica ( $k$ ).

O tensor de flexibilidade efetivo  $\mathbf{S}$  resulta da relação

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial(\psi_0 + \Delta\psi)}{\partial\sigma_{ij}} \equiv S_{ijkl}\sigma_{kl} , \quad (5.32)$$

a partir da qual se pode retirar o valor das constantes elásticas efetivas do material.

### Vazios elipsoidais

Caso o vazio seja elipsoidal (incluindo-se o caso particular da esfera e do esferoide), a solução analítica do comportamento elástico do material é, como já referido, baseada na solução do problema de *Eshelby*.

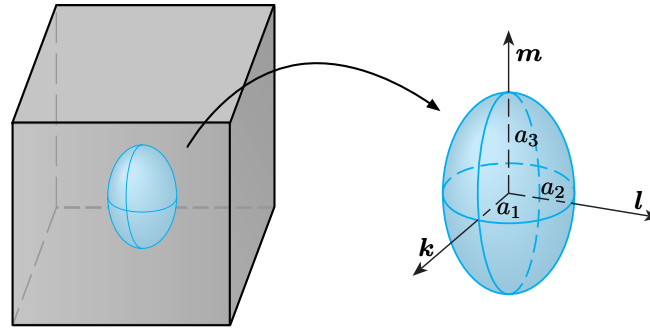


Figura 5.1: Representação da geometria de um vazio elipsoidal de raios  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  orientados com os vetores  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{l}$ ,  $\mathbf{m}$ , respetivamente.

Considerando um elipsoide genérico, com raios  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$ , orientados com os vetores  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{l}$  e  $\mathbf{m}$ , respetivamente (Figura 5.1), o *tensor de flexibilidade da cavidade elipsoidal* é dado por:<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \mathbb{H}_{1111} \mathbf{kkkk} + \mathbb{H}_{2222} \mathbf{llll} + \mathbb{H}_{3333} \mathbf{mmmm} \\ & + \mathbb{H}_{1122} (\mathbf{kkl} + \mathbf{lkk}) + \mathbb{H}_{2233} (\mathbf{lmm} + \mathbf{mml}) \\ & + \mathbb{H}_{3311} (\mathbf{mmk} + \mathbf{kmm}) + \mathbb{H}_{1212} (\mathbf{kl} + \mathbf{lk}) (\mathbf{kl} + \mathbf{lk}) \\ & + \mathbb{H}_{2323} (\mathbf{lm} + \mathbf{ml}) (\mathbf{lm} + \mathbf{ml}) + \mathbb{H}_{3131} (\mathbf{mk} + \mathbf{km}) (\mathbf{mk} + \mathbf{km}) , \end{aligned} \quad (5.33)$$

<sup>3</sup>Para tornar a notação mais compacta, o símbolo do produto tensorial  $\otimes$  é omitido (por exemplo:  $\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} \otimes \mathbf{k} \otimes \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{kkkk}$ ).

onde os coeficientes  $\mathbb{H}_{ijkl}$  são expressos em função do tensor de *Eshelby* (designado por  $\mathbb{S}$ ), do módulo de rigidez e coeficiente de *Poisson* da matriz,  $E_0$  e  $\nu_0$  respetivamente, e da fração volúmica do vazio  $f$  através das expressões:

$$\mathbb{H}_{1111} = \frac{f}{E_0\Lambda} \left\{ (1 - \mathbb{S}_{2222})(1 - \mathbb{S}_{3333}) - \mathbb{S}_{2233}\mathbb{S}_{3322} - \nu_0 [\mathbb{S}_{1122}(1 - \mathbb{S}_{3333} + \mathbb{S}_{2233} + \mathbb{S}_{1133}(1 - \mathbb{S}_{2222} + \mathbb{S}_{3322}))] \right\}; \quad (5.34a)$$

$$\mathbb{H}_{1122} = \frac{f}{E_0\Lambda} \left\{ \mathbb{S}_{1122}(1 - \mathbb{S}_{3333}) + \mathbb{S}_{1133}\mathbb{S}_{3322} - \nu_0 [(1 - \mathbb{S}_{2222})(1 - \mathbb{S}_{3333} + \mathbb{S}_{1133}) + \mathbb{S}_{2233}(\mathbb{S}_{1122} - \mathbb{S}_{3322})] \right\}; \quad (5.34b)$$

$$\mathbb{H}_{1212} = \frac{f}{E_0} \frac{(1 + \nu_0)}{2(1 - 2\mathbb{S}_{1212})}; \quad (5.34c)$$

onde

$$\Lambda = -\det \begin{vmatrix} \mathbb{S}_{1111} - 1 & \mathbb{S}_{1122} & \mathbb{S}_{1133} \\ \mathbb{S}_{2211} & \mathbb{S}_{2222} - 1 & \mathbb{S}_{2233} \\ \mathbb{S}_{3311} & \mathbb{S}_{3322} & \mathbb{S}_{3333} - 1 \end{vmatrix}. \quad (5.35)$$

Os restantes coeficientes  $\mathbb{H}_{ijkl}$  são obtidos por permutação cíclica de  $(1, 2, 3)$ . Encontram-se no Anexo D as expressões para o cálculo do tensor de *Eshelby* para vazios de geometria elipsoidal, bem como os casos particulares do esferoide e da esfera.

### Esferoide

Para o caso particular da cavidade esferoidal, admitindo que o eixo de simetria  $x_3$  está alinhado com o versor  $\mathbf{m}$  ( $a_1 = a_2 = a$ ), o *tensor de flexibilidade da cavidade* vem

$$\mathbf{H} = \frac{f}{E_0} \left[ h_1 \mathbf{II} + h_2 \mathbf{I} + \frac{h_3}{2} (\mathbf{mmI} + \mathbf{Imm}) + h_4 \mathbf{mIm} + h_5 \mathbf{mmmm} \right], \quad (5.36)$$

onde  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade de segunda ordem,  $\mathbf{1}$  é o tensor de quarta ordem identidade simétrico,  $l_{ijkl} = (\delta_{ik}\delta_{lj} + \delta_{il}\delta_{kj})/2$ , e os coeficientes  $h_i$  são dados por

$$h_1 = \frac{1}{\Delta} \left\{ (1 - \mathbb{S}_{3333} + \mathbb{S}_{1133}) [\mathbb{S}_{1122} - \nu_0(1 - \mathbb{S}_{1111})] - \mathbb{S}_{1133}(1 + \nu_0)(\mathbb{S}_{1122} - \mathbb{S}_{3311}) \right\}; \quad (5.37a)$$

$$h_2 = \frac{1 + \nu_0}{2(1 - 2\mathbb{S}_{1212})}; \quad (5.37b)$$

$$h_3 = \frac{2}{\Delta} \left\{ (1 - \mathbb{S}_{1111} + \mathbb{S}_{1212}) [(1 - \nu_0)\mathbb{S}_{3311} + \nu_0(\mathbb{S}_{1111} + \mathbb{S}_{1122} + \mathbb{S}_{1133} - 1)] + (1 - \mathbb{S}_{3333}) [\nu_0(1 - \mathbb{S}_{1111}) - \mathbb{S}_{1122}] - (1 + \nu_0)\mathbb{S}_{1133}\mathbb{S}_{3311} \right\}; \quad (5.37c)$$

$$h_4 = 2(1 + \nu_0) \left[ \frac{1}{(1 - 2\mathbb{S}_{1313})} - \frac{1}{(1 - 2\mathbb{S}_{1212})} \right]; \quad (5.37d)$$

$$h_5 = \frac{1}{\Delta} \left\{ (1 - \mathbb{S}_{1111} + \mathbb{S}_{1122}) [(1 + 2\nu_0)(1 - \mathbb{S}_{1111} - \mathbb{S}_{1122}) - 2\mathbb{S}_{3311}] - \mathbb{S}_{1133}(1 + \nu_0)(1 - \mathbb{S}_{1111} + \mathbb{S}_{3311}) + (1 - \mathbb{S}_{3333} + \mathbb{S}_{1133})(1 - \mathbb{S}_{1111} - \nu_0\mathbb{S}_{1122}) \right\} - \frac{2(1 + \nu_0)}{(1 - 2\mathbb{S}_{1313})}. \quad (5.37e)$$

Na publicação David e Zimmerman (2011) é alertado o facto das expressões acima, retiradas de Kachanov, Shafiro et al. (2003), conterem erros tipográficos. Particularmente, é especificada como uma primeira possível fonte de erro um fator multiplicativo de 2 no denominador da equação (5.37b), a primeira expressão da página 263 do livro Kachanov, Shafiro et al. (2003).

Para efetuar a verificação das equações acima indicadas, considere-se o desvio (baseado na norma Euclidiana) dado por

$$\delta = \frac{\|\mathbf{H}^{\text{elip}} - \mathbf{H}^{\text{esf}}\|}{\|\mathbf{H}^{\text{elip}}\|} = \sqrt{\frac{(\mathbf{H}_{ijkl}^{\text{elip}} - \mathbf{H}_{ijkl}^{\text{esf}})(\mathbf{H}_{ijkl}^{\text{elip}} - \mathbf{H}_{ijkl}^{\text{esf}})}{\mathbf{H}_{pqrs}^{\text{elip}}\mathbf{H}_{pqrs}^{\text{elip}}}}, \quad (5.38)$$

onde  $\mathbf{H}^{\text{elip}}$  denota o *tensor de flexibilidade da cavidade* calculado a partir da expressão do caso geral de um elipsoide, equação (5.33), e  $\mathbf{H}^{\text{esf}}$  a partir do caso particular do esferoide, equação (5.36). Considerando, por exemplo, um esferoide oblato ( $a_1 = a_2 = 2a_3$ ) com fração volúmica  $f = 2\%$ , calculou-se um desvio entre os dois tensores de cerca de 51%. Removendo o fator multiplicativo de 2 da expressão (5.37b) o desvio reduz-se para 15%. Com base nestes resultados confirma-se que as expressões indicadas para o caso particular do esferoide não

estão corretas, uma vez que os resultados obtidos têm que ser iguais aos do caso geral de um elipsoide, o que não se verificou.

Pretendendo-se garantir a coerência de resultados, todas as previsões analíticas das propriedades elásticas efetivas foram obtidas a partir do caso geral do elipsoide, uma vez que a expressão é igualmente válida nos casos particulares do esferoide e da esfera. No entanto, como referência é indicado a seguir o caso particular da esfera.<sup>4</sup>

### Esfera

No caso último de uma esfera os termos correspondentes à orientação do elipsoide anulam-se, resultando a expressão

$$\mathbf{H} = \frac{f}{E_0} \frac{3(1 - \nu_0)}{2(7 - 5\nu_0)} [10(1 + \nu_0)\mathbf{I} - (1 + 5\nu_0)\mathbf{II}] . \quad (5.39)$$

Neste caso as constantes elásticas efetivas podem ser obtidas diretamente das expressões

$$E = E_0 \left\{ 1 + f \frac{3(1 - \nu_0)(9 + 5\nu_0)}{2(7 - 5\nu_0)} \right\}^{-1} , \quad (5.40)$$

$$\nu = \frac{1}{5} + \left( \nu_0 - \frac{1}{5} \right) \frac{1 + 6f(1 - \nu_0)(7 - 5\nu_0)}{1 + 3f(1 - \nu_0)(9 + 5\nu_0)[2(7 - 5\nu_0)]^{-1}} . \quad (5.41)$$

## 5.3 Métodos estocásticos

As soluções analíticas até agora introduzidas descrevem o comportamento elástico efetivo de materiais porosos, com vazios de determinadas geometrias perfeitamente definidas. No entanto, na realidade os poros existentes nos materiais possuem geometrias complexas e não regulares, que impossibilita o seu tratamento analítico. Na recente publicação Drach et al. (2014) é analisado este tipo de problema, estabelecendo-se com base em modelação estatística uma correlação entre as áreas projetadas do vazio e o módulo de *Young* efetivo. A regressão polinomial tem como base um conjunto de geometrias de poros, obtidos por microtomografia de raios-X, de dois materiais compósitos (carbono/carbono e tecido de carbono 3D/*epoxy*) e os resultados individuais de cada cavidade obtidos através do *Método dos Elementos Finitos*. Em Drach et al. (2013) o mesmo autor adota uma estratégia em tudo semelhante à descrita, considerando no entanto como parâmetro geométrico do vazio os momentos principais de inércia e o rácio área/volume. Porém, com as áreas projetadas obtêm-se melhores resultados (Drach et al., 2014).

<sup>4</sup>Calculou-se de igual forma o desvio para o caso particular da esfera, tendo-se verificado um erro nulo, que confirma a validade da expressão indicada.

Admitindo que os poros se encontram alinhados, a relação do tensor de flexibilidade da cavidade com o módulo de *Young* efetivo  $E_i$ , nas três direções ortogonais, é estabelecida com parâmetro adimensional  $\tilde{E}_i$  através da expressão

$$\frac{E_i}{E_0} = \frac{1}{1 + f\tilde{E}_i}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.42)$$

A relação entre  $\tilde{E}_i$  e o tensor  $\mathbf{H}$  é

$$\tilde{E}_i = \frac{E_0}{f} \mathbf{H}_{iii}, \quad (5.43)$$

sem soma sobre índices repetidos. Como já referido, em vazios com formas complexas não existem soluções analíticas para o tensor de flexibilidade da cavidade, sendo necessário calcular o tensor  $\mathbf{H}$  por via numérica. Drach et al. (2014) estabelece uma aproximação para  $\tilde{E}_i$  através de um polinómio, determinando as respetivas constantes a partir de um conjunto de resultados de vazios com várias geometrias. Tem-se então que

$$\tilde{E}_i = c_1 + c_2\hat{A}_1 + c_3\hat{A}_2 + c_4\hat{A}_3 + c_5\hat{A}_1\hat{A}_2 + c_6\hat{A}_1\hat{A}_3 + c_7\hat{A}_2\hat{A}_3, \quad (5.44)$$

onde  $c_i$  são constantes e o parâmetro  $\hat{A}_i$  é dado por

$$\hat{A}_i = \frac{\tilde{A}_i - \text{avg}(\tilde{A}_i)}{\text{mid}(\tilde{A}_i)}. \quad (5.45)$$

Na expressão anterior,  $\text{avg}(\tilde{A}_i)$  e  $\text{mid}(\tilde{A}_i)$  denotam o valor médio e amplitude média dos resultados, respetivamente, da área projetada normalizada  $\tilde{A}_i$ ,

$$\tilde{A}_i = \frac{\sqrt{A_i}}{\sqrt[3]{V^v}}, \quad (5.46)$$

onde  $V^v$  denota o volume do vazio. Logo, para a determinação do módulo de *Young* nas três direções basta conhecer o valor das áreas projetadas  $A_i$  do vazio (Figura 5.2).

Na sua publicação, Drach et al. (2014) obtém, por microtomografia de raios-X, um conjunto de vazios provenientes de dois materiais compósitos: carbono/carbono e tecido de carbono 3D/*epoxy*. Os vazios são depois modelados num RVE de matriz isotrópica com  $E_0 = 1$  e  $\nu = 0.33$ , calculando-se os termos  $\mathbf{H}_{iii}$  e, consequentemente,  $\tilde{E}_i$ . Das expressões resultantes dos dois conjuntos de dados, apenas se consideram neste trabalho as referentes aos vazios do compósito carbono/carbono:

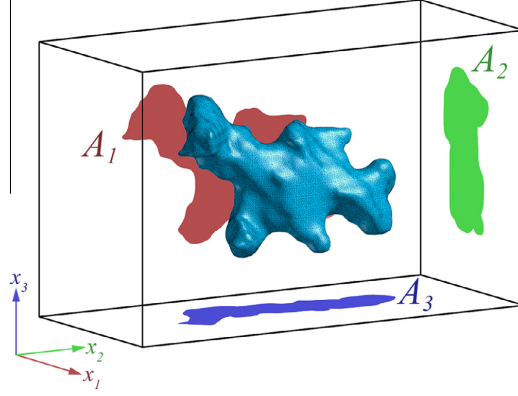


Figura 5.2: Representação esquemática das áreas projetadas de um vazio (Drach et al., 2014).

$$\begin{aligned} \tilde{E}_1 = & 2.509 + 0.844\hat{A}_1 - 0.349\hat{A}_2 - 0.195\hat{A}_3 \\ & - 0.270\hat{A}_1\hat{A}_2 - 0.106\hat{A}_1\hat{A}_3 + 0.252\hat{A}_2\hat{A}_3 ; \end{aligned} \quad (5.47a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_2 = & 2.485 - 0.362\hat{A}_1 + 0.790\hat{A}_2 - 0.201\hat{A}_3 \\ & - 0.315\hat{A}_1\hat{A}_2 + 0.212\hat{A}_1\hat{A}_3 - 0.125\hat{A}_2\hat{A}_3 ; \end{aligned} \quad (5.47b)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_3 = & 2.177 - 0.219\hat{A}_1 - 0.205\hat{A}_2 + 0.516\hat{A}_3 \\ & + 0.209\hat{A}_1\hat{A}_2 - 0.174\hat{A}_1\hat{A}_3 - 0.163\hat{A}_2\hat{A}_3 . \end{aligned} \quad (5.47c)$$

Optou-se por esta solução pelo facto de, no caso particular dos vazios elipsoidais, apresentar uma melhor correlação com a solução analítica de *Kachanov*. Na Figura 5.3 encontra-se, a título de exemplo, a comparação da evolução dos módulos de *Young* efetivos para um vazio esferoidal prolato ( $a_1 = 2a_3$ ,  $a_2 = a_3$ ), que demonstra a melhor correspondência dos resultados obtidos a partir dos vazios do compósito carbono/carbono. Na Tabela 5.1 encontram-se os valores da variação da área projetada normalizada, necessários na expressão (5.45).

## 5.4 Métodos numéricos

Descritos os métodos analíticos, bem como uma abordagem estocástica, é agora introduzida nesta secção a metodologia proposta para a obtenção das propriedades elásticas efetivas, recorrendo ao *Método dos Elementos Finitos*. O programa utilizado (*MSP*) resolve o problema à micro-escala, na hipótese de grandes deformações, encontrando-se no Capítulo 3 a respetiva formulação. Recordando, a microestrutura do material é modelada através de um *Elemento de Volume*

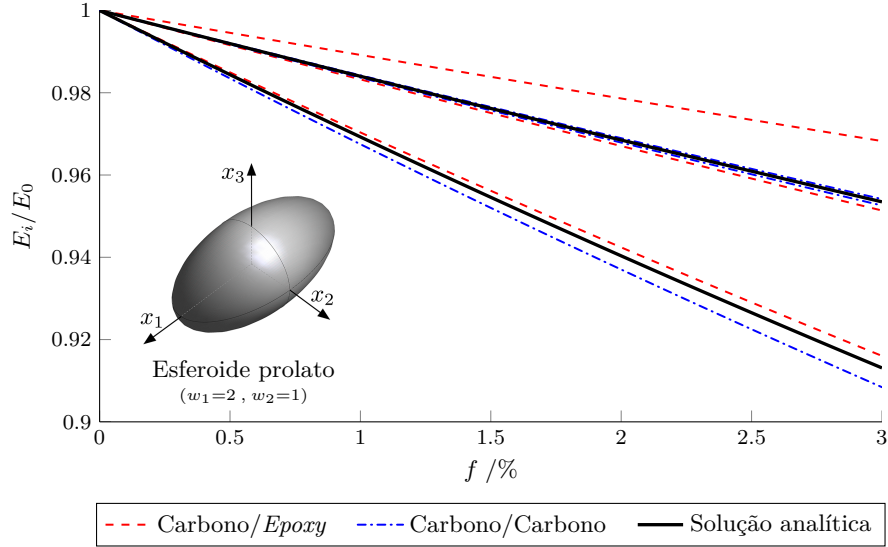


Figura 5.3: Módulo de *Young* efetivo nas três direções para um vazio esferoidal prolato ( $a_1 = 2a_3$ ,  $a_2 = a_3$ ).

Tabela 5.1: Variações dos valores da área projetada normalizada dos vazios medidos do compósito carbono/carbono (Drach et al., 2014).

	Valor mínimo	Valor máximo	Média	Amplitude média
	min	max	avg = $\frac{\max+\min}{2}$	mid = $\frac{\max-\min}{2}$
$\tilde{A}_1$	1.03	1.79	1.41	0.38
$\tilde{A}_2$	1.05	1.75	1.40	0.35
$\tilde{A}_3$	0.99	1.59	1.29	0.30

*Representativo*, ao qual é imposto um determinado gradiente de deformação e condições de fronteira. É obtido como resultado, além do campo de flutuação de deslocamentos, o primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

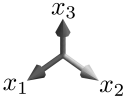
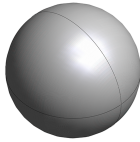
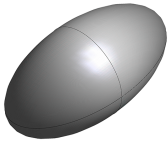
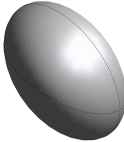
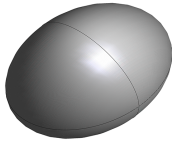
#### 5.4.1 Geometria do RVE

O tipo de RVE estudado consiste num cubo, com um vazio de determinada geometria no seu centro. Considerando uma cavidade elipsoidal genérica (Figura 5.1), a sua geometria é caracterizada pelas proporções

$$\left( \frac{a_1}{a_3}, \frac{a_2}{a_3} \right) \equiv (w_1, w_2), \quad (5.48)$$

e pela orientação no espaço dos seus eixos de simetria. São analisados, para três frações volúmicas de vazios ( $f = 0.1, 0.5$  e  $2\%$ ), quatro casos particulares: um elipsoide, dois esferoides (oblato e prolato) e uma esfera, indicando-se na Tabela 5.2 as respectivas geometrias. Em todos os casos é admitido que os eixos de simetria do elipsoide se encontram alinhados com o sistema de eixos global do RVE.

Tabela 5.2: Geometrias dos vazios analisados.

	Esfera	Esferoide Prolato	Esferoide Oblato	Elipsoide
				
$\left(\frac{a_1}{a_3}, \frac{a_2}{a_3}\right)$	(1, 1)	(2, 1)	(0.5, 1)	(2, 1.5)

Relativamente às dimensões do RVE, é admitido o comprimento lateral,

$$l_{\text{RVE}} = 1 \text{ mm} .$$

Repare-se no entanto que o valor desta dimensão não tem influência nos resultados. O programa à micro-escala utilizado é baseado numa formulação de primeira ordem e, como tal, apenas a proporção dos constituintes do RVE tem influência nos resultados.

As dimensões do elipsoide podem ser determinadas a partir da expressão

$$a_3 = \sqrt[3]{\frac{3fV_\mu}{4\pi w_1 w_2}} , \tag{5.49}$$

que tem como base a definição de fração volúmica de vazios,  $f = V_\mu^v/V_\mu$ , e a expressão de cálculo do volume de um elipsoide,  $V^v = (4\pi a_1 a_2 a_3)/3$ .

### Malha de elementos finitos

A estratégia adotada para a discretização espacial do RVE tira partido dos planos de simetria da geometria da cavidade, nomeadamente através da introdução de uma superfície curva envolvente ao vazio. Desta forma estabelece-se uma concordância entre a superfície curva da cavidade e os planos laterais do RVE, indicando-se na Figura 5.4, como exemplo, um RVE com um vazio elipsoidal ( $w_1 = 2, w_2 = 1.5$  e  $f = 0.2\%$ ) dividido em vários sub-volumes através metodologia descrita.

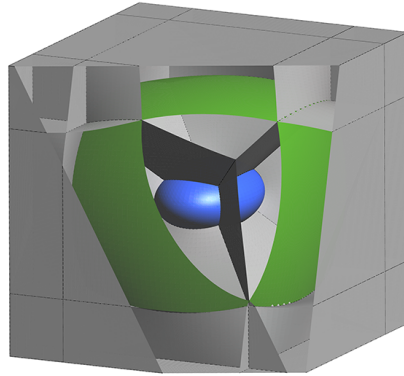


Figura 5.4: Metodologia de discretização espacial do RVE, indicando-se a verde a superfície de concordância entre a superfície curva do vazio (superfície azul) e a lateral do RVE.

Os sub-volumes do RVE (32 no total) são discretizados com malha estruturada de hexaedros de 20 nós, com integração reduzida ao longo de 8 pontos de *Gauss*. Note-se que todos os sub-volumes possuem um total de 6 faces, por forma a permitir a implementação deste tipo de malha. O número total de elementos varia entre 1488 e 2064, encontrando-se na Tabela 5.3 o número total de elementos de todas as malhas.

Na Figura 5.5 são apresentadas 1/8 das malhas correspondentes à fração volumétrica  $f = 2\%$ , sendo que as restantes apresentam a mesma morfologia, variando apenas a proporção do vazio.

#### 5.4.2 Propriedades da matriz

É considerada uma matriz isotrópica, elasto-perfeitamente plástica e caracterizada pelo modelo constitutivo de *von Mises*, encontrando-se na Tabela 5.4 as respetivas propriedades mecânicas. Ao contrário do tipo de análises presentes no Capítulo 6, as propriedades elásticas efetivas são determinadas a partir do primeiro incremento de aplicação da deformação, encontrando-se o material ainda fora do regime plástico. Assim sendo, o valor da tensão de cedência não afeta os resultados obtidos, tendo-se optado por um valor habitual no contexto das propriedades indicadas, características de um aço.

#### 5.4.3 Determinação das constantes elásticas

Considere-se um RVE genérico com um vazio elipsoidal genérico, em que matriz é constituída por um material homogêneo e isotrópico. Com base nos planos de simetria do vazio e nas propriedades da matriz é possível concluir que, nas direções dos eixos de simetria do elipsoide, o material apresenta um comportamento orto-

Tabela 5.3: Número de elementos de todas as malhas.

Geometria	Fração volúmica	Número de elementos
Esfera (1, 1)	$f = 0.1\%$	1654
	$f = 0.5\%$	1504
	$f = 2\%$	1488
Esferoide prolato (2, 1)	$f = 0.1\%$	2046
	$f = 0.5\%$	1856
	$f = 2\%$	1666
Esferoide oblato (0.5, 1)	$f = 0.1\%$	2046
	$f = 0.5\%$	1872
	$f = 2\%$	1488
Elipsoide (2, 1.5)	$f = 0.1\%$	1504
	$f = 0.5\%$	1504
	$f = 2\%$	1504

Tabela 5.4: Propriedades mecânicas da matriz.

Descrição	Valor
Módulo de <i>Young</i> , $E$	200 GPa
Coefficiente de <i>Poisson</i> , $\nu$	0.3
Tensão de cedência, $\sigma_y$	240 MPa

trópico. Da mesma maneira, no caso de um esferoide, conclui-se que o material é transversalmente isotrópico e no caso último da esfera é isotrópico. Assim sendo, as constantes elásticas podem ser determinadas com base na lei de *Hooke*, e o problema resume-se ao cálculo dos termos do tensor constitutivo, a partir da deformação e tensões homogeneizadas. Para um estudo mais detalhada da questão das simetrias elásticas sugere-se a publicação Sevostianov e Kachanov (2008).

Recordando a relação constitutiva de um material ortotrópico em termos da matriz de rigidez,

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix},$$

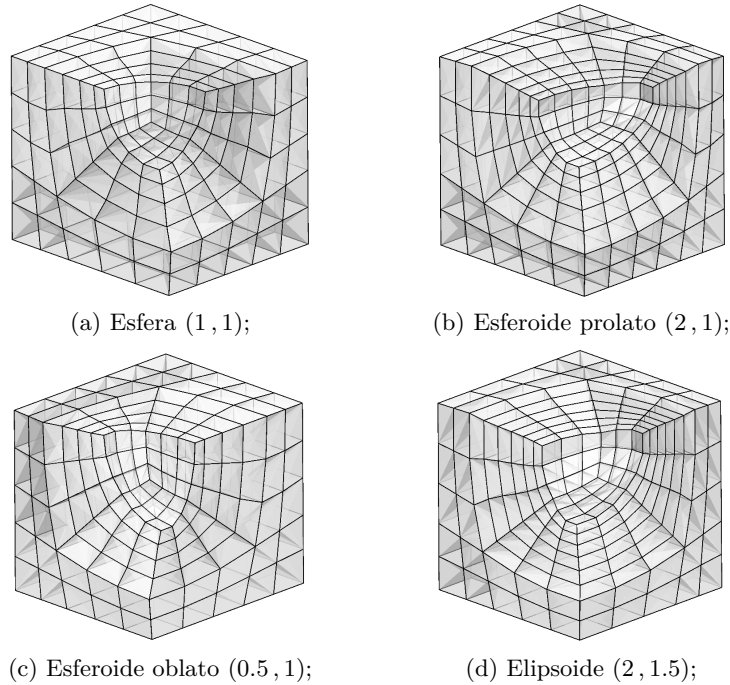


Figura 5.5: Malhas de elementos finitos com vazios de diferentes proporções  $(w_1, w_2)$  e fração volúmica  $f = 2\%$  (é representado apenas 1/8 do RVE).

existem cerca de 9 termos independentes a ser determinados. A estratégia utilizada consiste na aplicação de estados de deformação particulares, onde apenas uma das componentes do tensor  $\varepsilon$  é diferente de zero. Desta forma, em cada simulação é obtida a respetiva coluna da matriz de rigidez. Por exemplo, impondo  $\varepsilon_{11} \neq 0$  (e as restantes componentes iguais a zero) tem-se que

$$\sigma_{ii} = C_{1i}\varepsilon_{11}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.50)$$

Uma vez calculados todos os termos  $C_{ij}$ , as constantes elásticas são calculadas a partir das expressões (5.13).

Embora no caso particular do esferoide e da esfera o número de constantes elásticas seja menor, é sempre considerado o caso geral de comportamento ortotrópico. Desta forma a estratégia é válida para todas as geometrias analisadas, sendo possível confirmar os casos particulares de isotropia, através da identificação de constantes elásticas de valor igual.

### Gradiente de deformação imposto

Como indicado acima, os vários estados de deformação impostos para a determinação das propriedades devem garantir que apenas uma das componentes do

tensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  é não nula. Porém, no programa utilizado, a deformação é imposta ao RVE através do gradiente de deformação, sendo necessário relacionar de forma explícita os dois tensores.

Na hipótese de pequenas deformações, o tensor de *Hencky*  $\mathbf{E}$  pode ser utilizado como uma aproximação do tensor de deformações infinitesimais  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,

$$\mathbf{E} \approx \boldsymbol{\varepsilon} \equiv \frac{1}{2} \left[ \nabla_p \mathbf{u} + (\nabla_p \mathbf{u})^T \right]. \quad (5.51)$$

Recordando, o tensor  $\mathbf{E}$  é definido como

$$\mathbf{E} \equiv \ln \mathbf{U} \equiv \frac{1}{2} \ln \mathbf{F} \mathbf{F}^T.$$

É a partir desta expressão que é calculado o gradiente de deformação  $\mathbf{F}$  que garante os estados de deformação pretendidos. No entanto a relação não é direta, sendo necessário aplicar a decomposição espectral ao tensor de *Hencky*  $\mathbf{E}$ ,<sup>5</sup>

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^E \mathbf{l}_i^E \otimes \mathbf{l}_i^E, \quad (5.52)$$

onde  $\lambda_i^E$  são os valores próprios de  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{l}_i^E$  os respetivos vetores próprios, calculados a partir das expressões indicadas no Anexo F.

Com os tensores definidos no *espaço característico*, da definição do tensor de *Hencky* retira-se que

$$\lambda_i^U = \exp(\lambda_i^E), \quad (5.53)$$

onde  $\lambda_i^U$  denota os valores próprios do tensor  $\mathbf{U}$  (*right stretch tensor*). Os valores próprios do gradiente de deformação  $\lambda_i^F$  podem ser calculados a partir dos valores próprios  $\lambda_i^U$  através da relação

$$\mathbf{U} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \longrightarrow \lambda_i^F \equiv \sqrt{\lambda_i^U}. \quad (5.54)$$

Por fim, utilizando os vetores próprios  $\mathbf{l}_i^E$  do tensor de *Hencky* imposto, é realizado o retorno do gradiente de deformação ao espaço inicial (referente ao sistema de eixos global do RVE),

$$\mathbf{F} = [\Psi] [\text{diag}(\lambda_1^F, \lambda_2^F, \lambda_3^F)] [\Psi]^T, \quad (5.55)$$

onde  $[\Psi]$  é a matriz constituída pelos vetores próprios  $\mathbf{l}_i^E$  normalizados agrupados por colunas. Encontram-se na Tabela 5.5 os vários gradientes de deformação impostos que, como já referido, permitem determinar a matriz de rigidez coluna a coluna.

<sup>5</sup>Note-se que o tensor  $\mathbf{E}$  é simétrico, admitindo portanto a decomposição espectral.

Tabela 5.5: Gradientes de deformação impostos para a determinação da matriz de rigidez coluna a coluna.

$[\epsilon]$	$[F]$
$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 2.718 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2.718 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2.718 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.543 & 1.175 \\ 0 & 1.175 & 1.543 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.543 & 0 & 1.175 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1.175 & 0 & 1.543 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.543 & 1.175 & 0 \\ 1.175 & 1.543 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

## 5.5 Resultados obtidos

Com a metodologia descrita na secção anterior foram simulados um total de 216 RVE's, obtendo-se as constantes elásticas efetivas dos quatro tipos de vazio indicados na Tabela 5.2, para três frações volúmicas diferentes:  $f = 0.1, 0.5$  e  $2\%$ . Foram consideradas três tipos de condições de fronteira: linear, periódica e tração uniforme na fronteira. Nas figuras seguintes encontram-se os resultados obtidos, nomeadamente o módulo de *Young*, coeficiente de *Poisson* e módulo de rigidez transversal calculados, juntamente com a previsão analítica de Kachanov, Tsukrov et al. (1994) e também, no caso do módulo de *Young*, a solução estocástica de Drach et al. (2014). A Figura 5.6 corresponde ao vazio elipsoidal, as Figuras 5.7 e 5.8 ao esferoide prolato e oblato, respetivamente, e por último a Figura 5.9 corresponde ao caso do vazio esférico. Procurando-se apresentar de forma sintética os resultados obtidos, são representadas no mesmo gráfico as curvas referentes às constantes elásticas nas três direções do referencial considerado.

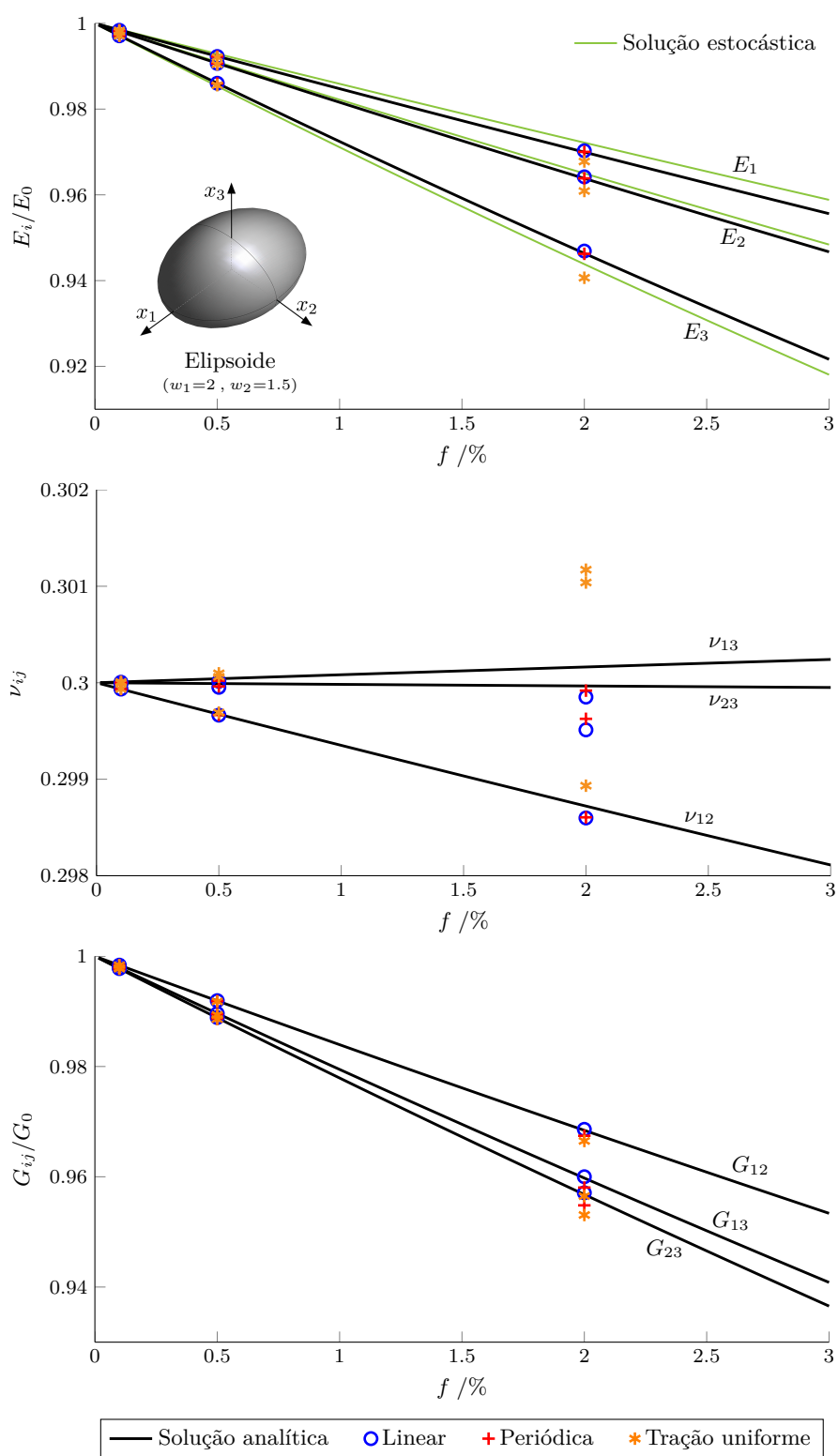


Figura 5.6: Resultados obtidos para o vazio elipsoidal.

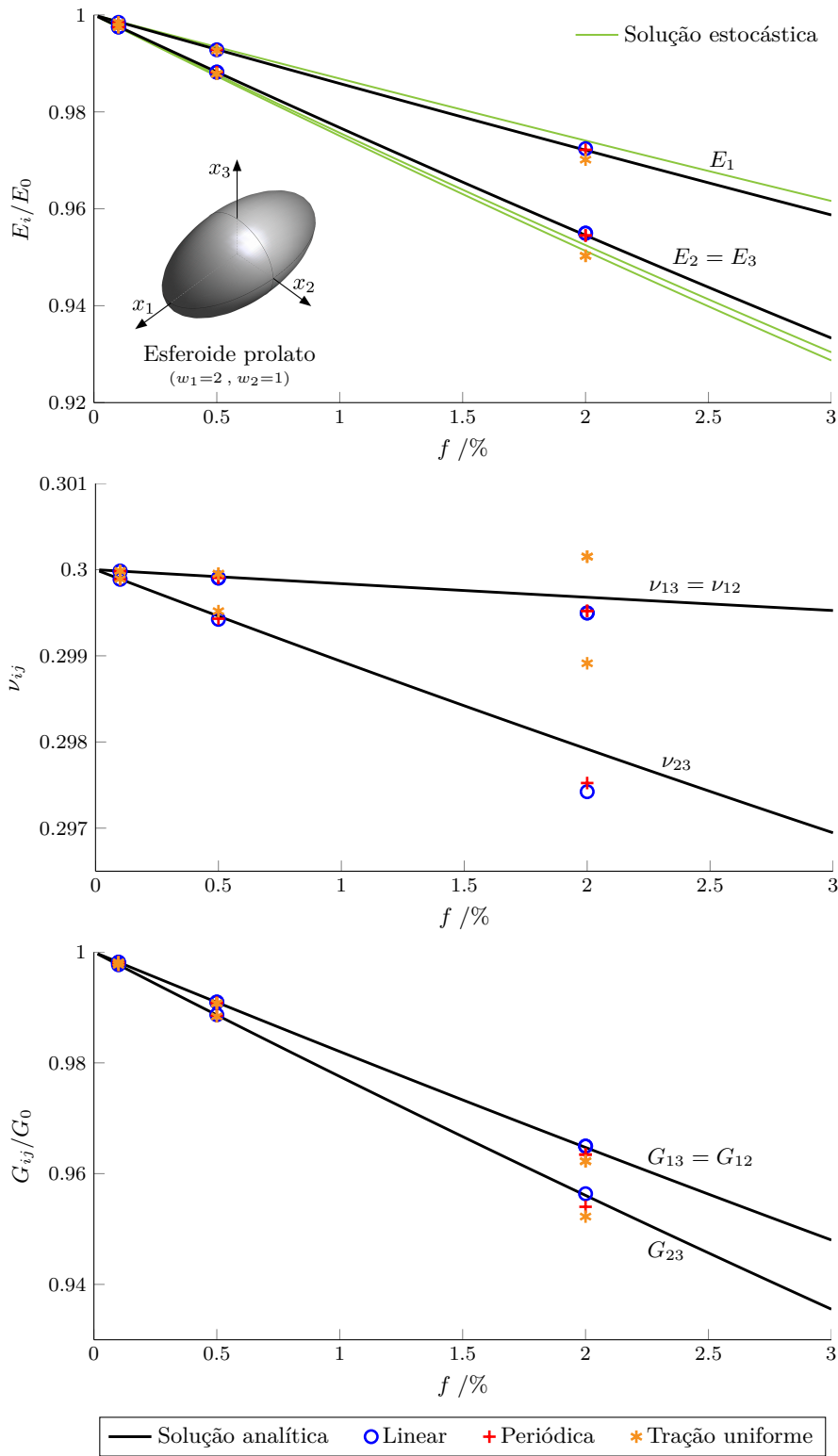


Figura 5.7: Resultados obtidos para o vazio esferoidal prolato.

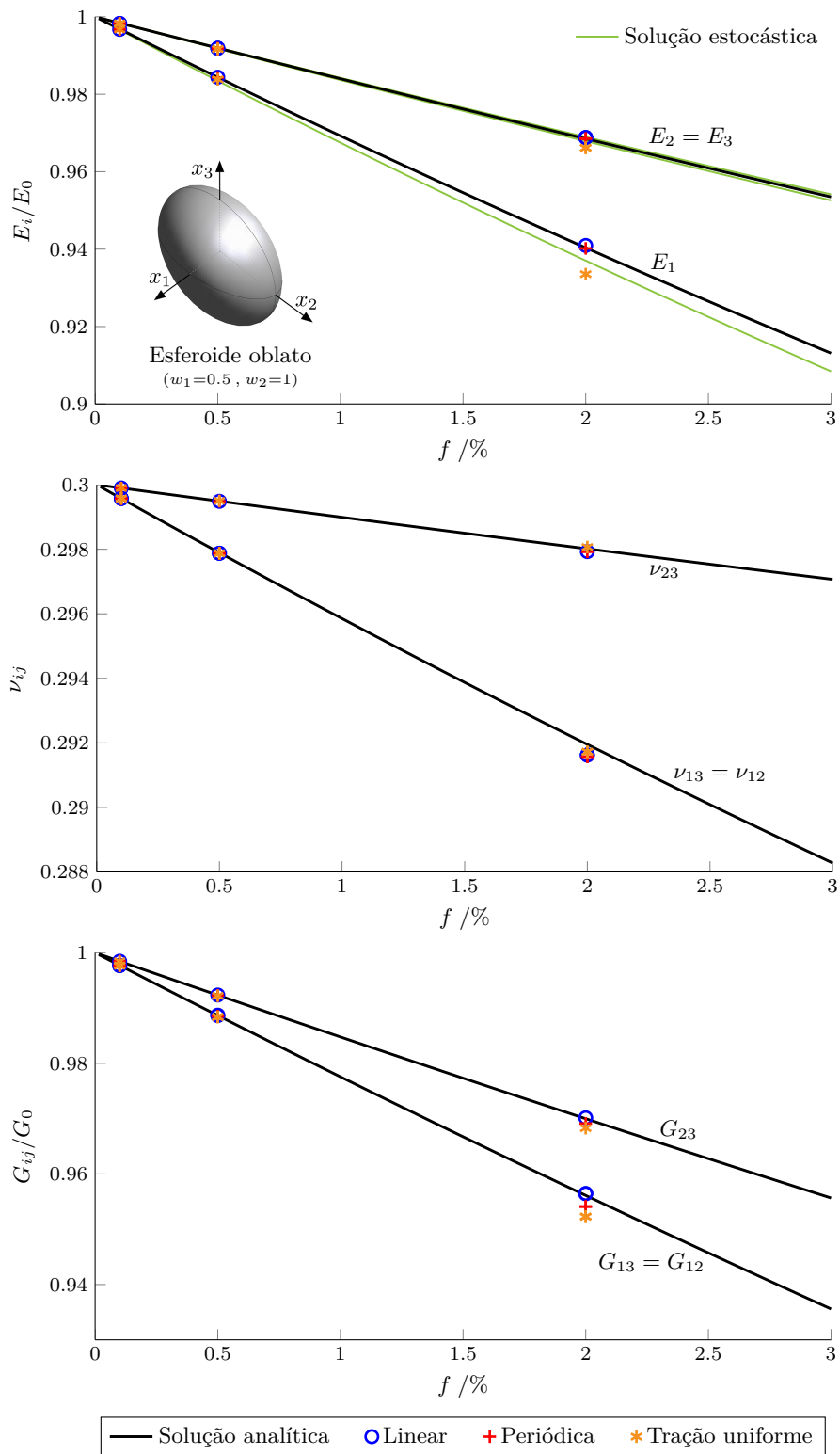


Figura 5.8: Resultados obtidos para o vazio esferoidal oblato.

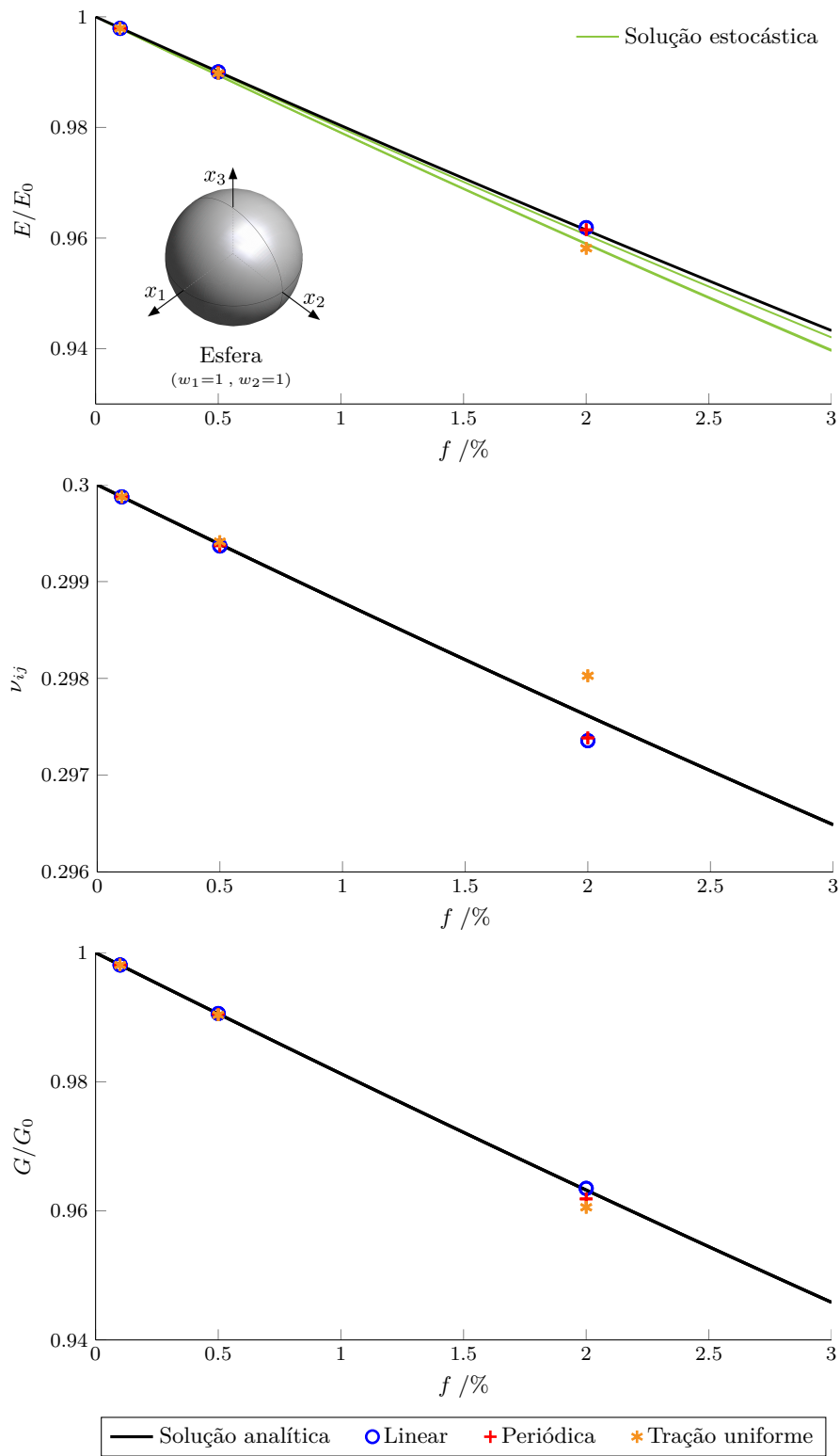


Figura 5.9: Resultados obtidos para o vazio esférico.

## 5.6 Análise de resultados

Analisando-se de um ponto de vista geral as várias curvas da evolução de todas as constantes elásticas efetivas, observa-se uma diminuição das propriedades elásticas com o aumento da fração volúmica. Constata-se ainda que no caso do elipsoide são obtidas três curvas distintas, nos esferoides duas e na esfera apenas uma curva. Este facto reflete o tipo de isotropia efetiva do material, justificada com base nas propriedades de simetria do vazio. Note-se que na determinação das constantes elásticas foi sempre admitido o caso geral do material ser ortotrópico, tornando-se possível este tipo de verificação.

No caso do elipsoide, verificam-se as relações:

$$E_1 > E_2 > E_3, \quad \nu_{13} > \nu_{23} > \nu_{12}, \quad G_{12} > G_{13} > G_{23}.$$

Atendendo à geometria do vazio, conclui-se que o material apresenta maior rigidez na direção normal ao plano que contém a menor secção do elipsoide, e vice-versa. O mesmo raciocínio é aplicado ao caso dos esferoides, sendo que neste caso apenas uma das direções difere das restantes. É também observado que, à exceção do caso da esfera, a diferença relativa entre as constantes elásticas aumenta com a fração volúmica. Logo pode-se concluir que o grau de anisotropia do material aumenta com a fração volúmica.

Examinando com maior detalhe os resultados obtidos por via numérica, observa-se que a diferença entre as constantes elásticas obtidas com diferentes condições de fronteira aumenta com a fração volúmica. Este resultado é coerente na medida em que, para frações volúmicas superiores o vazio se encontra mais próximo dos limites do RVE e, portanto, o efeito da condição na fronteira tem maior influência no modo como o vazio se deforma.

Verifica-se também que na evolução do módulo de *Young* e do módulo de rigidez transversal, para a fração volúmica  $f = 2\%$  (onde as diferenças são mais acentuadas) os resultados obtidos com a condição de fronteira linear são sempre superiores aos da condição de fronteira periódica. Por sua vez, a condição de tração uniforme na fronteira corresponde ao limite inferior, encontrando-se sempre abaixo das restantes. Estes resultados são consistentes com o grau de restrição imposto ao campo de flutuação de deslocamentos do RVE:

- A condição de fronteira linear, como impõe que o campo de flutuação de deslocamentos é nulo na fronteira, é a mais restritiva das três e, por isso, corresponde ao limite superior da resposta efetiva do material;
- A condição de tração uniforme na fronteira é baseada no *conjunto de flutuações de deslocamentos mínimamente restringido* e, portanto, corresponde à situação em que o RVE tem maior liberdade para se deformar.

Estas diferenças são ainda mais acentuadas na evolução do coeficiente de *Poisson*, onde se verifica o maior desvio relativamente às previsões analíticas. Neste caso,

o limite superior é dado pela condição de tração uniforme na fronteira e o inferior pela condição de fronteira linear. Estes resultados são coerentes na medida em que, como coeficiente de *Poisson*, por definição, relaciona a deformação transversal em relação à direção longitudinal de aplicação da carga, na condição de tração uniforme o RVE tem maior liberdade para se deformar e, conseqüentemente, a deformação transversal será maior: o coeficiente de *Poisson* é superior.

Relativamente à solução estocástica, observa-se uma boa correlação com a previsão analítica e os resultados obtidos. Embora na formulação das duas soluções, analítica e estocástica, se encontrem princípios distintos, nos exemplos analisados os resultados finais são bastante aproximados. No caso dos vazios esférico e esférico não se confirmou de forma exata o respetivo tipo de isotropia, encontrando-se no entanto os resultados bastante próximos dessa condição. Isto justifica uma abordagem comum neste tipo de estudos, que é a aproximação de vazios com formas irregulares por elipsoides equivalentes (Figura 5.10). A principal vantagem deste tipo de aproximação reside no facto de existirem disponíveis soluções analíticas exatas para a cavidade elipsoidal, tornando o problema mais simples. É possível encontrar na publicação Drach, Tsukrov et al. (2011) um exemplo deste tipo de estratégia.

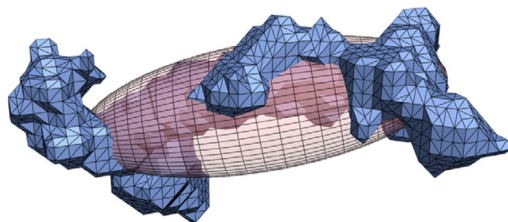


Figura 5.10: Vazio irregular aproximado por um elipsoide (Drach, Tsukrov et al., 2011).

## 5.7 Malha refinada

Pretendendo-se avaliar o grau de confiança dos resultados anteriores, procedeu-se a um refinamento da malha utilizada. Considerou-se apenas o caso da fração volumica  $f = 2\%$ , visto que corresponde ao caso onde as diferenças nos resultados obtidos com diferentes condições de fronteira é maior. Encontra-se representado na Figura 5.11 as malhas refinadas, indicando-se na legenda o número de elementos.

### 5.7.1 Resultados obtidos

Os resultados obtidos com a malha refinada (não incluídos no documento) encontram-se praticamente sobrepostos com os obtidos com a malha inicial, tendo-se verifi-

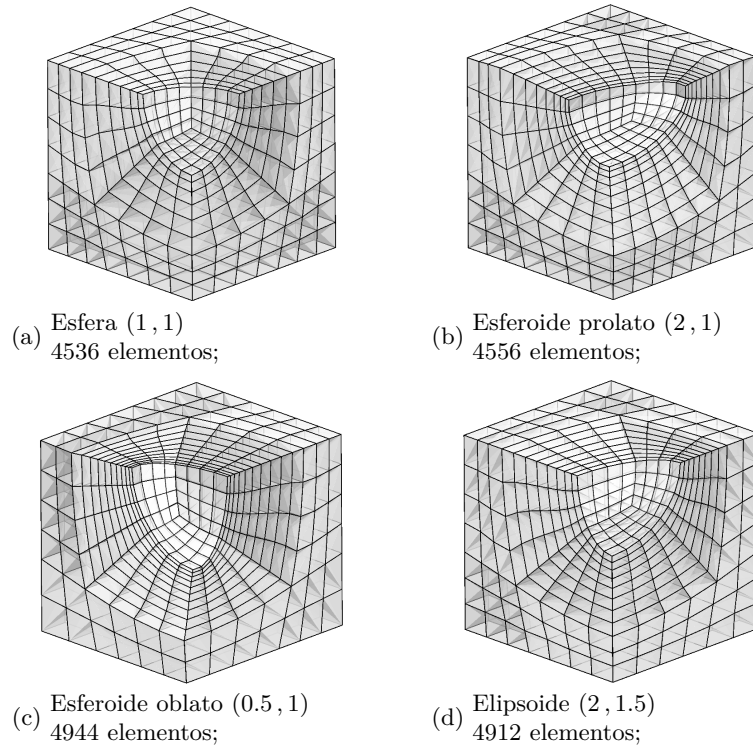


Figura 5.11: Malhas refinadas com vazios com diferentes proporções  $(w_1, w_2)$  e fração volúmica  $f = 2\%$  (é representado apenas 1/8 do RVE).

cado um desvio máximo entre os dois resultados inferior a 0.1%. Conclui-se com isto que a malha inicial consegue reproduzir de forma suficientemente precisa o comportamento elástico do material.

## 5.8 Conclusões

Neste capítulo são introduzidos os principais conceitos do comportamento linear elástico de materiais porosos com cavidades elipsoidais. Iniciando-se pela descrição detalhada da lei de *Hooke*, são depois apresentadas várias metodologias para o tratamento do problema de materiais porosos: a solução analítica exata de Kachanov, Tsukrov et al. (1994) para materiais com cavidades elipsoidais, uma metodologia estocástica (Drach et al., 2014) e, por último, a estratégia numérica adotada para a determinação das constantes elásticas efetivas.

Com os resultados obtidos é possível concluir que a geometria dos vazios existentes à micro-escala poderá condicionar a lei elástica a utilizar à macro-escala. É verificado que o aumento da fração volúmica provoca uma diminuição das propriedades elásticas e um aumento do grau de anisotropia do material. É observada

uma boa correspondência entre as previsões analíticas e os resultados obtidos, bem como uma relação direta do tipo de isotropia efetiva com as propriedades de simetria do vazio. Relativamente à solução estocástica, embora determinada a partir de vazios com formas irregulares, verifica-se uma boa correlação com os restantes resultados. Procedeu-se ainda a um refinamento da malha utilizada, não sendo registada qualquer alteração significativa nos resultados obtidos.

## Capítulo 6

# Análise do início da cedência plástica em materiais dúcteis

---

Uma das potencialidades de aplicação dos *Modelos Multi-Escala* é o desenvolvimento, validação ou otimização de modelos constitutivos macroscópicos. Este capítulo vem enquadrado no estudo do dano dúctil e o objetivo principal é a avaliação, por homogeneização computacional, de alguns dos modelos teóricos existentes na literatura. Mais precisamente, é avaliada a condição de cedência plástica em materiais porosos submetidos a deformações volumétricas positivas, estudando-se o efeito da geometria dos vazios nas respectivas curvas de cedência. A metodologia proposta é inspirada no trabalho de Giusti et al. (2009), avançando-se no entanto para análises tri-dimensionais de vazios com geometrias mais complexas, na hipótese de grandes deformações. Refira-se que em Fritzen et al. (2012) também são utilizados modelos 3D, embora seja considerado que o RVE possui múltiplos vazios dispersos aleatoriamente.

Na primeira secção é estudado o comportamento de materiais porosos com vazios cilíndricos, através de um modelo 2D e também 3D. Para ambos os modelos é descrita a geometria do RVE, a sua discretização e as propriedades da matriz, bem como a estratégia adotada para a imposição da deformação ao RVE. É também proposto um critério de cedência macroscópica, baseado na evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado. Na segunda secção é realizada uma análise semelhante à primeira, considerando-se neste caso vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais. Com os resultados obtidos são traçadas as curvas de cedência, procurando-se avaliar algumas das particularidades existentes tendo em conta os fenómenos de plasticidade observados no RVE. São também traçadas as respectivas curvas de cedência teóricas e comparadas com os resultados obtidos.

## 6.1 Vazio cilíndrico

O estudo da influência dos vazios cilíndricos tem interesse prático, por exemplo, em materiais cuja microestrutura inclui inclusões alongadas numa determinada direção. Nestes materiais, a partir de um determinado valor de deformação plástica podem formar-se vazios que, de forma aproximada, podem ser considerados cilíndricos (Gurson, 1977).

### 6.1.1 Modelação 2D do problema

O comportamento de um material poroso com vazios cilíndricos pode ser modelado, numa análise multi-escala, através de um RVE bi-dimensional em estado plano de deformação com um vazio circular no seu interior. Nos tópicos seguintes são descritos os vários aspetos do modelo utilizado.

#### Geometria do RVE

O RVE utilizado consiste num quadrado de dimensões

$$l_{\text{RVE}} = 1 \text{ mm} ,$$

contendo um vazio circular no seu centro. São consideradas três frações volúmicas:  $f = 0.1, 0.5$  e  $2\%$ . O raio do vazio, designado pela variável  $r$ , é determinado a partir da relação

$$r = \sqrt{\frac{f}{\pi}} , \quad (6.1)$$

que tem como base a definição de fração volúmica de vazios e a expressão de cálculo da área de um círculo. Note-se que o raio calculado a partir da expressão (6.1) vem em milímetros, uma vez que está implícito que  $A_{\mu} = 1 \text{ mm}^2$ .

#### Malha de elementos finitos

Na discretização do RVE são utilizados elementos quadriláteros de 8 nós, com integração reduzida ao longo de 4 pontos de *Gauss*. São utilizadas malhas estruturadas (Figura 6.1), desenhadas através de uma metodologia em tudo semelhante à das malhas já apresentadas no Capítulo 5. Neste caso, tratando-se de um problema 2D, são utilizadas curvas de concordância entre a circunferência do vazio e as arestas do RVE.

#### Propriedades da matriz

Tal como no Capítulo 5, é admitido que a matriz é isotrópica, elasto-perfeitamente plástica e caracterizada pelo modelo constitutivo de *von Mises*. As propriedades

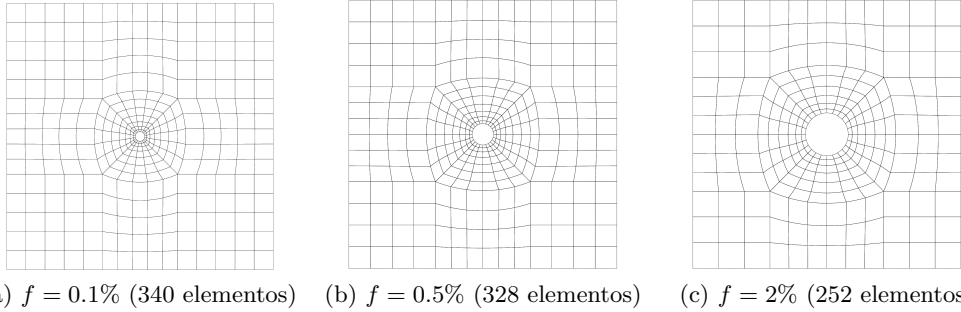


Figura 6.1: Malhas de elementos finitos do RVE 2D com vazio circular.

mecânicas consideradas são também as mesmas, nomeadamente:

$$E = 200 \text{ GPa} , \quad \nu = 0.3 , \quad \sigma_y = 240 \text{ MPa} .$$

### Imposição do gradiente de deformação

A estratégia utilizada para avaliar a transição elasto-plástica dos diferentes RVE's consiste em submeter cada RVE a um conjunto significativo de solicitações. Posteriormente, é efetuada a homogeneização das tensões e analisada a transição do domínio elástico para o plástico, tipicamente definida por uma função de cedência.

Para que sejam obtidas as curvas de cedência é necessário efetuar um varrimento dos vários estados de tensão compreendidos entre a solicitação puramente desviadora ( $p = 0$ ) e puramente hidrostática ( $\sigma_{\text{eq}} = 0$ ). Como no programa MSP é imposto o gradiente de deformação, a estratégia proposta consiste na definição do parâmetro  $\alpha$ , tal que

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{\alpha^2}{2}} & \sqrt{1 - \alpha^2} \\ 0 & \sqrt{\frac{\alpha^2}{2}} \end{bmatrix} , \quad (6.2)$$

com

$$0 \leq \alpha \leq 1 . \quad (6.3)$$

Quando  $\alpha = 0$  é imposto corte puro ao RVE, enquanto que  $\alpha = 1$  corresponde à situação de tração biaxial (Figura 6.2). Qualquer valor intermédio resulta numa combinação dos dois tipos de solicitação. Repare-se que a matriz que contém o parâmetro  $\alpha$  possui norma unitária, garantindo-se assim a magnitude da deformação aplicada é constante. No programa computacional a deformação é aplicada de forma incremental, tendo-se considerado uma discretização 'pseudo-temporal' de 10,000 incrementos.

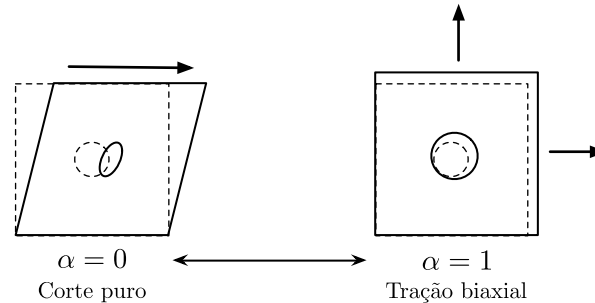


Figura 6.2: Representação esquemática da relação entre o parâmetro  $\alpha$  e a deformação imposta ao RVE.

### 6.1.2 Estabelecimento do critério de cedência macroscópica

O critério de cedência macroscópica utilizado é baseado na derivada da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado. Este tensor, introduzido no Capítulo 3, é o conjugado da taxa do gradiente de deformação e é uma medida de tensão que tem como referência a configuração não deformada do sólido. No Anexo G encontra-se um estudo preliminar com a sua evolução para diferentes solicitações, condições de fronteira e frações volúmicas, que serviu de base para o estabelecimento do critério utilizado. Contudo, para uma melhor compreensão do comportamento da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* é apresentada na Figura 6.3, nos moldes do estudo preliminar, a sua evolução até ao fator incremental total  $\lambda = 0.02$ , para várias solicitações, admitindo as condições de fronteira linear (limite superior) e de tração uniforme (limite inferior). O gráfico superior corresponde à fração volúmica  $f = 0.1\%$  e o inferior a  $f = 2\%$ .

Como se pode observar, a raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* reproduz de forma ponderada a evolução das várias componentes do tensor. Para a solicitação de corte puro observa-se uma estabilização após entrar em plasticidade, reproduzindo diretamente o comportamento das tensões de corte (ver caso  $\alpha = 0$  no Anexo G). Com a introdução da solicitação de tração biaxial (aumento do parâmetro  $\alpha$ ), a componente de corte vai desaparecendo e as curvas refletem a evolução das tensões normais (ver caso  $\alpha = 0.5$  no Anexo G). Note-se ainda que a ligeira inflexão observada na região  $\lambda \approx 0.0025$ , relacionada com a inflexão das tensões de corte, também se vai atenuando à medida que a componente de deformação de tração prevalece em relação à componente de corte. O aumento da fração volúmica provoca a diminuição generalizada da magnitude das tensões e uma atenuação da sua inflexão.

Posto isto, a cedência plástica será assinalada na região de inflexão. Mais precisamente, o critério consiste em considerar que o material entra em cedência plástica quando a derivada da raiz quadrada da dupla contração atinge um valor

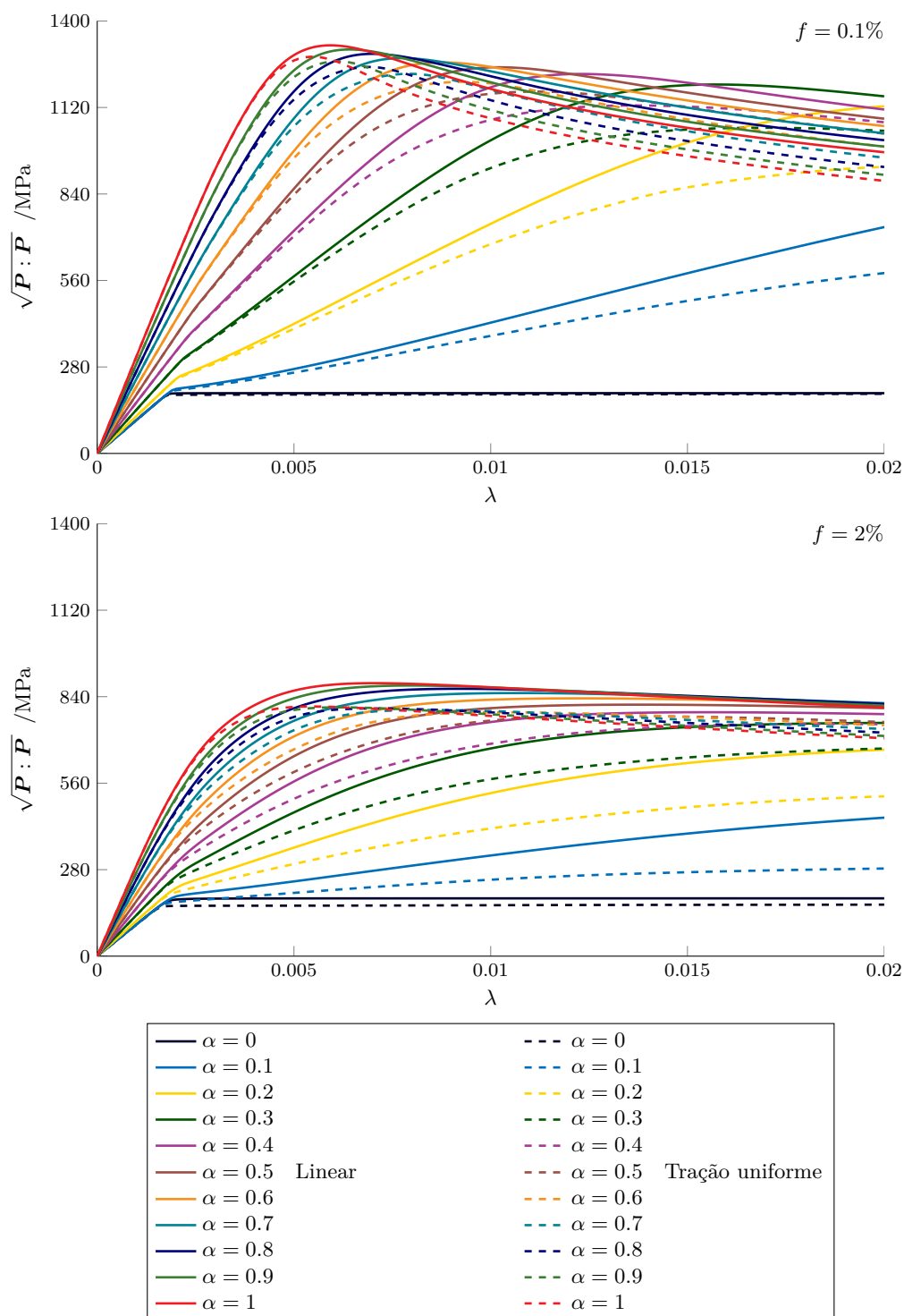


Figura 6.3: Evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* até ao fator incremental total  $\lambda = 0.02$ , para diferentes solicitações e condições de fronteira. O gráfico superior corresponde ao caso  $f = 0.1\%$  e o inferior a  $f = 2\%$ .

igual ou inferior a 5% da derivada correspondente ao domínio elástico, ou seja:

$$\frac{\mathcal{P}_{n+1} - \mathcal{P}_n}{\Delta\lambda} \leq 0.05\mathcal{P}_e, \quad (6.4)$$

onde

$$\mathcal{P} \equiv \sqrt{\mathbf{P} : \mathbf{P}}, \quad (6.5)$$

e  $\mathcal{P}_e$  é o valor de  $\mathcal{P}$  no domínio elástico. A tolerância de 5% garante a aplicabilidade deste critério mesmo nos casos em que as tensões estabilizam, tal como observado na solitação de corte puro.

A título de exemplo, na Figura 6.4 são apresentados no plano  $(\sigma_{eq}/\sigma_y, p_\gamma/\sigma_y)$  os resultados obtidos para várias solitações com fração volúmica  $f = 2\%$  e condição de fronteira linear, colocando-se em evidência os pontos onde é verificado o critério de cedência proposto. É também representada a configuração deformada do RVE para três casos particulares, ilustrando-se assim a relação entre a deformação imposta à micro-escala e o respetivo ponto da curva de cedência, à macro-escala.<sup>1</sup>

**Nota.** *No cálculo da tensão equivalente e da pressão hidrostática, apenas são consideradas as componentes de tensão no plano do vazio.*

Como nota final, refira-se que nas publicações Fritzen et al. (2012) e Giusti et al. (2009) são realizados estudos semelhantes ao apresentado neste capítulo, verificando-se contudo tensões com um comportamento diferente do aqui descrito: o critério de cedência é baseado na estabilização da tensão equivalente e hidrostática, não sendo observado qualquer tipo de inflexão. A diferença de resultados poderá ser justificada no facto do programa aqui utilizado se encontrar implementado para grandes deformações, permitindo assim que o possível amaciamento provocado pelo crescimento do vazio seja levado em consideração. Repare-se contudo que o critério aqui proposto, mesmo na hipótese das tensões estabilizarem, é capaz de reproduzir os mesmos resultados.

### 6.1.3 Curvas de cedência

Com o modelo descrito, foram calculados para as várias solitações os estados de tensão onde é verificado o critério de cedência proposto, encontrando-se na Figura 6.5 a representação no plano  $(\sigma_{eq}/\sigma_y, p_\gamma/\sigma_y)$  das curvas de cedência obtidas com as diferentes condições de fronteira, juntamente com as previsões do modelo de Gurson e GTN (com  $q_1 = 1.5$ ,  $q_2 = 1$  e  $q_3 = q_1^2$ ). O gráfico superior corresponde à fração volúmica  $f = 0.1\%$ , o do meio a  $f = 0.5\%$  e o inferior a  $f = 2\%$ .

<sup>1</sup>Para que seja mais facilmente visível o tipo de deformação imposta ao RVE, foi aplicado um fator de amplificação de 4 à deformada real.

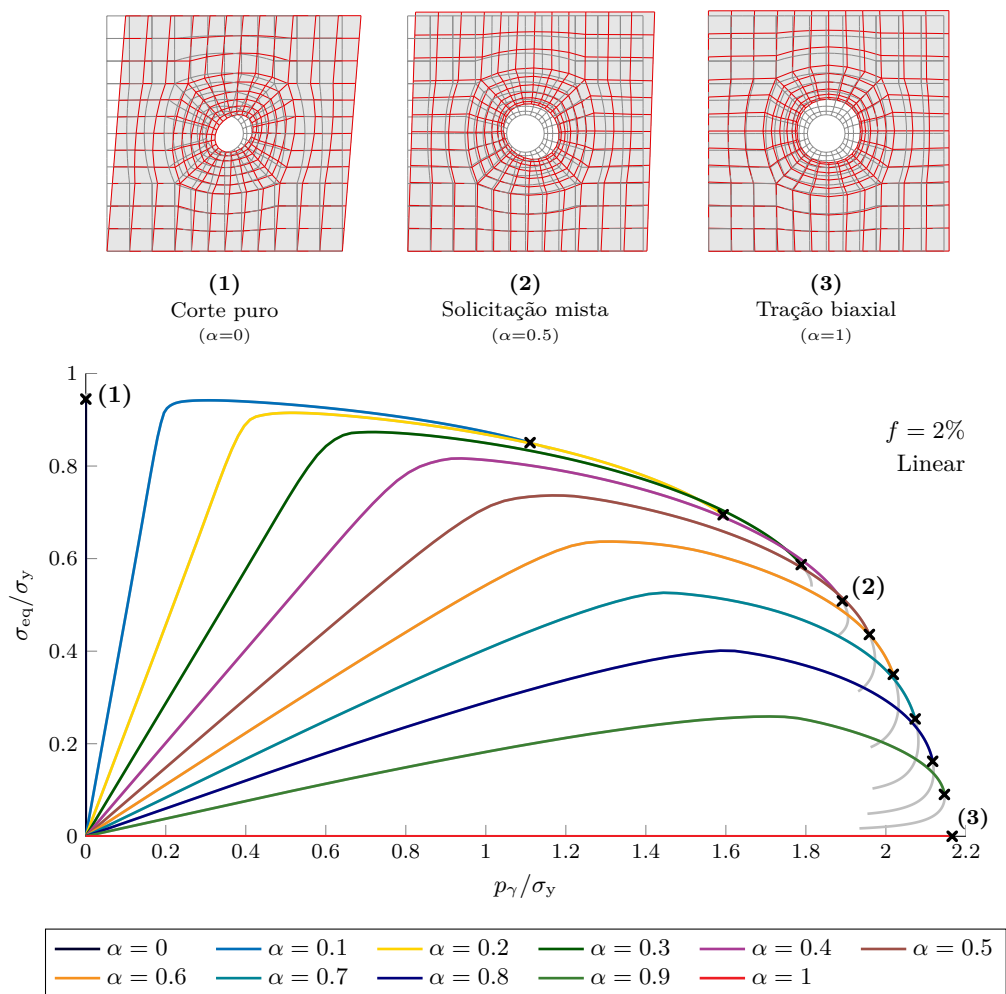


Figura 6.4: Resultados obtidos até ao fator incremental total  $\lambda = 0.02$ , para a fração volúmica  $f = 2\%$  e condição de fronteira linear. São também assinalados os pontos em que é verificado o critério de cedência proposto.

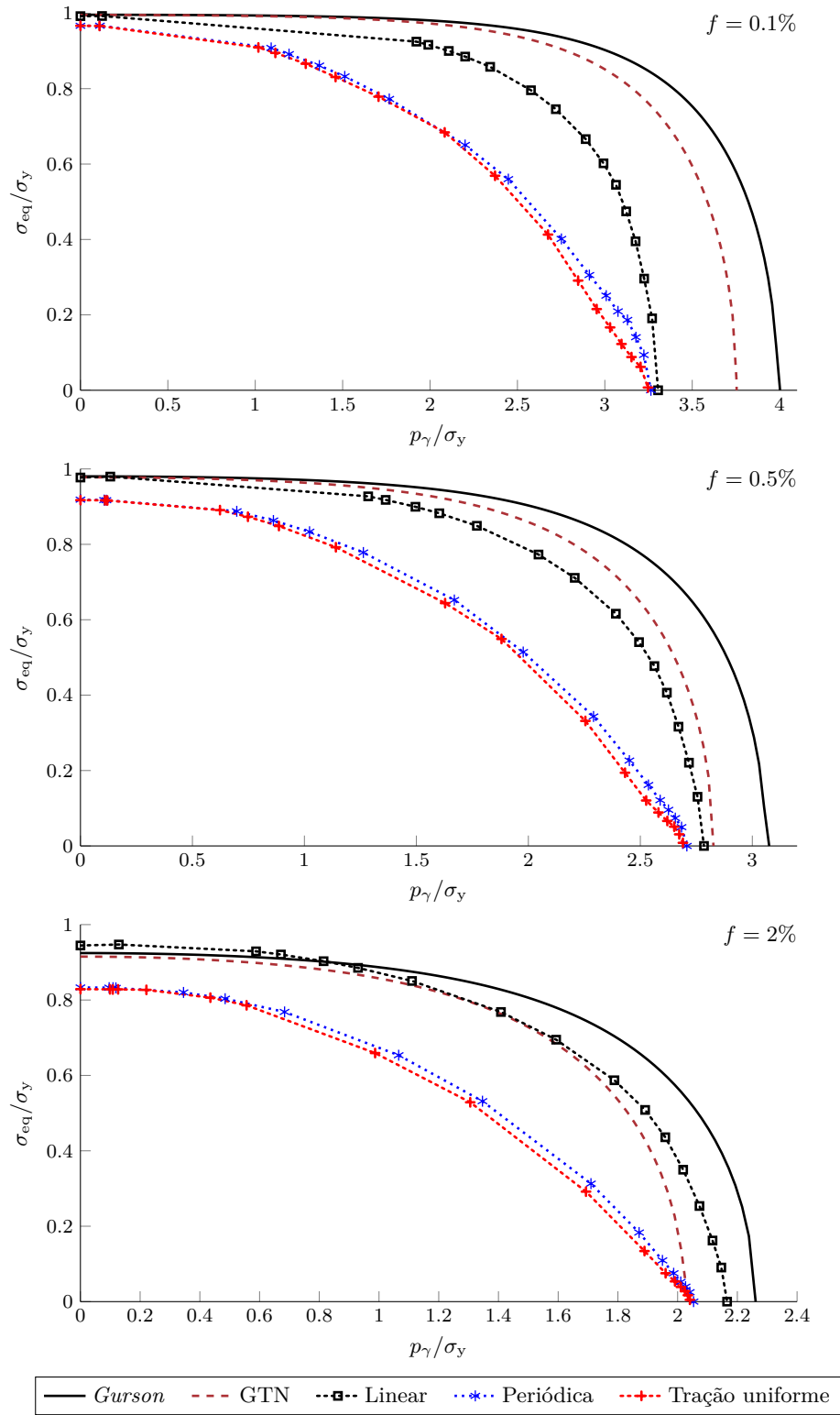


Figura 6.5: Curvas de cedência obtidas com o modelo 2D, juntamente com as previsões do modelo de Gurson e GTN.

#### 6.1.4 Análise de resultados

Como se pode observar na Figura 6.5, em todos os casos as curvas de cedência apresentam uma tipologia semelhante à das soluções de *Gurson* e GTN, onde o aumento da pressão hidrostática provoca uma diminuição da resistência do material. Comparando as diferentes frações volúmicas verifica-se que, tal como já referido no estudo paramétrico do Capítulo 4, o aumento das dimensões do vazio também provoca uma diminuição generalizada da capacidade de resistência do material.

Em regimes de baixa triaxialidade (pressão hidrostática reduzida), verifica-se uma boa correlação entre os resultados obtidos e as soluções teóricas, especialmente com a condição de fronteira linear. Este resultado é coerente na medida em que, da mesma forma que o modelo de *Gurson* é baseado nos limites superiores da plasticidade, a condição de fronteira linear fornece o limite superior da resposta do material. Logo pode-se concluir que, em regimes de baixa triaxialidade, os modelos teóricos são capazes de prever com precisão o limite superior da resposta de um material poroso com vazios cilíndricos. Analisando os resultados obtidos com as condições de fronteira periódica e de tração uniforme, constata-se que a diferença em relação à condição de fronteira linear aumenta com o aumento da fração volúmica. Para compreender melhor estas diferenças encontra-se nas Figuras 6.6 e 6.7 a deformação plástica equivalente acumulada na matriz do RVE no momento da cedência, para diferentes condições de fronteira e frações volúmicas. A Figura 6.6 corresponde à fração volúmica  $f = 0.1\%$  e a Figura 6.7 a  $f = 2\%$ .

Comparando as duas figuras, verifica-se que para fração volúmica  $f = 2\%$  (Figura 6.7) o efeito do vazio é mais pronunciado, sendo visível a formação de bandas de corte, ortogonais entre si e orientadas com o sistema de eixos do RVE. No caso  $f = 0.1\%$  (Figura 6.6) também se observam bandas de corte, mas a deformação plástica encontra-se maioritariamente na região envolvente do vazio. Assim sendo, como para frações volúmicas superiores a deformação plástica encontra-se mais dispersa e, acima de tudo, próxima dos limites do RVE, o efeito das condições na fronteira é mais acentuado.

Em regimes de elevada triaxialidade (pressão hidrostática elevada e tensão equivalente reduzida), existem diferenças entre as previsões dos modelos teóricos e os resultados obtidos. Para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  é claramente visível que os modelos teóricos aparentam sobrestimar o comportamento material, atenuando-se a diferença com o aumento da fração volúmica. Para ajudar a interpretar estes resultados, encontra-se na Figura 6.8, para a solicitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ) a deformação plástica equivalente do RVE no momento da cedência para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  e  $f = 2\%$  e condição de tração uniforme na fronteira. É também indicado o detalhe a região do vazio, juntamente com a malha na configuração não deformada.

Como se pode observar, para a solicitação de tração biaxial a deformação plás-

tica é maior do que no caso de corte puro e concentra-se totalmente no contorno do vazio. Analisando a fração volúmica  $f = 0.1\%$ , verifica-se que a diferença entre as dimensões do vazio no momento da cedência relativamente à configuração inicial é maior do que para a fração volúmica  $f = 2\%$ . Como o vazio da configuração inicial até à cedência plástica aumentou as suas dimensões, a resistência do material será tanto menor quanto maior for esse aumento. Por isso a diferença entre os resultados e as soluções teóricas é maior para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  do que para  $f = 2\%$ .

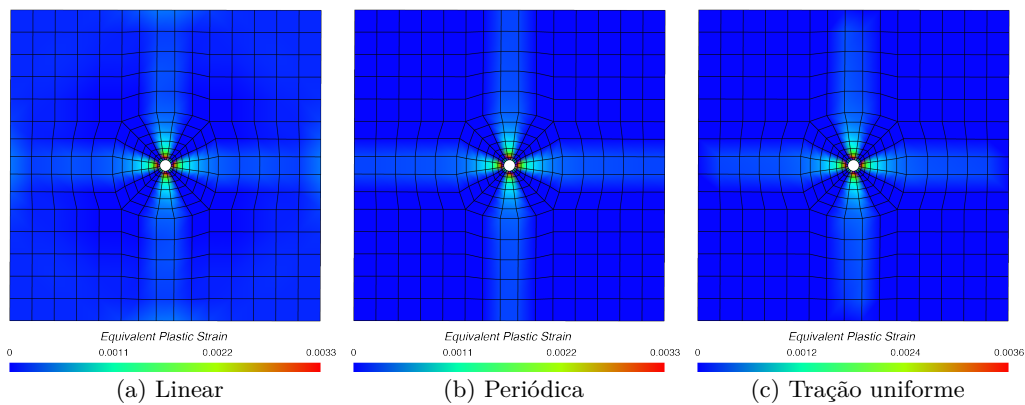


Figura 6.6: Deformação plástica equivalente na cedência plástica, para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ).

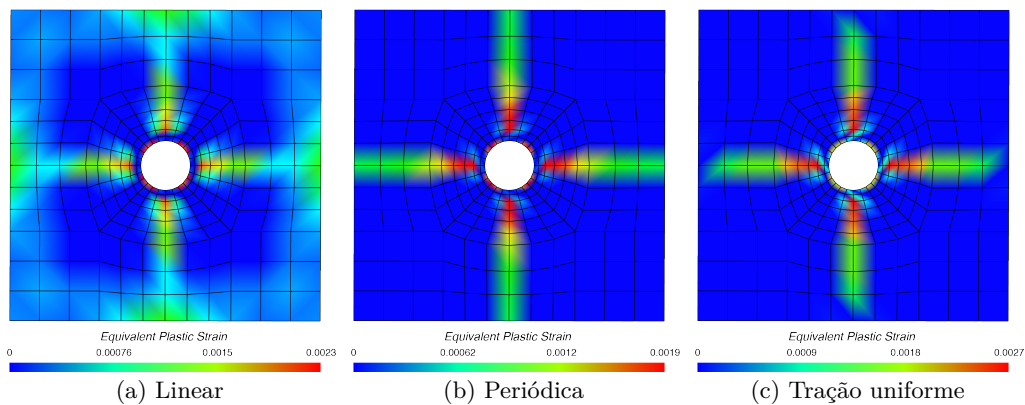


Figura 6.7: Deformação plástica equivalente na cedência plástica, para a fração volúmica  $f = 2\%$  e solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ).

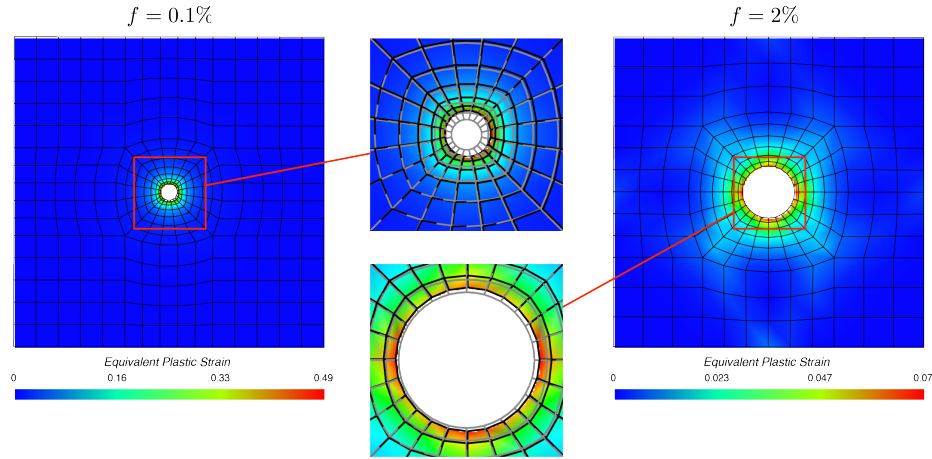


Figura 6.8: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a solicitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ), considerando as frações volúmicas  $f = 0.1\%$  e  $f = 2\%$ , com a condição de tração uniforme na fronteira.

### 6.1.5 Malha refinada

Foi também realizado um segundo conjunto de simulações, utilizando-se no entanto malhas com um maior grau de refinamento (Figura 6.9).

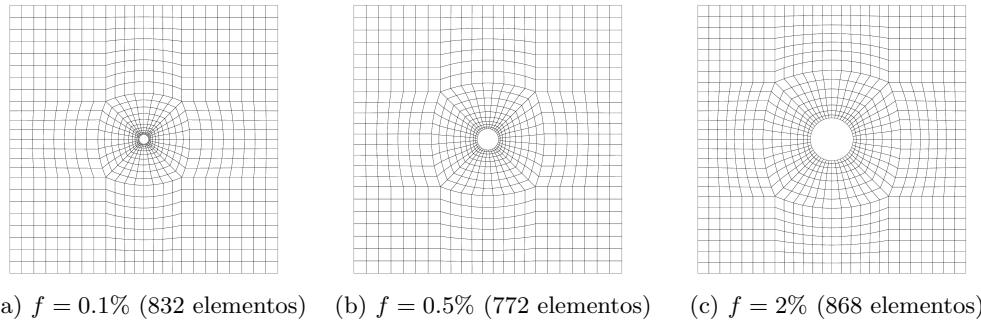


Figura 6.9: Malhas refinadas do RVE 2D com vazio circular.

### Resultados obtidos

Os resultados obtidos com a malha refinada (não apresentados neste documento) encontram-se praticamente sobrepostos com os resultados anteriores, podendo-se concluir que as malhas iniciais garantem um grau de confiança suficientemente elevado.

### 6.1.6 Modelação 3D do problema

Além dos modelos 2D em estado plano de deformação, o comportamento de materiais porosos com vazios cilíndricos pode também ser simulado através de modelos tri-dimensionais. Nesta secção é apresentado o modelo 3D utilizado, pretendendo-se no final comparar os resultados obtidos através da análise 3D e 2D.

É importante referir que:

- O critério de cedência utilizado permanece inalterado, uma vez que é aplicável tanto em análises 2D como 3D;
- À semelhança da análise 2D, para o cálculo da tensão equivalente e pressão hidrostática apenas são consideradas as componentes de tensão no plano do vazio.

#### Geometria do RVE

O RVE utilizado consiste num cubo com comprimento lateral

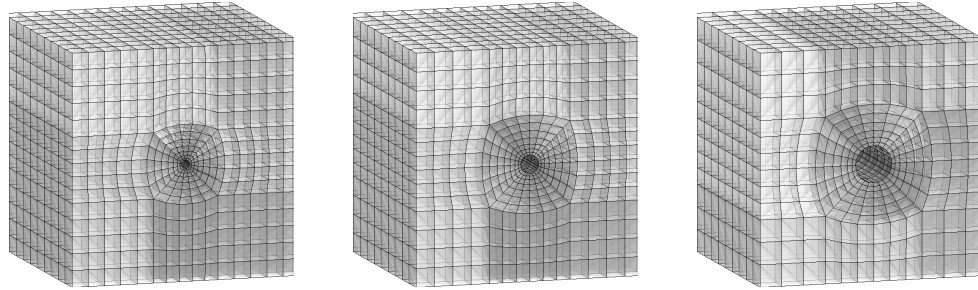
$$l_{\text{RVE}} = 1 \text{ mm} ,$$

com um vazio cilíndrico centrado. Foram consideradas as mesmas frações volúmicas ( $f = 0.1, 0.5$  e  $2\%$ ), calculando-se o raio do vazio da mesma forma que no modelo 2D.

**Nota.** *Refira-se que na análise 3D, dada a geometria do RVE, não foi utilizada a condição de tração uniforme na fronteira. Uma vez que o vazio se estende até à superfície do RVE, gera-se uma descontinuidade na fronteira. Isto obrigaria à adaptação do código utilizado, uma vez que a condição de tração uniforme é baseada num processo de integração ao longo da fronteira. Dado o objetivo deste trabalho e o grau de complexidade da implementação numérica da condição de tração uniforme, deu-se prioridade aos restantes estudos, ficando no entanto a sugestão dessa implementação para trabalhos futuros.*

#### Malha de elementos finitos

A malha de elementos finitos utilizada consiste basicamente na reprodução das malhas 2D ao longo da direção longitudinal do vazio. São utilizados, tal como no Capítulo 5, elementos hexaédricos de 20 nós com integração reduzida em 8 pontos de *Gauss*, encontrando-se representadas na Figura 6.10 as malhas para as três frações volúmicas analisadas.



(a)  $f = 0.1\%$  (3400 elementos) (b)  $f = 0.5\%$  (3280 elementos) (c)  $f = 2\%$  (2520 elementos)

Figura 6.10: Malhas de elementos finitos do RVE 3D com vazio cilíndrico.

### Imposição do gradiente de deformação

O gradiente de deformação imposto é em tudo semelhante ao considerado no modelo 2D, impondo-se neste caso a deformação no plano do vazio, ou seja

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{\alpha^2}{2}} & \sqrt{1 - \alpha^2} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\alpha^2}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.6)$$

Repare-se que em análises 3D o gradiente de deformação é uma matriz de dimensão 3. O número de incrementos considerado, cerca de 1500, é menor do que no caso 2D, devido ao maior peso computacional do modelo.

#### 6.1.7 Resultados obtidos

Na Figura 6.11 são apresentados os resultados obtidos, juntamente com as curvas de cedência obtidas com o modelo 2D e as respectivas soluções teóricas (modelo de *Gurson* e *GTN*).

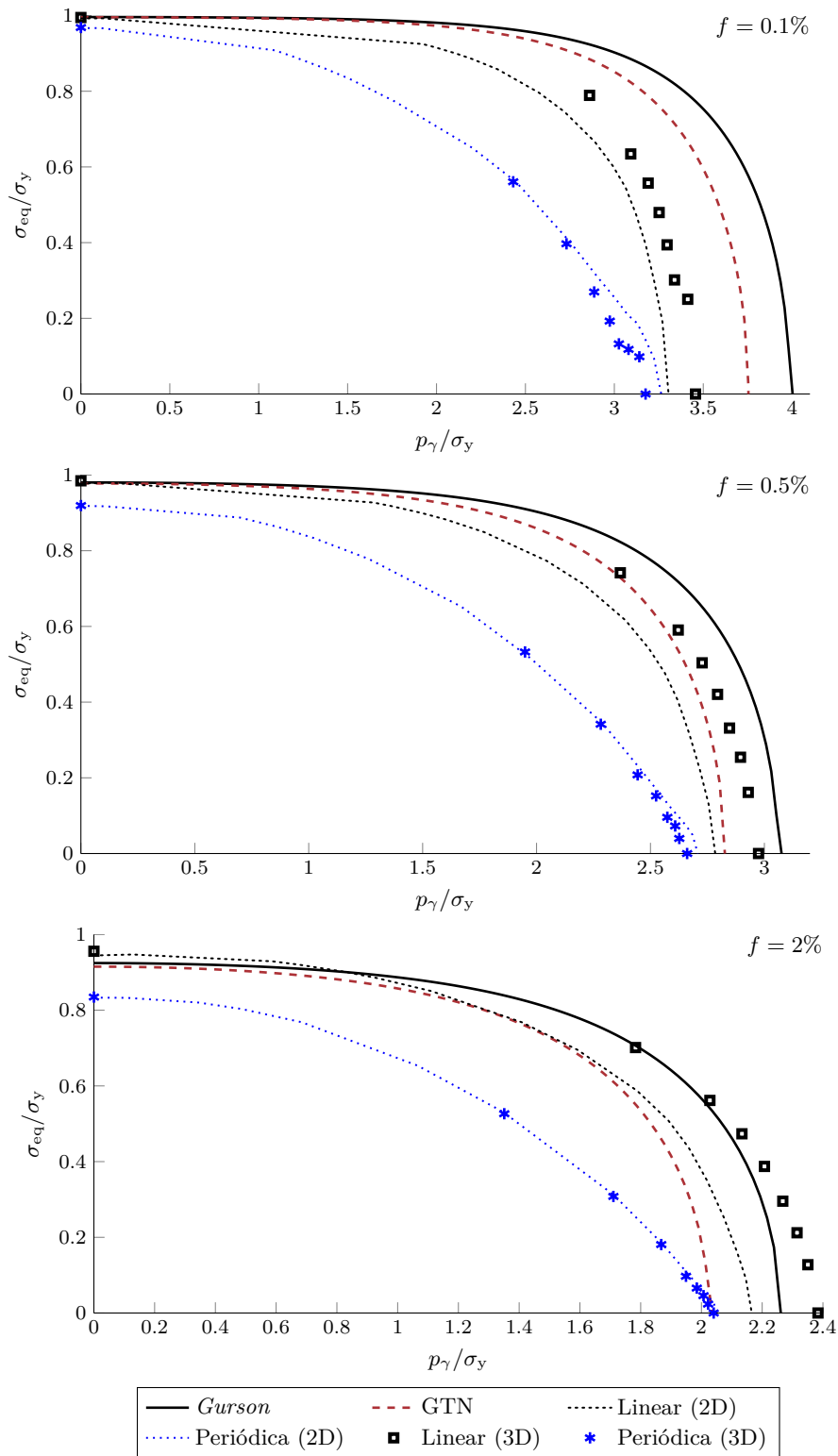


Figura 6.11: Comparação entre o modelo de *Gurson*, GTN, os resultados do modelo 3D e as curvas de cedência obtidas na análise 2D.

### 6.1.8 Análise de resultados

Analisando na generalidade os resultados obtidos, pode-se concluir que o modelo 3D com a condição de fronteira periódica reproduz com boa precisão os resultados obtidos com o modelo 2D. Este comportamento está perfeitamente de acordo com o esperado, dadas as propriedades do problema. Na hipótese de estado plano de deformação, o vazio circular representa um cilindro de comprimento infinito. Ora, como na condição de fronteira periódica o material pode ser imaginado como uma repetição periódica do RVE, o vazio repetir-se-ia de igual forma na direção longitudinal, formando um vazio de dimensões infinitas, tal como no estado plano de deformação. Para analisar com maior detalhe este fenómeno, encontra-se nas Figuras 6.12 e 6.13, num corte longitudinal do RVE, a deformação plástica equivalente no momento da cedência para a fração volúmica  $f = 0.1\%$ , com a condição de fronteira linear e periódica. A Figura 6.12 corresponde à solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ) e Figura 6.13 à solicitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ).

Como se pode observar em ambas as figuras, ao contrário do verificado com a condição de fronteira periódica, com a condição de fronteira linear a distribuição da deformação plástica ao longo do comprimento do vazio não é uniforme. Isto ocorre porque na condição de fronteira linear, apenas em secções suficientemente afastadas das superfícies é reproduzida a condição de estado plano de deformação. Uma possível solução para diminuir este efeito seria considerar um RVE mais comprido, garantindo-se assim uma atenuação da influência da fronteira no processo de homogeneização. No entanto, dado o peso computacional destas simulações e os meios disponíveis não foi possível realizar tal estudo.

Além das diferenças na distribuição da deformação plástica, um aspeto interessante também verificado na solicitação de tração biaxial (Figura 6.13) é que, com condição de fronteira linear, a geometria do vazio não é constante em todo o seu comprimento, observando-se uma redução da sua secção nos limites do RVE. Isto ocorre porque o vazio, até ao momento em que é verificado o critério de cedência, cresce. No entanto, nos limites do RVE a secção é menor porque na condição de fronteira linear é imposto que o campo de flutuação de deslocamentos na fronteira é nulo.

Analisando os resultados obtidos para a solicitação de corte puro, observa-se uma boa correlação entre os resultados obtidos com ambas as condições de fronteira. Uma possível interpretação para esta particularidade reside no facto do vazio não ser tracionado, o que faz com que a sua geometria não se altere significativamente e, conseqüentemente, o efeito da fronteira seja menos pronunciado. Na Figura 6.14 encontra-se a deformação plástica equivalente numa secção central do RVE, para a solicitação de corte puro e  $f = 2\%$ . Comparando com a Figura 6.7 (análise 2D correspondente), pode-se verificar a boa correlação obtida na distribuição de deformação plástica na matriz, especialmente para a condição de fronteira periódica.

Embora, do ponto de vista geral, os resultados obtidos com a condição de fronteira periódica sejam bastante coerentes com a análise 2D, observa-se para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  um ligeiro desvio dos resultados na região de elevada triaxilidade. Esta diferença poderá ter origem no número de incrementos: na análise 2D admitiu-se 10,000 incrementos enquanto que na análise 3D, devido ao peso computacional das simulações, assumiu-se cerca de 1500. No estudo preliminar (Anexo G), constatou-se que a inflexão das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* se acentua com a diminuição da fração volúmica. Ora, se a discretização ‘pseudo-temporal’ é mais grosseira, faz com que seja mais difícil reproduzir o ponto onde, teoricamente, se verificaria de forma exata o critério de cedência proposto. Por outro lado, como para a fração volúmica  $f = 2\%$  a inflexão das componentes do primeiro tensor *Piola-Kirchhoff* é mais suave, o efeito da discretização tem um efeito menos pronunciado nos resultados finais.

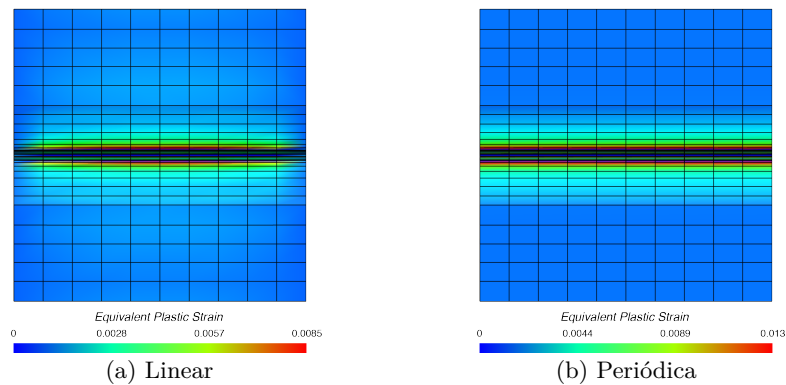


Figura 6.12: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  e solitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ).

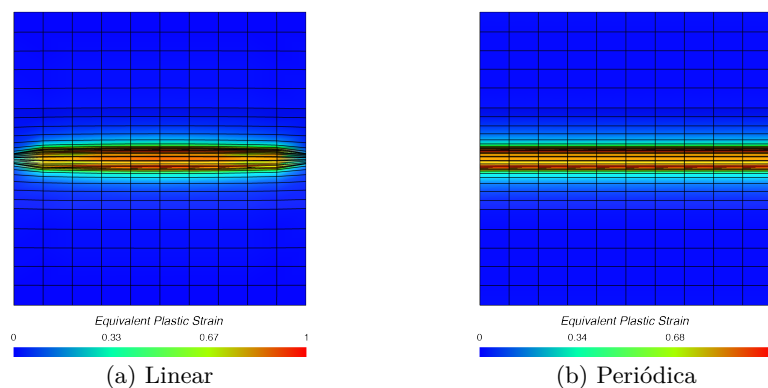


Figura 6.13: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  e solitação de tração biaxial ( $\alpha = 1$ ).

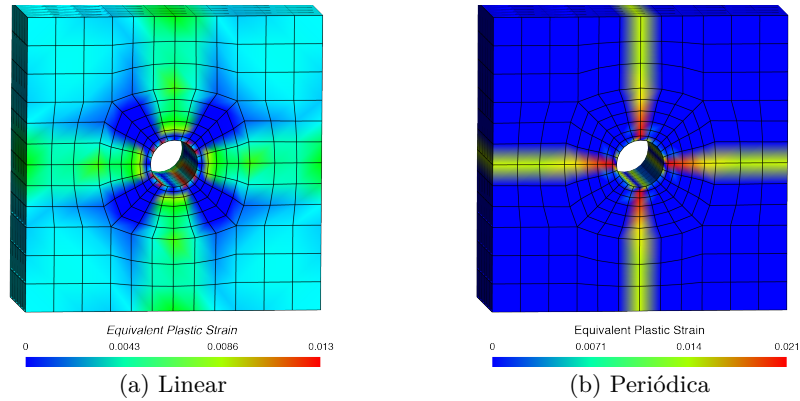


Figura 6.14: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para a fração volúmica  $f = 2\%$  e solitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ).

## 6.2 Vazio elipsoidal

Embora nos modelos clássicos de dano dúctil seja assumido que os vazios são cilíndricos ou esféricos, nos últimos anos vários autores (Gologanu et al., 1997; Kailasam, Castañeda e Willis, 1997; Danas e Castañeda, 2009b; Danas e Aravas, 2012; Madou e Leblond, 2012a,b; Madou, Leblond e Morin, 2013; Monchiet et al., 2014) procuraram desenvolver soluções para vazios com geometrias mais complexas, tais como esferoides e elipsoides. Nesta secção são analisados vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais, com o objetivo avaliar alguns dos modelos recentemente existentes na literatura, nomeadamente o modelo ML proposto por Madou e Leblond (2012a,b) e o modelo MVAR proposto por Danas e Aravas (2012).

### 6.2.1 Modelação 3D do problema

O modelo utilizado para este problema é em tudo semelhante ao utilizado no Capítulo 5 para a determinação das propriedades elásticas efetivas. A geometria do RVE, as malhas de elementos finitos e as propriedades da matriz são exatamente as mesmas, encontrando-se na Secção 5.4 a sua descrição. Resumidamente, são analisados, para as mesmas três frações volúmicas consideradas até agora, vazios com quatro geometrias diferentes: esfera ( $w_1 = 1, w_2 = 1$ ), esferoide prolato ( $w_1 = 2, w_2 = 1$ ), esferoide oblato ( $w_1 = 0.5, w_2 = 1$ ) e elipsoide ( $w_1 = 2, w_2 = 1.5$ ). Repare-se também que, relativamente ao modelo 3D utilizado na secção anterior para o estudo dos vazios cilíndricos, apenas é modificada a geometria do vazio e o tipo de deformação imposta.

### Imposição do gradiente de deformação

O gradiente de deformação imposto vem no seguimento da abordagem proposta na secção anterior, modificando-se apenas a componente de tração biaxial para tração triaxial (Figura 6.15), ou seja:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} & \sqrt{1-\alpha^2} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} \end{bmatrix}. \quad (6.7)$$

Tal como nos estudos anteriores, a norma da matriz que contém o parâmetro  $\alpha$  é unitária, garantindo-se assim que a magnitude da deformação imposta é constante. Dado o grande volume de simulações a realizar e o peso computacional das mesmas, foi assumida uma discretização ‘pseudo-temporal’ de 1500 incrementos.

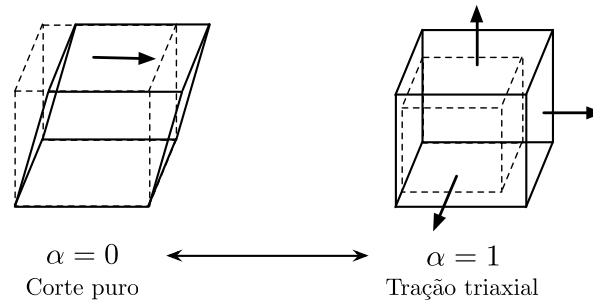


Figura 6.15: Representação esquemática da relação entre o parâmetro  $\alpha$  e a deformação imposta ao RVE.

### Crítério de cedência

Com o estudo preliminar apresentado no Anexo G, é possível constatar que no caso do vazio esférico (bem como nas restantes geometrias analisadas), o comportamento do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* é relativamente semelhante ao observado no caso dos vazios cilíndricos. Por este motivo, o critério de cedência utilizado será o mesmo da secção anterior.

#### 6.2.2 Curvas de cedência

Na Figura 6.16 são apresentadas, para as três frações volúmicas analisadas, as curvas de cedência obtidas com o vazio esférico. As Figuras 6.17, 6.18 e 6.19 correspondem aos casos do esferoide prolato, oblato e elipsoide, respetivamente. São

também representadas as curvas teóricas obtidas com os modelos ML e MVAR, incluindo-se ainda no caso da esfera a solução do modelo de *Gurson* e GTN (com  $q_1 = 1.5$ ,  $q_2 = 1$  e  $q_3 = q_1^2$ ).

Como descrito no Capítulo 4, no caso dos esferoides e elipsoides as curvas de cedência dos modelos ML e MVAR dependem do parâmetro de *Lode*. Para avaliar qual o comportamento deste parâmetro nas simulações numéricas, incluiu-se a sua análise no estudo preliminar apresentado no Anexo G. Com os resultados obtidos chegou-se à conclusão que o parâmetro de *Lode* é nulo no regime elástico, evoluindo depois para valores compreendidos entre 0 e 1. Logo, ao traçar as curvas de cedência teóricas é assumido

$$L = 0 ,$$

uma vez que, tal como demonstrado no estudo paramétrico do Capítulo 4, para este valor as curvas de cedência são, no regime de tração, mais conservadoras do que no caso  $L = 1$ . Assim, será possível verificar com precisão se os modelos teóricos sobrestimam ou não a resposta do material.

**Nota.** *Analisando com atenção o estudo paramétrico do Capítulo 4, constata-se que a afirmação anterior não é verdade no modelo MVAR no caso do esferoide oblato. No entanto, como o efeito do parâmetro de Lode nas curvas de cedência do modelo MVAR é reduzido (atenuando-se ainda mais as diferenças com a diminuição da distorção do esferoide), assumiu-se o mesmo valor para todas as curvas teóricas.*

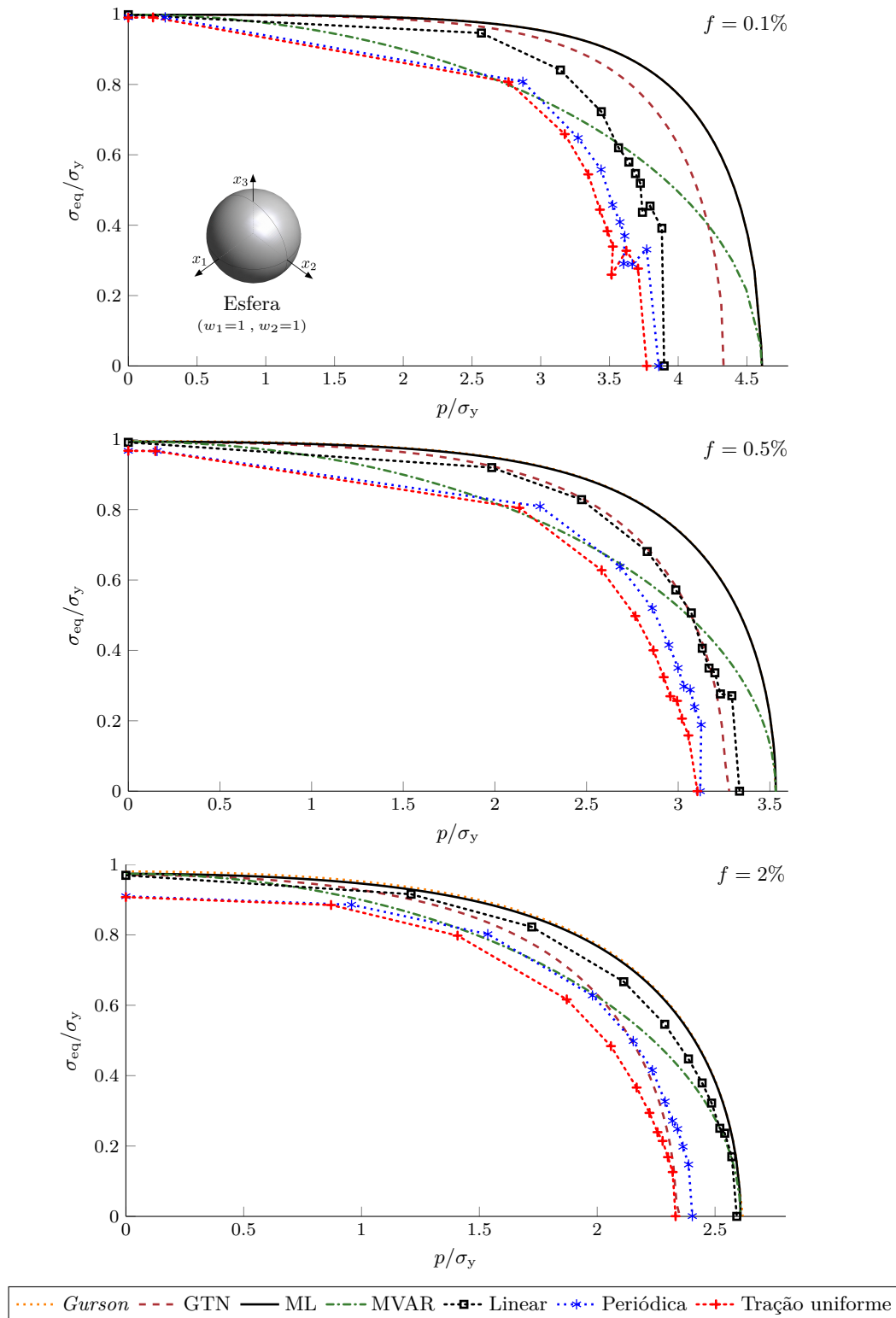


Figura 6.16: Vazio esférico: curvas de cedência calculadas e as respectivas soluções teóricas (*Gurson*, *GTN*, *ML* e *MVAR*).

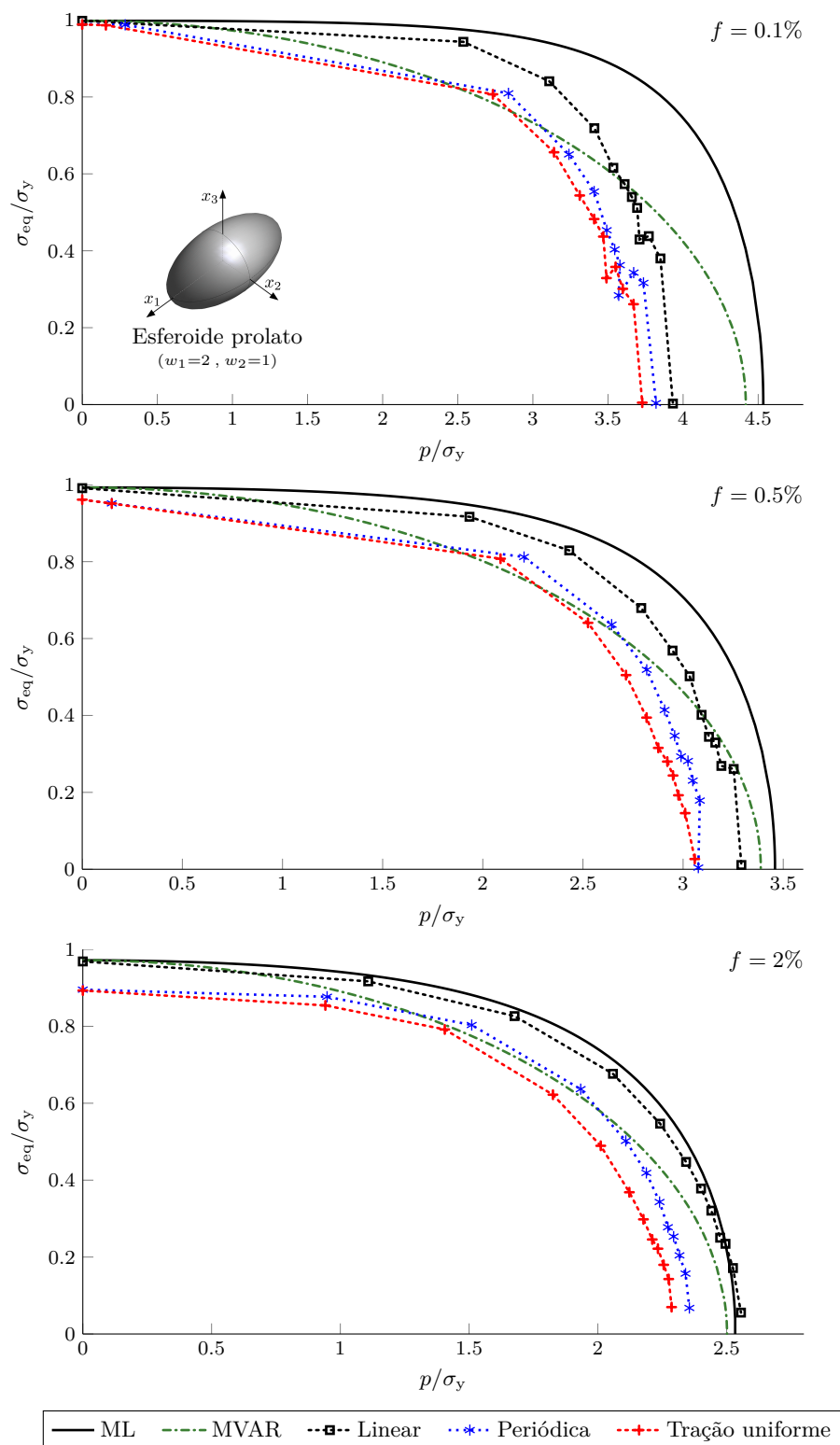


Figura 6.17: Vazio esferoidal prolato ( $w_1 = 2, w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

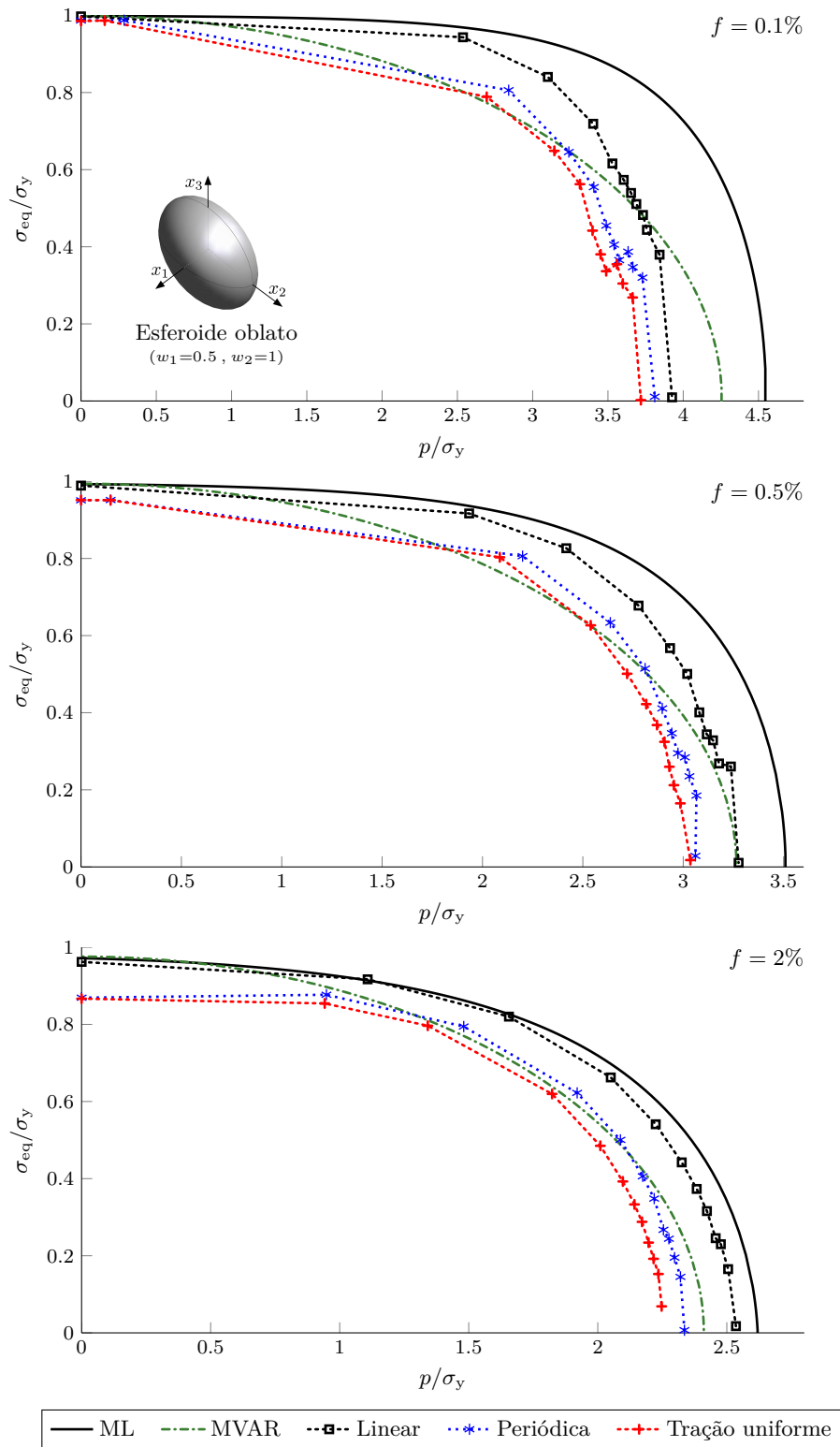


Figura 6.18: Vazio esferoidal oblato ( $w_1 = 0.5$ ,  $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

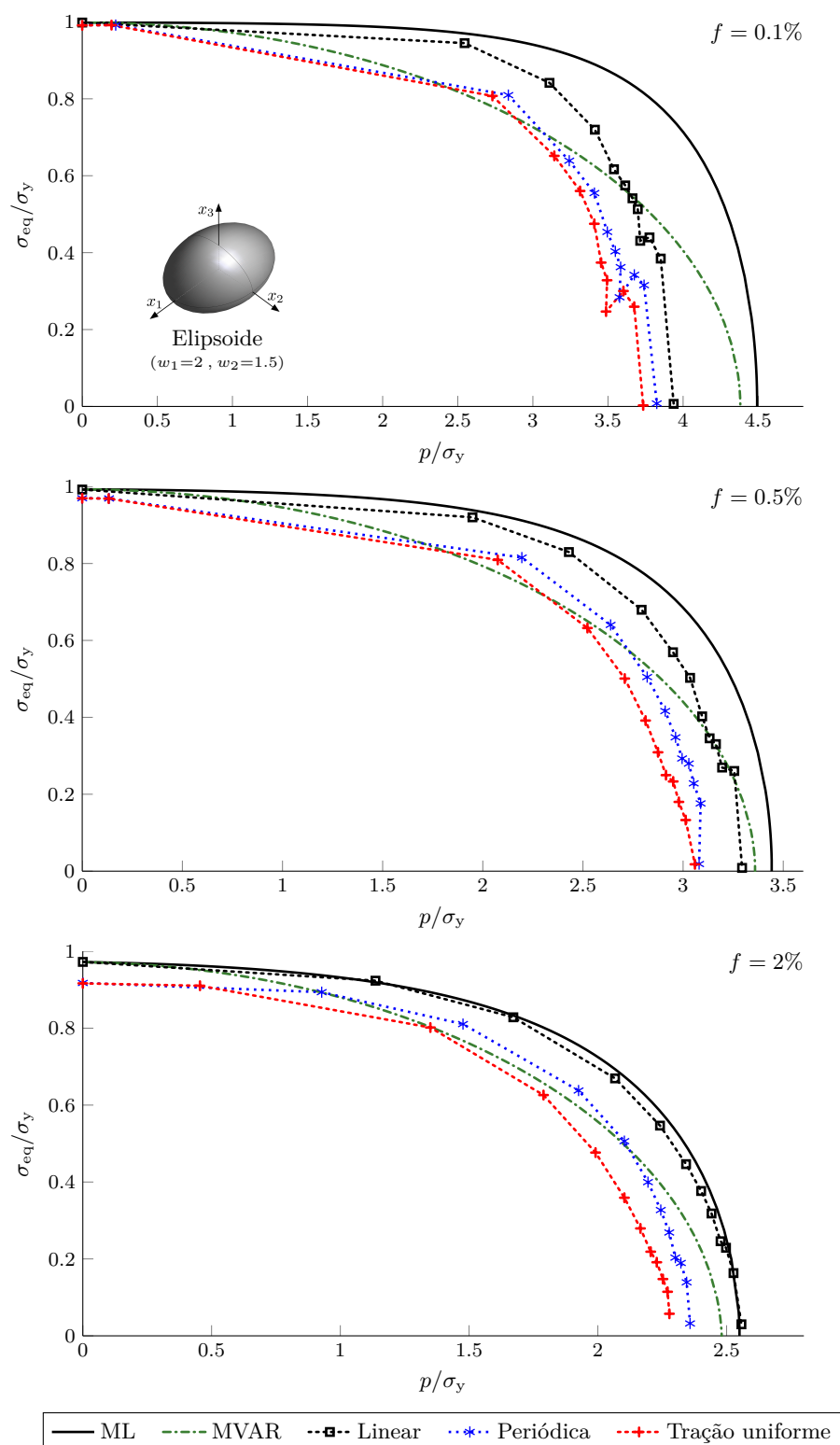


Figura 6.19: Vazio elipsoidal ( $w_1 = 2$ ,  $w_2 = 1.5$ ): curvas de cedência calculadas e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

### 6.2.3 Análise de resultados

Analisando de forma geral os resultados obtidos, constata-se que algumas das particularidades observadas da análise dos vazios cilíndricos voltam a ser verificadas:

- Na região de baixa triaxilidade existe uma boa correlação entre os resultados obtidos e as previsões teóricas, especialmente para a condição de fronteira linear. Com a condição de fronteira periódica e de tração uniforme existem ligeiras diferenças, que se acentuam com o aumento da fração volúmica;
- Na região de maior triaxilidade, e acima de tudo para frações volúmicas reduzidas, as curvas de cedência calculadas são mais conservadoras que as dos modelos teóricos.

Além destas propriedades, observa-se para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  (e também, embora de forma menos acentuada, para  $f = 0.5\%$ ), que todas as curvas de cedência apresentam uma evolução irregular na região de maior triaxilidade. Este comportamento, também já detetado nos resultados obtidos com o modelo 3D para o vazio cilíndrico, poderá ter origem na discretização ‘pseudo-temporal’ adotada. Para avaliar esta explicação, procedeu-se a um refinamento no número de incrementos, encontrando-se na secção seguinte os resultados obtidos. Além disso, para analisar com maior detalhe os resultados obtidos na região de triaxilidade elevada, será também estudada a evolução da fração volúmica até ao momento em que é verificado o critério de cedência.

### 6.2.4 Refinamento da discretização ‘pseudo-temporal’

Para avaliar o efeito da discretização ‘pseudo-temporal’ foi realizado o mesmo conjunto de simulações, considerando no entanto que a deformação é aplicada, não em 1500, mas em 5000 incrementos. Assim, será possível obter com maior precisão o ponto onde, teoricamente, se verificaria de forma exata o critério de cedência estabelecido. No entanto, antes de serem apresentadas as curvas de cedência obtidas, será ainda analisada a evolução da fração volúmica.

### Evolução da fração volúmica até à condição de cedência plástica

Tal como já referido na análise das curvas de cedência obtidas com os vazios cilíndricos, uma possível explicação para as diferenças observadas entre os resultados obtidos e as previsões dos modelos teóricos na região de triaxilidade elevada é o facto do vazio, face à componente de tração da deformação aplicada, aumentar de dimensões até ao momento em que é verificado o critério de cedência. À macro-escala, isto traduz-se numa diminuição da resistência do material, tornando assim as curvas de cedência mais conservadoras. Consequentemente, a comparação direta dos resultados obtidos com os modelos teóricos poderá tornar-se irrealista,

uma vez que se estão a comparar dois problemas com frações volúmicas diferentes. Posto isto, nas simulações com o número de incrementos refinado foi já implementado no MSP o cálculo da fração volúmica, através da estratégia descrita nos parágrafos seguintes.

É demonstrado em Souza Neto e Feijóo (2008) que para um RVE com geometria periódica, caso o campo de flutuação de deslocamentos seja também periódico na fronteira, o determinante do gradiente de deformação macroscópico mede a taxa de variação de volume total do RVE, ou seja,

$$J \equiv \det \mathbf{F} = \frac{V_\mu}{V_{\mu 0}} . \quad (6.8)$$

Na expressão anterior  $V_\mu$  denota o volume total do RVE (incluindo os vazios) na configuração deformada e  $V_{\mu 0}$  o volume total na configuração de referência. Repare-se que, como

$$\tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Lin.}} \subset \tilde{\mathcal{H}}_\mu^{\text{Per.}} , \quad (6.9)$$

esta relação é válida, quer para a condição de fronteira periódica, como para a condição de fronteira linear. Na condição de tração uniforme na fronteira a relação (6.8) não é válida, uma vez que o campo de flutuação de deslocamentos na fronteira do RVE não é necessariamente periódico.

Como o volume total do RVE pode ser decomposto na soma do volume material,  $V_\mu^s$ , com o volume de vazios,  $V_\mu^v$ , considerando a expressão (6.8) tem-se que

$$V_\mu^v \equiv V_{\mu 0} \det \mathbf{F} - V_\mu^s . \quad (6.10)$$

No MSP o volume total material  $V_\mu^s$  é calculado por integração de *Gauss*, obtendo-se então a fração volúmica de vazios através da expressão

$$f = \frac{V_\mu^v}{V_\mu} \equiv 1 - \frac{V_\mu^s}{V_{\mu 0} \det \mathbf{F}} . \quad (6.11)$$

Para analisar o comportamento da evolução da fração volúmica nos resultados obtidos (já com o número de incrementos refinado), é apresentado na Figura 6.20, para o caso do esferoide oblato, a evolução do desvio da fração volúmica em relação ao valor inicial, ou seja,

$$\delta_f = \frac{f - f_0}{f_0} \cdot 100\% , \quad (6.12)$$

onde  $f_0$  é a fração volúmica inicial (configuração não deformada) e  $f$  a fração volúmica na configuração deformada em cada incremento. O gráfico superior corresponde à fração volúmica inicial  $f_0 = 0.1\%$  e o inferior a  $f_0 = 2\%$ .

Como se pode observar, no caso  $f_0 = 0.1\%$  o vazio aumenta consideravelmente de dimensões, atingindo-se no momento da cedência frações volúmicas superiores ao dobro do valor inicial. Para  $f_0 = 2\%$  as diferenças são menores, registando-se

variações inferiores a 16%. Repare-se contudo que, para a solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ), em ambos os casos a fração volúmica é praticamente estável. Pode-se então concluir que o vazio, e consequentemente a fração volúmica, aumenta de dimensões quando o RVE é tracionado, sendo esta diferença tanto maior quanto menor for a fração volúmica inicial. Embora apenas demonstradas de forma qualitativa, estas particularidades são também verificadas na análise das curvas de cedência dos vazios cilíndricos (Subseção 6.1.4). Note-se também que a diferença entre os resultados obtidos com diferentes condições de fronteira é mais acentuada para frações volúmicas superiores. Isto é coerente com os resultados obtidos até ao momento e, tal como já referido, poderá ser justificado pelo facto do vazio, para frações volúmicas superiores, se encontrar mais próximo dos limites do RVE, acentuando-se assim o efeito da condição na fronteira.

Um aspeto curioso observado para a fração volúmica  $f_0 = 0.1\%$  é que, à exceção do caso de corte puro, os valores da fração volúmica no momento em que é verificado o critério de cedência são relativamente aproximados entre si. Esta particularidade poderá resultar do equilíbrio entre duas tendências dos resultados obtidos: por um lado, é visível que a taxa de aumento da fração volúmica é proporcional à magnitude da componente de tração da deformação imposta ao RVE; por outro lado, tal como demonstrado na Figura 6.3, conforme a componente de tração da deformação imposta prevalece em relação à de corte (aumento do parâmetro  $\alpha$ ), o critério de cedência é verificado para fatores incrementais cada vez menores. Assim, embora com o aumento do parâmetro  $\alpha$  a fração volúmica aumente com uma taxa superior, a condição de cedência plástica também é verificada mais rapidamente.

### Curvas de cedência

Nas Figuras 6.21, 6.22, 6.23 e 6.24 encontram-se as curvas de cedência obtidas com o número de incrementos refinado. É também indicado, para cada caso, o valor máximo da fração volúmica na cedência,  $f_y^{\max}$ , o respetivo desvio em relação ao valor inicial, a solicitação em que ocorre e a respetiva condição de fronteira. Considerando os valores limite da fração volúmica,  $f_0$  e  $f_y^{\max}$ , são também traçadas as curvas dos modelos ML e MVAR.<sup>2</sup> Assim, a curva de cedência obtida com a fração volúmica  $f_0$  (representadas a traço contínuo) corresponde ao limite superior e com  $f_y^{\max}$  (representadas a traço interrompido) ao limite inferior.

<sup>2</sup>Para não tornar a figura do caso da esfera demasiado pesada, são omitidas as curvas de cedência do modelo de *Gurson* e *GTN*.

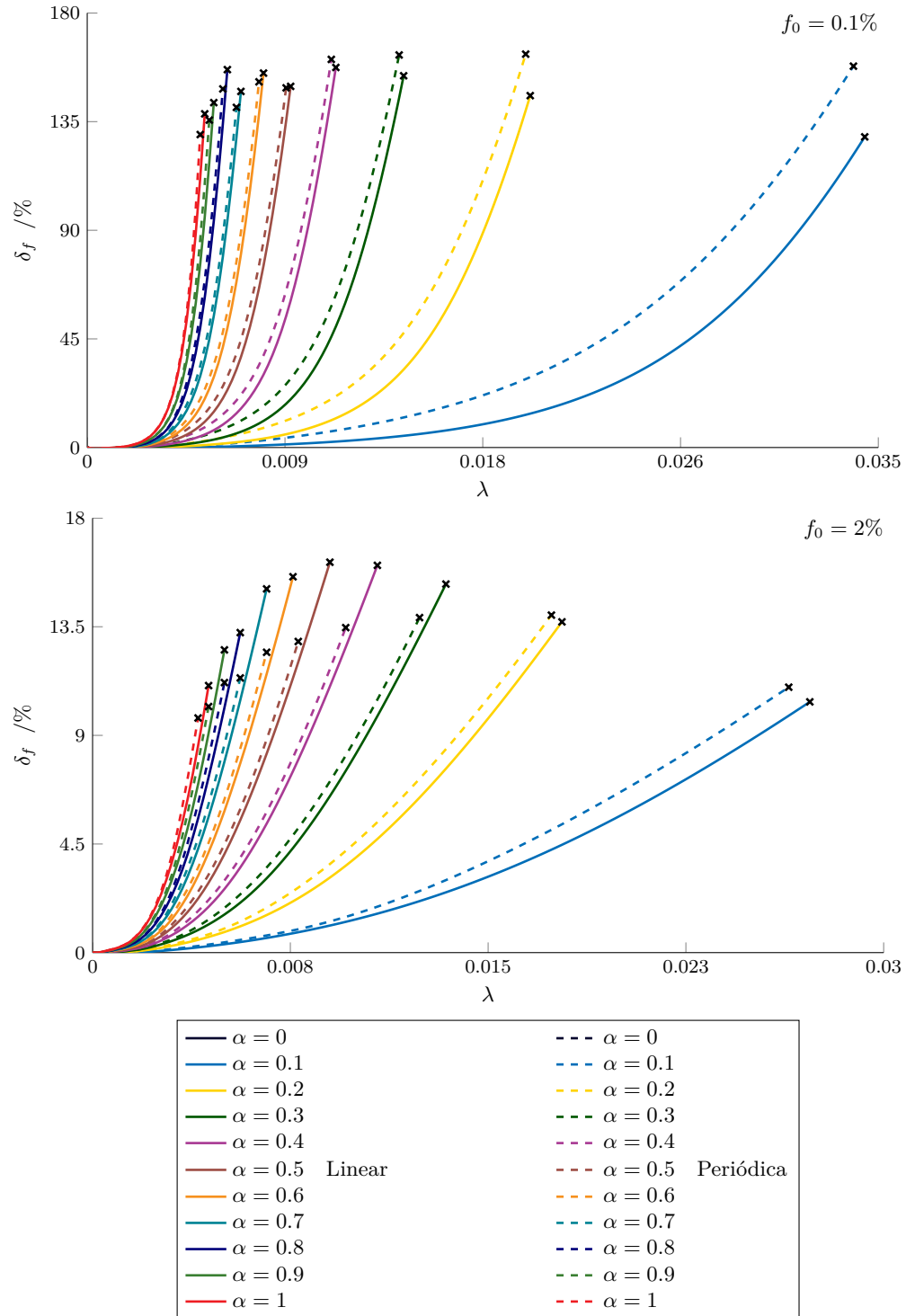


Figura 6.20: Evolução da variação da fração volúmica em relação ao valor inicial, desde a configuração inicial até ao ponto em que é verificado o critério de cedência proposto, para o caso do esferoide oblato. O gráfico superior corresponde à fração volúmica  $f = 0.1\%$  e o inferior a  $f = 2\%$ .

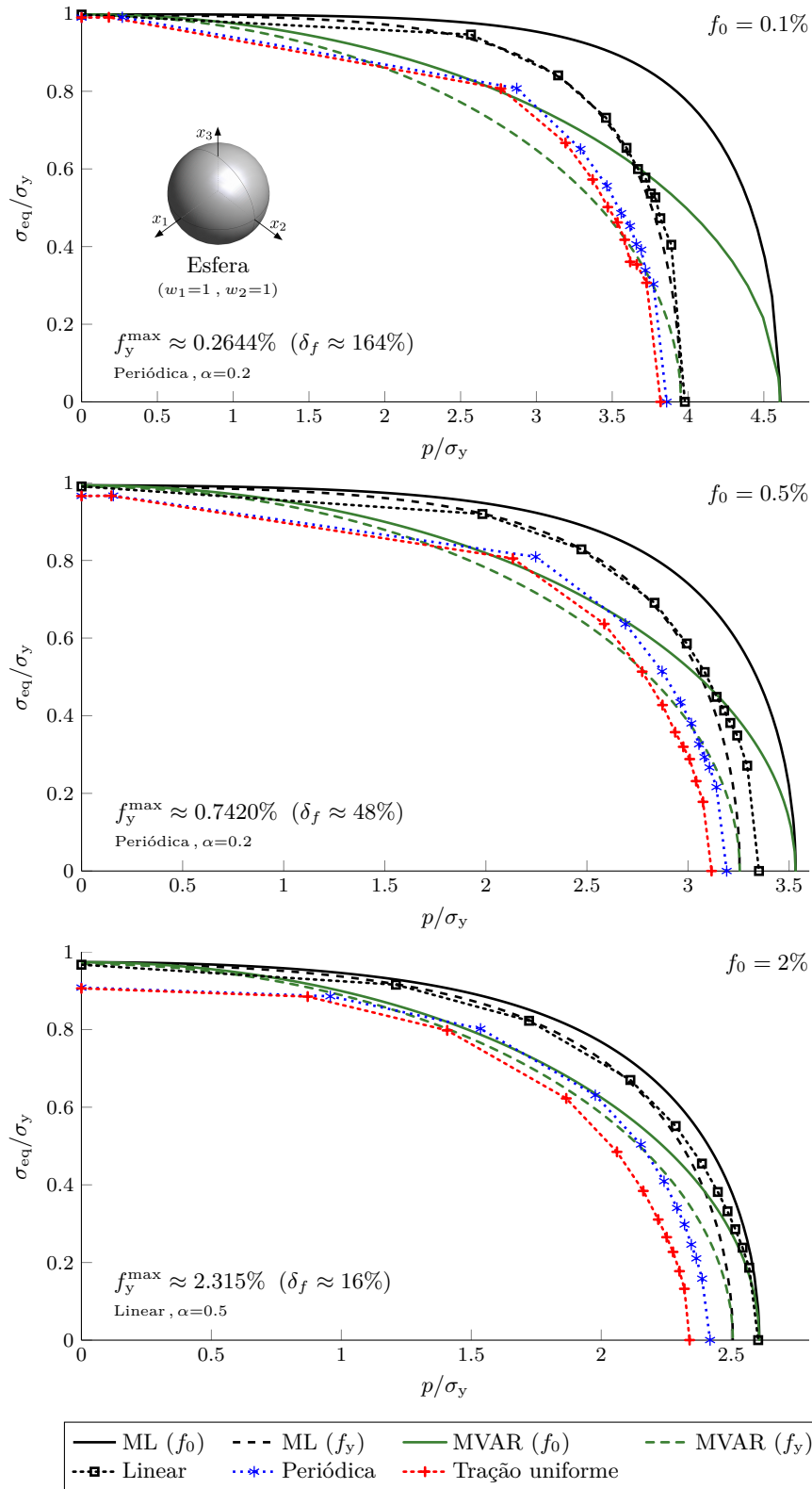


Figura 6.21: Vazio esférico: curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (Gurson, GTN, ML e MVAR).

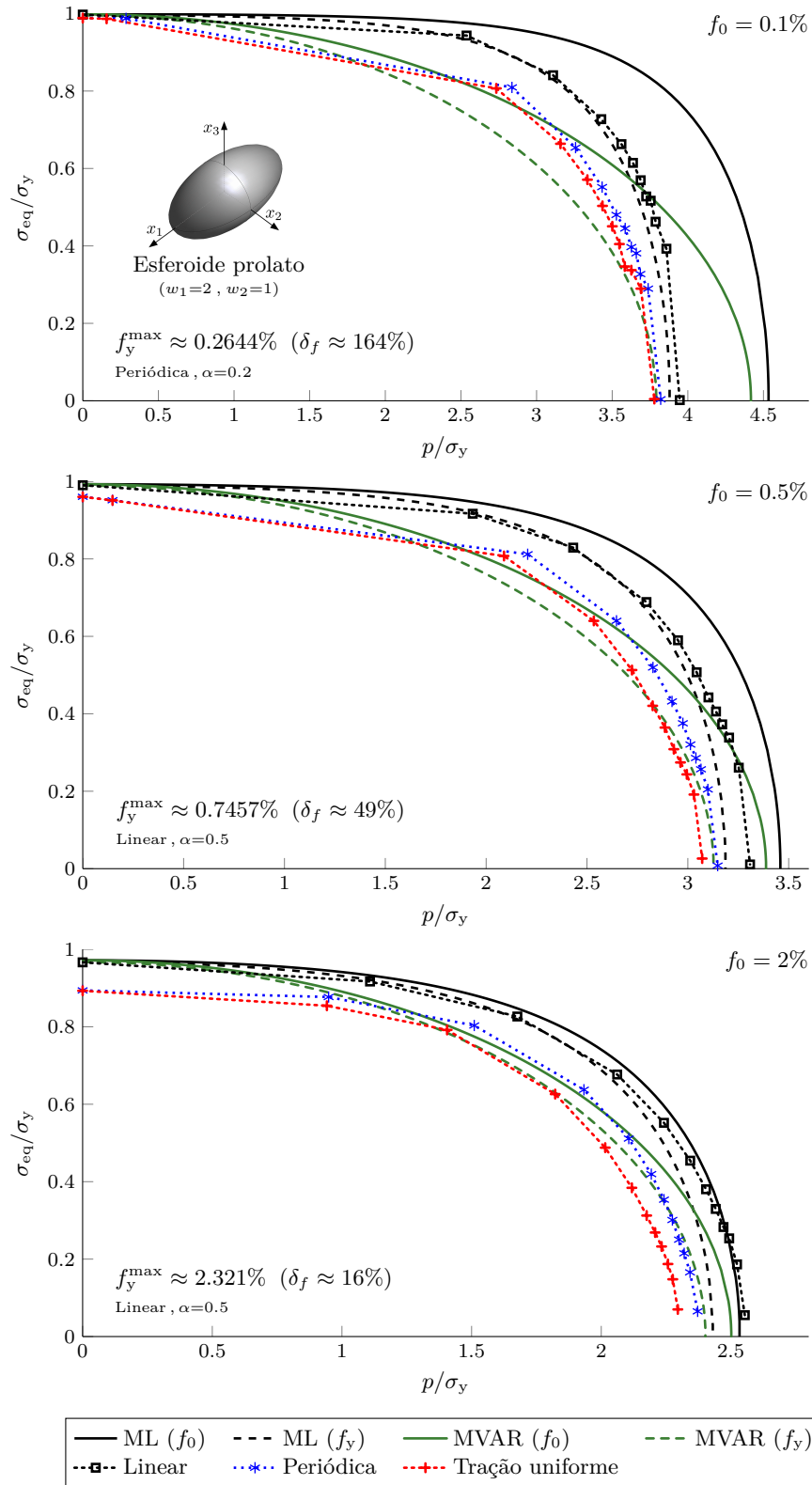


Figura 6.22: Vazio esferoidal prolato ( $w_1 = 2$ ,  $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

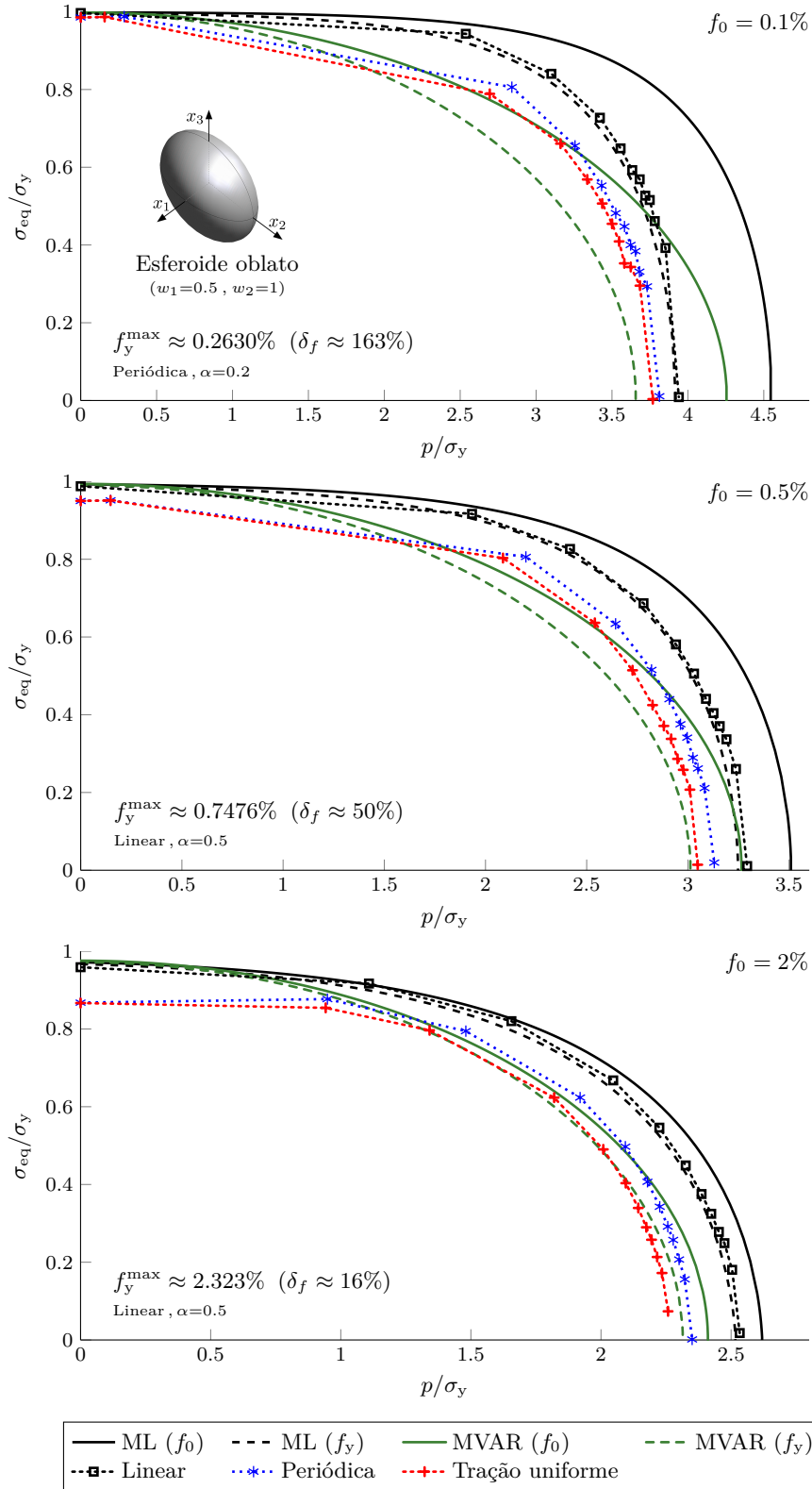


Figura 6.23: Vazio esferoidal oblato ( $w_1 = 0.5$ ,  $w_2 = 1$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

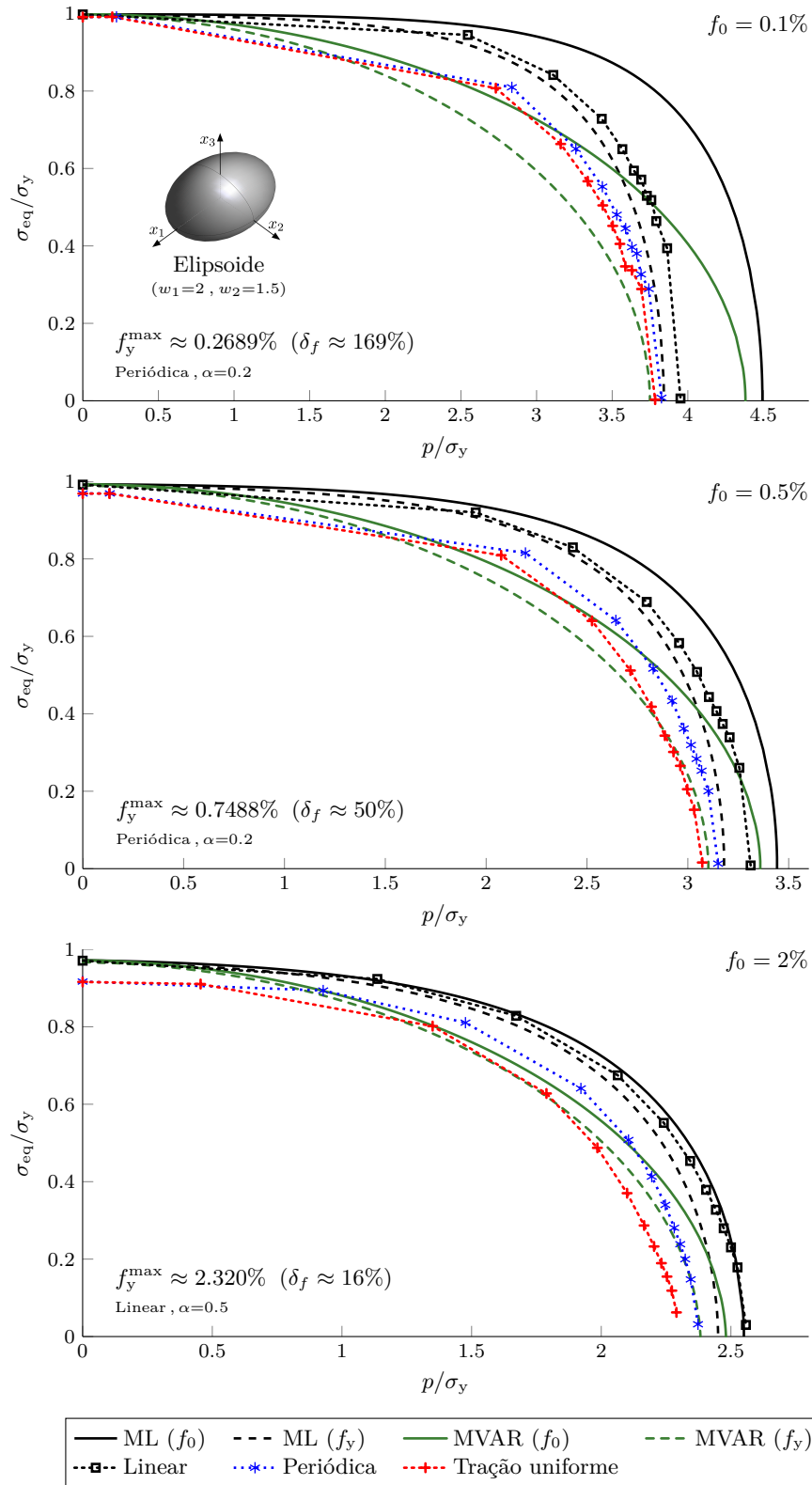


Figura 6.24: Vazio elipsoidal ( $w_1 = 2$ ,  $w_2 = 1.5$ ): curvas de cedência calculadas com o número de incrementos refinado e as respectivas soluções teóricas (ML e MVAR).

### Análise de resultados

Iniciando a análise de resultados pela comparação dos valores máximos da fração volúmica na cedência, verifica-se que o desvio em relação ao valor correspondente à configuração não deformada é tanto maior quanto menor for a fração volúmica inicial. Uma possível interpretação para este facto é que, uma vez que para frações volúmicas reduzidas o vazio se encontra mais afastado das superfícies do RVE, o efeito das restrições cinemáticas impostas na fronteira não é tão pronunciado e o vazio tem maior liberdade para se deformar. Repare-se também que estes resultados estão perfeitamente de acordo com a evolução das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* (ver Anexo G), na medida em que:

- Para frações volúmicas reduzidas o vazio cresce consideravelmente e, à macro-escala, isso reflete-se num amaciamento do material;
- Para frações volúmicas superiores, como a deformação do vazio é mais atenuada, as tensões estabilizam quando o RVE entra em regime plástico.

Estes resultados poderão ser justificados pelo facto do código utilizado se encontrar implementado para grandes deformações, levando assim em consideração o crescimento do vazio.

Analisando as curvas de cedência calculadas, verifica-se que com o refinamento do número de incrementos, as curvas de cedência apresentam uma evolução regular. A discretização ‘pseudo-temporal’ é, tal como a discretização espacial, um parâmetro determinante nos modelos numéricos, especialmente nos casos em que o sólido apresenta um comportamento não-linear. Além disso, o número de incrementos também afeta diretamente o comportamento do critério de cedência proposto, na medida em que:

- Com um número maior de incrementos a precisão do critério de cedência aumenta;
- O valor relativo ao domínio elástico da derivada da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* é determinado com base no primeiro incremento. Em situações em que o comportamento elástico seja não linear, por exemplo, será necessário analisar com maior cuidado a escolha do ponto cuja derivada será representativa do domínio elástico;
- Na implementação numérica do critério de cedência, a derivada é calculada através do método das diferenças finitas (expressão 6.4). A utilização de métodos mais sofisticados como, por exemplo, o método das diferenças finitas centradas, é um aspeto interessante que poderá ser analisado em trabalhos futuros.

Nas curvas de cedência obtidas por via numérica também se pode observar que, tal como no caso do vazio cilíndrico, a diferença entre condições de fron-

teira aumenta com a fração volúmica. Para averiguar qual a possível origem deste comportamento, encontra-se nas Figuras 6.25 e 6.26 a deformação plástica equivalente no momento em que é verificado o critério de cedência, para o vazio esferoidal oblato com  $f_0 = 0.1\%$  e  $f_0 = 2\%$ , respetivamente. É também representada na parte superior a localização tridimensional no RVE dos planos analisados. Analisando individualmente cada fração volúmica, verifica-se que:

- O valor máximo da deformação plástica na condição de fronteira linear é inferior ao obtido com a condição de fronteira periódica que, por sua vez, é também inferior ao obtido com a condição de tração uniforme;
- Existe uma banda de corte no plano normal ao semi-eixo de menor comprimento (plano OYZ), sendo esta mais pronunciada na condição de fronteira periódica e de tração uniforme.

Estes resultados estão de acordo com grau de restrição cinemática imposta em cada condição de fronteira, na medida em que: quanto maior liberdade o RVE tiver para se deformar, maior será a deformação plástica equivalente e, como tal, mais pronunciada será a banda de corte. Comparando as duas frações volúmicas pode-se concluir que:

- Para a mesma condição de fronteira, o valor máximo da deformação plástica para a fração volúmica inicial  $f_0 = 0.1\%$  é superior ao obtido com  $f_0 = 2\%$ ;
- A deformação plástica encontra-se mais concentrada na região envolvente do vazio para  $f_0 = 0.1\%$ .

Assim sendo, com estes resultados é possível chegar a uma possível explicação para o facto da diferença existente entre diferentes condições de fronteira aumentar com a fração volúmica: como vazio se encontra mais próximo dos limites do RVE, o efeito das condições cinemáticas impostas na fronteira é mais acentuado e, consequentemente, as diferenças nos resultados são mais pronunciadas. Repare-se que este raciocínio é coerente com o facto já analisado da fração volúmica aumentar de forma acentuada para frações volúmicas iniciais reduzidas.

Um aspeto interessante observado nas curvas de cedência calculadas é que, com a fração volúmica  $f_0 = 2\%$  (e também, embora de forma menos acentuada, com  $f_0 = 0.5\%$ ), para a solicitação de tração triaxial (ponto com pressão hidrostática máxima e tensão equivalente mínima) apenas no caso da esfera é que o estado de tensão na cedência é puramente hidrostático ( $\sigma_{eq} = 0$ ) para todas as condições de fronteira. Isto ocorre porque, à micro-escala, o facto do vazio não ser totalmente simétrico implica que à macro-escala o material seja anisotrópico. Nestes materiais, ao impor uma deformação volumétrica não se obtém um estado de tensão puramente hidrostático, dado que a magnitude das tensões normais não é igual em todas as direções. Além disso, repare-se que o desvio em relação ao

estado de tensão puramente hidrostático aumenta com a fração volúmica. Este tipo de comportamento está de acordo com os resultados obtidos no estudo das propriedades elásticas apresentado no Capítulo 5, na medida em que: como a diferença entre as constantes elásticas em diferentes direções aumenta com a fração volúmica, pode-se concluir que o grau de anisotropia também aumenta e, conseqüentemente, os pontos obtidos para solicitação de tração triaxial afastam-se da condição de estado de tensão puramente hidrostático.

Comparando os resultados obtidos com as curvas teóricas, verifica-se uma boa correlação entre o modelo ML e as curvas obtidas com a condição de fronteira linear, uma vez que em praticamente todos os casos estas se encontram no interior do balizamento estabelecido pelas curvas teóricas correspondentes aos valores limite das frações volúmicas  $f_0$  e  $f_y^{\max}$ . Pode-se então desde já concluir que o modelo ML é capaz de prever com boa precisão o limite superior da resposta do material. Repare-se também que, por exemplo no caso da esfera, para a fração volúmica  $f_0 = 0.1\%$  a curva de cedência obtida com a condição de fronteira linear encontra-se praticamente sobreposta com a curva de cedência do modelo ML correspondente à fração volúmica  $f_y^{\max}$ , enquanto que para  $f_0 = 2\%$  apenas se verifica esta correspondência em alguns pontos. Estes resultados são coerentes porque, tal como demonstrado na Figura 6.20, a fração volúmica na cedência tende a apresentar maiores variações quando  $f_0 = 2\%$ .

Relativamente às curvas de cedência do modelo MVAR, observa-se uma relativa correspondência com as curvas obtidas com as condições de fronteira periódica e de tração uniforme, especialmente para a fração volúmica  $f_0 = 2\%$ . Repare-se contudo que para esta fração volúmica inicial, nos estados de tensão puramente hidrostático ou de corte puro, os modelos teóricos tendem a sobrestimar a resposta do material. Por outro lado, para  $f_0 = 0.1\%$  as curvas de cedência do modelo MVAR são conservadoras, com a exceção dos estados puramente hidrostático ou de corte puro. Esta última afirmação não é totalmente verificada no caso do esferoide oblato, onde a curva de cedência do modelo MVAR é conservadora mesmo para o estado de tensão puramente hidrostático.

Para completar a análise de resultados, é ainda apresentado nas Figuras 6.27 e 6.28, para todas as geometrias, a deformação plástica equivalente na cedência, considerando a fração volúmica  $f_0 = 2\%$  e a condição de tração uniforme na fronteira. A Figura 6.27 corresponde à solicitação de corte no plano ( $\alpha = 0$ ) e a Figura 6.28 à solicitação de tração triaxial ( $\alpha = 1$ ).

Como se pode observar, quando o RVE é sujeito a corte puro (Figura 6.27) verifica-se a existência de bandas de corte. No caso da esfera formam-se duas bandas de corte, em dois planos verticais, ortogonais entre si e orientados com o RVE. No caso dos esferoides e do elipsoide, apenas se forma uma banda de corte, coincidente com o plano que contém a secção de maior área do vazio. Este comportamento está de acordo com o estudo das propriedades elásticas apresentado no Capítulo 5, onde é verificado que, no caso dos esferoides e do elipsoide,

o módulo de rigidez é menor na direção normal ao plano que contém a secção de maior área do vazio. Analisando a Figura 6.28, pode-se concluir que o valor máximo da deformação plástica equivalente é superior ao caso de corte puro. Além disso, a deformação plástica encontra-se concentrada na região envolvente do vazio, especialmente nas zonas com menor raio de concordância, onde o fator de concentração de tensões é maior.

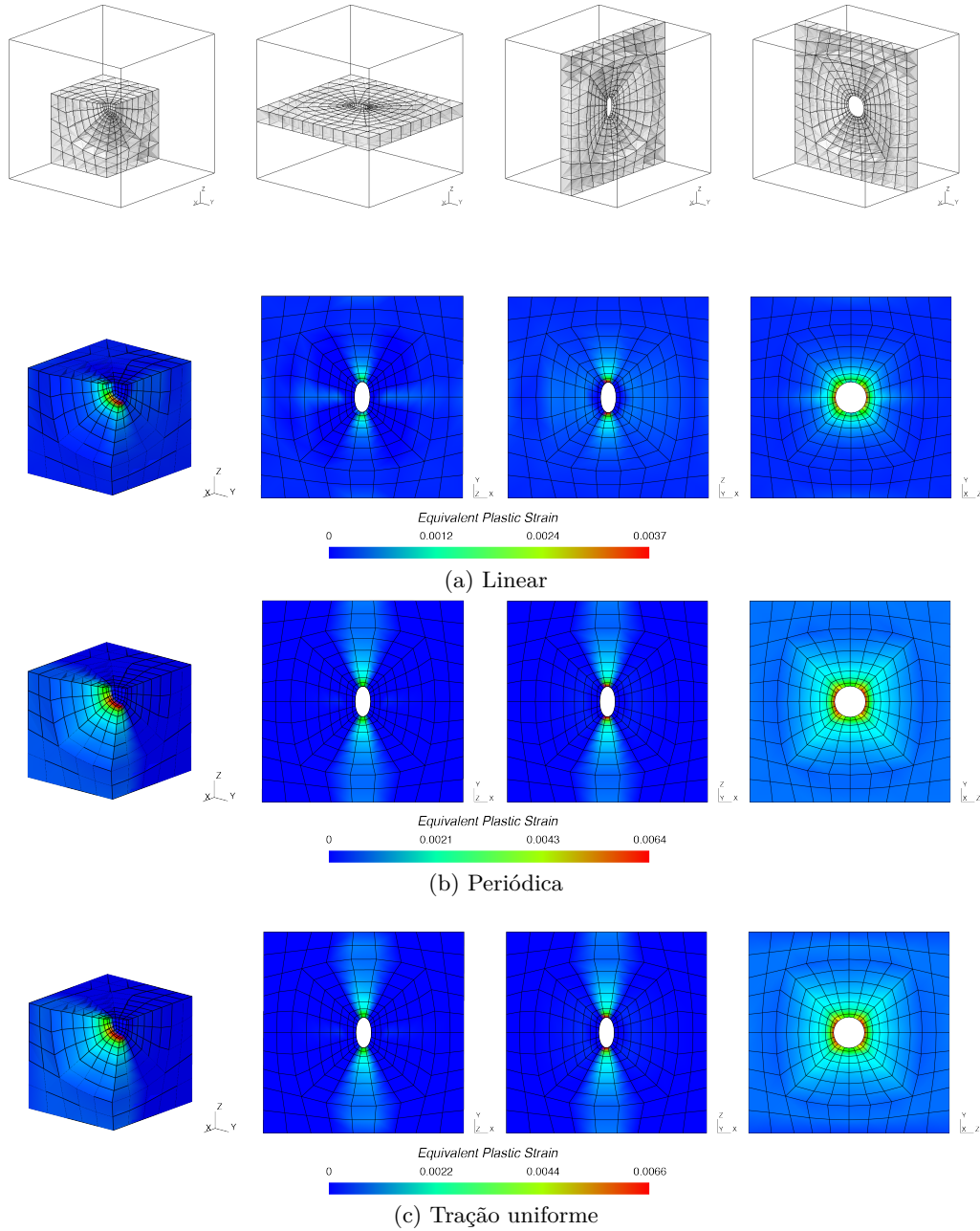


Figura 6.25: Deformação plástica equivalente na cedência plástica na solitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ) para o vazio esferoidal oblato e fração volúmica  $f_0 = 0.1\%$ .

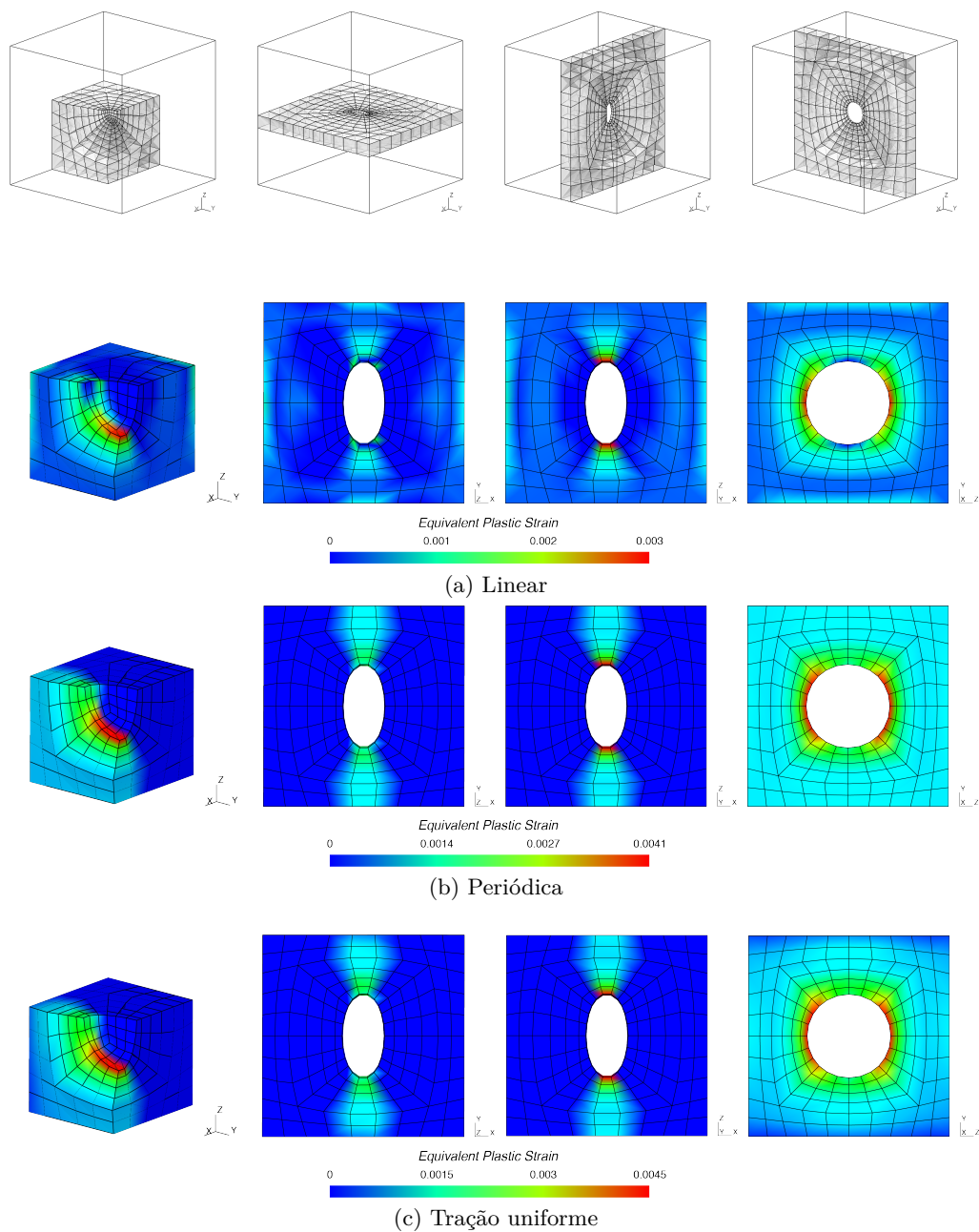


Figura 6.26: Deformação plástica equivalente na cedência plástica na solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ) para o vazio esferoidal oblato e fração volúmica  $f_0 = 2\%$ .

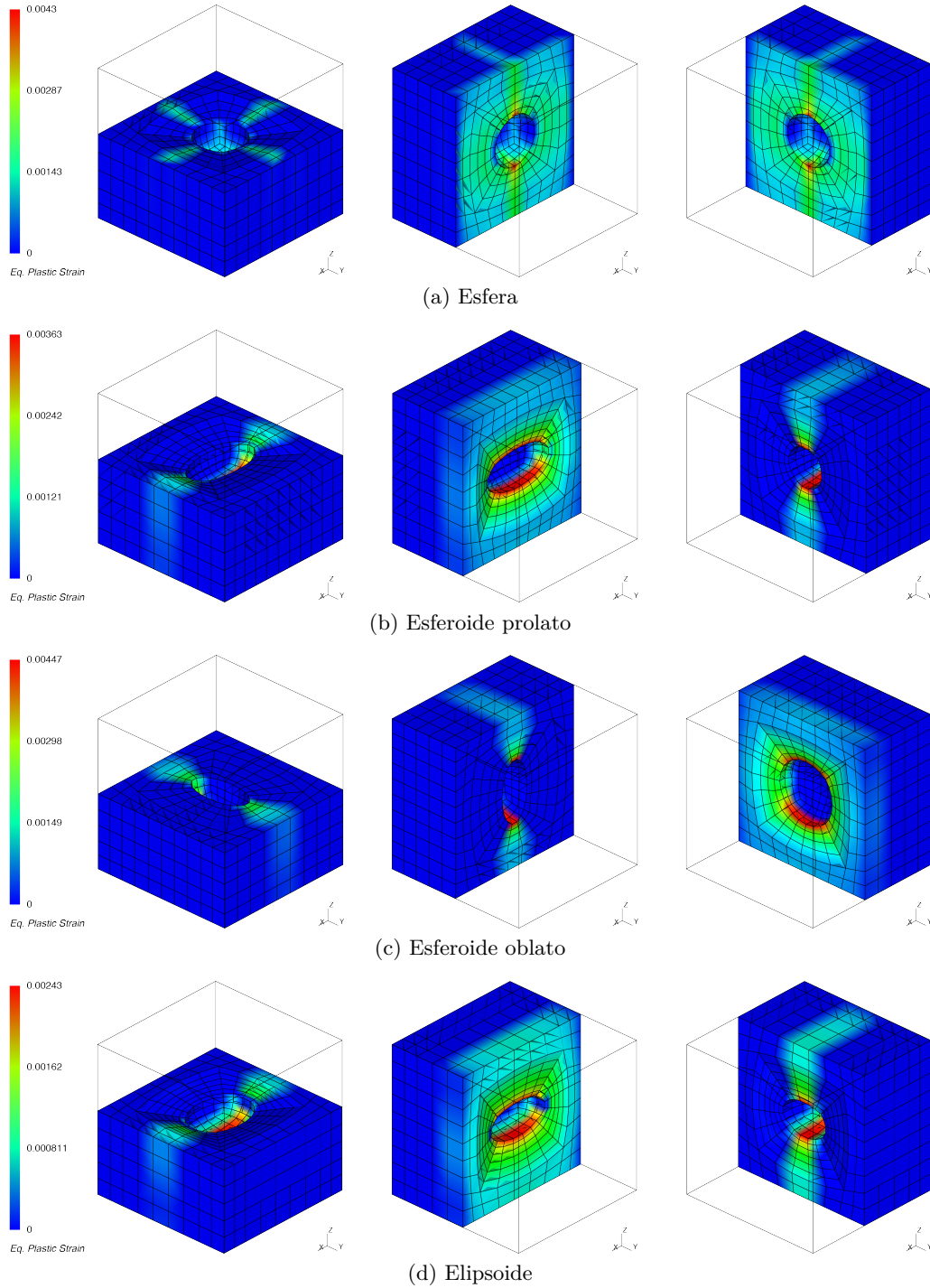


Figura 6.27: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para todas as geometrias analisadas, com a solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ), fração volúmica  $f_0 = 2\%$  e condição de tração uniforme na fronteira.

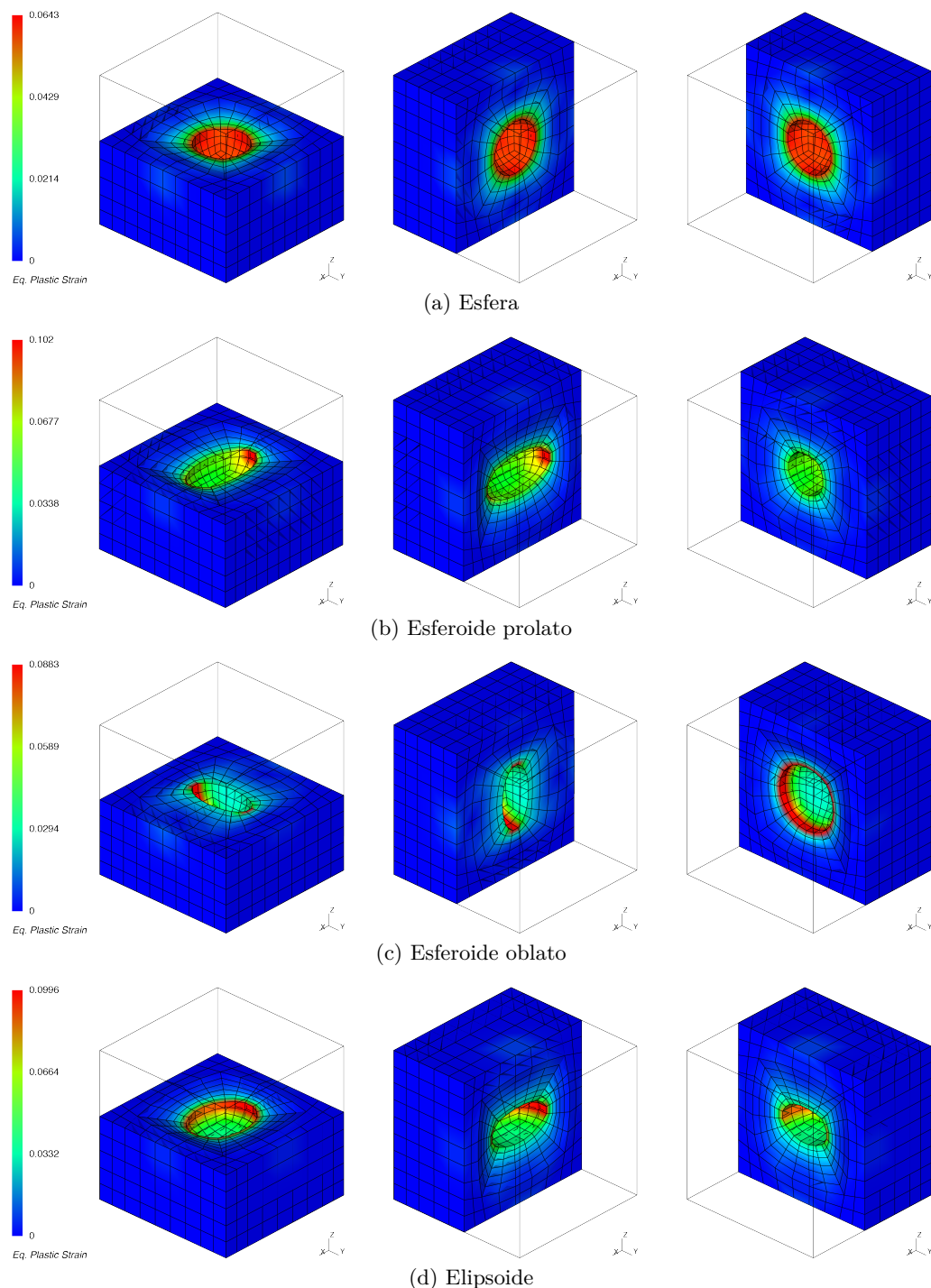


Figura 6.28: Deformação plástica equivalente na cedência plástica para todas as geometrias analisadas, com a solicitação de tração triaxial ( $\alpha = 1$ ), fração volúmica  $f_0 = 2\%$  e condição de tração uniforme na fronteira.

### 6.2.5 Estudo preliminar da resposta do material em regime de compressão

Em todas as análises realizadas até ao momento é avaliado o início da cedência plástica de um material poroso em regime de tração. No entanto, em regime de compressão o material comporta-se de forma diferente, uma vez que são envolvidos outros fenómenos metalúrgicos, como por exemplo o fecho de vazios (Saby et al., 2013). Trata-se de um tema com interesse do ponto de vista industrial e ainda em aberto na comunidade científica, especialmente no âmbito da modelação multi-escala, onde ainda muito pouco trabalho foi desenvolvido.

Enquadrado na metodologia dos estudos anteriores, é aqui analisado de forma preliminar o comportamento do material em regime de compressão. No entanto é importante frisar que, à partida, a capacidade das ferramentas numéricas disponíveis para modelar o comportamento de um material poroso em regime de compressão é limitada, uma vez que os vazios tender-se-ão a fechar. Logo, para realizar um estudo completo seria necessário utilizar um modelo de contacto. A implementação deste tipo de ferramenta no código à micro-escala utilizado é um aspeto com bastante potencial que poderá ser considerado em trabalhos futuros.

O modelo de elementos finitos é igual ao utilizado no regime de tração, modificando-se apenas o tipo de deformação imposta ao RVE. Neste caso o gradiente de deformação macroscópico é da forma

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \begin{bmatrix} -\sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} & \sqrt{1-\alpha^2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{\frac{\alpha^2}{3}} \end{bmatrix}. \quad (6.13)$$

Quando  $\alpha = 0$  é imposto corte puro (tal como nos casos anteriores), enquanto que  $\alpha = 1$  corresponde à solicitação de compressão triaxial (ver Figura 6.29).

Para analisar o tipo de resposta do material em compressão e avaliar a aplicabilidade do critério de cedência proposto nos estudos anteriores, foram simulados todos os exemplos até que, devido à sub-incrementação sucessiva, fosse atingido o fator incremental

$$\Delta\lambda \leq 10^{-6}.$$

Com esta estratégia, embora o esforço computacional seja maior, garante-se que a janela de resultados é o mais alargada possível.

### Resultados obtidos

Nos resultados obtidos verificou-se que, tal como esperado, a partir de um determinado fator incremental total existe inter-penetração de elementos. Como já

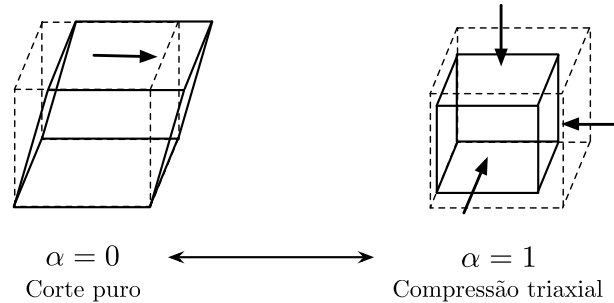


Figura 6.29: Representação esquemática da relação entre o parâmetro  $\alpha$  e a deformação imposta ao RVE.

referido, isto ocorre porque não existe qualquer modelo de contacto implementado no programa, sendo que os resultados obtidos a partir do momento em que há inter-penetração de elementos não têm qualquer significado físico.

Com o objetivo de avaliar a aplicabilidade do critério de cedência proposto, encontra-se na Figura 6.3 a evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado para o caso do vazio elipsoidal, até ao fator incremental total em que ocorre inter-penetração de elementos. São apresentados os resultados obtidos com as frações volúmicas  $f = 0.1\%$  e  $f = 2\%$  e condições de fronteira linear e de tração uniforme.

**Nota.** Apenas são indicados os resultados obtidos com o vazio elipsoidal, uma vez que com os resultados obtidos com as restantes geometrias não diferem de forma substancial.

Como se pode observar, para a fração volúmica  $f = 0.1\%$  a raiz quadrada da dupla contração aumenta de forma contínua, enquanto que para  $f = 2\%$  existe um ligeiro patamar de inclinação menos acentuada, relacionado com uma estabilização das tensões. Também se verifica que, relativamente à condição de tração uniforme, com a condição de fronteira linear a inter-penetração de elementos ocorre para fatores incrementais superiores. Isto reflete o grau de restrição cinemática subjacente a cada condição de fronteira, sendo que quanta maior liberdade o RVE tiver para se deformar, mais rapidamente se irá fechar o vazio.

Com base na gama de resultados obtidos, é possível concluir que o critério de cedência proposto não é capaz de prever a cedência do material, dado que não existe nenhuma zona de inflexão na evolução das tensões homogeneizadas.

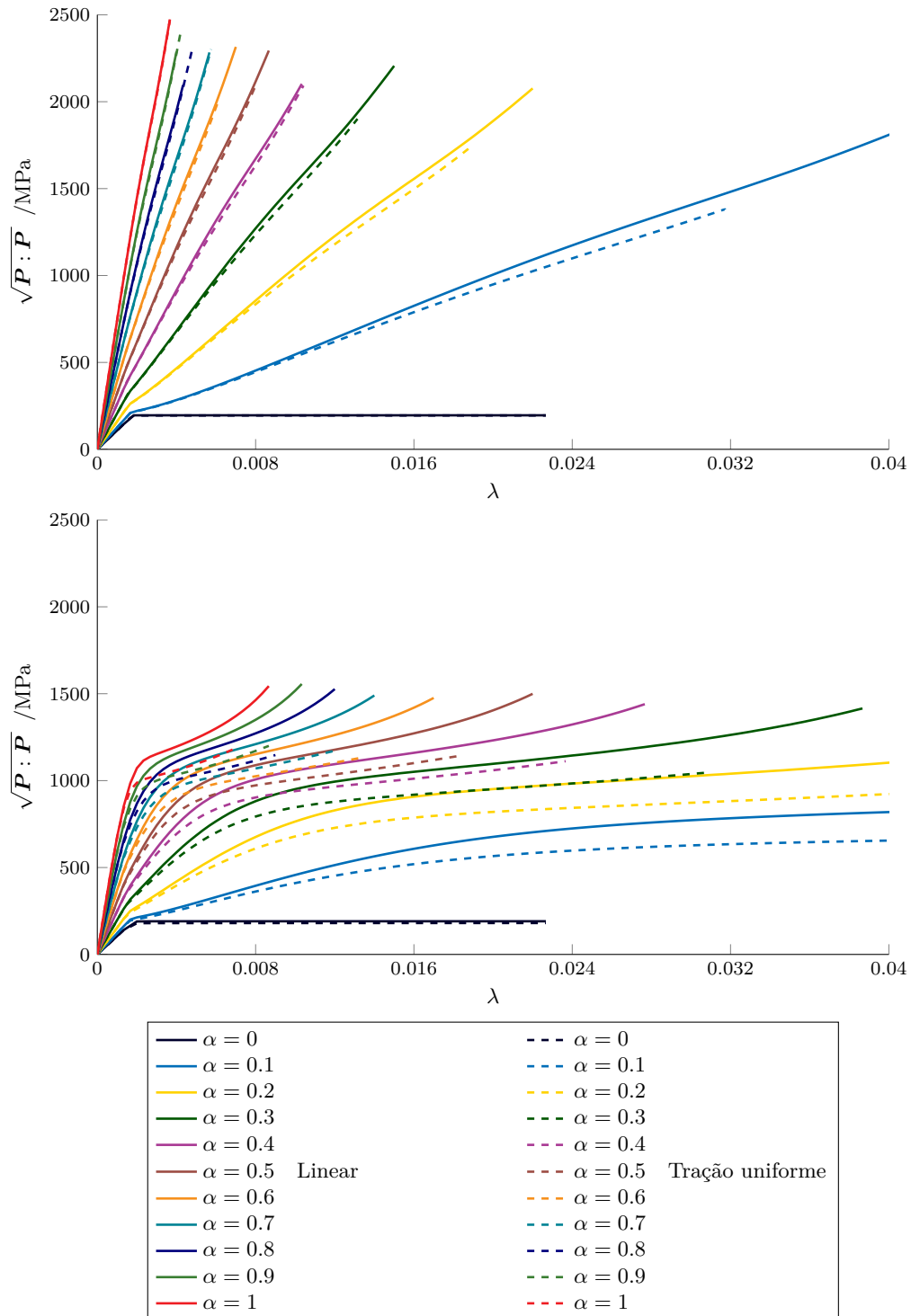


Figura 6.30: Evolução da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* para diferentes solicitações e condições de fronteira, até ao fator incremental total em que ocorre inter-penetração de elementos. O gráfico superior corresponde ao caso  $f = 0.1\%$  e o inferior a  $f = 2\%$ .

### 6.3 Conclusões

Este capítulo enquadra-se no estudo da fratura dúctil e tem como objetivo a avaliação de alguns dos modelos constitutivos existentes na literatura que incorporam o efeito da geometria do vazio no início da cedência plástica do material. Como tal, são implementados vários modelos à micro-escala, quer 2D como 3D, considerando-se vazios com várias geometrias. Contudo, para traçar as curvas de cedência é necessário efetuar um varrimento dos vários estados de tensão compreendidos entre a solicitação puramente hidrostática e de corte puro. Como tal, integrado nos modelos utilizados é proposta uma estratégia para a imposição do gradiente de deformação que, através de um parâmetro  $\alpha$ , consiste numa combinação ponderada de uma componente de corte puro e de tração. Além do varrimento no espaço das tensões, para traçar as curvas de cedência é também necessário estabelecer um critério de cedência. Não existindo nenhuma solução consensual na literatura, é proposto um critério de cedência baseado na evolução raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

No estudo dos materiais porosos com vazios cilíndricos é utilizado em primeiro lugar um modelo 2D em estado plano de deformação, chegando-se à conclusão de que os modelos teóricos de *Gurson* e GTN, à exceção da solicitação de corte puro, aparentam sobrestimar a resposta do material. No entanto, verificou-se que quando na deformação imposta é introduzida a componente de tração, o vazio cresce até que seja verificado o critério de cedência. A fração volúmica aumenta e as curvas calculadas são mais conservadoras. Contudo, para a solicitação de corte puro é verificado que o vazio não se deforma de forma considerável, podendo-se concluir que os modelos teóricos de *Gurson* e GTN, na região de baixa triaxialidade, preveem com boa precisão o limite superior da resposta do material. O limite inferior, dado pela condição de tração uniforme na fronteira, encontra-se abaixo das previsões teóricas, aumentando as diferenças com o aumento da fração volúmica. Além do modelo 2D, é também implementado um modelo 3D para a análise dos vazios cilíndricos. Comparando os resultados obtidos, conclui-se que o modelo 3D com a condição de fronteira periódica reproduz de forma precisa o modelo 2D.

São também analisados vazios esféricos, esferoidais e elipsoidais, tendo-se verificado que a discretização ‘pseudo-temporal’ deve ser adequada ao tipo de problema. Além disso, e à semelhança dos resultados obtidos com o vazio cilíndrico, foi também verificado que o vazio cresce até ser verificado o critério de cedência proposto. Logo, para avaliar com precisão este fenómeno, foi implementado no MSP o cálculo da fração volúmica, tornando-se assim possível comparar com precisão as curvas de cedência calculadas com as respetivas previsões teóricas.

Comparando os resultados obtidos com as soluções teóricas, é possível concluir que o modelo ML prevê de forma precisa o limite superior da resposta do material.

Por outro lado, verifica-se que o modelo MVAR, para as frações volúmicas

$f = 0.1$  e  $0.5\%$ , é conservador na região compreendida entre os casos extremos da solicitação puramente hidrostática e de corte puro. Em contrapartida, para  $f_0 = 2\%$  é verificada uma boa correlação com as curvas de cedência obtidas com a condição de fronteira periódica e de tração uniforme, observando-se contudo que para a solicitação puramente hidrostática e de corte puro, o modelo MVAR sobrestima a resposta do material. Logo pode-se concluir que, para frações volúmicas elevadas, o modelo MVAR prevê com relativa precisão o limite inferior da resposta do material, embora não seja verificada essa relação em toda a gama de solicitações analisada.

No final é ainda realizado um estudo prévio do comportamento do material em regime de compressão. É verificado que existe inter-penetração de elementos, uma vez que não existe no programa nenhum modelo de contacto. Também é demonstrado que o critério de cedência proposto, dentro da gama de resultados válidos, não é capaz de prever o início da cedência plástica do material.

## Capítulo 7

# Conclusões gerais e perspectivas de trabalhos futuros

---

O principal objetivo do trabalho desenvolvido é a determinação de propriedades efetivas de materiais porosos, por homogeneização computacional, na hipótese de grandes deformações. A microestrutura do material é modelada através de um *Elemento de Volume Representativo* que, resultado do processo de degradação interna, possui vazios no seu interior. São utilizados tanto modelos 2D como 3D, considerando-se vazios com diferentes geometrias e frações volúmicas.

Nos tópicos seguintes é apresentada, por capítulos, uma síntese dos vários aspectos analisados e conclusões retiradas.

### Capítulo 2 e Capítulo 3

Nestes dois primeiros capítulos iniciais são introduzidos os conceitos teóricos fundamentais à formulação de um *Modelo Multi-Escala*. No Capítulo 2 são introduzidos os conceitos base da *Mecânica dos Meios Contínuos* e do *Método dos Elementos Finitos*, necessários à formulação de um modelo numérico capaz de simular o comportamento de um sólido em deformação. No Capítulo 3 é introduzido o conceito de um *Modelo Multi-Escala*, apresentando-se a sua formulação e os vários tipos de condições de fronteira utilizadas. É ainda descrita a resolução do problema microscópico através do *Método dos Elementos Finitos*.

### Capítulo 4

No Capítulo 4 são apresentados os vários conceitos teóricos relacionados com a fratura dúctil. São, primeiro, descritos os aspectos fenomenológicos, seguindo-se uma descrição de alguns dos modelos de dano existentes na literatura. É também apresentado um estudo paramétrico das curvas de cedência dos modelos teóricos considerados, avaliando-se o efeito da fração volúmica, da geometria do vazio e do parâmetro de *Lode*.

É verificado que a distorção de um vazio esférico, para um esferoide ou elipsoide, provoca uma diminuição generalizada da resistência do material. Constatase também que o parâmetro de *Lode* tem um efeito reduzido nas curvas de cedência. No caso dos esferoides e elipsoides, verifica-se que o modelo MVAR é, na generalidade, mais conservador que o modelo ML.

## Capítulo 5

O objetivo do Capítulo 5 é a determinação, por homogeneização computacional, das propriedades elásticas efetivas de materiais dúcteis com vazios elipsoidais. É primeiro introduzida a lei de *Hooke* generalizada, descrevendo-se de seguida a solução analítica de *Kachanov, Tsukrov et al. (1994)* e a solução estocástica proposta por *Drach et al. (2014)*. É também descrita a metodologia numérica adotada para a determinação das constantes elásticas efetivas.

Nos resultados obtidos constata-se que o aumento da fração volúmica provoca uma diminuição generalizada das propriedades elásticas do material e, à exceção do caso da esfera, um aumento do grau de anisotropia. Verifica-se uma relação direta entre o tipo de isotropia efetiva e as propriedades de simetria do vazio, bem como uma boa correlação dos resultados obtidos com as previsões analíticas e estocástica.

## Capítulo 6

No Capítulo 6 é analisado o início da cedência plástica de materiais dúcteis, avaliando-se alguns dos modelos constitutivos existentes na literatura que consideram o efeito da geometria dos vazios. Juntamente com os modelos utilizados, é proposta uma estratégia para a imposição do gradiente de deformação, de forma a que seja realizado um varrimento dos vários estados de tensão compreendidos entre a solitação puramente hidrostática e de corte puro. É também proposto um critério de cedência macroscópica, baseado na derivada da raiz quadrada da dupla contração do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado.

São primeiro analisados vazios cilíndricos, modelados através de um RVE 2D em estado plano de deformação. As curvas de cedência obtidas são comparadas com as curvas do modelo de *Gurson e GTN*, constatando-se que, à exceção da solitação de corte puro, os modelos teóricos aparentam sobrestimar a resposta do material. Porém, nos resultados obtidos é verificado que o vazio cresce até ao momento em que é verificado o critério de cedência proposto, tornando as curvas mais conservadoras.

Foi também utilizado um modelo 3D para o caso do vazio cilíndrico, tendo-se observado uma boa correspondência com os resultados 2D quando considerada a condição de fronteira periódica.

São depois estudados materiais porosos com vazios elipsoidais, tendo-se verificado que a discretização ‘pseudo-temporal’ deve ser adequada ao tipo de problema.

Para avaliar com precisão a influência do crescimento dos vazios até ao momento em que é verificado o critério de cedência, foi implementado no programa utilizado o cálculo da fração volúmica.

Com os resultados obtidos constata-se que o modelo ML prevê com boa exatidão o limite superior da resposta do material.

Por outro lado, é verificado que o modelo MVAR, para frações volúmicas elevadas, prevê com relativa precisão o limite inferior da resposta do material, embora não seja verificada essa correlação em toda a gama de solicitações analisada.

No final é ainda realizado um estudo preliminar do comportamento do material em regime de compressão, tendo-se verificado que para este tipo de solicitações é necessário utilizar modelos de contacto. Constata-se também que, na gama de resultados válidos, o critério de cedência proposto não é capaz de prever o início da cedência plástica do material.

## 7.1 Perspetivas de trabalhos futuros

Em todos os estudos realizados foi considerada uma matriz isotrópica, elasto-perfeitamente plástica e caracterizada pelo modelo constitutivo de *von Mises*. Em estudos futuros pretende-se utilizar modelos materiais mais complexos, sendo que um possível trabalho a ser desenvolvido é, por exemplo, a validação de modelos constitutivos existentes na literatura para materiais porosos anisotrópicos (por exemplo o modelo proposto por Keralavarma e Benzerga, 2010).

No âmbito deste trabalho, a avaliação do efeito da geometria do vazio foi estabelecida com base num fator de proporcionalidade de 2. A análise de vazios mais distorcidos é um aspeto interessante a ser analisado no futuro, uma vez que permitiria acentuar as diferenças obtidas entre diferentes geometrias.

No estudo das propriedades elásticas efetivas apresentado no Capítulo 5, foram considerados três valores de fração volúmica. No entanto, um maior número de casos permitiria a caracterização mais pormenorizada da evolução das constantes elásticas efetivas.

No seguimento do trabalho desenvolvido, pretende-se ainda a analisar a influência da imposição ao RVE de solicitações mais complexas como, por exemplo, trajetórias combinadas de carregamento/descarregamento.

Por fim, para ser possível avaliar o comportamento do material em regime de compressão, a implementação de um modelo de contacto no MSP constitui um aspeto desafiante que será desenvolvido no futuro.

*Página intencionalmente deixada em branco*

## Anexo A

# Parâmetros do critério *Golaganu-Leblond-Deveaux*

---

No modelo de *Golaganu-Leblond-Deveaux* existe um total de seis constantes, que dependem dos parâmetros microestruturais que caracterizam a geometria do esferoide. Sejam  $e_1$  e  $e_2$  as excentricidades do vazio e da fronteira do RVE, respectivamente (ver Figura 4.6 do Capítulo 4):

$$e_1 = \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{a}{a_3}\right)^2}; & \\ \sqrt{1 - \left(\frac{a_3}{a}\right)^2}; & \end{cases} \quad e_2 = \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{a^{\text{RVE}}}{a_3^{\text{RVE}}}\right)^2}; & \text{(prolato)} \\ \sqrt{1 - \left(\frac{a_3^{\text{RVE}}}{a^{\text{RVE}}}\right)^2}; & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

onde  $(\cdot)^{\text{RVE}}$  denota a dimensão relativa à fronteira do RVE. As constantes  $g$ ,  $\kappa$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\eta$  e  $C$  são então dadas por:

$$g = \begin{cases} 0; & \text{(prolato)} \\ \frac{e_2^3}{\sqrt{1 - e_2^2}} = f \frac{e_1^3}{\sqrt{1 - e_1^2}} = f \frac{\sqrt{(1 - w^2)^3}}{w}; & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

$$\kappa = \begin{cases} \left[ \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{\ln(e_1/e_2)}{\ln f} (\sqrt{3} - 2) \right]^{-1}; & \text{(prolato)} \\ \frac{3}{2} \left[ 1 + \frac{(g_f - g_1) + \frac{4}{5} (g_f^{5/2} - g_1^{5/2}) - \frac{3}{5} (g_f^5 - g_1^5)}{\ln(g_f/g_1)} \right]^{-1}; & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

$$\alpha_1 = \begin{cases} \frac{e_1 - (1 - e_1^2) \tanh^{-1} e_1}{2e_1^3} ; & \text{(prolato)} \\ \frac{-e_1 (1 - e_1^2) + \sqrt{1 - e_1^2} \sinh^{-1} e_1}{2e_1^3} ; & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\alpha_2 = \begin{cases} \frac{(1 + e_2^2)}{(1 + e_2^2)^2 + 2(1 - e_2^2)} ; & \text{(prolato)} \\ \frac{(1 - e_2^2)(1 - 2e_2^2)}{(1 - 2e_2^2)^2 + 2(1 - e_2^2)} ; & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

$$\eta = -\frac{2}{3} \frac{\kappa(1 - f)(g + 1)(g + f)s_G}{(g + 1)^2 + (g + f)^2 + (g + 1)(g + f) [2\kappa(\alpha_1 - \alpha_2)s_G - 2c_G]} ; \quad (\text{A.6})$$

$$C = -\frac{2}{3} \frac{\kappa(g + 1)(g + 1)s_G}{\eta[(1 - f) + 3\eta(\alpha_1 - \alpha_2)]} ; \quad (\text{A.7})$$

onde

$$g_f \equiv \frac{g}{g + f} , \quad g_1 \equiv \frac{g}{g + 1} , \quad (\text{A.8})$$

$$s_G \equiv \sinh [2\kappa(\alpha_1 - \alpha_2)] , \quad c_G \equiv \cosh [2\kappa(\alpha_1 - \alpha_2)] .$$

No modelo GLD surge ainda a constante  $\alpha_1^G$  na lei de evolução da proporcionalidade do esferoide  $w$ , que é dada por

$$\alpha_1^G = \begin{cases} \frac{1}{(3 - e_1^2)} ; & \text{(prolato)} \\ \frac{(1 - e_1^2)}{(3 - 2e_1^2)} . & \text{(oblato)} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

## Anexo B

# Parâmetros do critério *Madou-Leblond*

---

O critério de cedência de *Madou-Leblond* é expresso em função das constantes  $\mathcal{L}\{\sigma\}$  e  $\mathcal{Q}\{\sigma\}$ , que dependem da geometria do vazio. Para apresentar as várias equações de forma sintética, destas foram organizadas por secções.

### B.1 Parâmetros geométricos

Os semi-eixos  $R_1$ ,  $R_2$  e  $R_3$  do elipsoide associado ao RVE são calculados a partir das expressões

$$R_1 = \sqrt{a_1^2 + \Lambda_{\text{ML}}}, \quad R_2 = \sqrt{a_2^2 + \Lambda_{\text{ML}}}, \quad R_3 = \sqrt{a_3^2 + \Lambda_{\text{ML}}}, \quad (\text{B.1})$$

onde  $\Lambda_{\text{ML}}$  é a solução positiva da equação

$$\left(a_1^2 + \Lambda_{\text{ML}}\right) \left(a_2^2 + \Lambda_{\text{ML}}\right) \left(a_3^2 + \Lambda_{\text{ML}}\right) - \left(\frac{a_1 a_2 a_3}{f}\right)^2 = 0. \quad (\text{B.2})$$

Os semi-eixos do elipsoide achatado  $\bar{a}_1$ ,  $\bar{a}_2$  e  $\bar{a}_3$  são dados por

$$\bar{a}_1 = \sqrt{a_1^2 - a_3^2}, \quad \bar{a}_2 = \sqrt{a_2^2 - a_3^2}, \quad (\bar{a}_3 = 0), \quad (\text{B.3})$$

cujo parâmetro de forma é

$$k = \frac{\bar{a}_2}{\bar{a}_1}. \quad (\text{B.4})$$

Note-se que para um vazio cilíndrico  $k = 0$ , pois  $\bar{a}_1 = +\infty$ . A porosidade secundária define-se como

$$g = \frac{\bar{a}_1 \bar{a}_2^2}{R_1 R_2 R_3}, \quad (\text{B.5})$$

com as constantes relacionadas

$$g_1 = \frac{g}{g+1}, \quad g_f = \frac{g}{g+f}. \quad (\text{B.6})$$

As excentricidades podem então ser definidas nas forma

$$e_{xz} = \frac{\bar{a}_1}{a_1}, \quad \mathcal{E}_{xz} = \frac{\bar{a}_1}{R_1}, \quad \mathcal{E}_{yz} = \frac{\bar{a}_2}{R_2}. \quad (\text{B.7})$$

## B.2 Constante $\mathcal{L}$

A constante  $\mathcal{L}\{\boldsymbol{\sigma}\}$  é definida como

$$\mathcal{L}\{\boldsymbol{\sigma}\} = \kappa \sigma_h, \quad (\text{B.8})$$

onde  $\kappa$  é dado por

$$\kappa \equiv \frac{3}{2\bar{F}} \quad (\text{B.9})$$

e a média ponderada das tensões normais  $\sigma_h$  por

$$\sigma_h \equiv H_x \sigma_{xx} + H_y \sigma_{yy} + H_z \sigma_{zz}. \quad (\text{B.10})$$

A constante  $\bar{F}$  é obtida da expressão

$$\begin{aligned} \bar{F} = 1 + \frac{1}{\ln(g_f/g_1)} & \left[ (k-1) \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \ln \left( \frac{11k^2 + 5g_f}{11k^2 + 5g_1} \right) + \right. \\ & \left. \frac{3}{5}(1-k)^2 \ln \left( \frac{8-5g_1}{8-5g_f} \right) + \frac{13}{10}k(g_f - g_1) - \frac{3}{10}k(g_f^5 - g_1^5) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Excepcionalmente para o caso de um esferoide prolato  $\bar{F}$  vem

$$\bar{F} = 1 + \left( \frac{1 - \sqrt{3}/2}{\ln f} \right) \ln \left[ \frac{11 + 5e_{xz}^3/(1 - e_{xz}^2)}{11 + 5fe_{xz}^3/(1 - e_{xz}^2)} \right]. \quad (\text{B.12})$$

Os termos  $H_x$ ,  $H_y$  e  $H_z$  são obtidos das expressões

$$H_x = (1 - k^2) H_x^{\text{prol}} + k^2 H_x^{\text{obl}}, \quad (\text{B.13a})$$

$$H_y = (1 - k) H_y^{\text{prol}} + k H_y^{\text{obl}} + \frac{1}{2}(1 - k) \left( \frac{\alpha_{\text{ML}}^2 + \beta_{\text{ML}}^2}{\alpha_{\text{ML}}} \right) \left[ \frac{\mathcal{E}_{xz}^{3/2} (1 - \alpha_{\text{ML}} - \mathcal{E}_{xz})}{(1 - \alpha_{\text{ML}} - \mathcal{E}_{xz})^2 + \beta_{\text{ML}}^2} \right], \quad (\text{B.13b})$$

$$H_z = 1 - H_x - H_y, \quad (\text{B.13c})$$

onde

$$H_x^{\text{prol}} = 1 - 2H_y^{\text{prol}}, \quad (\text{B.14a})$$

$$H_x^{\text{obl}} = H_y^{\text{obl}}, \quad (\text{B.14b})$$

$$\alpha_{\text{ML}} = \frac{4k^2}{1 + 9k^2}, \quad (\text{B.15})$$

$$\beta_{\text{ML}} = \frac{3k^2}{1 + 30k^2}, \quad (\text{B.16})$$

com  $H_x^{\text{prol}}$  e  $H_x^{\text{obl}}$  definidos como

$$H_y^{\text{prol}} = \frac{1}{3} \left( 1 + \mathcal{E}_{xz}^2 - \frac{\mathcal{E}_{xz}^4}{2} \right), \quad (\text{B.17a})$$

$$H_y^{\text{obl}} = \frac{1}{3} \left( \frac{2 - 7\mathcal{E}_{xz}^2 + 5\mathcal{E}_{xz}^4}{2 - 7\mathcal{E}_{xz}^2 + 10\mathcal{E}_{xz}^4} \right). \quad (\text{B.17b})$$

Note-se que no caso particular de um esferoide prolato,  $H_y$  reduz-se a  $H_y^{\text{prol}}$  uma vez que  $k$  e  $(\alpha_{\text{ML}}^2 + \beta_{\text{ML}}^2)/2$  são zero.

No caso especial de um vazio cilíndrico elíptico tem-se que

$$H_y = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{25}{2} \frac{\mathcal{E}_{yz}^2 (9\mathcal{E}_{yz}^2 - 1)}{(9\mathcal{E}_{yz}^2 - 1)^2 + 36\mathcal{E}_{yz}^4} \right]. \quad (\text{B.18})$$

### B.3 Constante $\mathcal{Q}$

A constante  $\mathcal{Q}\{\boldsymbol{\sigma}\}$  é definida como

$$\mathcal{Q}\{\boldsymbol{\sigma}\} \equiv \mathcal{Q}^{\text{W}}\{\boldsymbol{\sigma}\} - (1 + g)(f + g)\kappa^2\sigma_{\text{n}}^2, \quad (\text{B.19})$$

onde a forma quadrática de Willis  $\mathcal{Q}^{\text{W}}\{\boldsymbol{\sigma}\}$  é dada por

$$\mathcal{Q}^{\text{W}}\{\boldsymbol{\sigma}\} \equiv \boldsymbol{\sigma}^{\text{dg}} \cdot \boldsymbol{M}^{\text{dg}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\text{dg}} + \boldsymbol{\sigma}^{\text{offdg}} \cdot \boldsymbol{M}^{\text{offdg}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\text{offdg}}. \quad (\text{B.20})$$

Na expressão anterior  $\boldsymbol{\sigma}^{\text{dg}}$  e  $\boldsymbol{\sigma}^{\text{offdg}}$  denotam as tensões normais e de corte, respetivamente,

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{dg}} \equiv \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{Bmatrix}; \quad (\text{B.21a})$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{offdg}} \equiv \begin{Bmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.21b})$$

Os tensores  $\mathbf{M}^{\text{dg}}$  e  $\mathbf{M}^{\text{offdg}}$  são definidos como

$$\mathbf{M}^{\text{dg}} \equiv (1-f) \begin{bmatrix} 1 & -1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \\ -1/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} + \frac{3f}{2} \begin{bmatrix} \mathbb{T}_{1111} & \mathbb{T}_{1122} & \mathbb{T}_{1133} \\ \mathbb{T}_{2211} & \mathbb{T}_{2222} & \mathbb{T}_{2233} \\ \mathbb{T}_{3311} & \mathbb{T}_{3322} & \mathbb{T}_{3333} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (\text{B.22a})$$

$$\mathbf{M}^{\text{offdg}} \equiv 3(1-f) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{3f}{2} \begin{bmatrix} \mathbb{T}_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{T}_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{T}_{1313} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (\text{B.22b})$$

onde o tensor de quarta ordem  $\mathbb{T}_{ijkl}$  encontra-se relacionado com o tensor de *Eshelby* (calculado para o elipsoide do vazio e propriedades elásticas da matriz),  $\mathbb{S}_{ijkl}$ , através da expressão

$$\mathbf{T} \equiv \lim_{\nu \rightarrow 1/2} \frac{1}{2G} \mathbf{C}\{G, \nu\} : (\mathbf{I} - \mathbb{S}\{\nu\}). \quad (\text{B.23})$$

Note-se o paralelismo com o tensor microestrutural  $\mathbf{Q} \equiv \mathbf{C} : (\mathbf{I} - \mathbb{S}\{\nu\})$  (Anexo C). O tensor possui as propriedades de simetria maior e menor,

$$\mathbb{T}_{ijkl} = \mathbb{T}_{jikl} = \mathbb{T}_{ijlk} = \mathbb{T}_{klij}, \quad (\text{B.24})$$

e as suas componentes são dadas por

$$\begin{cases} \mathbb{T}_{1111} \equiv 2 - \frac{\mathcal{I}_1 + 3a_1^2 \mathcal{I}_{11}}{4\pi}, \\ \mathbb{T}_{1122} \equiv 1 - \frac{\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + (a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}}{8\pi}, \\ \mathbb{T}_{1212} \equiv \frac{1}{2} - \frac{(a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}}{8\pi}, \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

e restantes permutações cíclicas de (1, 2, 3) e  $(a_1, a_2, a_3)$ . Nas expressões anteriores os termos  $\mathcal{I}_i$  e  $\mathcal{I}_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) são os integrais de *Eshelby*, calculados a partir das expressões descritas no Anexo D.

**Nota.** *Os integrais de Eshelby com índices diferentes,  $\mathcal{I}_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3, i \neq j$ ), são definidos no Anexo D de forma ligeiramente diferente dos artigos do modelo ML. As expressões aqui documentadas têm como referência os livros Kachanov, Shafiro et al. (2003) e Mura (1987), que introduzem um fator multiplicativo de 3 nos integrais  $\mathcal{I}_{ij}$ . Logo, a expressão (B.25) vem ligeiramente diferente da apresentada na publicação Madou e Leblond (2012b).*

## Anexo C

# Modelo ‘Variacional’: cálculo do tensor microestrutural

---

As expressões abaixo indicadas têm como referência o Anexo A da publicação Aravas e Castañeda (2004), onde é descrita a implementação computacional do modelo ‘variacional’.

É demonstrado em Kailasam, Aravas et al. (2000) que o tensor microestrutural  $\mathbf{Q}$  pode ser escrito na forma

$$\frac{1}{G}\mathbf{Q} = \frac{w_1 w_2}{4\pi} \int_{|\boldsymbol{\xi}|=1} \frac{\mathbf{E}\{\boldsymbol{\xi}\}}{|\mathbf{Z}^{-1} \cdot \boldsymbol{\xi}|^3} dS(\boldsymbol{\xi}), \quad (\text{C.1})$$

onde o tensor de quarta ordem  $\mathbf{E}\{\boldsymbol{\xi}\}$  é dado por

$$\begin{aligned} E_{ijkl}\{\boldsymbol{\xi}, \nu\} &= \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^2}(\delta_{ik}\xi_j\xi_l + \delta_{il}\xi_j\xi_k + \delta_{jk}\xi_i\xi_l + \delta_{jl}\xi_i\xi_k) \\ &+ \frac{2\nu}{1-\nu} \left[ \delta_{ij}\delta_{kl} - \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^2}(\delta_{ij}\xi_k\xi_l + \delta_{kl}\xi_i\xi_j) \right] + \frac{2}{|\boldsymbol{\xi}|^4} \frac{1}{1-\nu} \xi_i\xi_j\xi_k\xi_l, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

e a matriz  $\mathbf{Z}$ , representativa da forma do vazão, é obtida por

$$\mathbf{Z} = \frac{1}{w_1} \mathbf{k} \otimes \mathbf{k} + \frac{1}{w_2} \mathbf{l} \otimes \mathbf{l} + \mathbf{m} \otimes \mathbf{m}. \quad (\text{C.3})$$

O integral da expressão (C.2), através de uma mudança de variáveis, pode ser desenvolvido em

$$I_m \equiv \int_{|\boldsymbol{\xi}|=1} A(\boldsymbol{\xi}) dS(\boldsymbol{\xi}) \equiv \int_{\phi=0}^{\pi} \int_{\chi=0}^{2\pi} A(\boldsymbol{\xi}\{\chi, \phi\}) \sin \phi d\chi d\phi, \quad (\text{C.4})$$

onde

$$\boldsymbol{\xi} = (\sin \phi \cos \chi, \sin \phi \sin \chi, \cos \phi). \quad (\text{C.5})$$

O integral pode ainda ser expresso no domínio normalizado através das variáveis

$$\chi(r) = (r + 1)\pi \quad , \quad \phi(s) = (s + 1)\frac{\pi}{2} \quad , \quad (\text{C.6})$$

vindo então

$$I_m \equiv \frac{\pi^2}{2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 A(\xi\{\chi, \phi\}) \sin \phi \, dr \, ds \quad . \quad (\text{C.7})$$

Utilizando a quadratura de *Gauss* o integral resulta em

$$I_m \cong \frac{\pi^2}{2} \sum_{i=1}^{n_G} \sum_{j=1}^{n_G} W_i W_j A(\xi\{\chi_i, \phi_j\}) \sin \phi_j \quad , \quad (\text{C.8})$$

onde  $\theta_i = \theta(r_i)$  e  $\phi_j = \phi(s_j)$  são as posições dos pontos dos  $n_G$  pontos de *Gauss* e  $W_i$  e  $W_j$  os respetivos pesos.

Para vazios onde os fatores de proporcionalidade são substancialmente diferentes da unidade, é necessário um número elevado de pontos de *Gauss* para calcular o integral (C.7) de forma suficientemente precisa (Aravas e Castañeda, 2004). Pretendendo-se tornar o processo numérico mais eficiente, os tensores microestruturais podem ser expressos, no sistema de eixos local definido pelos eixos principais do vazio, a partir da solução do problema de *Eshelby*. Assim sendo, considerando o referencial dado por  $a_1 \geq a_2 \geq a_3$ , o tensor microestrutural  $\mathbf{Q}$  pode ser expresso na forma<sup>1</sup>

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{1111} = \frac{G}{4\pi(1-\nu)} (8\pi - \mathcal{I}_1 - 3a_1^2 \mathcal{I}_{11}) \quad , \\ \mathbf{Q}_{1122} = \frac{G}{8\pi(1-\nu)} [16\pi\nu + (1-4\nu)(\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2) - (a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}] \quad , \\ \mathbf{Q}_{1212} = \frac{G}{8\pi(1-\nu)} [8\pi(1-\nu) - (1-2\nu)(\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2) - (a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}] \quad . \end{cases} \quad (\text{C.9})$$

Os termos  $\mathcal{I}_i$  e  $\mathcal{I}_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) são os integrais de *Eshelby*, cujas expressões se encontram descritas no Anexo D. As restantes componentes não nulas de  $\mathbf{Q}$  são obtidas por permutação cíclica de  $(1, 2, 3)$  e  $(a_1, a_2, a_3)$ , bem como através das propriedades de simetria,

$$\mathbf{Q}_{ijkl} = \mathbf{Q}_{jikl} = \mathbf{Q}_{ijlk} = \mathbf{Q}_{klij} \quad . \quad (\text{C.10})$$

<sup>1</sup>Tal como indicado no Anexo B, os integrais de *Eshelby* são aqui definidos com um fator multiplicativo de 3 relativamente à publicação Aravas e Castañeda (2004), vindo as expressões ligeiramente diferentes.

Na condição de incompressibilidade ( $\nu = 1/2$ ) tem-se que

$$\begin{cases} \frac{1}{G} Q_{1111} = 4 - \frac{\mathcal{I}_1 + 3a_1^2 \mathcal{I}_{11}}{2\pi}, \\ \frac{1}{G} Q_{1122} = 2 - \frac{\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + (a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}}{4\pi}, \\ \frac{1}{G} Q_{1212} = 1 - \frac{(a_1^2 + a_2^2) \mathcal{I}_{12}}{4\pi}. \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

Note-se a semelhança com o tensor  $\mathbf{T}$  associado ao modelo ML, descrito no Anexo B.

*Página intencionalmente deixada em branco*

## Anexo D

# Problema de *Eshelby*: inclusão elipsoidal

---

O problema da inclusão de *Eshelby* descreve o comportamento elástico de um sólido na presença de uma inclusão sujeita a uma deformação permanente  $\varepsilon_{ij}^*$  (designada por Mura (1987) pelo termo *eigenstrain*). Na resolução do problema, *Eshelby* utiliza o princípio da sobreposição de efeitos e a função de *Green*, considerando a matriz como um meio infinito, homogêneo e com comportamento linear elástico (Eshelby, 1957). O resultado final é o tensor de quarta ordem  $\mathbb{S}_{ijkl}$ , designado por tensor de *Eshelby*, que relaciona as deformações no sólido com a deformação permanente  $\varepsilon_{ij}^*$ .

No caso de uma inclusão elipsoidal, o tensor  $\mathbb{S}_{ijkl}$  é constante, o que significa que o campo deformações e tensões na matriz e na inclusão é uniforme, ou seja:

$$\varepsilon_{ij} = \mathbb{S}_{ijkl} \varepsilon_{ij}^* . \quad (\text{D.1})$$

O tensor  $\mathbb{S}_{ijkl}$ , como relaciona dois tensores simétricos, apresenta simetria menor<sup>1</sup>,

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{jikl} = \mathbb{S}_{ijlk} , \quad (\text{D.2})$$

e, caso a matriz seja isotrópica, é função da geometria da inclusão e do coeficiente de *Poisson*.

As expressões para a obtenção do tensor de *Eshelby*, para inclusões com determinadas particularidades geométricas, vêm simplificadas. No contexto deste trabalho apenas são detalhadas as expressões para o caso de um elipsoide genérico, e os casos particulares do esferoide e da esfera. Sugere-se ao leitor a consulta de (Mura, 1987) ou (Kachanov, Shafiro et al., 2003) para um estudo completo das várias soluções existentes.

---

<sup>1</sup>À exceção da esfera que, como indicado na Secção D.3, possui simetria menor e maior.

## D.1 Elipsoide genérico

Caso a inclusão seja um elipsoide genérico de raios distintos  $a_1, a_2, a_3$ , o tensor  $\mathbb{S}_{ijkl}$  é expresso em termos de integrais elípticos incompletos através das seguintes expressões:

$$\mathbb{S}_{1111} = \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_1^2 \mathcal{I}_{11} + \frac{(1-2\nu)}{8\pi(1-\nu)} \mathcal{I}_1, \quad (\text{D.3a})$$

$$\mathbb{S}_{1122} = \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_2^2 \mathcal{I}_{12} - \frac{(1-2\nu)}{8\pi(1-\nu)} \mathcal{I}_1, \quad (\text{D.3b})$$

$$\mathbb{S}_{1133} = \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_3^2 \mathcal{I}_{13} - \frac{(1-2\nu)}{8\pi(1-\nu)} \mathcal{I}_1, \quad (\text{D.3c})$$

$$\mathbb{S}_{1212} = \frac{(a_1^2 + a_2^2)}{16\pi(1-\nu)} \mathcal{I}_{12} + \frac{(1-2\nu)}{16\pi(1-\nu)} (\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2). \quad (\text{D.3d})$$

As restantes componentes  $\mathbb{S}_{ijkl}$  não nulas são obtidas através das relações de simetria  $\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{jikl} = \mathbb{S}_{ijlk}$  e por permutação cíclica de  $(1, 2, 3)$  nos termos  $\mathbb{S}_{ijkl}$ ,  $a_i$ ,  $\mathcal{I}_i$  e  $\mathcal{I}_{ij}$ .

Assumindo que  $a_1 > a_2 > a_3$  os integrais de *Eshelby* vêm

$$\mathcal{I}_1 = \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_1^2 - a_2^2) \sqrt{a_1^2 - a_3^2}} [\mathcal{F}_{\text{el}}(\theta, k) - \mathcal{E}_{\text{el}}(\theta, k)], \quad (\text{D.4a})$$

$$\mathcal{I}_3 = \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_2^2 - a_3^2) \sqrt{a_1^2 - a_3^2}} \left[ \frac{a_2 \sqrt{a_1^2 - a_3^2}}{a_1 a_3} - \mathcal{E}_{\text{el}}(\theta, k) \right]; \quad (\text{D.4b})$$

$$\mathcal{I}_2 = 4\pi - \mathcal{I}_1 - \mathcal{I}_3, \quad (\text{D.4c})$$

onde  $\mathcal{F}_{\text{el}}(\theta, k)$  e  $\mathcal{E}_{\text{el}}(\theta, k)$  são os integrais elípticos incompletos,

$$\mathcal{F}_{\text{el}}(\theta, k) = \int_0^\theta \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 w}} dw, \quad (\text{D.5})$$

$$\mathcal{E}_{\text{el}}(\theta, k) = \int_0^\theta \sqrt{1 - k^2 \sin^2 w} dw, \quad (\text{D.6})$$

cujos argumentos são dados por

$$\theta_{\text{el}} = \arcsin \sqrt{1 - \left(\frac{a_3}{a_1}\right)^2}, \quad (\text{D.7})$$

$$k_{\text{el}} = \sqrt{\frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 - a_3^2}}. \quad (\text{D.8})$$

Os termos  $I_{ij}$  são obtidos a partir das seguintes relações (e respectivas permutações cíclicas):

$$3\mathcal{I}_{11} + \mathcal{I}_{12} + \mathcal{I}_{13} = \frac{4\pi}{a_1^2}, \quad (\text{D.9a})$$

$$3a_1^2\mathcal{I}_{11} + a_2^2\mathcal{I}_{12} + a_3^2\mathcal{I}_{13} = 3\mathcal{I}_1, \quad (\text{D.9b})$$

$$\mathcal{I}_{12} = \frac{\mathcal{I}_2 - \mathcal{I}_1}{a_1^2 - a_2^2}. \quad (\text{D.9c})$$

## D.2 Esferoide

No caso de um esferoide ( $a_1 = a_2 \neq a_3$ ) o tensor de *Eshelby* vem simplificado, sendo apenas função da geometria, através do parâmetro  $w = a_3/a_1$ , e do coeficiente de *Poisson*:

$$\mathbb{S}_{1111} = \mathbb{S}_{2222} = -\frac{3w^2}{8(1-\nu)(1-w^2)} + \frac{g}{4(1-\nu)} \left[ 1 - 2\nu + \frac{9}{4(1-w^2)} \right], \quad (\text{D.10a})$$

$$\mathbb{S}_{3333} = \frac{1}{(1-\nu)} \left[ 2 - \nu - \frac{1}{1-w^2} \right] + \frac{g}{2(1-\nu)} \left[ -4 + 2\nu + \frac{3}{4(1-w^2)} \right], \quad (\text{D.10b})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{1122} = \mathbb{S}_{2211} &= \frac{1}{8(1-\nu)} \left[ 1 - \frac{1}{1-w^2} \right] \\ &+ \frac{g}{16(1-\nu)} \left[ -4(1-2\nu) + \frac{3}{1-w^2} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.10c})$$

$$\mathbb{S}_{1133} = \mathbb{S}_{2233} = \frac{w^2}{2(1-\nu)(1-w^2)} - \frac{g}{4(1-\nu)} \left[ 1 - 2\nu + \frac{3w^2}{1-w^2} \right], \quad (\text{D.10d})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{3311} = \mathbb{S}_{3322} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left[ (2\nu - 1) + \frac{1}{1-w^2} \right] \\ &+ \frac{g}{4(1-\nu)} \left[ 2(1-2\nu) - \frac{3}{1-w^2} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.10e})$$

$$\mathbb{S}_{1212} = -\frac{w^2}{8(1-\nu)(1-w^2)} + \frac{g}{16(1-\nu)} \left[ 4(1-2\nu) + \frac{3}{1-w^2} \right], \quad (\text{D.10f})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{1313} = \mathbb{S}_{2323} &= \frac{1}{4(1-\nu)} \left[ 1 - 2\nu + \frac{(1+w^2)}{(1-w^2)} \right] \\ &- \frac{g}{8(1-\nu)} \left[ 1 - 2\nu + 3\frac{(1+w^2)}{(1-w^2)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.10g})$$

Nas expressões anteriores o termo  $g$  depende da forma do esferoide:

- Oblato:  $w < 1$

$$g = \frac{w}{(1-w^2)^{3/2}} \left[ \arccos w - w\sqrt{1-w^2} \right], \quad (\text{D.11})$$

- Prolato:  $w > 1$

$$g = \frac{w}{(w^2-1)^{3/2}} \left[ w\sqrt{w^2-1} - \operatorname{arccosh} w \right]. \quad (\text{D.12})$$

Os integrais de *Eshelby* são dados por

$$\mathcal{I}_1 = \mathcal{I}_2 = 2\pi g, \quad (\text{D.13a})$$

$$\mathcal{I}_3 = 4\pi - 2\mathcal{I}_1, \quad (\text{D.13b})$$

$$\mathcal{I}_{11} = \mathcal{I}_{22} = \mathcal{I}_{12} = \frac{\pi}{a_1^2} - \frac{\mathcal{I}_1 - \mathcal{I}_3}{4(a_3^2 - a_1^2)}, \quad (\text{D.13c})$$

$$\mathcal{I}_{13} = \mathcal{I}_{23} = \frac{\mathcal{I}_1 - \mathcal{I}_3}{(a_3^2 - a_1^2)}, \quad (\text{D.13d})$$

$$3\mathcal{I}_{33} = \frac{4\pi}{a_3^2} - 2\mathcal{I}_{13}. \quad (\text{D.13e})$$

### D.3 Esfera

No caso último de uma esfera ( $a_1 = a_2 = a_3 = a$ ), o tensor de *Eshelby* depende apenas do coeficiente de *Poisson*:

$$\mathbb{S}_{1111} = \frac{7-5\nu}{15(1-\nu)}; \quad (\text{D.14a})$$

$$\mathbb{S}_{1212} = \frac{4-5\nu}{15(1-\nu)}; \quad (\text{D.14b})$$

$$\mathbb{S}_{1122} = \frac{5\nu-1}{15(1-\nu)}. \quad (\text{D.14c})$$

As restantes componentes são obtidas por permutação cíclica dos termos (1, 2, 3) e pelas relações de simetria, que no caso da esfera além da simetria menor, o tensor  $\mathbb{S}_{ijkl}$  possui simetria maior, ou seja

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{jikl} = \mathbb{S}_{ijlk} = \mathbb{S}_{klij}. \quad (\text{D.15})$$

Os integrais de *Eshelby* neste caso reduzem-se a

$$\mathcal{I}_1 = \mathcal{I}_2 = \mathcal{I}_3 = \frac{4\pi}{3}, \quad (\text{D.16a})$$

$$\mathcal{I}_{11} = \mathcal{I}_{22} = \mathcal{I}_{33} = \mathcal{I}_{12} = \mathcal{I}_{13} = \mathcal{I}_{23} = \frac{4\pi}{5a^2}. \quad (\text{D.16b})$$

## Anexo E

# Lei de *Hooke* na forma matricial: Notação de *Voigt*

---

É usual na implementação computacional das equações relativas ao *Método dos Elementos Finitos* a representação de tensores na forma de vetores e matrizes. A principal vantagem desta notação é a maior facilidade de programação e eficiência do programa em termos de consumo de memória.

### E.1 Notação de *Voigt*

Seja  $A_{ijkl}$  um tensor de quarta ordem genérico. Caso o tensor possua simetria maior e menor,

$$A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{ijlk} = A_{klij}, \quad (\text{E.1})$$

é possível representá-lo na forma matricial através da notação de *Voigt*. A transformação  $A_{ijkl} \rightarrow A_{mn}$  é realizada através da correlação de índices:

$$\begin{array}{llll} (11) & \rightarrow & 1 & ; & (22) & \rightarrow & 2 & ; & (33) & \rightarrow & 3 \\ (23) & \rightarrow & 4 & ; & (13) & \rightarrow & 5 & ; & (12) & \rightarrow & 6 \\ (32) & & & & (31) & & & & (21) & & \end{array} \quad (\text{E.2})$$

Na expressão anterior os termos em parênteses denotam os termos  $(ij)$  ou  $(kl)$  do tensor  $A_{ijkl}$ , que correspondem aos índices  $m$  ou  $n$  (número sem parênteses) na notação matricial  $A_{mn}$ . Desta forma tem-se que

$$[\mathbf{A}] = \begin{bmatrix} A_{1111} & A_{1122} & A_{1133} & A_{1123} & A_{1113} & A_{1112} \\ A_{2211} & A_{2222} & A_{2233} & A_{2223} & A_{2213} & A_{2212} \\ A_{3311} & A_{3322} & A_{3333} & A_{3323} & A_{3313} & A_{3312} \\ A_{2311} & A_{2322} & A_{2333} & A_{2323} & A_{2313} & A_{2312} \\ A_{1311} & A_{1322} & A_{1333} & A_{1323} & A_{1313} & A_{1312} \\ A_{1211} & A_{1222} & A_{1233} & A_{1223} & A_{1213} & A_{1212} \end{bmatrix}. \quad (\text{E.3})$$

Note-se que devido às relações de simetria iniciais, a matriz  $[\mathbf{A}]$  é simétrica.

### E.1.1 Representação vetorial dos tensores de deformação e tensão

O tensor de deformação  $\varepsilon_{ij}$  pode ser representado na forma vetorial, através de um método análogo ao descrito anteriormente, resultando:

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.4})$$

O tensor das tensões  $\sigma_{ij}$  vem

$$[\boldsymbol{\sigma}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.5})$$

Na Equação (E.4) as componentes de deformação de corte na representação vetorial vêm multiplicadas por 2, sendo  $\boldsymbol{\varepsilon}$  geralmente designado por deformações de engenharia. A introdução deste fator multiplicativo tem o intuito de garantir a manutenção da propriedade comutativa<sup>1</sup>, ou seja,

$$\boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{E.6})$$

## E.2 Lei de *Hooke* na forma matricial

A lei de *Hooke* generalizada é descrita pela seguinte relação:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= S_{ijkl} \sigma_{kl}; \\ \sigma_{ij} &= D_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

onde o tensor de quarta ordem  $S_{ijkl}$  é o tensor de flexibilidade e  $D_{ijkl}$  o tensor de rigidez. Ambos possuem simetria maior e menor, o que possibilita a sua representação na forma matricial. Logo, através das relações lógicas (E.2), o tensor de

<sup>1</sup>Devido à propriedade de simetria dos tensores das deformações e tensões, tem-se que  $[\boldsymbol{\varepsilon}] : [\boldsymbol{\sigma}] = [\boldsymbol{\sigma}]^T : [\boldsymbol{\varepsilon}]$ .

rigidez  $D_{ijkl}$  na forma matricial é dado por

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{D}] &= \begin{bmatrix} D_{1111} & D_{1122} & D_{1133} & D_{1123} & D_{1113} & D_{1112} \\ & D_{2222} & D_{2233} & D_{2223} & D_{2213} & D_{2212} \\ & & D_{3333} & D_{3323} & D_{3313} & D_{3312} \\ & & & D_{2323} & D_{2313} & D_{2312} \\ & & & & D_{1313} & D_{1312} \\ \text{sim.} & & & & & D_{1212} \end{bmatrix} \\
 &\equiv \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & D_{14} & D_{15} & D_{16} \\ & D_{22} & D_{23} & D_{24} & D_{25} & D_{26} \\ & & D_{33} & D_{34} & D_{35} & D_{36} \\ & & & D_{44} & D_{45} & D_{46} \\ & & & & D_{55} & D_{56} \\ \text{sim.} & & & & & D_{66} \end{bmatrix} .
 \end{aligned} \tag{E.8}$$

O tensor de flexibilidade resulta

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{S}] &= \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & 2S_{1123} & 2S_{1113} & 2S_{1112} \\ & S_{2222} & S_{2233} & 2S_{2223} & 2S_{2213} & 2S_{2212} \\ & & S_{3333} & 2S_{3323} & 2S_{3313} & 2S_{3312} \\ & & & 4S_{2323} & 4S_{2313} & 4S_{2312} \\ & & & & 4S_{1313} & 4S_{1312} \\ \text{sim.} & & & & & 4S_{1212} \end{bmatrix} \\
 &\equiv \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ & & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ & & & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ & & & & S_{55} & S_{56} \\ \text{sim.} & & & & & S_{66} \end{bmatrix} .
 \end{aligned} \tag{E.9}$$

Note-se os fatores multiplicativos nas últimas três linhas e colunas, necessários para que se mantenham coerentes os resultados obtidos quer pela matriz de flexibilidade ou pela matriz de rigidez.

Na notação matricial a lei de *Hooke* generalizada pode então ser escrita como:

$$\varepsilon_m = S_{mn} \sigma_n ; \tag{E.10a}$$

$$\sigma_m = D_{mn} \varepsilon_n . \tag{E.10b}$$

### E.3 Constantes elásticas

As matrizes de rigidez e flexibilidade definidas anteriormente caracterizam o comportamento elástico de um material e as suas componentes são expressas em função das constantes elásticas, nomeadamente:

- $E$ : módulo de *Young*;
- $\nu$ : coeficiente de *Poisson*;
- $G$ : módulo de rigidez transversal;
- $\kappa$ : módulo de compressibilidade;
- $\lambda$ : primeiro parâmetro de *Lamé*.

Existem ainda outras constantes elásticas, sendo indicadas acima apenas as mais usuais.

Na tabela seguinte encontram-se as relações entre as constantes elásticas consideradas.

Tabela E.1: Relações entre constantes elásticas.

	$\lambda$	$G$	$E$	$\nu$	$\kappa$
$\lambda, G$	$\lambda$	$G$	$\frac{G(3\lambda+2G)}{\lambda+G}$	$\frac{\lambda}{2(\lambda+G)}$	$\lambda+\frac{2}{3}G$
$\lambda, E$	$\lambda$	$\frac{E-3\lambda+r}{4}$	$E$	$\frac{2\lambda}{E+\lambda+r}$	$\frac{E+3\lambda+r}{6}$
$\lambda, \nu$	$\lambda$	$\frac{\lambda(1-2\nu)}{2\nu}$	$\frac{\lambda(1+\nu)(1-2\nu)}{\nu}$	$\nu$	$\frac{\lambda(1\nu)}{3\nu}$
$\lambda, \kappa$	$\lambda$	$\frac{3}{2}(\kappa-\lambda)$	$\frac{9\kappa(\kappa-\lambda)}{3\kappa-\lambda}$	$\frac{\lambda}{3\kappa-\lambda}$	$\kappa$
$G, E$	$\frac{G(E-2G)}{3G-E}$	$G$	$E$	$\frac{E-2G}{2G}$	$\frac{GE}{3(3G-E)}$
$G, \nu$	$\frac{2\nu G}{1-2\nu}$	$G$	$2G(1+\nu)$	$\nu$	$\frac{2G(1+\nu)}{3(1-2\nu)}$
$G, \kappa$	$\kappa-\frac{2}{3}G$	$G$	$\frac{9\kappa G}{3\kappa+G}$	$\frac{3\kappa-2G}{6\kappa+2G}$	$\kappa$
$E, \nu$	$\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{E}{2(1+\nu)}$	$E$	$\nu$	$\frac{E}{3(1-2\nu)}$
$E, \kappa$	$\frac{3\kappa(3\kappa-E)}{9\kappa-E}$	$\frac{3\kappa E}{9\kappa-E}$	$E$	$\frac{3\kappa-E}{6\kappa}$	$\kappa$
$\nu, \kappa$	$\frac{3\kappa\nu}{1+\nu}$	$\frac{3\kappa(1-2\nu)}{2(1+\nu)}$	$3\kappa(1-2\nu)$	$\nu$	$\kappa$

$$r=\sqrt{E^2+9\lambda^2+2E\lambda}$$

## Anexo F

# Decomposição espectral

---

Dado um tensor genérico  $\mathbf{A}$ , um vetor não nulo  $\mathbf{l}$  é um vetor próprio de  $\mathbf{A}$ , com o valor próprio associado  $\lambda$ , se

$$\mathbf{A}\mathbf{l} = \lambda\mathbf{l} . \quad (\text{F.1})$$

O espaço definido pelos vetores que satisfazem a equação acima é denominado por *espaço característico*, possuindo as propriedades:

- Os valores próprios de um tensor definido positivo são positivos;
- O *espaço característico* de um tensor simétrico é constituído por vetores mutuamente ortogonais.

A partir das propriedades enunciadas, pode-se escrever que, caso o tensor  $\mathbf{A}$  seja simétrico, este admite a representação

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{l}_i \otimes \mathbf{l}_i , \quad (\text{F.2})$$

onde  $\lambda_i$  são os valores próprios de  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{l}_i$  os respetivos vetores próprios. A expressão acima é denominada por *decomposição espectral* de  $\mathbf{A}$ . Relativamente à base  $\{\mathbf{l}_i\}$  o tensor  $\mathbf{A}$  é representado pela matriz diagonal

$$\mathbf{A} = \text{diag} [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n] , \quad (\text{F.3})$$

e os vetores  $\mathbf{l}_i$  são denominados por direções principais de  $\mathbf{A}$ .

Alternativamente, pode-se também estabelecer a decomposição espectral a partir das *eigenprojections*  $\mathbf{L}_i$ , ou seja,

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^p \lambda_i \mathbf{L}_i , \quad (\text{F.4})$$

onde  $p \leq n$  denota o número de valores próprios distintos. Os tensores  $\mathbf{L}_i$  possuem a propriedade

$$\sum_{i=1}^p \mathbf{L}_i = \mathbf{I} , \quad (\text{F.5})$$

bem como

$$\mathbf{L}_i : \mathbf{L}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, p, \quad (\text{F.6})$$

onde  $\delta_{ij}$  representa o delta de *Kronecker*. Caso  $p = n$  (valores próprios distintos) tem-se que

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{l}_i \otimes \mathbf{l}_i, \quad (\text{F.7})$$

sendo que no caso geral  $\mathbf{L}_i$  é dado por

$$\mathbf{L}_i = \begin{cases} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^p \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} (\mathbf{A} - \lambda_j \mathbf{I}) & \text{se } p > 1; \\ \mathbf{I} & \text{se } p = 1. \end{cases} \quad (\text{F.8})$$

## F.1 Cálculo dos valores próprios

Os valores próprios satisfazem a equação característica,

$$\det(\mathbf{A} - \lambda_i \mathbf{I}) = 0, \quad (\text{F.9})$$

podendo-se escrever no caso tridimensional que

$$\det(\mathbf{A} - \lambda_i \mathbf{I}) = \lambda_i^3 - I_1 \lambda_i^2 + I_2 \lambda_i - I_3, \quad (\text{F.10})$$

onde os invariantes  $I_i$  são definidos como

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{A}; \quad (\text{F.11a})$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \{ (\text{tr } \mathbf{A})^2 - \text{tr } \mathbf{A}^2 \}; \quad (\text{F.11b})$$

$$I_3 = \det \mathbf{A}. \quad (\text{F.11c})$$

Admitindo que  $\mathbf{A}$  é uma matriz real, tem-se que

$$\lambda_1 = -2\sqrt{Q_\lambda} \cos\left(\frac{\theta_\lambda}{3}\right) + \frac{I_1}{3}; \quad (\text{F.12a})$$

$$\lambda_2 = -2\sqrt{Q_\lambda} \cos\left(\frac{\theta_\lambda + 2\pi}{3}\right) + \frac{I_1}{3}; \quad (\text{F.12b})$$

$$\lambda_3 = -2\sqrt{Q_\lambda} \cos\left(\frac{\theta_\lambda - 2\pi}{3}\right) + \frac{I_1}{3}, \quad (\text{F.12c})$$

onde  $Q_\lambda$  e  $\theta_\lambda$  são definidos como

$$Q_\lambda = \frac{I_1^2 - 3I_2}{9}, \quad (\text{F.13})$$

e

$$\theta_\lambda = \cos^{-1} \frac{(-2I_1^3 + 9I_1I_2 - 27I_3)}{54\sqrt{Q_\lambda^3}}. \quad (\text{F.14})$$

## F.2 Cálculo dos vetores próprios

Calculados os valores próprios, os vetores próprios podem ser calculados a partir da Equação F.1, ou seja

$$\mathbf{A}\mathbf{l}_i = \lambda_i \mathbf{l}_i. \quad (\text{F.15})$$

A expressão anterior resulta num sistema de equações linear, podendo-se retirar as proporções entre as várias componentes dos vetores próprios.

## F.3 Cálculo das *eigenprojections*

Calculados os valores próprios, os tensores  $\mathbf{L}_i$  são dados por:

- Se  $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ ,

$$\mathbf{L}_i = \frac{\lambda_i}{2\lambda_i^3 - I_1\lambda_i^2 + I_3} \left[ \mathbf{A}^2 - (I_1 - \lambda_i)\mathbf{A} + \frac{I_3}{\lambda_i}\mathbf{I} \right]; \quad (\text{F.16})$$

- Se  $\lambda_i \neq \lambda_j = \lambda_k$ , calcula-se  $\mathbf{L}_i$  pela expressão anterior e

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{I} - \mathbf{L}_i; \quad (\text{F.17})$$

- Se  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ ,

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{I}. \quad (\text{F.18})$$

*Página intencionalmente deixada em branco*

## Anexo G

# Estudo preliminar da evolução do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*

---

Este pequeno estudo tem como objetivo a análise e identificação de comportamentos típicos da evolução das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* homogeneizado, para diferentes solicitações, condições de fronteira e frações volúmicas. São analisados vazios com duas geometrias: cilíndricos e esféricos. Para o caso dos vazios cilíndricos é utilizado o modelo 2D e para os vazios esféricos o modelo 3D, ambos descritos no Capítulo 6. A metodologia utilizada consiste em correr todas as simulações até ser atingido o fator incremental total  $\lambda = 0.02$ . Este valor garante uma janela de resultados razoavelmente ampla, podendo-se assim observar as principais alterações na resposta macroscópica do material.

### G.1 Vazio cilíndrico

Na Figura G.1 encontra-se a evolução das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* para  $\alpha = 0$  (corte puro). São apresentados no mesmo gráfico, para as frações volúmicas  $f = 0.1$  e  $2\%$ , os resultados obtidos com a condição de fronteira linear, periódica e de tração uniforme. As Figuras G.2 e G.3 correspondem aos casos  $\alpha = 0.5$  (solicitação mista) e  $\alpha = 1$  (tração biaxial), respetivamente. Utilizando a Equação 3.22 (Capítulo 3),

$$\boldsymbol{\sigma} \equiv \frac{\mathbf{P}\mathbf{F}^T}{\det \mathbf{F}},$$

é calculado o tensor de *Cauchy* e, a partir deste, as várias medidas de tensão associadas. Na Figura G.4 é apresentada a evolução da tensão equivalente de *von Mises* e da pressão hidrostática transversal. Nos gráficos são apresentados os resultados para dez valores de  $\alpha$  distintos, considerando a a condição de fronteira linear (limite superior) e de tração uniforme (limite inferior).

**Nota.** Para o cálculo da tensão equivalente e pressão hidrostática, apenas foram consideradas as componentes de tensão no plano do vazio.

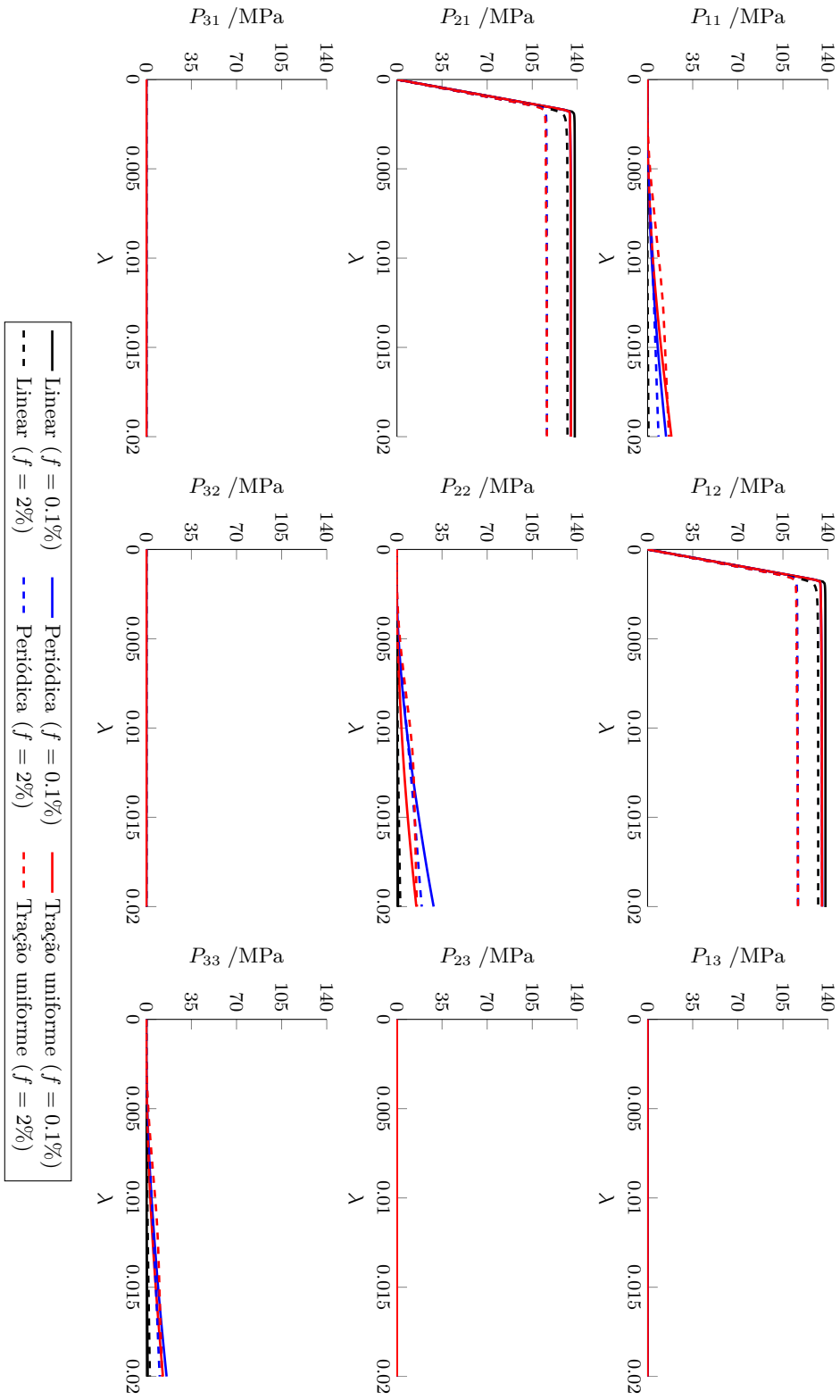


Figura G.1: Evolução das componentes primeiro tensor de Piola-Kirchhoff para  $\alpha = 0$  (corte puro).

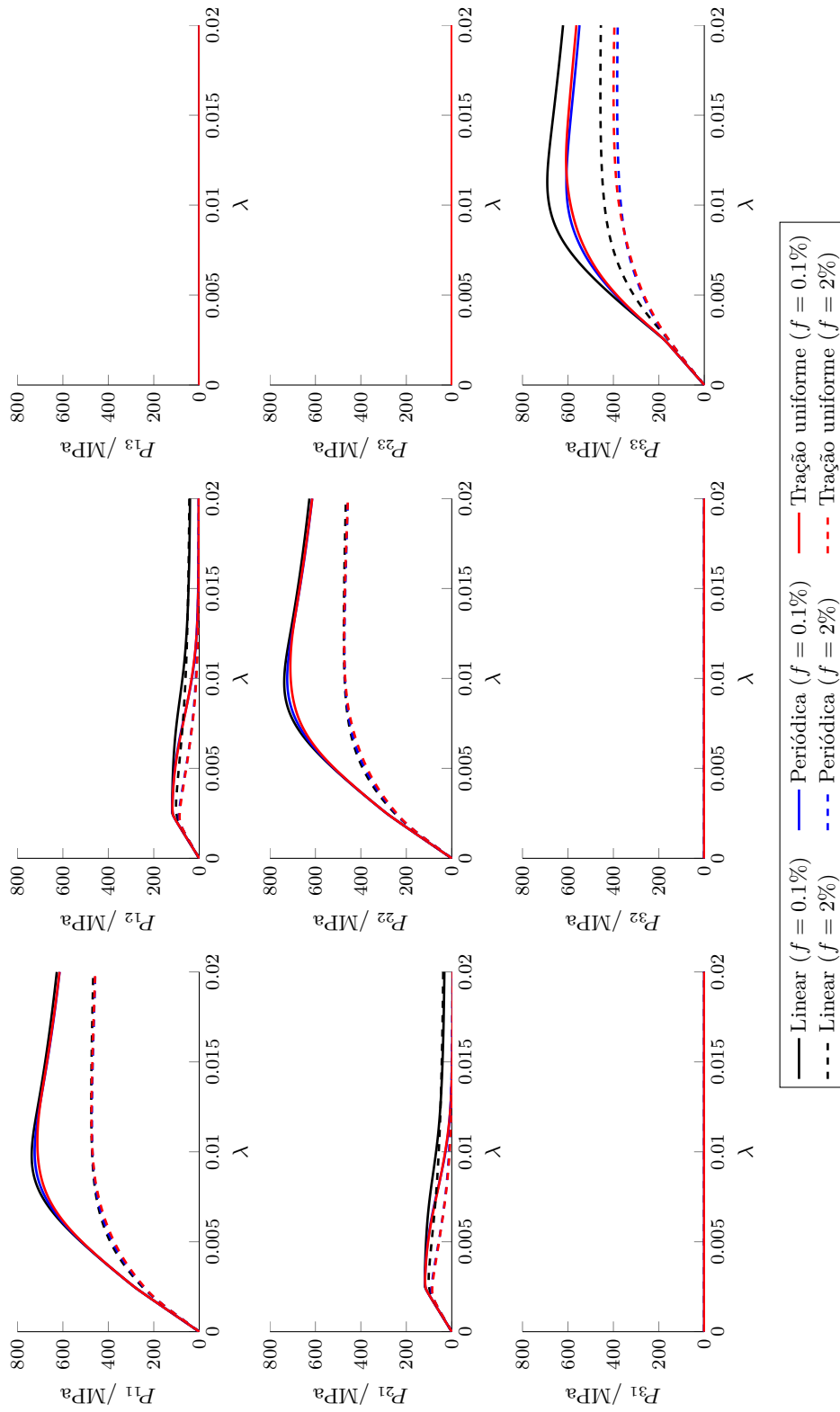


Figura G.2: Evolução das componentes primeiro tensor de Piola-Kirchhoff para  $\alpha = 0.5$  (solicitação mista).

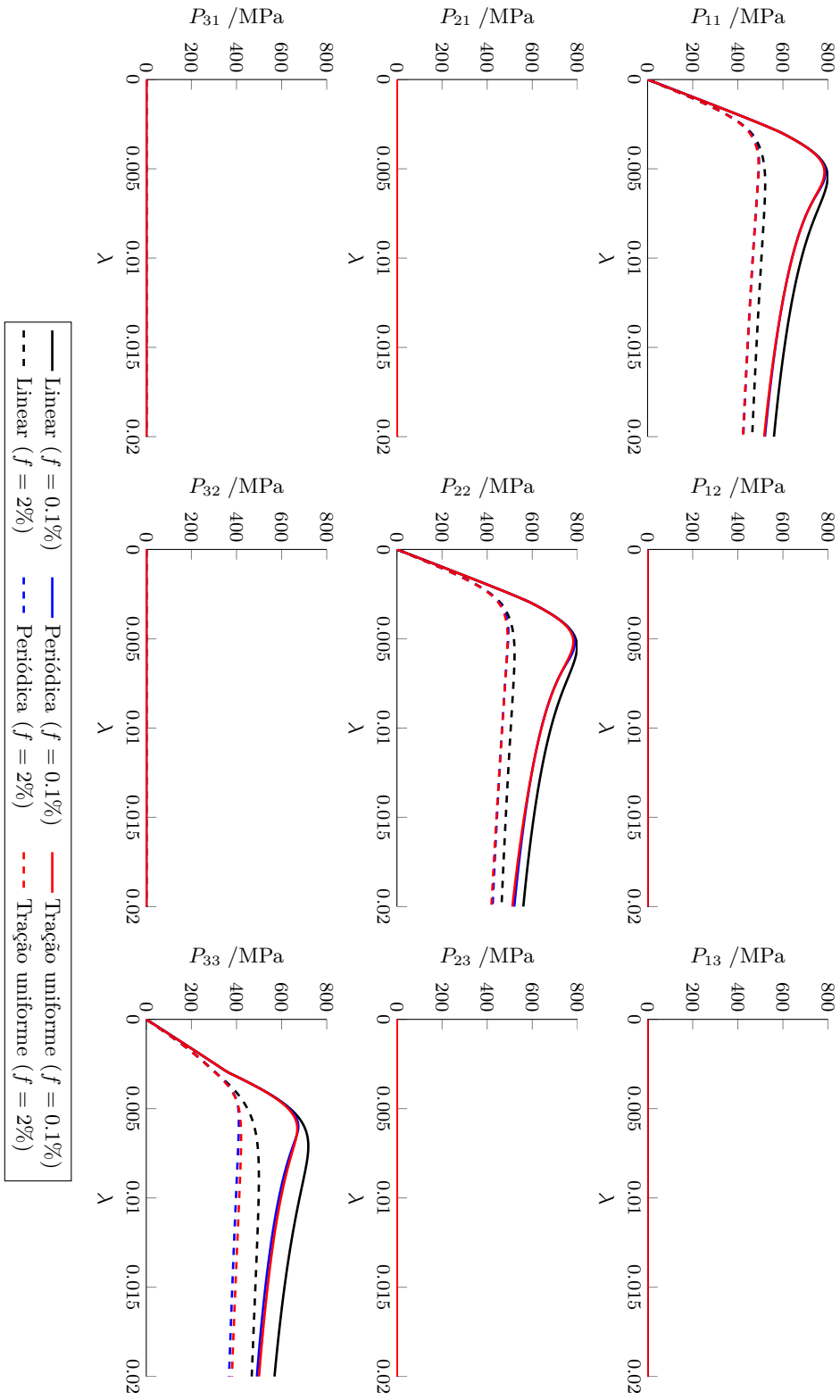


Figura G.3: Evolução das componentes primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* para  $\alpha = 1$  (tração biaxial).

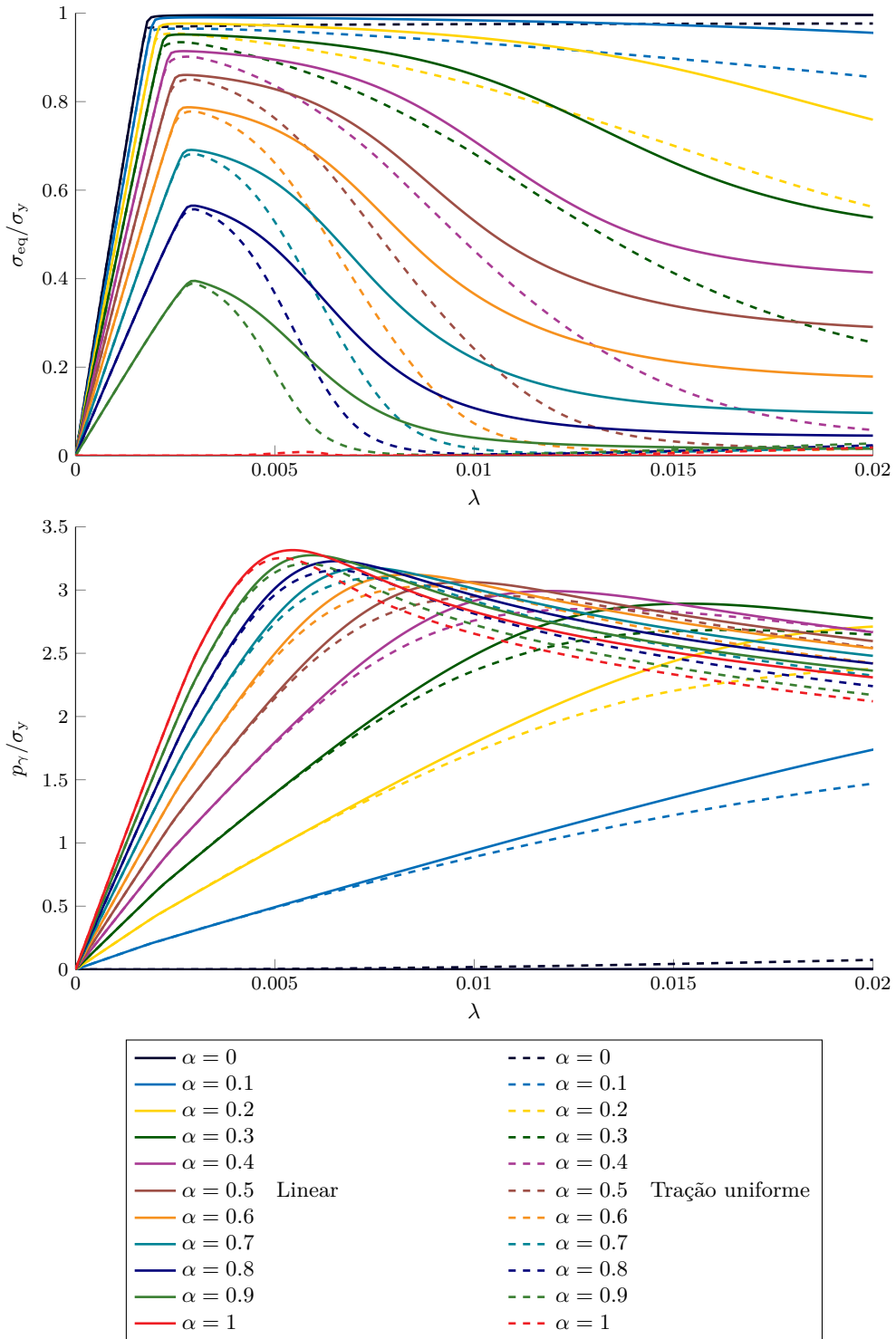


Figura G.4: Evolução da tensão equivalente de *von Mises* (gráfico superior) e da pressão hidrostática (gráfico inferior).

### G.1.1 Análise de resultados

Analisando a evolução do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* verifica-se que:

- Em todos os casos apenas se desenvolvem tensões normais e tensões de corte no plano, o que está perfeitamente de acordo com o tipo de deformação imposta ao RVE;
- Para a situação de corte puro,  $\alpha = 0$ , as tensões de corte são as que apresentam maior magnitude, estabilizando após entrar em regime de plasticidade. As tensões normais na condição de fronteira linear permanecem praticamente nulas, tendo-se registado contudo, para a condição de fronteira periódica e de tração uniforme, um ligeiro aumento quando atingido um determinado valor de fator incremental ( $\lambda \approx 0.005$ );
- Para  $\alpha = 0.5$  (solicitação mista), é possível observar que as tensões normais prevalecem relativamente às de corte, registando-se ainda pontos de inflexão na evolução de ambas as tensões. Repare-se contudo que a inflexão das tensões de corte ocorre primeiro ( $\lambda \approx 0.0025$ ) que nas tensões normais ( $\lambda \approx 0.08$ );
- Quando  $\alpha = 1$  (tração biaxial pura), as tensões de corte são nulas e as tensões normais são ligeiramente superiores ao caso  $\alpha = 0.5$ . Observa-se também que o ponto de inflexão ( $\lambda \approx 0.006$ ) se deslocou para um valor de fator incremental inferior ao registado em  $\alpha = 0.5$ ;
- Comparando a resposta obtida com as duas frações volúmicas, verifica-se que o aumento das dimensões do vazio provoca uma diminuição generalizada da magnitude das tensões e atenuação da inflexão das curvas.

A Figura G.4 permite uma visualização global dos factos até agora indicados, uma vez que a tensão equivalente de *von Mises* no plano está intimamente relacionada com as tensões de corte e a pressão hidrostática no plano com as tensões normais no plano. Analisando o gráfico superior, verifica-se que a tensão equivalente diminui com o aumento do parâmetro  $\alpha$  (diminuição da componente de corte aplicada ao RVE), observando-se também que a inflexão das curvas é mais acentuada. No caso  $\alpha = 1$ , tal como já apontado, a tensão equivalente de *von Mises* é praticamente nula e para o caso  $\alpha = 0$ , estabiliza num valor próximo da tensão de cedência da matriz. Relativamente à evolução da pressão hidrostática no plano, observa-se uma proporcionalidade direta com a magnitude da componente de tração aplicada ao RVE (aumento do parâmetro  $\alpha$ ). Verifica-se também que o ponto de inflexão ocorre para valores de fator incremental cada vez mais baixos. Embora nos casos  $\alpha = 0.1$  e  $\alpha = 0.2$  não seja visível, foi depois confirmado noutras simulações que existe um o ponto de inflexão, já para valores de fator incremental superiores a  $\lambda = 0.02$ .

## G.2 Vazio esférico

À semelhança da secção anterior, é apresentado nas figuras G.5, G.6 e G.7 a evolução das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* para os casos  $\alpha = 0$ , 0.5 e 1, respetivamente. Na Figura G.8 é apresentada a evolução da tensão equivalente de *von Mises* (gráfico superior) e da pressão hidrostática (gráfico inferior). Na Figura G.9 é apresentada a evolução da triaxialidade (gráfico superior) e do parâmetro de *Lode* (gráfico inferior).<sup>1</sup> O motivo pelo qual se analisou o parâmetro de *Lode* está relacionado com seu efeito nas curvas de cedência dos modelos teóricos ML e MVAR. Embora no caso do vazio esférico as curvas sejam independentes do parâmetro de *Lode*, é importante conhecer o comportamento deste parâmetro com o tipo de deformação aplicada. Assim, ao traçar as curvas de cedência teóricas nos casos particulares da esfera degenerada, será possível escolher um valor de parâmetro de *Lode* próximo do obtido por via numérica.

**Nota.** *Embora não seja documentado, foi realizado este mesmo estudo considerando todas as geometrias consideradas no âmbito deste trabalho. No entanto, por uma questão de brevidade e, acima de tudo, porque em todos os casos o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff evolui de forma semelhante, apenas é indicado o caso da esfera.*

---

<sup>1</sup>Note-se que neste caso as medidas de tensão foram calculadas considerando todas as componentes do tensor de *Cauchy*.

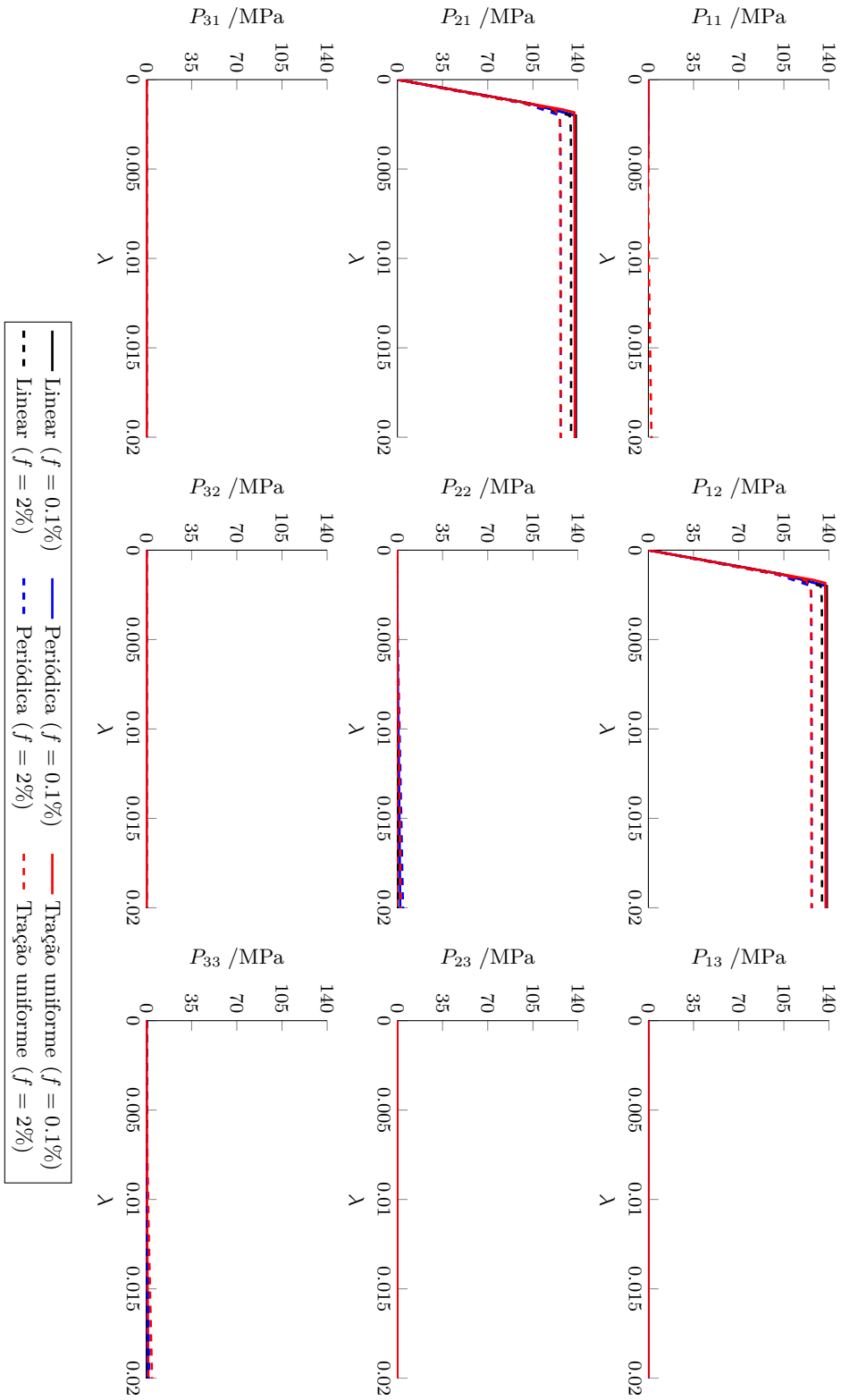


Figura G.5: Evolução das componentes primeiro tensor de Piola-Kirchhoff para  $\alpha = 0$  (corte puro).

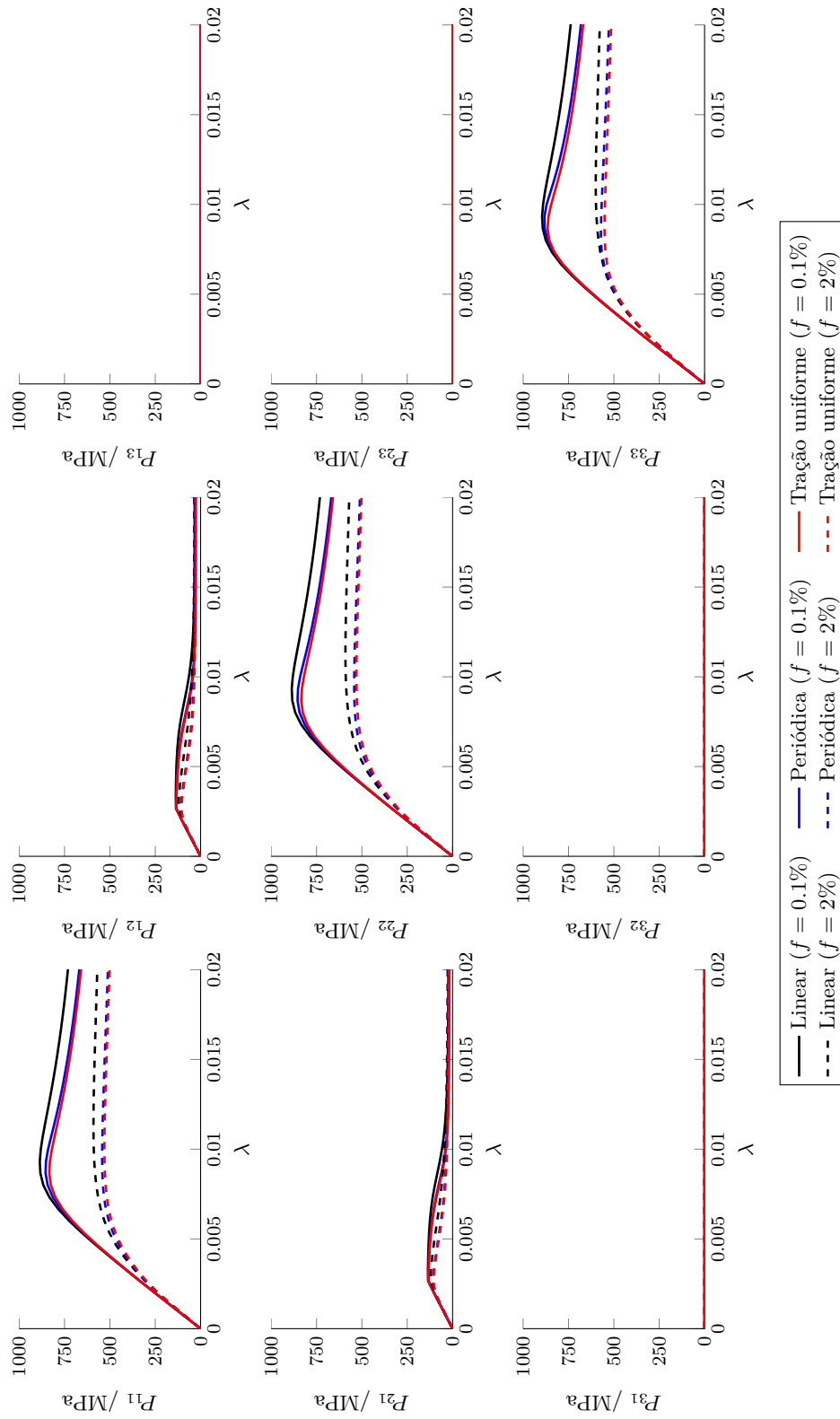


Figura G.6: Evolução das componentes primeiro tensor de Piola-Kirchhoff para  $\alpha = 0.5$  (solicitação mista).

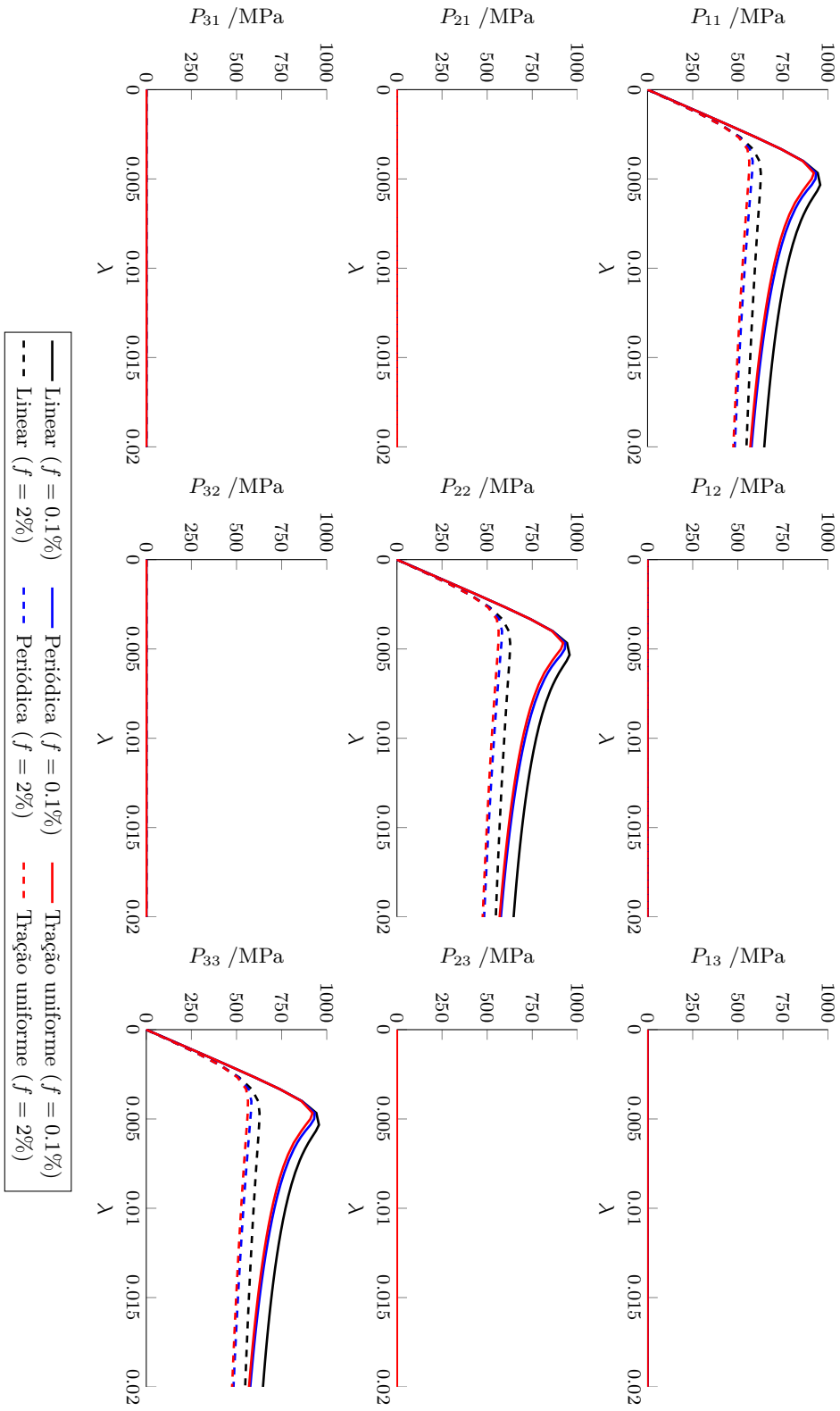


Figura G.7: Evolução das componentes primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* quando  $\alpha = 1$  (tração triaxial).

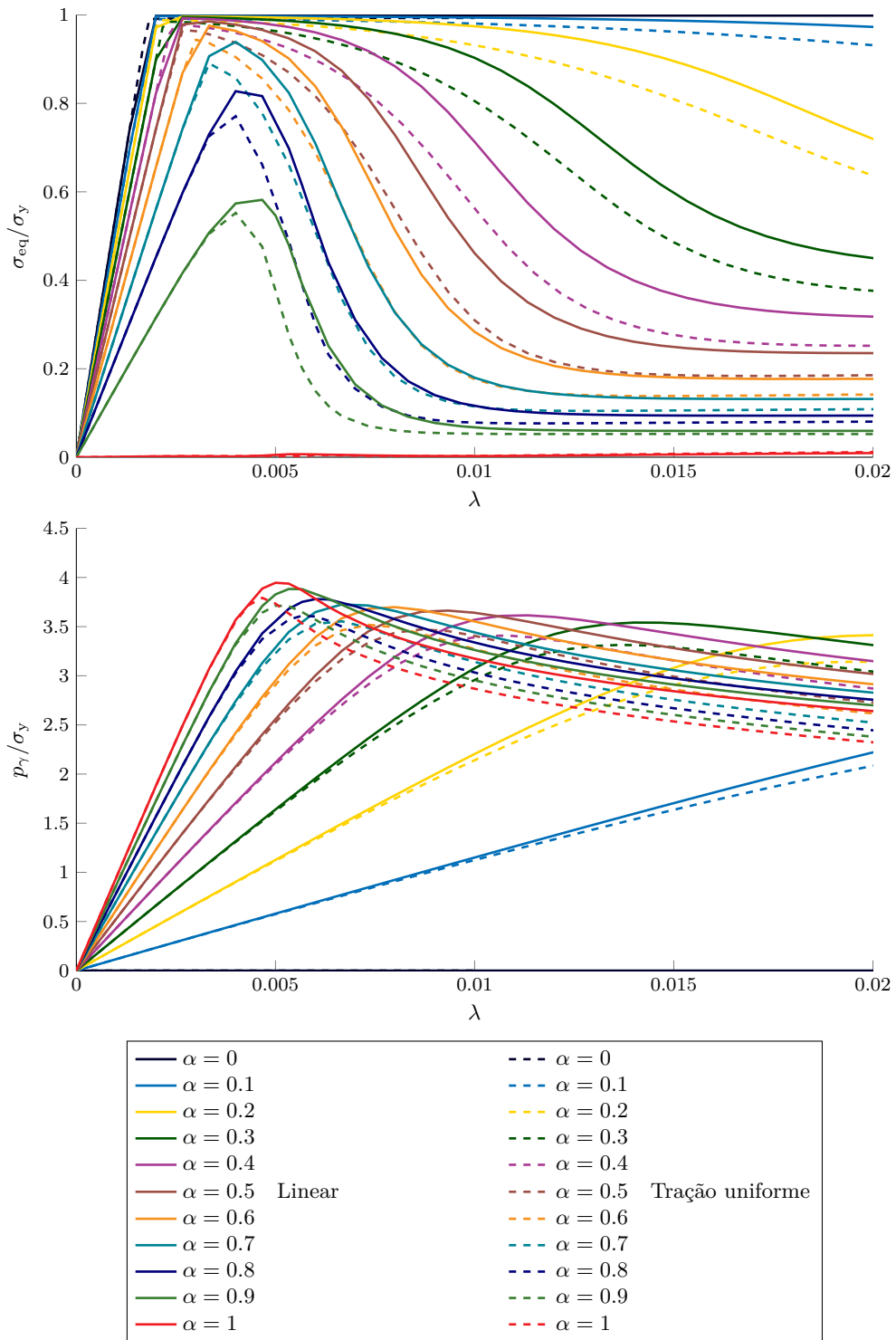


Figura G.8: Evolução da tensão equivalente de *von Mises* (gráfico superior) e da pressão hidrostática (gráfico inferior).

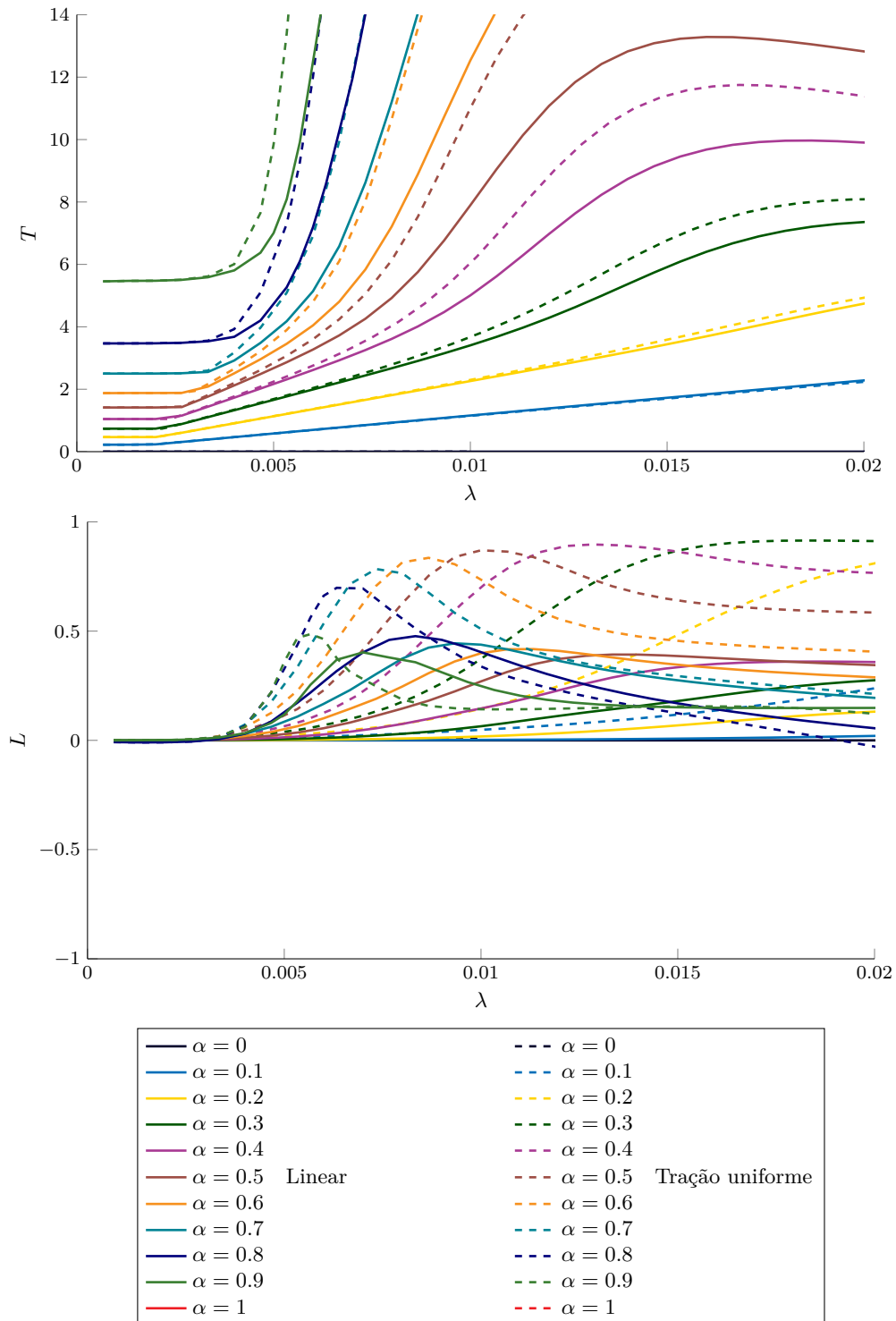


Figura G.9: Evolução da triaxialidade (gráfico superior) e do parâmetro de Lode (gráfico inferior).

### G.2.1 Análise de resultados

Como se pode observar nas figuras da evolução das componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*, o comportamento das tensões é em tudo semelhante ao obtido no estudo anterior dos vazios cilíndricos. As diferenças consistem essencialmente na magnitude das tensões normais, que aumentaram ligeiramente em relação ao estudo anterior. No entanto, todas as conclusões que foram retiradas da análise anterior mantêm-se no caso dos vazios esféricos.

Analisando a evolução da triaxialidade, pode-se concluir que:

- Para a solicitação de corte puro ( $\alpha = 0$ ), a triaxialidade permanece nula. Este resultado é coerente porque, uma vez que neste caso as tensões normais são próximas de zero, a pressão hidrostática é praticamente nula;
- O aumento do parâmetro  $\alpha$  (aumento da magnitude da componente de tração triaxial aplicada), conduz a valores de triaxialidade cada vez mais elevados. Por este motivo o caso  $\alpha = 1$  não é indicado, uma vez que os resultados se encontram totalmente fora da gama de valores dos restantes casos. Do ponto de vista teórico esta particularidade faz todo o sentido, uma vez que no estado de tensão puramente hidrostático ( $\sigma_{eq} = 0$ ) a triaxialidade é infinita;
- À exceção dos casos limite de corte puro ( $\alpha = 0$ ) e de tração triaxial ( $\alpha = 1$ ), a curva triaxialidade apresenta um patamar em que é constante, seguindo-se uma fase de declive positivo e posterior inflexão. O patamar de valor constante corresponde ao domínio elástico, onde as tensões de corte e normais, embora com diferente magnitude, evoluem de forma semelhante. A região de declive positivo tem início no ponto de inflexão das tensões de corte, sendo que a não linearidade observada nesse período reflete a forma como as tensões de corte se vão atenuando. A região de inflexão está diretamente relacionada com a inflexão das tensões normais.

Relativamente ao parâmetro de *Lode*, verifica-se que em todos os casos é nulo na região correspondente ao regime elástico, evoluindo depois para valores compreendidos entre 0 e 1. Esta evolução é mais acentuada com a condição de tração uniforme na fronteira. Verifica-se também que existe uma região de inflexão, cada vez mais acentuada conforme a componente de tração da deformação imposta prevalece em relação à de corte. Observando com maior atenção, verifica-se que esta inflexão está relacionada com a estabilização, após o período de inflexão, da tensão equivalente (ver gráfico superior da Figura G.8). O caso  $\alpha = 1$  não é indicado porque, como as tensões de corte são praticamente nulas e as tensões normais iguais entre si, não faz sentido analisar um parâmetro que está, por definição, intimamente relacionado com as tensões desviadoras.

### G.3 Conclusões

Com os resultados obtidos foi possível identificar alguns comportamentos típicos das várias componentes do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff*, em relação ao tipo de solicitação imposta ao RVE. Como os resultados obtidos com o vazão cilíndrico e esférico são muito próximos entre si, as conclusões aqui indicadas são válidas para ambos os casos.

Uma das principais conclusões a que foi possível chegar é que, dada a evolução do primeiro tensor de *Piola-Kirchhoff* nas várias simulações, as tensões de corte encontram-se diretamente relacionadas com a componente de corte da deformação imposta e as tensões normais com a componente de tração. No caso  $\alpha = 0$  as tensões de corte são as únicas componentes e estabilizam após o RVE entrar em regime de plasticidade. Para  $\alpha = 1$  as tensões de corte são nulas e as tensões normais atingem a magnitude máxima. Um aspeto relevante observado foi que, à exceção da solicitação de corte puro, existem pontos de inflexão na evolução de todas as componentes. No contexto do estabelecimento do critério de cedência utilizado neste trabalho este facto foi preponderante, sendo utilizado como identificação da cedência plástica do material à macro-escala.

## Referências

---

- Aravas, N. e P.P. Castañeda (2004). «Numerical methods for porous metals with deformation-induced anisotropy». Em: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 193.36, pp. 3767–3805.
- Babout, L. et al. (2001). «Characterization by X-ray computed tomography of decohesion, porosity growth and coalescence in model metal matrix composites». Em: *Acta Materialia* 49.11, pp. 2055–2063.
- Bai, Y. e T. Wierzbicki (2010). «Application of extended Mohr–Coulomb criterion to ductile fracture». Em: *International Journal of Fracture* 161.1, pp. 1–20.
- Barsoum, I. e J. Faleskog (2007). «Rupture mechanisms in combined tension and shear—experiments». Em: *International Journal of Solids and Structures* 44.6, pp. 1768–1786.
- Benzerga, A.A. (2000). «Rupture ductile des tôles anisotropes. Simulation de la propagation longitudinale dans un tube pressurisé». Tese de doutoramento. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Benzerga, A.A. e J.B. Leblond (2010). «Ductile fracture by void growth to coalescence». Em: *Advances in Applied Mechanics* 44, pp. 169–305.
- Castañeda, P.P. (1991). «The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 39.1, pp. 45–71.
- (2002). «Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations: I—theory». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50.4, pp. 737–757.
- Castañeda, P.P. e J.R. Willis (1995). «The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 43.12, pp. 1919–1951.
- Castañeda, P.P. e M. Zaidman (1994). «Constitutive models for porous materials with evolving microstructure». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 42.9, pp. 1459–1497.

- Chen, Z. e C. Butcher (2013). *Micromechanics Modelling of Ductile Fracture*. Solid Mechanics and Its Applications. Springer Netherlands.
- Chu, C.C. e A Needleman (1980). «Void nucleation effects in biaxially stretched sheets». Em: *Journal of Engineering Materials and Technology(Transactions of the ASME)* 102.3, pp. 249–256.
- Danas, K. e N. Aravas (2012). «Numerical modeling of elasto-plastic porous materials with void shape effects at finite deformations». Em: *Composites Part B: Engineering* 43.6, pp. 2544–2559.
- Danas, K. e P.P. Castañeda (2009a). «A finite-strain model for anisotropic viscoplastic porous media: II–Applications». Em: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 28.3, pp. 402–416.
- (2009b). «A finite-strain model for anisotropic viscoplastic porous media: I–Theory». Em: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 28.3, pp. 387–401.
- (2012). «Influence of the Lode parameter and the stress triaxiality on the failure of elasto-plastic porous materials». Em: *International Journal of Solids and Structures* 49.11, pp. 1325–1342.
- David, E.C. e R.W. Zimmerman (2011). «Compressibility and shear compliance of spheroidal pores: Exact derivation via the Eshelby tensor, and asymptotic expressions in limiting cases». Em: *International Journal of Solids and Structures* 48.5, pp. 680–686.
- Drach, B., A. Drach e I. Tsukrov (2013). «Characterization and statistical modeling of irregular porosity in carbon/carbon composites based on X-ray microtomography data». Em: *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 93.5, pp. 346–366.
- (2014). «Prediction of the effective elastic moduli of materials with irregularly-shaped pores based on the pore projected areas». Em: *International Journal of Solids and Structures* 51.14, pp. 2687–2695.
- Drach, B., I. Tsukrov et al. (2011). «Numerical modeling of carbon/carbon composites with nanotextured matrix and 3D pores of irregular shapes». Em: *International Journal of Solids and Structures* 48.18, pp. 2447–2457.
- Eshelby, John D. (1957). «The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems». Em: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1226. The Royal Society, pp. 376–396.
- Fritzen, F. et al. (2012). «Computational homogenization of elasto-plastic porous metals». Em: *International Journal of Plasticity* 29, pp. 102–119.

- Giusti, S.M. et al. (2009). «An assessment of the Gurson yield criterion by a computational multi-scale approach». Em: *Engineering Computations* 26.3, pp. 281–301.
- Gologanu, M. et al. (1997). *Recent extensions of Gurson's model for porous ductile metals*. Springer.
- Gurson, A.L. (1977). «Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media». Em: *Journal of engineering materials and technology* 99.1, pp. 2–15.
- Gurtin, M.E. (1982). *An Introduction to Continuum Mechanics*. Mathematics in Science and Engineering. Elsevier Science.
- Hashin, Z. (1983). «Analysis of composite materials—a survey». Em: *Journal of Applied Mechanics* 50.3, pp. 481–505.
- Hashin, Z. e S. Shtrikman (1963). «A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11.2, pp. 127–140.
- Hill, R. (1963). «Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11.5, pp. 357–372.
- Holzappel, G.A. (2000). *Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering*. Wiley.
- Horstemeyer, M.F., S. Ramaswamy e M. Negrete (2003). «Using a micromechanical finite element parametric study to motivate a phenomenological macroscale model for void/crack nucleation in aluminum with a hard second phase». Em: *Mechanics of Materials* 35.7, pp. 675–687.
- Hutchinson, J.W. e V. Tvergaard (2012). «Comment on “Influence of the Lode parameter and the stress triaxiality on the failure of elasto-plastic porous materials” by K. Danas and P. Ponte Castañeda». Em: *International Journal of Solids and Structures* 49.23, pp. 3484–3485.
- Kachanov, M., B. Shafiro e I. Tsukrov (2003). *Handbook of elasticity solutions*. Springer Science & Business Media.
- Kachanov, M., I. Tsukrov e B. Shafiro (1994). «Effective moduli of solids with cavities of various shapes». Em: *Applied Mechanics Reviews* 47.1S, S151–S174.
- Kailasam, M., N. Aravas e P.P. Castañeda (2000). «Porous metals with developing anisotropy: constitutive models, computational issues and applications to deformation processing». Em: *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences* 1.2, pp. 105–118.

- Kailasam, M. e P.P. Castañeda (1997). «The evolution of anisotropy in porous materials and its implications for shear localization». Em: *IUTAM Symposium on Mechanics of Granular and Porous Materials*. Springer, pp. 365–376.
- Kailasam, M., P.P. Castañeda e J.R. Willis (1997). «The effect of particle size, shape, distribution and their evolution on the constitutive response of nonlinearly viscous composites: I—Theory». Em: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 355.1730, pp. 1835–1852.
- Kanetake, N., M. Nomura e T. Choh (1995). «Continuous observation of microstructural degradation during tensile loading of particle reinforced aluminium matrix composites». Em: *Materials Science and Technology* 11.12, pp. 1246–1252.
- Keralavarma, S.M. e A.A. Benzerga (2010). «A constitutive model for plastically anisotropic solids with non-spherical voids». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 58.6, pp. 874–901.
- Khdir, Y.K. et al. (2015). «A computational homogenization of random porous media: Effect of void shape and void content on the overall yield surface». Em: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 49, pp. 137–145.
- Kouznetsova, V.G., M.G.D. Geers e W.A.M. Brekelmans (2004). «Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy». Em: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193.48, pp. 5525–5550.
- Leblond, J.B. e M. Gologanu (2008). «External estimate of the yield surface of an arbitrary ellipsoid containing a confocal void». Em: *Comptes Rendus Mecanique* 336.11, pp. 813–819.
- Leblond, J.B., G. Perrin e P. Suquet (1994). «Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids». Em: *International Journal of Plasticity* 10.3, pp. 213–235.
- Madou, K. e J.B. Leblond (2012a). «A Gurson-type criterion for porous ductile solids containing arbitrary ellipsoidal voids—I: Limit-analysis of some representative cell». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60.5, pp. 1020–1036.
- (2012b). «A Gurson-type criterion for porous ductile solids containing arbitrary ellipsoidal voids—II: Determination of yield criterion parameters». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60.5, pp. 1037–1058.
- (2013). «Numerical studies of porous ductile materials containing arbitrary ellipsoidal voids—I: Yield surfaces of representative cells». Em: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 42, pp. 480–489.

- Madou, K., J.B. Leblond e L. Morin (2013). «Numerical studies of porous ductile materials containing arbitrary ellipsoidal voids–II: Evolution of the length and orientation of the void axes». Em: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 42, pp. 490–507.
- Michel, J.C. e P. Suquet (1992). «The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 40.4, pp. 783–812.
- Miehe, C. (2003). «Computational micro-to-macro transitions for discretized microstructures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy». Em: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192.5, pp. 559–591.
- Miehe, C. e A. Koch (2002). «Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains». Em: *Archive of Applied Mechanics* 72.4-5, pp. 300–317.
- Molina, A.J.C. (2007). «Computational homogenization for multi scale finite element simulation». Tese de doutoramento. Swansea University.
- Monchiet, V., E. Charkaluk e D. Kondo (2014). «Macroscopic yield criteria for ductile materials containing spheroidal voids: An Eshelby-like velocity fields approach». Em: *Mechanics of Materials* 72, pp. 1–18.
- Mura, Toshio (1987). *Micromechanics of defects in solids*. Vol. 3. Springer Science & Business Media.
- Nemat-Nasser, S. e M. Hori (2013). *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. Elsevier.
- Reis, F.J.P. (2014). «Multi-Scale Modelling and Analysis of Heterogeneous Solids at Finite Strains». Tese de doutoramento. Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.
- Saby, M. et al. (2013). «Three-dimensional analysis of real void closure at the meso-scale during hot metal forming processes». Em: *Computational Materials Science* 77, pp. 194–201.
- Sevostianov, I. e M. Kachanov (2008). «On approximate symmetries of the elastic properties and elliptic orthotropy». Em: *International Journal of Engineering Science* 46.3, pp. 211–223.
- Shabana, A.A. (2011). *Computational Continuum Mechanics*. Cambridge University Press.
- Souza Neto, E.A. e R.A. Feijóo (2006). «Variational foundations of multi-scale constitutive models of solid: small and large strain kinematical formulation». Em: *LNCC Research & Development Report* 16.

- Souza Neto, E.A. e R.A. Feijóo (2008). «On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models». Em: *Mechanics of materials* 40.10, pp. 803–811.
- Souza Neto, E.A., D. Peric e D.R.J. Owen (2011). *Computational Methods for Plasticity: Theory and Applications*. Wiley.
- Speirs, D. (2007). «Characterisation of materials with hyperelastic microstructures through computational homogenisation and optimisation methods». Tese de doutoramento. Swansea University.
- Torquato, S. (2002). *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties*. Vol. 16. Springer Science & Business Media.
- Tsukrov, I. e J. Novak (2002). «Effective elastic properties of solids with defects of irregular shapes». Em: *International journal of solids and structures* 39.6, pp. 1539–1555.
- Tvergaard, V. (1981). «Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions». Em: *International Journal of Fracture* 17.4, pp. 389–407.
- Tvergaard, V. e A. Needleman (1984). «Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar». Em: *Acta metallurgica* 32.1, pp. 157–169.
- Weck, A. e D.S. Wilkinson (2008). «Experimental investigation of void coalescence in metallic sheets containing laser drilled holes». Em: *Acta Materialia* 56.8, pp. 1774–1784.
- Willis, J.R. (1991). «On methods for bounding the overall properties of nonlinear composites». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 39.1, pp. 73–86.
- Wong, W.H. e T.F. Guo (2015). «On the energetics of tensile and shear void coalescences». Em: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*.
- Zienkiewicz, O.C. e R.L. Taylor (2013). *The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics*. Elsevier Science.
- Zienkiewicz, O.C., R.L. Taylor e J.Z. Zhu (2013). *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Science.