

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

FELIPE RECKA DE ALMEIDA

FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA DA PERDA DE RIGIDEZ EM
INTERFACES UTILIZANDO POTENCIAIS TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS

CURITIBA
2009

FELIPE RECKA DE ALMEIDA

FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA DA PERDA DE RIGIDEZ EM
INTERFACES UTILIZANDO POTENCIAIS TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS

Dissertação apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Métodos
Numéricos em Engenharia, Setor de
Tecnologia, Universidade Federal do Paraná
como requisito parcial à obtenção do título de
Mestre em Ciências.

Professor orientador: Mildred Ballin
Hecke

CURITIBA
2009

ΕΠΙΓΡΑΦΕ

Corpus omne perseverare in status quo quiescendi
vel movendi uniformiter in directum, nisi quatenus
a viribus impressis cogitur statum illum mutare.

Sir Isaac Newton

AGRADECIMENTOS

Obrigado a todos, sem exceção.

RESUMO

Lesões cariosas extensas, amplas restaurações e fraturas dentais podem levar à necessidade de tratamento endodôntico. Dentes tratados endodonticamente tornam-se mais frágeis devido à perda de estrutura após a remoção da lesão cariosa ou da regularização da fratura e da instrumentação do canal radicular. Além disso, suas estruturas se apresentam desidratadas devido à falta de irrigação sanguínea, que antes era promovida pelo órgão pulpar. A desintegração dessas estruturas dentais pode tornar os dentes mais suscetíveis à fratura. Por esses motivos, foram desenvolvidos retentores intra-radulares com o intuito de reter o material restaurador. A função dos cimentos é selar a interface entre o pino e a dentina radicular, além de auxiliar em sua retenção. Neste trabalho é apresentado um modelo numérico-computacional capaz de simular o processo de perda de rigidez das interfaces pino-cimento-dentina por meio da Mecânica do Dano e da definição de dois potenciais termodinâmicos com o auxílio de técnicas da análise convexa. O procedimento de solução do equilíbrio global se dá através do método Quase-Newton, a discretização espacial é obtida aplicando o Método dos Elementos Finitos e a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial. A abordagem escolhida permite conhecer o comportamento constitutivo através de dois potenciais: um potencial de energia e um potencial de dissipação. Tal abordagem apresenta vantagens sobre a tradicional, entre as quais se destaca a obtenção de resultados que seguramente não violam as Leis da Termodinâmica. As equações de fluxo são derivadas a partir de potenciais termodinâmicos, onde o conceito de “materiais standard generalizados” é aplicado. Ao final são apresentados e discutidos alguns exemplos didáticos e, na seqüência, são discutidos também resultados obtidos a partir de simulações realizadas com o programa desenvolvido.

Palavras-chave: Mecânica do dano. Potenciais termodinâmicos. Método dos Elementos Finitos. Interface. Biomecânica.

ABSTRACT

Extensive carious lesions, large dental restorations and fractures can lead to the need for endodontic treatment. Endodontically treated teeth become more fragile due to loss of structure after removal of the carious lesion or the regularization of the fracture and the instrumentation of the root canal. Moreover, their structures have been dehydrated due to lack of blood, which was once promoted by the pulp. The disintegration of dental structures can make the teeth more susceptible to fracture. For these reasons, root posts were developed in order to retain the restorative material. The role of the cement is to seal the interface between the post and root dentin, and help in their retention. The purpose of this work is to present non-linear mathematical programming algorithm capable of simulating the loss of stiffness process in post-cement-dentin interfaces through the Continuum Damage Mechanics and the definition of two thermodynamic potentials with help of convex analysis. The procedure for solving the global balance occurs through the quasi-Newton method, the spatial discretization is performed by means of the Finite Element Method and temporal discretization was introduced independently of the spatial discretization. In the chosen approach, the constitutive behavior is determined from two thermodynamic potentials: a potential energy and a potential of dissipation. One of the advantages of the present approach is that the results obtained satisfy the fundamental laws of thermodynamics. The flow equations are derived from thermodynamic potential, where the concept of generalized standard materials is applied. At the end are presented and discussed a few didactical examples, and in sequence, are also discussed results from simulations performed with the program developed.

Key words: Continuum Damage Mechanics. Thermodynamic Potentials. Finite Element Method. Interface. Biomechanics.

LISTA DE SÍMBOLOS

P_{ext}	- potência mecânica ou externa
B	- volume
∂B	- superfície de um volume
\vec{a}	- força distribuída por unidade de superfície
\vec{b}	- força distribuída por unidade de massa
\vec{v}	- velocidade do ponto material
x	- abscissa de um ponto no espaço
ρ	- densidade de massa
Q_e	- taxa de calor
r	- calor gerado por unidade de massa
\vec{q}	- fluxo de calor
\vec{n}	- versor unitário
\dot{U}	- taxa de energia interna
e	- energia interna por unidade de massa
\dot{E}_c	- taxa de energia cinética
\dot{E}_T	- taxa de energia total de um sistema
σ	- tensor de tensões
D	- tensor taxa de deformações
$\dot{\epsilon}$	- tensor taxa de deformações para pequenas deformações
S	- entropia
s	- entropia por unidade de massa
θ	- temperatura absoluta
ψ	- energia livre
α_k	- variável de estado interna
A^k	- força termodinâmica
P	- região admissível
Ω	- interior da região admissível
$\partial\Omega$	- fronteira da região admissível
f	- função de escoamento
$\dot{\alpha}_k$	- taxa de variação da variável de estado interna
λ	- multiplicador de Lagrange
M	- ponto de um corpo
\vec{n}	- vetor
δS	- área de um plano que corta o volume representativo
δS_{D_x}	- área de interseção de todas as microfissuras e microcavidades em δS
α_d	- variável de estado interna relativa ao dano
δS_D	- área de interseção mais danificada em δS
$\bar{\sigma}$	- tensor de tensões efetivas
E	- módulo de elasticidade longitudinal

\bar{E}	- módulo de elasticidade efetivo
$\bar{\varepsilon}$	- tensor de deformações efetivas
A^d	- força termodinâmica relativa ao dano
ψ_C	- potencial termodinâmico complementar
$\bar{\psi}$	- energia livre relativa
Ind_P	- indicatriz do conjunto P
χ	- função de dissipação
$\dot{\sigma}$	- taxa de tensões
\dot{A}^d	- taxa da força termodinâmica relativa ao dano
$j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$	- potencial termodinâmico das taxas temporais de tensões e das taxas temporais da força termodinâmica relativa ao dano
$\dot{\varepsilon}$	- taxa de deformações
$\dot{\alpha}_d$	- taxa da variável interna relativa ao dano
$j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d)$	- potencial termodinâmico das taxas temporais de deformações e das taxas temporais da variável interna relativa ao dano
$\Delta\sigma$	- incremento de tensões
ΔA^d	- incremento de força termodinâmica relativa ao dano
$\Delta\varepsilon$	- incremento de deformações
$\Delta\alpha_d$	- incremento da variável interna relativa ao dano
$\bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d)$	- potencial termodinâmico dos incrementos de deformações e dos incrementos da variável interna relativa ao dano
A_0^d	- força termodinâmica a partir da qual se inicia o processo de danificação
ε_{d0}	- deformação a partir da qual o processo de danificação é iniciado
Z	- parâmetro responsável pelo endurecimento/amolecimento no modelo de dano
$C1$	- constante responsável pela magnitude da região das forças termodinâmicas admissíveis
$C2$	- constante responsável pela superfície da região das forças termodinâmicas admissíveis
Ω_e	- elemento da malha de elementos finitos
B^i	- operador do Método dos Elementos Finitos
$(B^i)^T$	- matriz transposta do operador do Método dos Elementos Finitos
N^i	- matriz de funções de forma
$(N^i)^T$	- matriz transposta da matriz de funções de forma
$\Delta\hat{U}^i$	- vetor com os componentes x e y dos deslocamentos nodais
Ψ	- função de forma do Método dos Elementos Finitos
L	- operador
F_{int}	- esforços internos
ΔF_{int}	- incremento de esforços internos
F_{int}^i	- esforços internos de um elemento da malha de elementos finitos
F_{ext}	- esforços externos
ΔF_{ext}	- incremento de esforços externo
F_{ext}^i	- esforços externos de um elemento da malha de elementos finitos

$R(\Delta U)$	- resíduo da equação de equilíbrio
$IQ4$	- elemento isoparamétrico de quatro nós
h	- altura do elemento
b	- comprimento do elemento
K_{IQ4}	- matriz de rigidez do elemento isoparamétrico de quatro nós
K_i	- coeficiente da matriz de rigidez
C	- matriz constitutiva do estado plano de deformações
C_{ijkl}	- componente da matriz constitutiva
C_{1111}	- componente normal da matriz constitutiva
C_{1212}	- componente cisalhante da matriz constitutiva
C_{1112}	- componente do efeito acoplado (normal e cisalhante) da matriz constitutiva
C_e^I	- matriz constitutiva do elemento de interface
ϱ_i	- pesos atribuídos a componente normal dos materiais que compõe a região de interface
φ	- parâmetro a ser atendido para a utilização do elemento de interface
E_N	- módulo de elasticidade longitudinal da interface
G_N	- módulo de elasticidade transversal da interface
B	- operador linear de deformações
d_k	- direção ao longo da qual se busca diminuir o valor de uma função do método de otimização na iteração k
p_k	- passo do método de otimização na iteração k
G_k	- matriz simétrica não singular do método de otimização na iteração k
H_k	- Aproximação do Hessiano na iteração k
y_k	- diferença entre os valores dos resíduos na iteração $k+1$ e na iteração k no método Quase-Newton
s_k	- diferença entre os valores dos deslocamentos na iteração $k+1$ e na iteração k no método Quase-Newton
ϖ	- termo empregado na atualização do Hessiano pelo método BFGS

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. OBJETIVOS	3
1.1.1. Objetivo geral	3
1.1.2. Objetivos específicos.....	4
1.2. ESTRUTURA DO TRABALHO.....	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	13
3.1. MODELOS TERMODINAMICAMENTE ADMISSÍVEIS.....	13
3.1.1. Considerações e definições gerais.....	13
3.1.2. Primeira Lei da Termodinâmica.....	14
3.1.3. Segunda Lei da Termodinâmica.....	17
3.1.4. A desigualdade de Clausius-Duhem.....	18
3.1.5. Potencial termodinâmico	19
3.1.6. Região admissível	21
3.1.7. Potencial de dissipação	22
3.2. MECÂNICA DO DANO.....	24
3.2.1. Variável interna de dano.....	25
3.2.2. Deformação equivalente.....	26
3.2.3. Tensão equivalente	28
3.3. MODELO CONSTITUTIVO	29
3.3.1. Potencial termodinâmico e Leis de estado	29
3.3.2. Potencial de dissipação	31
3.3.3. Equação constitutiva de dano em taxas	32
3.3.4. Equação constitutiva de dano em incrementos finitos.....	35
3.3.5. Relação entre função dissipação e função escoamento.....	37
4. UM MODELO DE DANO SEGUNDO ENFOQUE TERMODINÂMICO	40
5. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E ALGORITMOS	44
5.1. PROGRAMA DESENVOLVIDO	44
5.2. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	46
5.2.1 Elemento de interface.....	48
5.3. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EQUILÍBRIO.....	52
5.4. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO CONSTITUTIVA	58
5.3.1 Aplicação do algoritmo de Newton Raphson para o modelo de dano	60
6. EXEMPLOS	62
6.1. EXEMPLO 1	62
6.2. EXEMPLO 2.....	65
6.3. EXEMPLO 3.....	72
6.4. EXEMPLO 4.....	76
7. CONCLUSÕES	93
REFERÊNCIAS	95

1. INTRODUÇÃO

O tratamento endodôntico é uma técnica preconizada quando existem lesões cariosas extensas, amplas restaurações ou fraturas dentais. Segundo Assif & Gorfil (1994), a perda de estrutura após remover a lesão cariosa ou regularizar a fratura e fazer a instrumentação do canal radicular torna a estrutura dentinária mais frágil. Com a remoção do órgão pulpar a irrigação dessa estrutura dental é interrompida, tornando-a desidratada. Essa desidratação pode tornar os dentes mais propensos a fraturas. Na figura 01 é mostrada a preparação do canal radicular, etapa do tratamento endodôntico.



FIGURA 01 – TRATAMENTO ENDODÔNTICO
FONTE: Franco (2008)

A fim de contornar tais problemas foram desenvolvidos pinos intraradiculares com a função de devolver certa rigidez à estrutura, propiciando uma distribuição mais adequada das tensões pelas quais essa estrutura venha a ser solicitada. Esses pinos são fixados à dentina por meio de cimentos resinosos odontológicos, que selam a interface entre pino e a dentina radicular.

Como todo processo adesivo, o sucesso da fixação desses pinos está sujeito à qualidade da união pino-cimento-dentina, proporcionada pelos agentes adesivos intermediários. Na literatura é vasta a preocupação com a concentração de tensões e conseqüente falha da união entre cimento-dentina e cimento-pino. Podem ser destacados os trabalhos de Ferrari et al. (2000), Lanza et al. (2005), Tay et al. (2005) e Franco (2008).

A realização de estudos sobre o comportamento dos cimentos resinosos e das interfaces adesivas entre pino-cimento-dentina é fundamental para se obter uma adesão segura e para o desenvolvimento de futuros materiais. Sendo assim, o presente estudo desenvolve, tendo por base a Mecânica do Dano para Meios Contínuos, uma formulação para descrever o processo de perda de rigidez e sua conseqüente aplicação em interfaces. Na figura 02 a interface entre o cimento resinoso e a dentina pode ser identificada.

Situações de interação entre diferentes materiais são comumente encontradas na engenharia. O comportamento da região de fronteira entre esses materiais tem sido representado em modelos de elementos finitos por meio de elementos de interface. Sendo assim, com o objetivo de permitir a análise da distribuição de tensões e deformações, simulando diferentes condições e seqüências de carregamento, todo o comportamento constitutivo dos materiais envolvidos foi descrito através do Método dos Elementos Finitos.

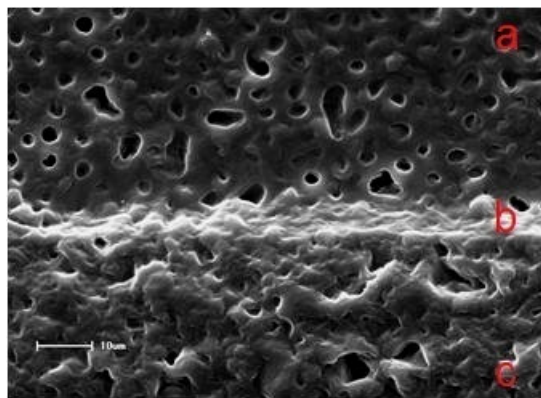


FIGURA 02 – FOTO DE MICROSCOPIA ELETRÔNICA ONDE PODEM SER OBSERVADOS: (a) CIMENTO RESINOSO, (b) INTERFADE E A (c) DENTINA

FONTE: Franco (2008)

A teoria do dano descreve localmente a evolução dos fenômenos que se desenvolvem entre um estado inicial, relativo a uma situação de material íntegro, e um estado final, representado pela perda total da resistência. No caso dos cimentos resinosos, um material em que a fissuração é o fenômeno dominante no comportamento não-linear, a Mecânica do Dano é capaz de formular modelos realistas.

O dano não é uma grandeza física mensurável diretamente, mas no âmbito de uma modelagem matemática é possível quantificá-lo através de uma redução

progressiva de uma propriedade mecânica global como, por exemplo, a rigidez do material. O modelo de dano implementado neste trabalho foi o modelo desenvolvido por Tao & Phillips (2005), onde somente o efeito isotrópico do dano é considerado. Esse modelo apresenta bons resultados mesmo sendo bastante simples e tem como virtude sua fácil implementação.

A termodinâmica desempenha um importante papel na formulação e desenvolvimento de modelos constitutivos. Para evitar resultados termodinamicamente inconsistentes, a primeira e a segunda leis da termodinâmica formam a base da abordagem presente neste trabalho, que tem como principal guia o trabalho desenvolvido por Houlsby & Puzrin (2000).

Muitos trabalhos sobre a aplicação dos conceitos termodinâmicos na mecânica do dano já foram desenvolvidos, sendo que a maioria desses se concentrou no estudo de estruturas de concreto. No presente trabalho, propõe-se o estudo de um modelo constitutivo aplicado às interfaces entre um cimento resinoso, um pino polimérico e a dentina. O desenvolvimento de modelos capazes de fornecer previsões mais realistas do comportamento da interface passa a ser importante para ampliar os conhecimentos de cirurgiões-dentistas, proporcionando a melhora das técnicas e dos materiais envolvidos no tratamento endodôntico, além de diminuir a necessidade de ensaios *in vivo* e *in vitro*.

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. Objetivo geral

Desenvolver um modelo numérico-computacional que permita simular o processo de danificação e conseqüente perda de rigidez das interfaces entre o cimento resinoso, o pino intra-radicular e a dentina a partir da definição de dois potenciais termodinâmicos com o auxílio de técnicas da análise convexa.

1.1.2. Objetivos específicos

- a) Aplicar a teoria termodinâmica com variáveis internas e técnicas da análise convexa à modelagem do comportamento mecânico de um cimento resinoso;
- b) Apresentar a formulação de um modelo constitutivo de dano segundo enfoque termodinâmico;
- c) Implementar algoritmos adequados à resolução do problema constitutivo;
- d) Aplicar o Método dos Elementos Finitos à discretização espacial do problema de perda de rigidez;
- e) Implementar um elemento adequado à simulação da região de interface;
- f) Realizar algumas simulações com o programa desenvolvido e comparar com resultados obtidos em ensaios experimentais.

1.2. ESTRUTURA DO TRABALHO

A seguir está descrito, de forma sucinta, o conteúdo de cada capítulo deste trabalho.

No primeiro capítulo foi feita uma introdução a respeito da técnica de tratar os dentes endodonticamente, o valor da união do cimento resinoso à dentina e ao pino intra-radicular no sucesso do tratamento e a importância de modelos mais realistas para prever o comportamento das interfaces entre esses materiais.

No segundo capítulo é apresentada uma breve revisão bibliográfica do desenvolvimento da Mecânica do Dano para Meios Contínuos, enfatizando-se aspectos relativos aos trabalhos realizados na área de modelagem constitutiva de materiais frágeis, além da descrição de alguns elementos de interface encontrados na literatura.

No terceiro capítulo conceitos da teoria da termodinâmica com variáveis internas são apresentados. A Mecânica do Dano para Meios Contínuos é revista seguindo a abordagem termodinâmica, a seguir, uma abordagem utilizando conceitos da análise convexa é introduzida e por fim o modelo constitutivo é apresentado.

No quarto capítulo o modelo de dano com o critério de danificação de Tao & Phillips (2005) é descrito segundo enfoque termodinâmico.

No quinto capítulo é descrito a forma na qual o programa desenvolvido foi estruturado, bem como se apresentam o elemento de interface e os algoritmos empregados para a resolução do problema de equilíbrio e constitutivo.

O sexto capítulo apresenta dois exemplos didáticos do problema constitutivo e resultados numéricos obtidos através do programa desenvolvido. Esses resultados são então comparados a resultados obtidos em ensaios experimentais.

No último capítulo, são apresentadas as conclusões deste trabalho.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A modelagem constitutiva de materiais frágeis tem sido objeto de estudo já há algumas décadas. O comportamento físico não-linear de sólidos, observado macroscopicamente, é uma manifestação de mudanças irreversíveis que ocorrem em sua microestrutura. Algumas dessas mudanças têm origem em microdefeitos constituídos por inclusões ou mesmo vazios, os quais, pelas suas características, favorecem a concentração de microtensões. Esses microdefeitos constituem o que se entende por dano inicial do material.

Dependendo das condições ambientais e devido à existência de solicitações mecânicas, mesmo que a resposta global do material se mantenha dentro dos limites do regime elástico, o dano inicial pode evoluir em consequência do rompimento das ligações entre átomos ou por rupturas na interface entre componentes distintos. Macroscopicamente, esse processo de evolução do dano inicial, ou danificação, acaba por influenciar diretamente as propriedades elásticas, conforme evidenciam as reduções de resistência e de rigidez. Já em um estágio mais avançado de solicitação, a danificação leva à formação e ao crescimento de microfissuras. Como essa fissuração ocorre de forma distribuída, a Mecânica do Dano é capaz de formular modelos muito realistas para os cimentos.

Com o intuito de estudar a ruptura, precocemente observada em relação ao esperado em metais em regime de deformação lenta, como uma consequência da existência de defeitos no material, Kachanov introduziu, em 1958, as primeiras idéias sobre danificação de meios contínuos. A partir de então, vários outros estudos sobre a Mecânica do Dano têm sido realizados tornando-a uma das mais populares teorias utilizadas para a simulação desse processo.

A terminologia Mecânica do Dano para Meios Contínuos ("*continuum damage mechanics*", CDM) foi usada por Janson & Hult (1977) para designar modelos da mecânica do contínuo que tratam das respostas constitutivas, considerando os efeitos de degradação em modo difuso e progressivo, por meio de redução das propriedades mecânicas, como resistência e rigidez do material.

É importante notar a diferença em relação à Mecânica da Fratura. Enquanto a Mecânica da Fratura lida com as condições de propagação de uma fissura macroscópica imersa em um meio contínuo íntegro, a Mecânica do Dano se ocupa

do efeito de um processo de microfissuração distribuída que se desenvolve em uma etapa preliminar a formação da fissura discreta.

Desde então inúmeras abordagens bem sucedidas utilizando o dano para modelar materiais diversos, como polímeros ou mesmo materiais frágeis, estão presentes na literatura como Krajcinovic (1983) e Ortiz (1985). Enquanto algumas delas têm como base apenas o comportamento fenomenológico, outras abordagens, baseadas na formulação da CDM, levam em conta princípios termodinâmicos.

Em 1985, Lemaitre desenvolveu bases teóricas de acordo com a formulação termodinâmica dos processos irreversíveis, propondo o uso de variáveis internas escalares, implicando na hipótese de deterioração isotrópica da rigidez. No entanto, a particularidade dessa nova abordagem está no conjunto de hipóteses fundamentais admitidas. São elas: os processos irreversíveis podem ser aproximados por uma seqüência de estados de equilíbrio aos quais correspondem valores instantâneos de um número finito de variáveis internas; as variáveis internas a serem escolhidas devem representar os processos dissipativos dominantes e a resposta do meio depende exclusivamente de seu estado atual.

Novos modelos então foram desenvolvidos. Entre os modelos puramente de dano podem ser destacados Kattan & Voyiadjis (1990), Maugin (1992) e Lemaitre (1992). Existem ainda outros modelos de dano com propriedades específicas, entre esse trabalhos destacam-se Murakami (1981) e Kachanov (1984) modelando a deterioração lenta do material; Mazars (1984) estudando o dano em estruturas de concreto armado; Lemaitre & Chaboche (1985) e Marigo (1985) na simulação da interação dano-fadiga; e Simo & Ju (1987) e Tai (1990) tratando sobre dano em materiais dúcteis.

Esses modelos de dano podem ser classificados como isotrópicos ou anisotrópicos, segundo a natureza da variável de dano utilizada. Os modelos isotrópicos, onde são empregadas variáveis escalares, são conceitualmente simples e têm a vantagem de necessitarem de um número reduzido de parâmetros a se identificar. Por outro lado, eles podem ter sua aplicação restrita a algumas situações. Alguns modelos, como o apresentado em Mazars & Pizaudier-Cabot (1989), chegam a empregar dois escalares para quantificar o dano, um para a tração outro para a compressão. Os modelos anisotrópicos, onde a variável de dano é uma grandeza tensorial apresentam uma gama de aplicação maior, porém com maior complexidade na identificação dos parâmetros do modelo.

Já na década de 90 uma série de trabalhos envolvendo a aplicação da termodinâmica para a modelagem constitutiva de materiais frágeis, como solos e o concreto, foram então desenvolvidos, pode-se destacar Maugin (1992), Hansen & Schreyer (1994) e Collins & Houlsby (1997). A maioria desses trabalhos une efeitos da perda de rigidez às deformações plásticas e ao dano. Esses modelos dividem-se em dois grandes grupos.

O primeiro grupo é composto pelos modelos chamados “desacoplados”, onde o dano e a plasticidade são processos independentes, embora possam, sob algumas condições, acontecer simultaneamente. O segundo grupo é formado pelos modelos ditos acoplados, onde o dano e a plasticidade sempre ocorrem simultaneamente.

No presente trabalho, a CDM foi expressa através da abordagem utilizada nos materiais standard generalizados e usando as idéias apresentadas por Houlsby & Puzrin (2000) quando trataram de modelos elastoplásticos. A principal característica desse tipo de abordagem é o fato do comportamento constitutivo de um material ser conhecido a partir da definição de somente dois potenciais termodinâmicos: uma função de energia (energia livre de Helmholtz, energia livre de Gibbs, entalpia ou energia interna) e uma função de dissipação.

A introdução de um potencial termodinâmico, como a energia livre de Helmholtz, conduz às leis de estado a partir das quais é possível relacionar variáveis de estado com suas variáveis associadas. A deformação total e um conjunto de variáveis internas associadas à perda de rigidez são adotados como as variáveis de estado. As variáveis associadas são as tensões e as forças termodinâmicas generalizadas. Toda formulação baseia-se no uso de variáveis internas para representar o programa de cargas sofrido pelo material.

O potencial de dissipação introduzido fornece as leis de fluxo permitindo avaliar a evolução das variáveis internas. A definição de uma região de forças termodinâmicas admissíveis completa o modelo.

A lei da Normalidade estabelece que os incrementos da variável interna são perpendiculares a uma superfície no espaço das forças termodinâmicas definida a partir de uma função potencial. Muitos modelos assumem que a função potencial possui a mesma forma da função de danificação, isto é, fluxo associado. No entanto essa consideração não é necessária e existem evidências de que a função de

escoamento/danificação e a função potencial não são idênticas em materiais frágeis, ou seja, pode ocorrer fluxo não associado.

Motivados pelo problema de simular o fenômeno de “pull out” nas armaduras de peças de concreto armado, onde problemas de convergência são bastante comuns, Tao & Phillips (2005) desenvolveram um modelo de dano isotrópico bi-axial bastante simples, porém com ótimos resultados. Desse modelo foi retirada a região de forças termodinâmicas admissíveis e definida assim a superfície de dano.

No ano de 2007, Einav, Houlsby e Nguyen demonstraram que essa abordagem termodinâmica é capaz de descrever o comportamento constitutivo de materiais sujeitos a perda de rigidez sem considerar a plasticidade, tornando-se assim a base para esse estudo. A diferença entre o modelo apresentado pelos autores e os demais modelos para a plasticidade recai sobre o papel físico das variáveis internas.

A preocupação com as mudanças do comportamento constitutivo de materiais que interagem entre si formando uma interface é de longa data na literatura. Em modelos de elementos finitos essa região é simulada através dos elementos de interface.

Um dos primeiros trabalhos empregando esse tipo de elemento foi proposto por Ngo & Scordelis (1967). Ele foi utilizado na análise do comportamento de vigas de concreto armado. Nessa análise os autores consideraram uma viga tridimensional composta pelo material concreto e pelo material aço. O padrão das fissuras principais encontradas em ensaios experimentais foi reproduzido pela inserção de elementos de interface. As mudanças estruturais devido à fissuração do concreto foram obtidas através do emprego de um critério de resistência máxima a tração.

Goodman, Taylor e Brekke (1968) propuseram um elemento de interface e o empregaram para a análise de estabilidade de maciços rochosos e escavações. Especificamente, estudaram o comportamento de modelos de túneis em formato trapezoidal e semicircular construídos através da remoção de blocos até constituírem a cavidade. Os elementos de interface foram empregados como meio de ligação entre esses blocos.

Também com o propósito de analisar problemas em escavações e estabilidade de encostas rochosas, Zienkiewicz et. al (1970) propuseram um elemento de interface composto por quatro nós, porém geometricamente esse elemento não possui espessura, sendo que esta é considerada apenas como um

parâmetro na modelagem. Os autores empregaram o comportamento não linear elástico e o modelo plástico representado pelo critério de Mohr-Coulomb para descrever o material utilizado nos elementos de interface. Esse elemento se demonstrou adequado a discretização de modelos com elementos triangulares.

Para a análise das descontinuidades representadas por ligações de rochas, falhas e interfaces, Ghaboussi, Wilson e Isenberg (1973) propuseram um elemento de interface com espessura não nula. Os autores empregaram um modelo elástico, perfeitamente plástico com critério de escoamento de Mohr-Coulomb na análise de fundações de formato circular e no problema de cunha, desenvolvendo assim a formulação para um elemento de interface com simetria axial. Em 1978 Herrmann utilizou a mesma geometria e graus de liberdade propostos por Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973), porém com a possibilidade de admitir o escorregamento e a perda de contato entre os elementos. Isso foi feito através da inclusão de um conjunto de molas discretas que conectam as faces do elemento. A limitação do efeito de escorregamento é introduzida pelo autor através do critério de Mohr-Coulomb. Esse modelo foi utilizado para simular peças de concreto armado e estacas sujeitas a forças de empuxo devido ao assentamento de solo adjacente.

Também inspirados pelas idéias de Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973), Pande & Sharma (1979) desenvolveram um elemento de interface isoparamétrico de oito nós formulado em termos de deslocamentos relativos. A determinação dos deslocamentos é feita de maneira igual à empregada no método dos elementos finitos para os elementos isoparamétricos. Depois de computada a matriz de rigidez global são calculados os deslocamentos. Contudo, esses ainda são deslocamentos globais e relativos, sendo necessária uma transformação para que os deslocamentos absolutos sejam obtidos. Só então é feito o procedimento padrão dos elementos isoparamétricos para computar as deformações e tensões.

Resultados obtidos por Veiga (2000) mostram a equivalência entre o elemento de interface proposto por Pande & Sharma (1979) e o elemento utilizado no presente trabalho proposto por Desai et al. (1984). Porém o elemento proposto por Pande & Sharma (1979) exige um esforço computacional maior, uma vez que necessita da transformação dos deslocamentos relativos em globais.

O elemento de interface proposto por Desai et al. (1984) foi utilizado originalmente na modelagem de solos e sua grande vantagem recae no desembaraço do emprego de sua formulação, posto que tanto a formulação do

contínuo quando do elemento em si são realizadas através de elementos quadriláteros planos. Dessa forma torna-se fácil a implementação desse elemento em um programa computacional.

Mais uma vez o elemento desenvolvido por Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973) foi usado como base para uma nova formulação. As diferenças propostas por Beer (1985) foram: uma formulação isoparamétrica e a espessura nula do elemento de interface. Para modelos bidimensionais foram empregados elementos de linhas entre elementos de casca, enquanto que, para modelos tridimensionais foram utilizados elementos de interface planos entre elementos sólidos. Essa formulação foi vantajosa para modelar juntas e fraturas de rochas.

Em 2003, Coutinho et al. propuseram uma extensão do elemento proposto por Herrmann (1978), uma vez que apenas acrescentou uma mola central ao elemento em questão. O cálculo das tensões e deformações ocorre da mesma forma.

Além dessas, outras contribuições foram feitas por outros autores como Griffiths (1987) que se preocupou com a escolha dos elementos de interface, Frank, Guenot e Humbert (1982) que empregaram elementos de interface para a modelagem de contato ou Day & Potts (1994) que estudaram as dificuldades numéricas em simulações com a presença de elementos de interface.

Com a criação e evolução de diversas linhas de pesquisa ligadas à bioengenharia vários trabalhos vêm estudando as interfaces entre materiais inertes (cimentos, hastes, pinos, etc.) e tecidos vivos (osso, dentina, etc.). A preocupação com essas interfaces reside no fato de várias técnicas odontológicas (endodontia, implantodontia, etc.) dependerem do sucesso da fixação entre os materiais envolvidos.

Na última década vários trabalhos avaliaram a resistência de adesão entre pino, cimento e dentina. Dentre esses, podem ser destacados: Ferrari et al. (2000), avaliando a influência dos túbulos dentinários no interior dos canais radiculares, aumentando da área superficial de adesão e sendo assim responsáveis por uma melhor adesão; Santis et al. (2000), verificando a resistência de adesão entre pino de fibra e cimentos resinosos através do ensaio de pull-out; Bouillaguet et al. (2003), averiguando a resistência de adesão por meio de ensaios de micro-tração, Goracci et al. (2005) testando a adesão de pinos intra-radulares através de três tipos ensaios experimentais de resistência adesiva (micro-tração com espécimes em forma de ampulheta, micro-tração com espécimes em forma de palitos e pull-out);

Lanza et al. (2005) utilizando o Método do Elementos Finitos com o intuito de avaliar a união entre pino-cimento-dentina; Perez et al. (2006) verificando a influência da espessura da camada de cimento resinoso na resistência adesiva em dentes tratados endodonticamente; e Bonfante (2007) examinando a continuidade da interface entre cimento e dentina por meio de microscopia eletrônica de varredura.

Com essa breve revisão bibliográfica procurou-se demonstrar que a abordagem utilizada no presente trabalho está em concordância com os recentes trabalhos na área de Mecânica do Dano, que a escolha do elemento de interface objetivou elementos versáteis, mas que conservassem a simplicidade, e que essas ferramentas são necessárias a um melhor entendimento, e conseqüente desenvolvimento, de técnicas endodônticas.

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1. MODELOS TERMODINAMICAMENTE ADMISSÍVEIS

Este item tem por objetivo apresentar, inicialmente, alguns aspectos da Termodinâmica aplicados aos meios contínuos visando garantir que o modelo constitutivo seja fisicamente admissível. A seguir, tal formalismo termodinâmico foi empregado em conjunto com a Mecânica do Dano. O desenvolvimento apresentado nesse item pode ser encontrado nos textos de Proença & Pituba (2000).

3.1.1. Considerações e definições gerais

Para os propósitos da Mecânica dos Meios Contínuos Sólidos, um sistema termodinâmico fechado é uma quantidade de matéria contínua e invariante. A noção de continuidade permite considerar subsistemas que ocupam volumes muito pequenos. Se for possível definir em tais volumes quantidades médias representativas do fluxo de calor, da temperatura e do gradiente de deformação em qualquer um dos seus pontos, então as leis relacionadas ao balanço de energia podem ser expressas por formas diferenciais e consideradas válidas em um ponto. A quantidade de energia em um sistema termodinâmico referenciada por unidade de massa é chamada *energia interna*.

Quando é possível avaliar todas as informações necessárias para a caracterização do problema, diz-se que o *estado* do sistema é conhecido. Uma grandeza física, mensurável direta ou indiretamente, necessária para determinar a energia interna do sistema, em qualquer instante, é denominada *variável de estado*. As *variáveis de estado observáveis* são aquelas que podem ser medidas. Elas, geralmente, são a temperatura e o tensor de deformações

Postula-se que um número finito de variáveis de estado seja suficiente para a determinação unívoca da energia interna. De maneira mais geral a escolha sobre o número de variáveis é arbitrária, até certo ponto, estando dependente dos fenômenos que se pretende levar em conta em cada problema.

Um sistema está em *equilíbrio termodinâmico* quando as variáveis de estado não são alteradas com o tempo. Se existe uma mudança ao longo do tempo, diz-se que o sistema está sofrendo um *processo*.

Além da energia interna, pode-se associar ao sistema quantidades de energia cinética, ligadas ao seu movimento, e energia potencial, relacionada à sua posição ou cota, ambas dependentes do referencial adotado, em relação ao qual se medem a velocidade e a posição do corpo.

Nas análises que seguem, considera-se que as mudanças na energia total do sistema implicam em mudanças nas parcelas referentes à sua energia cinética e energia interna. Admite-se, por simplificação, que as transformações que o sistema poderá sofrer não levem em alterações significativas de sua cota, de modo que mudanças na energia potencial não serão consideradas.

A energia total do sistema pode variar se houver trabalho mecânico realizado em relação ao sistema por forças internas e/ou transferências de calor. Normalmente, para dar generalidade ao estudo essa variação de energia é analisada considerando-se as taxas de trabalho mecânico (potência) e de transferência de calor.

3.1.2. Primeira Lei da Termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica estabelece justamente o balanço de energia entre a potência mecânica e a taxa de calor transferidas para dentro do sistema com a taxa de variação da sua energia total.

A potência mecânica pode ser produzida por forças \vec{a} distribuídas por unidade de superfície e por forças \vec{b} por unidade de massa. O calor pode ser transmitido por condução através da superfície de corpo e/ou induzido diretamente na massa por irradiação ou então por alguma fonte interna.

A relação que define a potência mecânica, ou externa P_{ext} , introduzida sobre uma quantidade de massa que ocupa certo instante o volume B, limitado pela superfície ∂B , é expressa na seguinte forma:

$$P_{ext} = \int_{\partial B} \vec{a} \cdot \vec{v} d\partial B + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB \quad (3.1)$$

onde \vec{v} é vetor velocidade do ponto material que na configuração atual do corpo ocupa a posição x do espaço de pontos. Ainda na relação anterior aparece a densidade ρ , que multiplicada pela força \vec{b} é denominada força de corpo.

Por sua vez, a taxa de calor Q_e introduzida no sistema provém da condução através da superfície ∂B e do calor gerado por unidade de massa r . Então, por definição:

$$Q_e = - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB \quad (3.2)$$

onde \vec{q} é o vetor fluxo de calor e o sinal negativo indica o fluxo de fora para dentro do sistema, uma vez que \vec{n} é um versor que, em cada ponto do contorno, aponta para o exterior do corpo.

A primeira lei da termodinâmica diz respeito à conservação de energia do sistema, podendo-se enunciá-la da seguinte maneira: *a taxa de trabalho mecânico ou potência das cargas externas mais a taxa de calor introduzida no sistema é igual à taxa de energia cinética mais a taxa de variação da energia interna*. A relação que a exprime é a seguinte:

$$P_{ext} + Q_e = \dot{E}_c + \dot{U} \quad (3.3)$$

onde,

$$\dot{U} = \frac{d}{dt} \int_B \rho e dB \quad (3.3a)$$

é a taxa de energia interna (e é a densidade de energia interna por unidade de massa), e:

$$\dot{E}_c = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB \quad (3.3b)$$

é a taxa de energia cinética.

O segundo membro da equação (3.3) compõe a *taxa de energia total do sistema* (\dot{E}_T), de modo que:

$$\dot{E}_T = P_{ext} + Q_e \quad (3.4)$$

Substituindo-se (3.3) nas expressões das energias envolvidas, obtém-se:

$$\int_{\partial B} \vec{a} \cdot \vec{v} d\partial B + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} + \rho e \right] dB \quad (3.5)$$

A parcela referente à potência mecânica pode ser desenvolvida considerando-se os teoremas de Cauchy e da divergência.

Do teorema de Cauchy segue que $\vec{a} = \sigma \vec{n}$ em ∂B , onde \vec{n} é o versor normal ao contorno no ponto e σ é o tensor de tensões. Fazendo-se uso do teorema da divergência, a integral de contorno, correspondente ao carregamento distribuído na superfície, pode ser transformada em uma integral no volume. Dessa forma, a potência mecânica resulta:

$$P_{ext} = \int_B \text{div}(\sigma^T \vec{v}) dB + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB \quad (3.6)$$

Lembrando-se da análise tensorial que: $\text{div}(\sigma^T \vec{v}) = \text{div} \sigma \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v}$, a expressão anterior passa a ser dada por:

$$P_{ext} = \int_B \left[(\text{div} \sigma + \rho \vec{b}) \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v} \right] dB \quad (3.7)$$

Finalmente, levando-se em conta a equação de balanço da quantidade de movimento linear e o princípio da conservação da massa, obtém-se:

$$\int_B \left(\rho \frac{d\vec{v}}{dt} \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v} \right) dB = \frac{d}{dt} \int_B \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dB + \int_B \sigma \cdot D dB \quad (3.8)$$

e, portanto

$$P_{ext} = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB + \int_B \sigma \cdot D dB \quad (3.9)$$

A primeira parcela é a taxa de energia cinética do sistema e a segunda é denominada potência das tensões, sendo D o tensor taxa de deformação, igual à parte simétrica do tensor gradiente de velocidade ($\dot{\epsilon}$ no caso de pequenas deformações).

Assim a potência introduzida pode ser avaliada via taxa de trabalho realizado pelas forças externas ou de forma equivalente, pela variação da energia cinética mais a potência das tensões.

Utilizando-se de (3.9), a expressão (3.5) assume a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB + \int_B \sigma \cdot D dB - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} + \rho e \right] dB \quad (3.10)$$

Admitindo-se, por um lado, um regime de pequenas deformações ($D = \dot{\epsilon}$) e, por outro lado, aplicando-se o teorema da divergência à parcela de fluxo de calor no contorno, valem as relações:

$$\sigma \cdot D = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} \quad (3.11)$$

$$\int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} \, d\partial B = \int_B \text{div} \vec{q} \, dB \quad (3.12)$$

Assim sendo, considerando-se que a expressão (3.10) deve valer para qualquer porção do volume ocupado pelo sistema, uma forma local para a primeira lei pode ser escrita da seguinte forma:

$$\rho \dot{e} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \text{div} \vec{q} + \rho r \quad (3.13)$$

3.1.3. Segunda Lei da Termodinâmica

A primeira lei permite a transformação das diferentes formas de energia entre si, desde que haja um balanço entre elas, sem qualquer restrição sobre o sentido em que a conversão possa se processar. Nos processos reversíveis esse fato realmente não tem importância; entretanto nos processos irreversíveis, ou dissipativos, a ausência de restrição é relevante.

A segunda lei da termodinâmica introduz o conceito de entropia do sistema. Além disso, na ocorrência de um processo dissipativo, essa lei impõe a variação não-negativa dessa grandeza, restringindo as possibilidades de conversão entre as formas de energia.

Admite-se, de início, que ao volume B ocupado pelo sistema em cada instante t , se possa associar um número S chamado entropia de B , dado por:

$$S = \int_B \rho s \, dB \quad (3.14)$$

onde $s = s(x, t)$ é a entropia específica por unidade de massa da partícula que ocupa na configuração atual do corpo a posição x . Nos processos reversíveis, a variação de entropia tem correspondência com a quantidade de calor transferida. Em um sentido bastante simples, a entropia relaciona-se com o grau de desordem assumido pelo sistema em função da quantidade de calor transferida.

A segunda lei impõe que, em processos quaisquer de transformação que incluem os processos irreversíveis, a variação total de entropia de um sistema deve ser igual ou superar a variação provocada pela transferência de calor. A igualdade vale para processos reversíveis e a desigualdade para processos irreversíveis.

Nesse último caso, diz-se que existe produção interna de entropia. Em forma geral, a lei se exprime por:

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho s \, dB \geq \int_B \frac{r}{\theta} \rho \, dB + \int_{\partial B} -\frac{\vec{q}}{\theta} \cdot \vec{n} \, d\partial B \quad (3.15)$$

Na expressão (3.15) θ representa a temperatura absoluta, definida como um campo escalar de valores positivos em cada ponto do domínio B considerado. O segundo membro da inequação (3.15) é a taxa ou fluxo de entropia correspondente à transferência externa de calor.

A imposição da segunda lei implica que, ao contrário dos processos reversíveis, nos processos irreversíveis a energia interna não fica totalmente armazenada no sistema, mas parte dela acaba sendo empregada na evolução dos fenômenos internos que geram maior desordem no sistema. Normalmente, faz-se referência a essa parte da energia interna como energia dissipada.

Retornando a expressão (3.15) e empregando-se o teorema da divergência, aquela relação assume a seguinte forma:

$$\int_B \left(\rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \right) dB \geq 0 \quad (3.16)$$

Como essa desigualdade deve ser válida para qualquer volume B do corpo, torna-se válida a seguinte forma local:

$$\rho \dot{s} + \operatorname{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \geq 0 \quad (3.17)$$

3.1.4. A desigualdade de Clausius-Duhem

A primeira e a segunda lei podem ser combinadas conduzindo a uma desigualdade que deve ser observada para que um processo seja termodinamicamente admissível. Considerando as relações que exprimem localmente a primeira e a segunda lei:

$$\rho \dot{e} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \operatorname{div} \vec{q} + \rho r \quad (3.18)$$

$$\rho \dot{s} + \operatorname{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \geq 0 \quad (3.19)$$

Da análise tensorial sabe-se que:

$$\operatorname{div} \frac{\bar{q}}{\theta} = \frac{1}{\theta} \operatorname{div} \bar{q} - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \quad (3.20)$$

Substituindo-se essa relação na expressão da segunda lei e combinando-se com a primeira resultam, sucessivamente:

$$\begin{aligned} \rho \dot{s} + \frac{1}{\theta} \operatorname{div} \bar{q} - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} - \rho \frac{r}{\theta} &\geq 0 \\ \rho \dot{s} + \frac{1}{\theta} (\sigma \cdot \dot{\varepsilon} + \rho r - \rho \dot{e}) - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} - \rho \frac{r}{\theta} &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Finalmente, multiplicando-se a última expressão por θ e cancelando-se ρr obtém-se a desigualdade de Clausius-Duhem:

$$\rho \theta \dot{s} + \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \rho \dot{e} - \frac{1}{\theta} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \geq 0 \quad (3.22)$$

Processos nos quais a desigualdade de Clausius-Duhem é verificada localmente a cada instante são denominados “termodinamicamente admissíveis”.

3.1.5. Potencial termodinâmico

Pode-se ainda trabalhar com uma nova variável ψ denominada energia livre:

$$\psi = \rho e - \rho \theta s \quad (3.23)$$

Derivando essa energia em relação ao tempo, tem-se:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} &= \rho \dot{e} - \rho \theta \dot{s} - \rho \dot{\theta} s \\ \rho(\theta \dot{s} - \dot{e}) &= -(\dot{\psi} + \rho \dot{\theta} s) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Substituindo na desigualdade de Clausius-Duhem (3.22), obtém-se:

$$\sigma \cdot \dot{\varepsilon} - (\dot{\psi} + \rho \dot{\theta} s) - \frac{1}{\theta} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \geq 0 \quad (3.25)$$

Definidas as variáveis de estado que se julgam serem relevantes ao modelo, define-se um potencial termodinâmico a partir do qual se derivam as leis de estado. Utilizando-se o potencial da energia livre ψ , escrito como função do tensor de deformações ε , da temperatura θ e das variáveis de estado internas α_k associadas a processos irreversíveis, tem-se:

$$\psi = \psi(\varepsilon, \theta, \alpha_k) \quad (3.26)$$

Nessa condição, a taxa de energia livre fica expressa por:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \cdot \dot{\varepsilon} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \cdot \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k \quad (3.27)$$

Combinando-se as relações (3.25) e (3.27), resulta que:

$$\left(\sigma - \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \right) \cdot \dot{\varepsilon} - \left(\rho s + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \cdot \dot{\theta} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \right) \cdot \dot{\alpha}_k - \frac{1}{\theta} \text{grad} \theta \cdot \vec{q} \geq 0 \quad (3.28)$$

A desigualdade (3.28) deve valer para qualquer processo, em especial os reversíveis.

Em um caso particular, considere um processo reversível, adiabático e com temperatura uniforme. Nesse caso, a única variável é o tensor de deformações elásticas (reversível) e a desigualdade (3.28) fica atendida se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} = \sigma \quad (3.29)$$

Em um segundo caso, considere um processo puramente térmico a temperatura constante, então a única variável de estado é a entropia e a desigualdade (3.24) fica atendida se:

$$\rho s = - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (3.30)$$

Voltando aos processos gerais e impondo a validade das expressões (3.29) e (3.30), o que implica em que as variáveis de estado possam ser agrupadas entre aquelas de natureza reversível e irreversível, a desigualdade (3.28) assume a forma:

$$- \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k - \frac{1}{\theta} \text{grad} \theta \cdot \vec{q} \geq 0 \quad (3.31)$$

Considerando-se, novamente, uma transformação a temperatura constante, a relação (3.31) fornece a seguinte condição, chamada desigualdade de dissipação:

$$- \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.32)$$

Por analogia as expressões (3.29) e (3.30) pode-se definir uma variável chamada força termodinâmica A^k . Assim como a tensão é uma quantidade conjugada da deformação, as forças termodinâmicas são conjugadas às variáveis internas:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} = -A^k \quad (3.33)$$

de forma que a expressão (3.32) passa a ser escrita como:

$$A^k \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.34)$$

Lembrando-se que o sinal negativo da relação (3.31) decorreu de uma correção do fluxo para que passasse a ser considerado positivo quando fosse para o interior do corpo, então a relação (3.34) indica que os processos irreversíveis definem a quantidade de energia dissipada.

O potencial termodinâmico descreve a relação entre as variáveis de estado e suas variáveis associadas. Observa-se que, na equação (3.32), estão presentes as taxas de variação das variáveis internas. Para materiais que sofrem o processo de danificação, nos quais as tensões e deformações atuais dependem da história de carregamento, as equações constitutivas apresentadas não são suficientes para descrever o comportamento do material. Fazem-se necessárias equações de evolução que determinem as taxas de variação de cada uma das variáveis internas.

Enquanto em modelos elásticos apenas um potencial termodinâmico é suficiente para descrever o comportamento constitutivo do material, em modelos de dano pelo menos dois potenciais termodinâmicos são utilizados. Esses são a energia livre e um potencial de dissipação. A introdução de um potencial termodinâmico, como a energia livre, conduz às leis de estado a partir das quais é possível relacionar variáveis de estado com as suas variáveis associadas, conforme já apresentado. Já a introdução de um potencial de dissipação fornece as leis de fluxo que permitem avaliar a evolução das variáveis internas. A definição de uma região de forças termodinâmicas admissíveis completa o modelo.

3.1.6. Região admissível

A região admissível P é definida como o conjunto de forças termodinâmicas possíveis para um dado material. A função de danificação $f(A^k)$ (análoga a função de escoamento em modelos elásto-plásticos) delimita uma região no espaço das forças termodinâmicas que se modifica conforme o processo de danificação ocorre. Dessa forma, enquanto se dá esse processo de danificação, a variável interna de dano é alterada e a região admissível no espaço das forças termodinâmicas se modifica.

Assim, a região P pode ser representada através de uma função f , denominada função de danificação:

$$P = \{A^k / f(A^k) \leq 0\} \quad (3.35)$$

A fronteira $\partial\Omega$ da região admissível, ou superfície de dano, é definida por:

$$\partial\Omega = \{A^k / f(A^k) = 0\} \quad (3.36)$$

Já o interior Ω da região admissível é descrito por:

$$\Omega = \{A^k / f(A^k) < 0\} \quad (3.37)$$

Pontos internos à região admissível representam estados a partir dos quais ocorrem processos elásticos sem a perda de rigidez. Forças termodinâmicas situadas na fronteira da região admissível são aquelas associadas a processos puramente elásticos, sem danificação, caso sejam seguidas de um descarregamento ou de início de processos de danificação, também elásticos, mediante aplicação de carga efetiva. Forças termodinâmicas exteriores a essa região são inadmissíveis. As taxas de variação das variáveis internas assumem valores segundo o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_k = 0 \text{ se } & \begin{cases} f(A^k) < 0 \\ f(A^k) = 0 \text{ e } \dot{f} < 0 \end{cases} \\ \dot{\alpha}_k \neq 0 \text{ se } & f(A^k) \text{ e } \dot{f} = 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

A danificação isotrópica caracteriza-se por uma modificação igual em todas as suas direções da superfície de dano no espaço das forças termodinâmicas. A alteração da superfície pode ser definida por uma única variável escalar. O processo de danificação anisotrópico, por sua vez, costuma ser descrito por uma variável tensorial.

3.1.7. Potencial de dissipação

Nesta seção são introduzidos os últimos conceitos necessários à modelagem do comportamento constitutivo de materiais através de modelos termodinamicamente admissíveis. A lei da normalidade e convexidade da região admissível são discutidas.

Voltando-se à equação (3.34), assume-se que a força termodinâmica $A^k = 0$ sempre pertence à região admissível. Dessa forma tem-se: dada uma força

termodinâmica onde se inicia o processo de danificação $A^k \in P$ e uma taxa da variável interna $\dot{\alpha}_k$, a desigualdade:

$$(A^k - A_*^k) \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.39)$$

é válida para qualquer valor de forças termodinâmicas $A_*^k \in P$. Observa-se que a equação (3.39), está de acordo com a forma local da desigualdade de dissipação descrita na equação (3.34) e satisfaz o postulado de estabilidade de Drucker no espaço das forças termodinâmicas.

A desigualdade (3.39) possui uma interpretação geométrica que estabelece que o vetor $(A^k - A_*^k)$ forma um ângulo agudo com $\dot{\alpha}_k$, implicando que todos os pontos A_*^k devem estar de um dos lados plano perpendicular a $\dot{\alpha}_k$ no ponto A^k que toca a superfície de dano. Assim, a superfície de dano deve ser convexa, conforme ilustrado na figura 03.

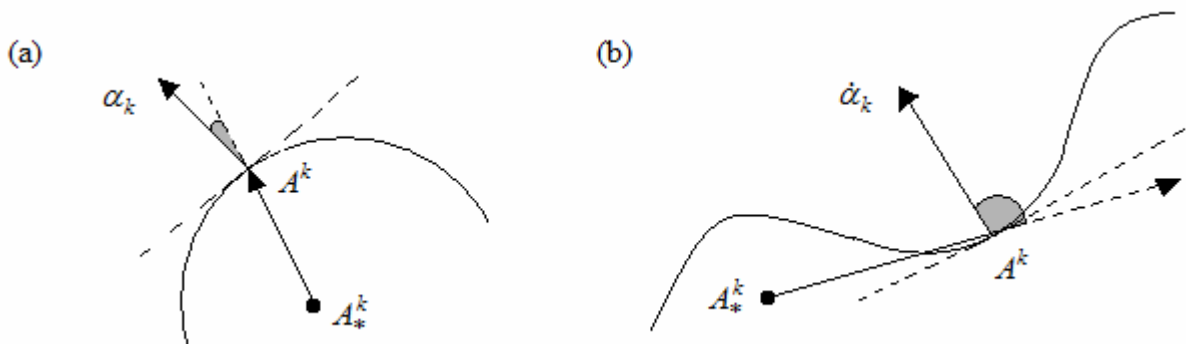


FIGURA 03 – CONVEXIDADE DA SUPERFÍCIE DE DANO: (a) SUPERFÍCIE DE DANO CONVEXA (b) SUPERFÍCIE DE DANO NÃO-CONVEXA
FONTE: O autor (2009)

Se a superfície de dano for regular em A^k , uma maneira de assegurar que todo A_*^k esteja em um dos lados do plano perpendicular a $\dot{\alpha}_k$ no ponto A^k é que $\dot{\alpha}_k$ seja normal a superfície de dano em A^k e, portanto, paralelo ao gradiente da função de danificação no ponto:

$$\dot{\alpha}_k = \lambda \nabla f(A^k) \quad (3.40)$$

A equação (3.40) descreve a Lei da Normalidade. O multiplicador de Lagrange λ é um escalar com valor não negativo. As restrições referentes a esse escalar são determinadas pela condição de complementaridade:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A^k) = 0 \quad (3.41)$$

a última condição da expressão (3.41) implica que λ possui valor positivo apenas quando a função de danificação é nula, isto é, quando ocorre danificação. Por sua vez quando a função de danificação assume valor negativo, λ assume valor nulo, caso em que a o processo de danificação não evolui.

Finalmente, assumindo que em um dado instante de tempo t , a condição $f(A^k(t))=0$ é satisfeita e, para qualquer instante de tempo, as forças termodinâmicas admissíveis são tais que $f \leq 0$, tem-se $\dot{f}(A^k(t)) \leq 0$. Se $\dot{f} < 0$, as forças termodinâmicas movem-se em direção ao interior da região admissível, isto é, tem-se descarregamento elástico e $\lambda = 0$. Logo, o dano, para os quais $\lambda > 0$, ocorrem quando $\dot{f} = 0$. Pode-se resumir essa condição em:

$$\text{Quando } f = 0 \text{ então } \lambda \geq 0, \dot{f} \leq 0 \text{ e } \lambda \cdot \dot{f} = 0 \quad (3.42)$$

O formalismo descrito até aqui apresenta, portanto, três aspectos fundamentais, a escolha das variáveis internas, a escolha da forma da energia livre e as equações que exprimem as leis de evolução das variáveis internas. Atendidos os três aspectos é possível que sejam formulados modelos constitutivos fenomenológicos, termodinamicamente consistentes e que refletem, através do conjunto de variáveis internas, os principais fenômenos físicos observados na estrutura.

3.2. MECÂNICA DO DANO

As idéias de representar o processo de danificação em meios contínuos foram desenvolvidas por Kashanov & Rabotnov em 1958. Entretanto, maiores avanços na Mecânica do Dano para meios contínuos se deram somente nas décadas de 70 e 80 com bases teóricas mais rigorosas, seguindo conceitos termodinâmicos. Desde então inúmeros modelos da Mecânica do Contínuo foram propostos a fim de modelar a resposta constitutiva de diversos tipos de materiais.

Este item tem por objetivo apresentar essas idéias para que, em conjunto com a teoria termodinâmica, o modelo constitutivo seja descrito.

3.2.1. Variável interna de dano

As grandezas da Mecânica do Contínuo são definidas em um ponto. No entanto, do ponto de vista geométrico, e levando-se em conta a heterogeneidade de um material, essas grandezas precisam ser consideradas apenas como valores médios dentro do que é chamado “elemento de volume representativo”. Entende-se como “representativo” um elemento com dimensões suficientemente grandes para considerar a distribuição de microdefeitos contínua e, ao mesmo tempo, um elemento suficientemente pequeno para ser considerado como um ponto material. Como conseqüência, as tensões e deformações da Mecânica do Contínuo devem ser interpretadas fisicamente como grandezas que atuam sobre esse elemento.

De forma similar, para definir o dano em um ponto M , é considerado um elemento de volume representativo orientado por um plano definido por sua normal \vec{n} e pela abscissa x na direção de \vec{n} . O valor de dano $\alpha_d(M, \vec{n}, x)$ em um ponto M na direção \vec{n} com abscissa x é definido por:

$$\alpha_d(M, \vec{n}, x) = \frac{\delta S_{D_x}}{\delta S} \quad (3.43)$$

onde δS é a área de interseção do plano considerado e do elemento de volume representativo, e δS_{D_x} é área de interseção de todas as microfissuras e microcavidades em δS . Neste trabalho, a variável de dano será denotada como α_d em vez do comum D . Isso foi feito a fim de enfatizar que essa é uma variável interna e será utilizada em conjunto com a abordagem anteriormente descrita. Na figura 04 são apresentados o elemento de volume representativo e as áreas de interesse.

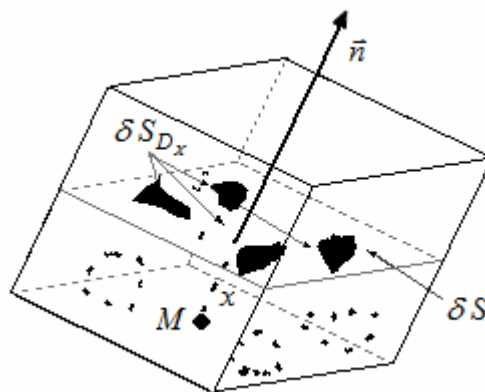


FIGURA 04 – ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO
 FONTE: Nguyen (2005)

A variável de dano assume valores no intervalo $0 \leq \alpha_d \leq 1$, sendo que $\alpha_d = 0$ representa o material íntegro e $\alpha_d = 1$ indica um estado de total deterioração. A falha do elemento de volume representativo na direção \vec{n} é definida na área mais danificada:

$$\alpha_d(M, \vec{n}) = \max_x \alpha_d(M, \vec{n}, x) = \frac{\delta S_D}{\delta S} \quad (3.44)$$

onde δS_D é a área de interseção mais danificada. Uma vez que o dano no elemento de volume representativo depende da direção \vec{n} , a natureza anisotrópica do dano está contemplada nessa definição e α_d passa a ter caráter tensorial. A teoria de dano proporciona um meio de caracterizar a deterioração de um material em um nível microscópico através de valores em um nível macroscópico. Se as microfissuras e microcavidades são uniformemente distribuídas no elemento de volume representativo, é adequado assumir o dano de forma isotrópica, afinal a variável de dano α_d , nesse caso, não depende da direção \vec{n} . No presente trabalho o estudo será restrito a casos com variável de dano escalar, ou seja, caso isotrópico.

3.2.2. Deformação equivalente

O conceito de tensão efetiva é resultado direto da definição de variável interna de dano.

Considere o caso de tração uniaxial com uma variável de dano escalar. Devido ao processo de danificação a área da seção transversal é reduzida e se torna uma área efetiva, $S - S_D$, na qual S é a seção transversal original e S_D é a área total de microfissuras. A tensão não mais pode ser representada por:

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (3.45)$$

devendo ser substituída pela tensão efetiva:

$$\bar{\sigma} = \frac{F}{(S - S_D)} = \frac{\sigma}{(1 - \alpha_d)} \geq \sigma \quad (3.46)$$

A tensão efetiva é definida como a tensão calculada utilizando-se a área da seção transversal que efetivamente resiste às forças aplicadas.

A extensão desse conceito ao caso de tensões multiaxiais com uma variável escalar de dano não exige mudanças uma vez que esse caso não depende da direção \vec{n} . Assim:

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma}{(1 - \alpha_d)} \quad (3.47)$$

onde σ e $\bar{\sigma}$ são o tensor de tensões e o tensor de tensões efetivas respectivamente.

No descarregamento, quando da mudança de tensões de tração para tensões de compressão, devido ao fenômeno de fechamento das microfissuras, a seção transversal efetiva é maior que $S - S_D$. Em um caso particular onde todos os microdefeitos se fecham $S_D = 0$ essa seção será igual a S e a tensão σ e a tensão efetiva $\bar{\sigma}$ serão iguais. Esse comportamento unilateral tem sua importância durante simulação de materiais frágeis, porém não foi introduzido no presente trabalho.

O princípio de deformações equivalentes apresentado por Lemaitre (1971) segue da definição de tensão efetiva e auxilia a evitar análises micromecânicas para cada tipo de defeito e cada tipo de mecanismo de dano. Esse princípio pode ser enunciado da seguinte forma: *Qualquer equação constitutiva empregada a fim de se obter as deformações de um material danificado deve ser tratada da mesma forma como se aplicada a um material íntegro exceto que a tensão deve ser substituída pela tensão efetiva.* A figura 05 ilustra o princípio de deformações equivalentes.

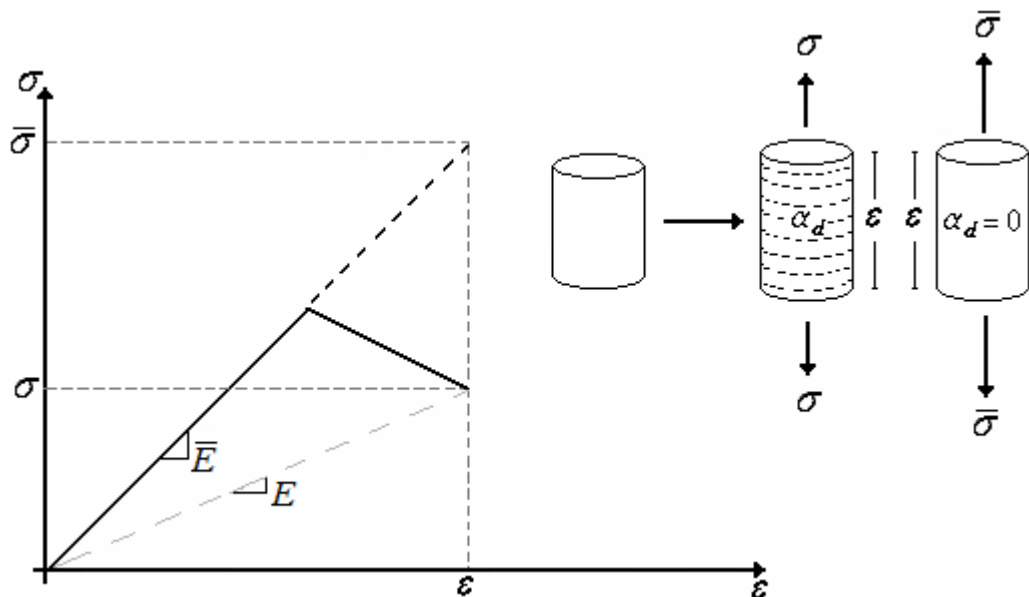


FIGURA 05 – PRINCÍPIO DAS DEFORMAÇÕES EQUIVALENTES
FONTE: O autor (2009)

Ainda segundo Lemaitre (1992), a aplicação da hipótese de deformações equivalentes resulta em um estado de junção entre dano e elasticidade. Essa junção vem da observação do fenômeno físico onde o processo de danificação resulta em uma mudança nas propriedades mecânicas de um material. Na modelagem constitutiva isso pode ser descrito para o caso uniaxial através da seguinte expressão:

$$\sigma = (1 - \alpha_d) \bar{E} \varepsilon \quad (3.48)$$

Essa expressão está de acordo com observações experimentais realizadas por Lemaitre (1992), onde o módulo de elasticidade efetivo E depende do valor da variável de dano:

$$E = (1 - \alpha_d) \bar{E} \quad (3.49)$$

Em formulações baseadas em deformações, o dano é caracterizado através da tensão efetiva em conjunto com a hipótese de deformações equivalentes

3.2.3. Tensão equivalente

Um conceito dual à hipótese de deformações equivalentes é a formulação baseada em tensões. A hipótese de tensão equivalente é proposta e o dano é apresentado através do conceito de deformação efetiva, no qual o tensor de deformações efetivas para o caso de dano isotrópico é descrito por:

$$\bar{\varepsilon} = (1 - \alpha_d) \varepsilon \quad (3.50)$$

A hipótese de tensão equivalente foi enunciada por Simo & Ju (1987) na seguinte forma: *a tensão associada a um estado de danificação obtido através da imposição de uma deformação é equivalente a tensão obtida em um material não danificado através da imposição da deformação efetiva*. A figura 06 ilustra a hipótese de tensões equivalentes.

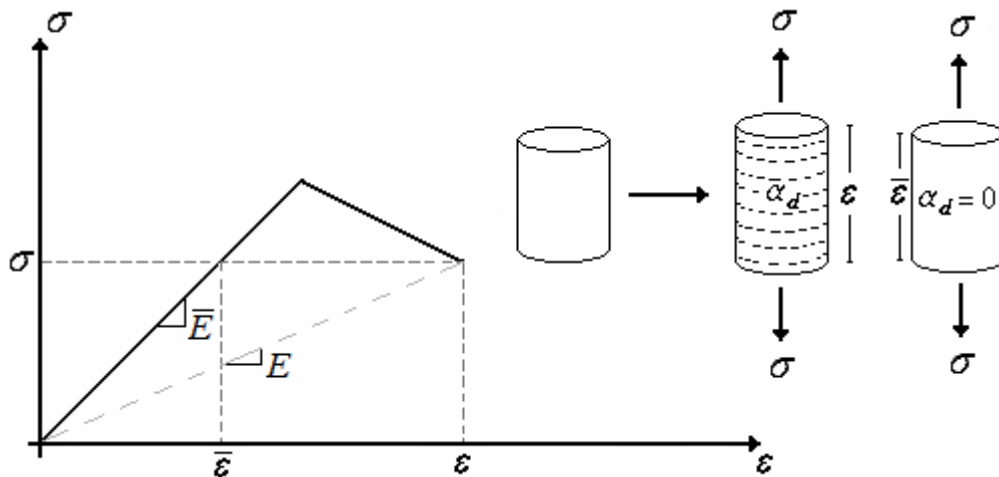


FIGURA 06 – HIPÓTESE DAS TENSÕES EQUIVALENTES
 FONTE: O autor (2009)

3.3. MODELO CONSTITUTIVO

Nesta seção, será apresentado o modelo constitutivo para a simulação do processo de danificação. A teoria anteriormente apresentada será descrita através de conceitos da análise convexa. A nova abordagem permitirá obter os mesmos resultados de uma maneira mais rigorosa, além de eliminar algumas restrições como, por exemplo, a necessidade de utilizar apenas funções suaves. No início da seção é definido um potencial termodinâmico, em seguida, as leis de estado apresentadas anteriormente, equações (3.29) e (3.33), são reescritas utilizando outra formulação. Em seguida o potencial termodinâmico complementar da energia livre de Helmholtz é obtido. Por fim, resultados da análise convexa são apresentados, o potencial de dissipação e as leis de evolução são determinados, completando o modelo. As demonstrações dos resultados da análise convexa encontram-se nos trabalhos de Rockafellar (1970) e Lemaréchal & Hiriart-Urruty (1991).

3.3.1. Potencial termodinâmico e Leis de estado

Como mostrado anteriormente o estado de um material, sofrendo um processo de danificação isotérmico, pode ser completamente definido através do conhecimento do tensor de deformações ε e da variável interna de dano α_d .

A primeira lei da termodinâmica estabelece uma função de estado, chamada energia interna. Em condições isotérmicas, essa função pode ser substituída pela energia livre de Helmholtz:

$$\psi = \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.51)$$

Se a energia livre de Helmholtz ψ for adotada, pode-se definir assim as leis de estado:

$$\sigma = \nabla_{\varepsilon} \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.52)$$

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.53)$$

Alternativamente, uma transformada de Legendre-Fenchel pode ser efetuada obtendo-se a função dual ou conjugada de ψ :

$$\psi_C = \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.54)$$

Onde σ é tensor de tensões de Cauchy e A^d são as forças termodinâmicas. Essas duas funções são relacionadas por:

$$\psi_C(\varepsilon, A^d) = \sup_{\varepsilon, \alpha} [\sigma \cdot \varepsilon + A^d \cdot \alpha_d - \psi(\varepsilon, \alpha_d)] \quad (3.55)$$

Por hipótese, assume-se que a função energia livre de Helmholtz ψ é estritamente convexa e diferenciável. Uma vez que ψ é estritamente convexa, o potencial conjugado ψ_C é diferenciável. Assim as variáveis de estado ε e α_d podem ser assim definidas:

$$\varepsilon = \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.56)$$

$$\alpha_d = \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.57)$$

Usando ainda a hipótese de deformação equivalente e considerando a energia livre de Helmholtz como:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d) \quad (3.58)$$

A variável de estado σ é definida como:

$$\sigma = \nabla_{\varepsilon} \bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d) \quad (3.59)$$

definição essa correspondente a formulação de Lemaitre (1971) se for identificada a tensão efetiva como:

$$\bar{\sigma} = \nabla_{\varepsilon} \bar{\psi}(\varepsilon) \quad (3.60)$$

É importante notar que a força termodinâmica, associada à perda de rigidez, tem a mesma dimensão de energia:

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} [\bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d)] = \bar{\psi}(\varepsilon) \quad (3.61)$$

3.3.2. Potencial de dissipação

A lei da normalidade e a convexidade da superfície de dano foram apresentadas, anteriormente, como conseqüências do princípio da potência máxima de Hill. Nesta seção, esses resultados são obtidos a partir da aplicação do teorema apresentado a seguir.

Teorema: Seja X um espaço reflexivo de Banach e seja $g : X \rightarrow R$ uma função própria, convexa e fraca semi-contínua (l.s.c.). Dados $x \in X$ e $x^* \in X^*$, então:

$$x^* \in \partial g(x) \leftrightarrow x \in \partial g^*(x^*)$$

onde g^* é uma função conjugada de g .

Na aplicação do teorema apresentado, assume-se que o espaço vetorial X corresponde ao espaço das taxas da variável interna de dano e o espaço X^* corresponde ao espaço das forças termodinâmicas associadas ao processo de danificação.

Define-se a função suporte da região convexa de forças termodinâmicas admissíveis P como:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \sup_{A_*^d} \{A_*^d \cdot \dot{\alpha}_d / A_*^d \in P\} = A^d \cdot \dot{\alpha}_d \quad (3.62)$$

onde A^d é o ponto onde o supremo é atingido. Nesse contexto, χ é a função de dissipação. Essa função é a função conjugada à função indicatriz da região admissível P e possui as seguintes propriedades: convexa, positiva homogênea, fraca semi-contínua (l.s.c.), não negativa e contém a origem. Portanto do teorema apresentado no início dessa seção, tem-se:

$$\dot{\alpha}_d \in \partial Ind_P \leftrightarrow A^d \in \partial \chi(\dot{\alpha}_d) \quad (3.63)$$

onde a função indicatriz de P , Ind_P , indica se um valor de A^d pertence a região P .

Para valores de $A^d \notin P$, $Ind_P = \infty$.

A equação acima é uma generalização da Lei da Normalidade, admitindo o caso de funções de escoamento não suaves. A formulação apresentada nessa seção permite descrever a Lei da Normalidade de duas formas equivalentes, conforme apresentado no quadro a seguir:

FORMULAÇÃO	DESCRIÇÃO
Tipo I	χ - função convexa, positiva homogênea, não negativa e contendo a origem. $A^d \in \partial\chi(\dot{a}_d)$
Tipo II	P - conjunto fechado, convexo e contendo a origem. $\chi_C^* = Ind_P$ - função indicatriz de P $\dot{\alpha} \in \partial Ind_P(A^d)$

QUADRO 1 – FORMULAÇÕES EQUIVALENTES DA LEI DE FLUXO
FONTE: FREITAS (2008)

Segundo Han & Reddy (1999) considerações práticas determinam qual das formulações é mais apropriada para a resolução de um determinado problema.

A formulação do tipo II é comumente mais utilizada e é a formulação adotada no presente trabalho. Segundo essa formulação, onde P representa a região admissível, Ω o interior dessa região e $\partial\Omega$ sua fronteira, identificam-se três situações distintas:

- $A^d \notin P \rightarrow \partial Ind_P(A^d) = \{ \}$ e, portanto, essa região é inacessível;
- $A^d \in \Omega \rightarrow \partial Ind_P(A^d) = \{0\}$ e, por essa razão, o interior de P é conhecido como região elástica;
- $A^d \in \partial\Omega \rightarrow \partial Ind_P(A^d) = \{ \dot{\alpha}_d / (A_*^d - A^d) \cdot \dot{\alpha} \leq 0, \forall A_*^d \in P \}$ representando o cone das normais externas a P em A^d .

3.3.3. Equação constitutiva de dano em taxas

Nessa seção, as relações constitutivas são enunciadas em termos de taxas temporais de tensão e deformação.

A fim de obter as leis de estado em taxas, as equações (3.56) e (3.57) são derivadas em relação ao tempo. Como resultado, obtém-se as seguintes expressões:

$$\dot{\varepsilon} = \nabla_{\sigma\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} + \nabla_{\sigma A^d}(\sigma, A^d) \dot{A}^d \quad (3.64)$$

$$\dot{\alpha}_d = \nabla_{A^d A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{A}^d + \nabla_{A^d \sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \quad (3.65)$$

Introduzindo o potencial $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$:

$$\begin{aligned} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) &= \frac{1}{2} \nabla_{\sigma\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \cdot \dot{\sigma} + \nabla_{\sigma A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \cdot \dot{A}^d + \\ &+ \frac{1}{2} \nabla_{A^d A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{A}^d \cdot \dot{A}^d \end{aligned} \quad (3.66)$$

pode-se obter as leis de estado em taxas:

$$\dot{\varepsilon} = \nabla_{\dot{\sigma}} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) \quad (3.67)$$

$$\dot{\alpha}_d = \nabla_{\dot{A}^d} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) \quad (3.68)$$

O potencial $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$ é um funcional quadrático, estritamente convexo, diferenciável, coercivo e com mínimo em zero. Por definição, o funcional complementar a esse potencial é também diferenciável e possui a forma:

$$j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) = \sup_{\sigma, A^d} [\dot{\sigma} \cdot \dot{\varepsilon} + A^d \cdot \dot{\alpha}_d - j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)] \quad (3.69)$$

Assim como as taxas de deformações e da variável interna de dano estão relacionadas ao potencial introduzido na equação (3.66), as taxas de tensões e das forças termodinâmicas podem ser obtidas do potencial $j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d)$:

$$\dot{\sigma} = \nabla_{\dot{\varepsilon}} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) \quad (3.70)$$

$$\dot{A}^d = -\nabla_{\dot{\alpha}_d} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) \quad (3.71)$$

Para exprimir a relação constitutiva em taxas é necessário, ainda, encontrar uma relação de consistência que vinculará as taxas de forças termodinâmicas com as taxas da variável interna de dano. Essa relação de consistência é apresentada por:

$$\dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d = 0 \quad (3.72)$$

Faz-se necessário, também, definir a região convexa das taxas das forças termodinâmicas admissíveis. Como em Freitas (2008) e Hecke (1991) adota-se, para essa região, o cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_p(A^d)$, ou seja:

$$\dot{P} = [\partial \text{Ind}_p(A^d)]^- \quad (3.73)$$

Salienta-se que \dot{P} é um cone convexo com vértice na origem e definido por:

$$\dot{A}_*^d \in [\partial \text{Ind}_P(A^d)]^- \leftrightarrow \dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d \leq 0 \quad \forall \dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(A^d) \quad (3.74)$$

e esquematizado na figura 07.

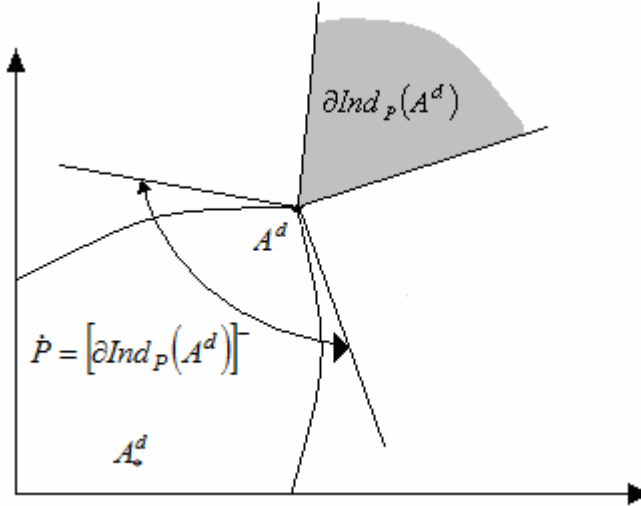


FIGURA 07 – CONE POLAR NEGATIVO DE $\partial \text{Ind}_P(A^d)$

FONTE: O autor (2009)

Dados os vetores A_*^d e A^d , o vetor $(A_*^d - A^d)$ encontra-se na região do cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$. Fazendo $A_*^d = A_{t+\Delta t}^d$ e $A^d = A_t^d$, obtém-se:

$$\dot{A}^d = \lim_{\Delta t} \frac{A_*^d - A^d}{\Delta t} = \frac{\Delta A^d}{\Delta t} \quad (3.75)$$

Assim as taxas de forças termodinâmicas admissíveis \dot{A}^d , também se encontram na região do cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$.

Considerando que a região das taxas das forças termodinâmicas admissíveis é o cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$, é possível demonstrar que dado $\dot{A}^d \in \dot{P}$, então $\dot{\alpha}_d$ é tal que:

- $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(A^d)$
- $\dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d = 0$ se, e somente se, $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(\dot{A}^d)$

É possível obter uma interpretação física para o fato de $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(\dot{A}^d)$, analisando as seguintes situações particulares:

- $A^d \in \Omega$, nesse caso, não ocorre danificação, pois a força termodinâmica nesse instante pertence ao interior da região

admissível, $\dot{\alpha} = 0$ e qualquer taxa de força termodinâmica é admissível;

- b) $A^d \in \partial\Omega$, nesse caso, onde a força termodinâmica pertence à superfície da região admissível, identificam-se três situações:
- i. $\dot{A}^d \in \Omega\{\dot{P}\}$. Sendo a taxa de forças termodinâmicas pertencente ao interior do cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$, o conjunto $\partial Ind_p(\dot{A}^d)$ possui somente o elemento nulo, interpreta-se que não ocorre danificação, isto é, $\dot{\alpha} = 0$. Esse é o caso em que ocorre descarregamento elástico local;
 - ii. $\dot{A}^d \in \partial\Omega\{\dot{P}\}$. Quando a taxa de forças termodinâmicas pertence à superfície do cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$ pode ocorrer danificação ou ainda um processo neutro. Nesse caso, $\dot{\alpha}_d \in \partial Ind_p(\dot{A}^d)$.
 - iii. $\dot{A}^d \notin \dot{P}$. Quando a taxa das forças termodinâmicas não pertence ao cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$ o conjunto $\partial Ind_p(\dot{A}^d)$ é vazio.

3.3.4. Equação constitutiva de dano em incrementos finitos

Processos evolutivos podem ser aproximados através da descrição do comportamento do material em certos instantes obtidos em intervalos de tempo selecionados. O problema de evolução consiste em avaliar as variáveis no fim do intervalo de tempo a partir de seus valores no início do intervalo e dos valores dos incrementos sofridos pelas variáveis ao longo do intervalo. Dessa forma, o estado de um corpo no instante $t + \Delta t$ é obtido a partir do estado do corpo em um instante t :

$$\sigma_{t+\Delta t} = \sigma_t + \Delta\sigma \quad (3.76)$$

$$A_{t+\Delta t}^d = A_t^d + \Delta A^d \quad (3.77)$$

$$\varepsilon_{t+\Delta t} = \varepsilon_t + \Delta\varepsilon \quad (3.78)$$

$$\alpha_{d,t+\Delta t} = \alpha_{d,t} + \Delta\alpha_d \quad (3.79)$$

As leis de estado, dadas pelas equações (3.56) e (3.57), são reescritas na forma incremental:

$$\Delta \varepsilon = \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.80)$$

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.81)$$

Introduzindo o potencial $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$:

$$\begin{aligned} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) = & \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \Delta \sigma \cdot \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) - \\ & - \Delta A^d \cdot \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) - \psi_C(\sigma, A^d) \end{aligned} \quad (3.82)$$

É possível obter os incrementos de deformação e os incrementos da variável interna relativa ao dano:

$$\Delta \varepsilon = \nabla_{\sigma} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (3.83)$$

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (3.84)$$

Adotando para potencial de dissipação a função:

$$\chi(\Delta \alpha_d) = \sup_{A_*^d} (A_*^d \cdot \alpha_d) \quad (3.85)$$

E para o potencial conjugado:

$$\chi_C(A^d + \Delta A^d) = \text{Ind}_P(A^d + \Delta A^d) \quad (3.86)$$

Obtêm-se as expressões:

$$(A^d + \Delta A^d) \in \partial \chi(\Delta \alpha_d) \quad (3.87)$$

$$\Delta \alpha_d = \partial \text{Ind}_P(A^d + \Delta A^d) \quad (3.88)$$

Salienta-se que o funcional $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$ é análogo ao funcional $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$, sendo que a diferença entre esses reside em dois pontos. Primeiramente, enquanto $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$ é uma função quadrática das taxas temporais das tensões e das taxas temporais das forças termodinâmicas relativas ao dano, $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$ é uma função convexa e diferenciável dependente apenas de $\psi_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$. Além disso, na formulação em taxas, \dot{A}^d deve pertencer ao cone convexo das taxas admissíveis de \dot{P} , enquanto no problema em incrementos finitos as forças termodinâmicas relativas ao dano no final do passo $A^d + \Delta A^d$ devem ser admissíveis, isto é, contidas na região P .

O funcional $\bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d)$ é estritamente convexo, de forma que seu conjugado resulta diferenciável. A partir da relação:

$$\bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d) = \sup_{\Delta\sigma_*, \Delta A_*^d} \left[\Delta\sigma_* \cdot \Delta\varepsilon - \bar{j}_C(\Delta\sigma_*, \Delta A_*^d) \right] \quad (3.89)$$

E das propriedades do funcional conjugado, é possível obter a relação constitutiva inversa:

$$\Delta\sigma \in \nabla_{\varepsilon} \bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d) \leftrightarrow \Delta\varepsilon \in \nabla_{\sigma} \bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d) \quad (3.90)$$

3.3.5. Relação entre função dissipação e função escoamento

Nessa seção a relação entre as funções de dissipação e de escoamento é apresentada, utilizando-se para isso o conceito de funções polares.

A função gauge ou função de Minkowski para um conjunto P é definida pela expressão a seguir:

$$g_P(A^d) = \inf \{ \mu > 0 / A^d \in \mu P \} \quad (3.91)$$

Conforme pode se observar, essa função assume o menor valor positivo pelo qual um conjunto P pode ser multiplicado, de forma que um elemento A^d do conjunto continue a fazer parte do mesmo.

Em conjuntos que contém a origem, a função gauge assume valor 1 para elementos na fronteira do conjunto e valor menor que 1 para elementos internos. Dessa forma como a função de danificação assume valor nulo para valores de forças termodinâmicas na fronteira da região admissível e valor menor que zero para forças termodinâmicas internas à região admissível, é possível definir a região admissível como:

$$P = \{ A^d / g_P(A^d) \leq 1 \} \quad (3.92)$$

Na equação (3.92), a função g_P a partir da qual a região admissível foi definida é denominada, por alguns autores, função de dano canônica.

A função g_P também pode ser definida da seguinte forma:

$$g_P(A^d) = \inf \{ \mu > 0 / \langle A^d \cdot \dot{\alpha}_d \rangle \leq \mu \chi(\dot{\alpha}_d) \} \quad (3.93)$$

Nessa equação χ representa a função de dissipação, isto é, a função suporte da região admissível P .

Assumindo que $\chi(\dot{\alpha}_d) = 0$, se e somente se, $\dot{\alpha}_d = 0$, então a função gauge e a função de dissipação podem ser relacionadas pela expressão:

$$g_P(A^d) = \sup_{A^d \in \text{dom } \chi} \frac{\langle A^d \cdot \dot{\alpha}_d \rangle}{\chi(\dot{\alpha}_d)} \quad (3.94)$$

A função (3.94) estabelece que as funções gauge e a função de danificação são funções conjugadas polares. O Lema apresentado a seguir permitirá obter a Lei da normalidade a partir das definições apresentadas.

Lema: Seja g uma função convexa não-negativa, com $g(0) = 0$ e seja A um ponto no interior do domínio de g , tal que $g(A) > 0$. Seja $P = \{X / g(X) \leq g(A)\}$. Então $\dot{\alpha} \in N_P(A)$, se e somente se, existir $\lambda \geq 0$, tal que $\dot{\alpha} \in \lambda \partial g(A)$.

Para funções diferenciáveis, obtém-se a forma clássica da Lei da Normalidade a partir do lema apresentado, isto é:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \nabla g(A^d) \quad (3.95)$$

Da definição de subdiferencial, determina-se o multiplicador λ . Fazendo $X = 0$ e depois $X = 2A^d$, na equação:

$$\lambda g(X) - \lambda g(A^d) \geq \dot{\alpha}_d \cdot (X - A^d) \quad (3.96)$$

E usando a propriedades de g , obtém-se a relação:

$$\lambda = \chi(\dot{\alpha}_d) \quad (3.97)$$

Para uma função de danificação f escrita sob uma forma qualquer, os vetores normais externos a P , em um ponto A^d da superfície de dano, também são proporcionais ao vetor gradiente da função f nesse ponto, de forma que:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \nabla_{A^d} f(A^d) \quad (3.98)$$

A condição de que somente pontos da superfície de dano podem apresentar danificação efetiva, isto é $\lambda \neq 0$, é condensada na condição de complementaridade:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A^k) = 0 \quad (3.99)$$

Com o auxílio da condição de consistência apresentada na equação (3.70) e da definição de cone polar negativo, a região das taxas de forças termodinâmicas admissíveis pode ser definida por:

$$\dot{P} = \{\dot{A}^d / \lambda \nabla_{A^d} f(A^d) \dot{A}^d, \forall \lambda \geq 0\} \quad (3.100)$$

A relação de consistência e a região definida na equação (3.100) permitem estabelecer as relações a seguir:

$$\text{se } f(A^d) = 0, \text{ então } \lambda \geq 0 \quad \dot{f}(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot \dot{f}(A^k) = 0 \quad (3.101)$$

$$\text{onde } \dot{f} = \nabla_{A^d} f(A^d) \dot{A}^d \quad (3.102)$$

Caso a função de danificação não seja diferenciável, pode-se admitir que a região P é definida pela inserção de um número finito de regiões convexas, identificadas por funções f_j , suficientemente regulares, chamadas modos de danificação. Convencionou-se que f é o vetor cujo componente j é o valor da função f_j no ponto. Além disso, cada modo de danificação possui um multiplicador associado, ou seja, λ também é um vetor.

4. UM MODELO DE DANO SEGUNDO ENFOQUE TERMODINÂMICO

No presente capítulo o modelo de dano desenvolvido por Tao & Phillips (2005) é formulado segundo enfoque termodinâmico.

Para a energia livre, adota-se a seguinte função:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} \overline{ID} (1 - \alpha_d) \varepsilon \cdot \varepsilon \quad (4.1)$$

onde \overline{ID} é a matriz elástica apresentada na equação (4.2) em termos do módulo de elasticidade E e do coeficiente de Poisson ν .

$$\overline{ID} = \begin{bmatrix} \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Na equação a seguir, a matriz elástica é apresentada para o caso de estado plano de deformações:

$$\overline{ID} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{(1-\nu)} & 0 \\ \frac{\nu}{(1-\nu)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

O potencial termodinâmico complementar possui a seguinte forma:

$$\psi_c(\sigma, A^d) = \begin{cases} \frac{1}{2\overline{ID}} \sigma \cdot \sigma & \text{se } A^d \leq A_0^d \\ \frac{1}{2\overline{ID}} \left[1 + C1(A^d - A_0^d)^{C2} \right] \sigma \cdot \sigma & \text{se } A^d > A_0^d \end{cases} \quad (4.4)$$

onde A_0^d é a força termodinâmica a partir da qual se inicia o processo de danificação calculada através da expressão (4.5), $C1$ e $C2$ são constantes do modelo responsáveis pela modificação da região admissível.

$$A_0^d = \frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} \quad (4.5)$$

Na expressão (4.5) ε_{d0} corresponde a deformação a partir da qual os processos não-lineares, como a danificação, ocorrem. Esse parâmetro é obtido através de ensaios de tração uniaxial, como pode ser visto na figura 08.

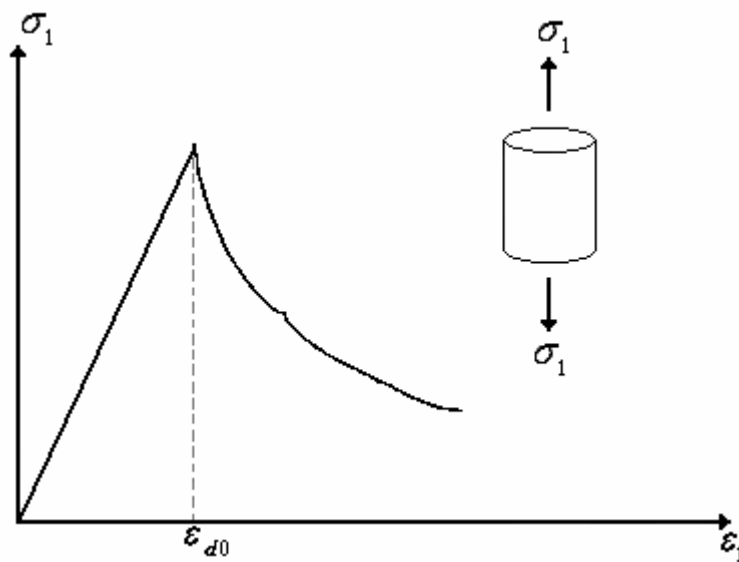


FIGURA 08 – ENSAIO DE TRAÇÃO UNIAXIAL: DEFINIÇÃO DE ε_{d0}
 FONTE: Guello (2002)

A força termodinâmica relativa ao dano, por sua vez, se confunde com a energia livre, como pode ser observado na figura 09. Essa força termodinâmica pode ser interpretada como a energia livre do sistema se esse fosse perfeitamente elástico:

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} \psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon \cdot \varepsilon \quad (4.6)$$

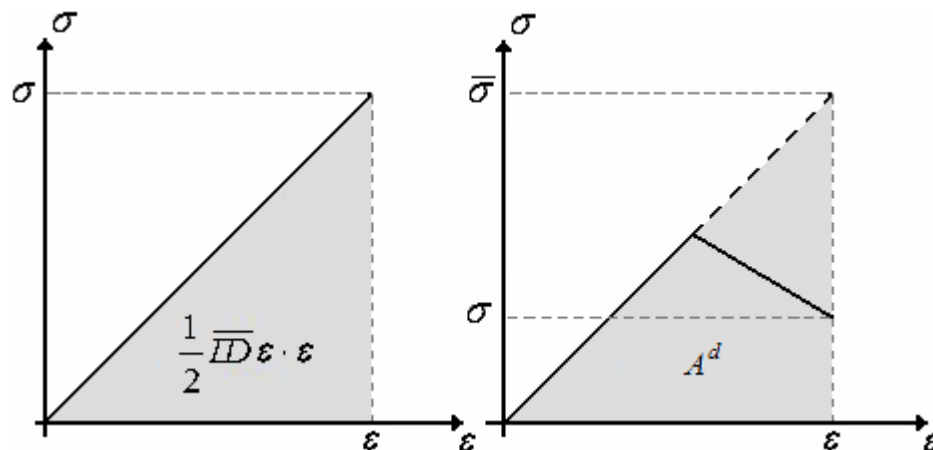


FIGURA 09 – COMPARAÇÃO ENTRE A ENERGIA LIVRE E A FORÇA TERMODINÂMICA
 FONTE: O autor (2009)

A região das forças termodinâmicas admissíveis pode ser definida de forma similar a La Bordeire et al. (1992):

$$P = \{A^d - A_0^d - Z \leq 0\} \quad (4.7)$$

Segundo Tao & Phillips (2005), conforme o processo de danificação ocorre, a superfície inicial de danificação se altera em função do parâmetro de endurecimento/amolecimento Z . Esse parâmetro pode ser definido matematicamente de diferentes formas, através de polinômios, potenciais, funções exponenciais, etc. Segundo os autores ainda, potenciais e funções exponenciais representam de maneira mais acurada as curvas de carregamento de materiais cimentícios. Assim, Tao & Phillips (2005) definem o parâmetro Z como:

$$Z = \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_d}{1 - \alpha_d} \right)^{C2} \quad (4.8)$$

onde $C1$ e $C2$ são duas constantes a serem calibradas através de ensaios uniaxiais de tração e compressão. Os efeitos da variação dessas constantes sobre o parâmetro Z podem ser observados na figura 10.

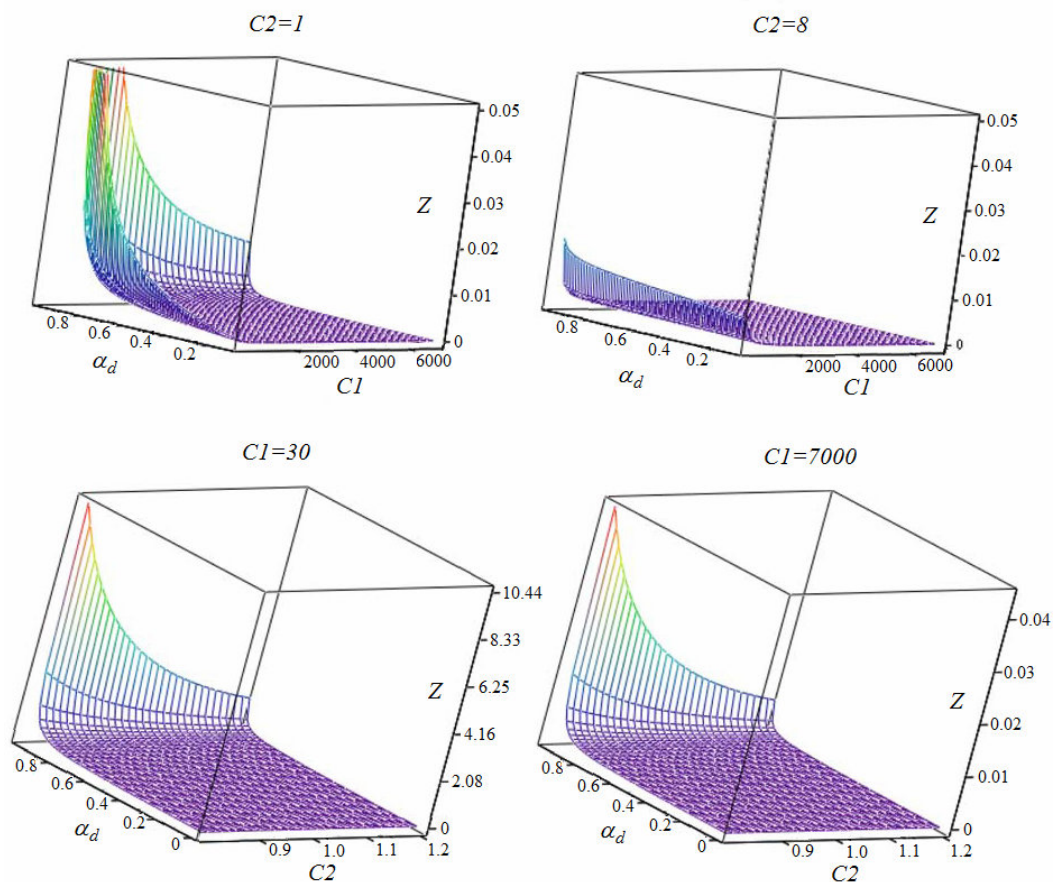


FIGURA 10 – EFEITO DE $C1$ E $C2$ EM Z
 FONTE: Tao & Phillips (2005)

Especificamente, $C1$ é responsável pela magnitude da região admissível e $C2$, por sua vez, é responsável pela superfície dessa região, influenciando a característica de endurecimento/amolecimento do material a ser simulado, como pode ser visto na figura 11. A escolha apropriada de $C1$ e $C2$ conduzirá a um parâmetro Z mais adequado aos diferentes tipos de cimentos e suas resistências a esforços de tração e compressão.

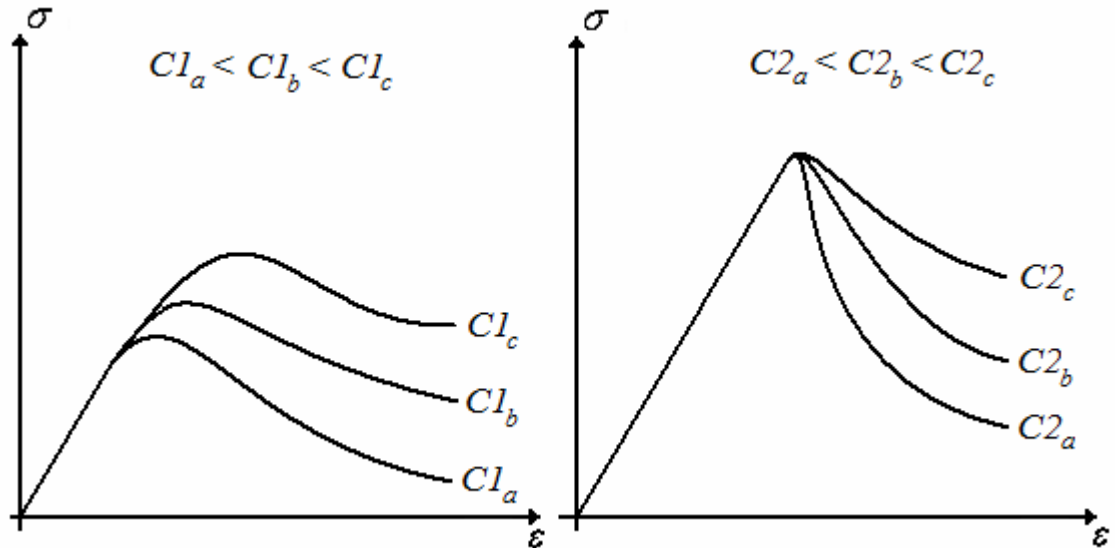


FIGURA 11 – SIGNIFICADO FÍSICO DE $C1$ E $C2$
 FONTE: O autor (2009)

Por definição, a função dissipação é o suporte da região admissível P , sendo determinada por:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \sup_{A^d \in P} \{A^d \cdot \dot{\alpha}_d\} \quad (4.9)$$

Assim a função de dissipação assume a forma:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon \cdot \varepsilon\right) \dot{\alpha}_d, & \text{se } \dot{\alpha}_d > 0 \\ \infty, & \text{se } \dot{\alpha}_d \leq 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

O potencial termodinâmico complementar é então obtido a partir de:

$$\chi_C = \partial \text{Ind}_P(A^d) \quad (4.11)$$

5. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E ALGORITMOS

Este capítulo tem por objetivo descrever a estrutura do programa desenvolvido, detalhar o elemento de interface implementado, além de apresentar os métodos numéricos e algoritmos para resolver o problema de dano.

O procedimento de solução combina um método Quase-Newton para a resolução do equilíbrio global e um algoritmo de programação matemática (Newton-Raphson) para a resolução da equação constitutiva. A discretização espacial é obtida aplicando-se o método dos elementos finitos e a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial.

5.1. PROGRAMA DESENVOLVIDO

Com o intuito de simular a perda de rigidez em interfaces foi desenvolvido um programa numérico computacional. Esse programa foi implementado em linguagem FORTRAN 90, utilizando o software Compaq Visual Fortran, Copyright© 2000, Compaq Computer Corporation, baseando-se no programa desenvolvido por Freitas (2008) e com o auxílio de idéias contidas no Sistema de Desenvolvimento de Programas no Método dos Elementos Finitos (SDP) escrito por Feijóo & Gouvea (1985).

O código está estruturado em módulos, algumas sub-rotinas do programa de Freitas (2008) foram utilizadas a fim de possibilitar não só a simulação do processo de danificação, mas que também fosse capaz de realizar simulações de problemas elasto-idealmente-plásticos, com um critério de escoamento de Drucker-Prager, e simulações de problemas elastoplásticos, com um critério de escoamento definido a partir de um modelo cap.

O programa aceita como condições de contorno a imposição de cargas distribuídas, cargas concentradas e deslocamentos prescritos em determinados nós da malha de elementos finitos. Considera-se que os materiais em análise são isotrópicos, não havendo restrição quanto ao número de materiais que podem compor a estrutura analisada.

No programa desenvolvido para este estudo, o módulo denominado CODE contém o programa principal o qual realiza as chamadas dos módulos PREP,

responsável pela entrada de dados, e PROC, módulo que realiza a montagem e resolução do problema de equilíbrio para cada incremento de carga. Esses processos são realizados através da chamada de sub-rotinas contidas nesses dois módulos.

Para cada incremento de carga, a sub-rotina SOLVE resolve um problema de equilíbrio global, no qual são balanceadas as forças externas e as forças internas, calculadas ponto a ponto, seguindo a discretização espacial do Método dos Elementos Finitos. A sub-rotina FORMFK é responsável pela montagem da equação de equilíbrio. Essa por sua vez chama a sub-rotina ELEM responsável pela determinação das forças internas (tensões) a partir da resolução da equação constitutiva, em cada ponto de Gauss, a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial. As rotinas de integração numérica estão contidas no módulo INTEGRA. A figura 12 ilustra a estrutura do programa desenvolvido.

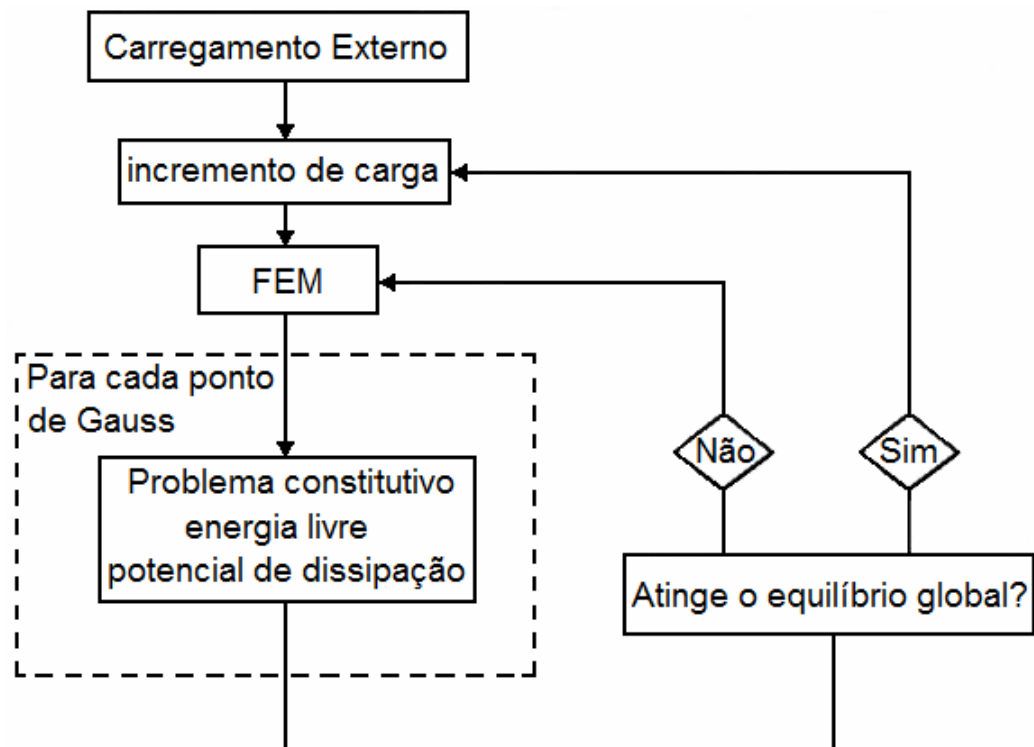


FIGURA 12 – ESTRUTURA DO PROGRAMA DESENVOLVIDO
FONTE: O autor (2009)

Inicialmente, o programa foi desenvolvido para resolver problemas de estado plano de tensões, de deformações e de sólidos axissimétricos, a extensão para análises tridimensionais poderá ser realizada com a implementação de elementos adequados.

5.2. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

A solução de um problema elástico plano é uma função que descreve os deslocamentos dos pontos do domínio. Essa função pertence a um espaço de dimensão infinita, podendo ser obtida a partir da combinação linear das infinitas funções que formam a base do espaço vetorial que faz parte.

O método de Galerkin propõe construir uma solução aproximada para o problema, tomando um número finito de funções que formam a base do espaço ao qual pertence a solução exata. Assim, a solução aproximada é formada a partir da combinação linear de um número finito de termos. Como Oden (1981) destacou, o método de Galerkin torna-se uma ferramenta útil a partir do momento em que se dispõe de uma técnica sistemática para a construção das funções que formam a base do espaço vetorial, denominadas funções base.

O Método dos Elementos Finitos é uma técnica que permite determinar as funções que formam a base do espaço vetorial aproximado. Segundo esse método, as funções base são construídas a partir de funções definidas em cada um dos elementos (subdomínios) no qual o domínio foi dividido. As funções definidas em cada elemento são denominadas funções de forma.

É possível definir um elemento máster com um sistema de coordenadas local com base no qual as funções de forma são definidas. A seguir, todos os cálculos do método são efetuados sobre esse elemento máster que se relaciona com os elementos da malha a partir de uma transformação (mudança de coordenadas). Por fim, as contribuições de cada elemento da malha são somadas com o intuito de se obter a solução aproximada do problema.

O problema de dano elástico pode ser definido para um elemento da malha Ω_e , pela seguinte equação:

$$\int_{\Omega_e} (B^i)^T (\sigma^i + \Delta\sigma^i) d\Omega = \int_{\Omega_e} (N^i)^T (b + \Delta b) d\Omega + \int_{\Gamma_q} (N^i)^T (t + \Delta t) d\Gamma \quad (5.1)$$

Na equação (5.1), $\Delta\sigma^i$ está relacionado com $\Delta\hat{U}^i$ pela relação constitutiva:

$$\Delta\sigma^i = \nabla_{\varepsilon} \bar{j} (B^i \Delta\hat{U}^i, \Delta\alpha_d) \quad (5.2)$$

O vetor local de incrementos de deslocamentos é formado a partir da combinação linear das funções de forma do elemento i , ou seja:

$$\Delta U^i(x, y) = [N^i(x, y)]^T \Delta \hat{U}^i(x, y) \quad (5.3)$$

$$(\Delta \hat{U}^i)^T = [U_{x1}^i \quad U_{y1}^i \quad U_{x2}^i \quad U_{y2}^i \quad \dots \quad U_{xn}^i \quad U_{yn}^i] \quad (5.4)$$

$$(N^i)^T = \begin{bmatrix} \Psi_1^i & 0 & \Psi_2^i & 0 & \dots & \Psi_n^i & 0 \\ 0 & \Psi_1^i & 0 & \Psi_2^i & \dots & 0 & \Psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\Delta U^i(x, y) = \begin{bmatrix} U_{x1}^i \Psi_1^i + U_{x2}^i \Psi_2^i + \dots + U_{xn}^i \Psi_n^i \\ U_{y1}^i \Psi_1^i + U_{y2}^i \Psi_2^i + \dots + U_{yn}^i \Psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Nas equações (5.3) a (5.6), Ψ representa as funções de forma, N^i representa a matriz contendo as funções de forma, $\Delta \hat{U}^i$ representa o vetor contendo as componentes x e y dos deslocamentos nodais e n representa o número de nós do elemento i .

A matriz B^i para campos de deslocamentos aproximados de deformação é dada por:

$$L \Delta U^i = L (N^i)^T \Delta \hat{U}^i = B^i \Delta \hat{U}^i \quad (5.7)$$

onde:

$$L = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

Finalmente, a equação de equilíbrio, fornecida pelo diferencial de $\bar{\Pi}(\Delta u)$ é dada por:

$$R(\Delta U) = (F_{\text{int}} + \Delta F_{\text{int}}) - (F_{\text{ext}} + \Delta F_{\text{ext}}) \quad (5.9)$$

Onde os termos F_{int} , ΔF_{int} , F_{ext} e ΔF_{ext} são obtidos a partir da soma das contribuições de todos os elementos:

$$F_{\text{int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \sigma^i d\Omega \quad (5.10)$$

$$\Delta F_{\text{int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \Delta \sigma^i d\Omega \quad (5.11)$$

$$F_{\text{ext}}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T b d\Omega + \int_{\Gamma_e} (N^i)^T t d\Gamma \quad (5.12)$$

$$\Delta F_{ext}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T \Delta b d\Omega + \int_{\Gamma_e} (N^i)^T \Delta t d\Gamma \quad (5.13)$$

5.2.1 Elemento de interface

O elemento aqui descrito foi inicialmente utilizado em problemas da mecânica dos solos, onde são comuns aproximações bidimensionais com o emprego das hipóteses simplificadoras do estado plano de deformações. Como os problemas axissimétricos são similares aos problemas de estado plano de deformações em coordenadas cilíndricas, o desenvolvimento utilizado por Desai et al. (1984) pode ser seguido sem maiores problemas.

Os autores partiram dessas hipóteses para chegar ao elemento de interface passando por um estado de transição. Esse estado de transição é caracterizado pela modificação do componente C_{1212} do estado plano de deformações. Essa alteração adveio de análises numéricas realizadas. Após esta primeira modificação, Desai e seus colaboradores, resolveram alguns problemas numéricos utilizando elementos isoparamétricos. Ao fim desse processo definiram as propriedades do elemento de interface propriamente dito. A esse estado de transição tem-se associado um elemento de transição, assim denominado o elemento que contém características do estado plano de deformações e da própria interface.

Para a análise do elemento de interface faz-se necessária a avaliação do comportamento do elemento em função da influência de sua espessura. Essa avaliação é realizada por intermédio de um elemento isoparamétrico de quatro nós $IQ4$, podendo ser estendida para o elemento com seis nós, empregado nesse trabalho para simular a região de interface.

A geometria do $IQ4$ é regular, sua altura tem dimensão h , comprimento b e sua matriz de rigidez foi calculada e integrada para uma dimensão unitária na direção X_3 , essa matriz de rigidez pode ser escrita como:

$$K_{IQ^4} = \begin{bmatrix} K_1 & K_3 & K_5 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & -K_3 & K_6 & -K_4 \\ K_3 & K_2 & -K_4 & K_7 & -K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_8 \\ K_5 & -K_4 & K_1 & -K_3 & K_6 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & K_3 \\ K_4 & K_7 & -K_3 & K_6 & -K_4 & K_8 & K_3 & \frac{-K_2}{2} \\ \frac{-K_1}{2} & -K_3 & K_6 & -K_4 & K_1 & K_3 & K_5 & K_4 \\ -K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_8 & K_3 & K_2 & -K_4 & K_7 \\ K_6 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & K_3 & K_5 & -K_4 & K_1 & -K_3 \\ -K_4 & K_8 & K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_7 & -K_3 & K_2 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

onde:

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{1}{3bh} (h^2 C_{1111} + b^2 C_{1212}) & K_2 &= \frac{1}{3bh} (h^2 C_{1212} + b^2 C_{2222}) \\ K_3 &= \frac{1}{4} (C_{1122} + C_{1212}) & K_4 &= \frac{1}{4} (C_{1122} - C_{1212}) \\ K_5 &= -\frac{1}{6bh} (2h^2 C_{1111} - b^2 C_{1212}) & K_6 &= \frac{1}{6bh} (h^2 C_{1111} - 2b^2 C_{1212}) \\ K_7 &= -\frac{1}{6bh} (2h^2 C_{1212} - b^2 C_{2222}) & K_8 &= \frac{1}{6bh} (h^2 C_{1212} - 2b^2 C_{2222}) \end{aligned} \quad (5.15)$$

e:

$$C = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & 0 \\ C_{1122} & C_{2222} & 0 \\ 0 & 0 & C_{1212} \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

Na equação (5.16), a matriz C representa a matriz constitutiva do estado plano de deformações de um elemento contido no plano OX_1X_2 .

Se for considerado que o comprimento b é muito menor que sua altura h , como pode ser observado na figura 13, as equações anteriores podem ser aproximadas como:

$$K_1 = \frac{h}{3b} C_{1111} \quad K_2 = \frac{h}{3b} C_{1212}$$

$$\begin{aligned}
 K_3 &= \frac{1}{4}(C_{1122} + C_{1212}) & K_4 &= \frac{1}{4}(C_{1122} - C_{1212}) \\
 K_5 &= -\frac{h}{3b}C_{1111} = -K_1 & K_6 &= \frac{1}{6bh}C_{1111} = \frac{K_1}{2} \\
 K_7 &= -\frac{h}{3b}C_{1212} = -K_2 & K_8 &= \frac{h}{6b}C_{1212} = \frac{K_2}{2}
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Observa-se que o termo C_{2222} está ausente na equação (5.17). Também se pode notar que a matriz de rigidez pode ser escrita apenas em função dos termos K_1 a K_4 , onde os coeficientes K_1 e K_2 são dependentes, e K_3 e K_4 independentes da relação $\frac{h}{b}$.

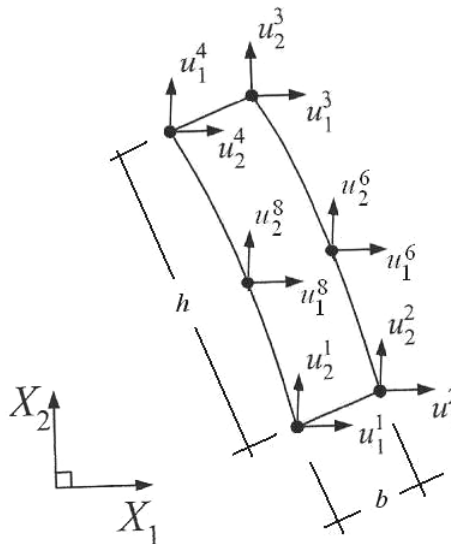


FIGURA 13 – ESBOÇO DO ELEMENTO DE INTERFACE
FONTE: O autor (2009)

A partir da constatação que o termo C_{2222} contribui muito pouco quando o comprimento do elemento tende a um valor muito baixo e o efeito da dilatação está presente é que Sharma & Desai (1992) propuseram que as propriedades da região sejam representadas por:

$$C_e^I = \begin{bmatrix} C_{1111} & 0 & C_{1112} \\ 0 & 0 & 0 \\ C_{1112} & 0 & C_{1212} \end{bmatrix} \tag{5.18}$$

Onde C_e^I é a matriz constitutiva elástica da interface, C_{1111} é a componente normal, C_{1212} é a componente cisalhante e C_{1112} a componente acoplada dos dois efeitos (normal e cisalhante). Porém, de acordo com os próprios autores, os efeitos

acoplados são difíceis de serem determinados por intermédio de testes, por isso neste trabalho, assim como em Lázaro (2004), foram negligenciados.

Como essa região de interface é fortemente influenciada pela presença dos materiais que estão em contato e sendo suas propriedades corretas difíceis de serem precisamente determinadas, Sharma e Desai (1992) propõem que a componente normal C_{1111} da região de interface seja uma função linear das propriedades dos materiais envolvidos e da própria interface, muitas vezes considerada com propriedades idênticas as de um dos dois materiais envolvidos. Dessa forma, a componente normal pode ser escrita como uma combinação linear das propriedades normais da interface C_{1111}^I e dos materiais envolvidos C_{1111}^a e C_{1111}^b , ou seja:

$$C_{1111} = \mathcal{G}_1 C_{1111}^I + \mathcal{G}_2 C_{1111}^a + \mathcal{G}_3 C_{1111}^b \quad (5.19)$$

onde os termos \mathcal{G}_i são pesos atribuídos a cada componente envolvido na estrutura.

A componente cisalhante C_{1212} , segundo Sharma e Desai (1992), pode ser obtida por ensaios de cisalhamento direto.

Sharma & Desai (1992) apresentam dois parâmetros adimensionais que devem ser satisfeitos concomitantemente para que o elemento de interface comporte-se de acordo com as aproximações e considerações feitas. Esses parâmetros foram retirados a partir da análise de vários conjuntos de simulações numéricas e ensaios laboratoriais e são utilizados como orientação para o emprego dos elementos de interface.

Um dos parâmetros é dado por:

$$\varphi = \frac{h}{b} \frac{(E_N G_N)^{\frac{1}{2}}}{(C_{1111} C_{1212})^{\frac{1}{2}}} \geq 10^4 \quad (5.20)$$

Onde E_N e G_N são, respectivamente, o módulo longitudinal e o módulo cisalhante dos materiais envolvidos. Uma adaptação é proposta para se determinar esses valores, posto que, existem materiais com módulos diferentes em contato com a interface. Essa adaptação consiste em empregar uma média aritmética para se encontrar os respectivos valores de E_N e G_N . Dessa forma eles podem ser obtidos a partir de:

$$E_N = \frac{E_a + E_b}{2} \quad (5.21)$$

$$G_N = \frac{G_a + G_b}{2} \quad (5.22)$$

onde E_i e G_i correspondem aos módulos dos materiais que estão diretamente em contato com a região de interface.

O outro parâmetro a ser respeitado, também obtido por Sharma & Desai (1992) através das análises numéricas e testes laboratoriais, corresponde à relação entre a altura e o comprimento do elemento de interface dado por:

$$\frac{b}{h} \leq 0,01 \quad (5.23)$$

Uma grande vantagem desse elemento fundamenta-se no desembaraço do emprego de sua formulação, posto que tanto a formulação do contínuo quanto do elemento de interface são realizadas através de elementos quadrilaterais planos. Dessa forma, torna-se fácil a implementação desse elemento em um programa computacional.

5.3. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EQUILÍBRIO

Esta seção descreve os procedimentos adotados para a solução do problema de equilíbrio. A forma variacional cinemática do problema de equilíbrio consiste em encontrar incrementos de deslocamentos cinematicamente admissíveis tais que a Equação (5.24) seja satisfeita:

$$\langle \sigma + \Delta\sigma, B(\Delta u^*) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta u^*), \forall \Delta u^* \in U \quad (5.24)$$

Na equação (5.24), $\Delta\sigma$ está relacionado com Δu através da equação constitutiva:

$$\Delta\sigma = \nabla_{\varepsilon} \bar{j}(B(\Delta u), \Delta\alpha_d) \quad (5.25)$$

Com o uso da propriedade de convexidade de $\bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d)$, chegou-se ao seguinte princípio de mínimo equivalente à forma variacional apresentada:

$$\inf_{\Delta u^* \in U} \bar{j}(B(\Delta u), \Delta\alpha_d) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle \quad (5.26)$$

Reconhece-se no princípio de mínimo apresentado, um problema de otimização. Nesse tipo de problema, pretende-se minimizar uma função objetivo

$f(x)$, onde $x \in \mathfrak{R}^n$. Os algoritmos de otimização que permitem resolver o problema descrito geram, a partir de um ponto inicial x_0 , uma seqüência de iterações $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ que termina quando não se pode fazer mais progresso ou quando se obteve um ponto suficientemente próximo da solução (Nocedal & Wright, 1999). Para gerar o próximo ponto da seqüência de iterações a partir de um ponto x_k , os algoritmos utilizam informações a respeito da função f em x_k e, possivelmente, informações das iterações anteriores x_0, x_1, \dots, x_{k-1} . Essas informações são utilizadas para encontrar um ponto x_{k+1} , no qual o valor da função f seja menor do que o valor de f em x_k .

Alguns métodos escolhem uma direção d_k e procuram ao longo dessa direção um novo ponto x_{k+1} , no qual o valor de f seja menor do que o valor de f em x_k . A iteração é dada por:

$$x_{k+1} = x_k + p_k d_k \quad (5.27)$$

O sucesso do método depende de escolhas eficientes da direção d_k e do tamanho do passo p_k .

A maioria dos métodos requer que d_k seja uma direção descendente, já que essa propriedade garante que o valor da função f diminua ao longo dessa direção. Assim, a direção d_k costuma ter a forma apresentada da seguinte forma:

$$d_k = -G_k^{-1} \nabla f_k \quad (5.28)$$

Na Equação (5.28), G_k é uma matriz simétrica não-singular. No método de Newton, G_k é o Hessiano $\nabla^2 f(x_k)$. Nos métodos de Quase-Newton, G_k é uma aproximação do Hessiano atualizada a cada iteração.

Fazendo $G_k^{-1} = H_k$, obtém-se:

$$d_k = -H_k \nabla f_k \quad (5.29)$$

$$x_{k+1} = x_k - p_k H_k \nabla f_k \quad (5.30)$$

Para o problema de equilíbrio em análise, a função objetivo f é dada por:

$$f = \bar{j}(B(\Delta u), \Delta \alpha_d) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle \quad (5.31)$$

No presente trabalho, a função objetivo será minimizada utilizando um Método de Quase-Newton. A aplicação desse método exige que se determine ∇f_k . Assim como nos trabalhos de Freitas (2008) e Hecke (1991) o funcional a ser minimizado é apenas uma vez diferenciável e a anulação de seu diferencial fornece a equação de equilíbrio. Por definição, um funcional $f : U \rightarrow \mathfrak{R}$ é dito diferenciável em $u \in U$, se existe um operador Df definido por:

$$Df(u)(v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[f(u + \theta v) - f(u)]}{\theta} \quad (5.32)$$

Se $U \subset \mathfrak{R}^n$, tem-se:

$$Df(u)(v) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial u_i} v_i = \nabla f \cdot v \quad (5.33)$$

Sendo a derivada de uma soma igual à soma das derivadas e aplicando as definições apresentadas em (5.32) e (5.33) a cada uma das parcelas do segundo membro da equação (5.31), tem-se:

$$\begin{aligned} D\bar{j}(B(\Delta u), \Delta \alpha_d)(B(\Delta v)) &= \nabla_{\varepsilon} \bar{j} \cdot B(\Delta v) = \int_{\Gamma} \nabla_{\varepsilon} \bar{j} \cdot D(\Delta v) d\Gamma \\ &= \langle \nabla_{\varepsilon} \bar{j}, B(\Delta v) \rangle = \langle \Delta \sigma, B(\Delta v) \rangle \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$DL_{t+\Delta t}(\Delta u)(\Delta v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[L_{t+\Delta t}(\Delta u + \theta \Delta v) - L_{t+\Delta t}(\Delta u)]}{\theta} = L_{t+\Delta t}(\Delta v) \quad (5.35)$$

$$D(\langle \sigma, B(\Delta u) \rangle)(\Delta v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[\langle \sigma, B(\Delta u + \theta \Delta v) \rangle - \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle]}{\theta} = \langle \sigma, B(\Delta v) \rangle \quad (5.36)$$

Dessa forma, a anulação do diferencial do funcional a ser minimizado fornece a equação de equilíbrio:

$$\langle \Delta \sigma, B(\Delta v) \rangle + \langle \sigma, B(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t} = 0 \quad (5.37)$$

$$R = \langle \sigma_{t+\Delta t}, B(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t}(\Delta v) = 0 \quad (5.38)$$

$$\langle \sigma_{t+\Delta t}, B(\Delta v) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta v) \quad (5.39)$$

A função R , dada pela diferença entre as forças internas e as forças externas, é denominada resíduo e corresponde ao diferencial do funcional que se pretende minimizar. Assim, para o problema em análise a equação (5.30) assume a forma:

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k - d_k H_k R(\Delta U_k) \quad (5.40)$$

Nesse trabalho, a atualização de H_k foi realizada a partir do método BFGS. A teoria envolvida na derivação do método pode ser encontrada em Nocedal & Wright (1999). A fórmula de atualização de H_k proposta pelo método é descrita da seguinte forma:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{s_k \otimes s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{(H_k \cdot y_k) \otimes (H_k \cdot y_k)}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} + (y_k \cdot H_k \cdot y_k) \varpi \otimes \varpi \quad (5.41)$$

onde

$$y_k = R(\Delta U_{k+1}) - R(\Delta U_k) \quad (5.42)$$

$$s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k \quad (5.43)$$

$$\varpi = \frac{s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{H_k \cdot y_k}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} \quad (5.44)$$

A adoção de uma aproximação da matriz inversa do Hessiano possui uma vantagem, além do fato de não ser necessário determinar as derivadas segundas da função objetivo. Sabe-se que o Hessiano deve ser uma matriz positivo-definida. Segundo Press et al (1992), em geral, longe do mínimo, não há garantia de que o Hessiano seja positivo definido, de forma que incrementos de deslocamento na direção calculada pelo Método de Newton utilizando o Hessiano podem levar a pontos onde o valor da função está aumentando. A estratégia do método de Quase-Newton consiste em adotar uma matriz simétrica, positivo-definida como aproximação inicial do Hessiano e construir as demais aproximações H_k de forma que essa matriz permaneça simétrica e positivo-definida. Longe do mínimo, esse procedimento assegura que os incrementos de deslocamento ocorram ao longo da direção de decréscimo da função objetivo. Próximo ao mínimo, a fórmula de atualização de H_k aproxima-se do Hessiano, obtendo-se a convergência quadrática do Método de Newton.

Ainda segundo Press et al. (1992), quando não se está suficientemente próximo do mínimo, acrescentar ao deslocamento inicial todo o incremento calculado, $-H_k \nabla f_k$, pode não levar a um decréscimo da função objetivo, mesmo que a aproximação do Hessiano seja uma matriz positivo-definida. O único aspecto que se pode garantir é que inicialmente a função objetivo decresce na direção do incremento calculado. No entanto, após um decréscimo inicial, a função pode passar a crescer. Por essa razão, adotam-se métodos de cálculo de passo como, por

exemplo, o método secante para calcular o tamanho do passo a ser dado na direção determinada. Descrições do Método Secante podem ser encontradas em Press et al. (1992) e Akay (1994).

Nos quadros 2 e 3, são apresentados os algoritmos utilizados para resolver o problema de equilíbrio. Esses algoritmos podem ser encontrados em Freitas (2008) e Press et al. (1992).

```

Determinar  $\Delta U_1$ 
Determinar  $H_1$  (em geral,  $H_1 = I$ )
Determinar  $\nabla f_1 = R(\Delta U_1)$ 
Determinar  $d_1 = -R(\Delta U_1)$ 
Fazer para  $k = 1, ITMAX$  (número máximo de iterações admitido)
    Determinar  $p_k$ , tal que  $d_k [R(\Delta U_k + p_k d_k)] \leq TOL \{d_k [R(\Delta U_k)]\}$ 
     $TOL$  é um valor de tolerância.
    Fazer  $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$ 
    Fazer  $s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k$ 
    Calcular  $R(\Delta U_{k+1})$ 
     $TEST = 0.0$ 
     $TEMP = 0.0$ 
    Fazer  $TEST = (\Delta U_k) \cdot R(\Delta U_k)$ 
    Fazer  $TEMP = (\Delta U_{k+1}) \cdot R(\Delta U_{k+1})$ 
    Se  $|TEMP| \leq GTOL |TEST|$ , finalizar a rotina, critério de convergência satisfeito
    Fazer  $y_k = R(\Delta U_{k+1}) - R(\Delta U_k)$ 
    Fazer  $hy_k = H_k \cdot y_k$ 
    Fazer  $fac = y_k \cdot s_k$ 
    Fazer  $fae = y_k \cdot hy_k$ 
    Fazer  $sumy = y_k \cdot y_k$ 
    Fazer  $sums = s_k \cdot s_k$ 

```

Se fac menor que $\sqrt{EPS.sumy.sums}$, fazer

$$fac = \frac{1.0}{fac}$$

$$fad = \frac{1.0}{fae}$$

$$y_k = fac.s_k - fad.hy_k$$

$$H_{k+1} = fac.s_k.s_k - fad.hy_k.hy_k + fae.y_k.y_k$$

Fim

Fazer $d_{k+1} = -H_{k+1}.R(\Delta U_{k+1})$

Fim

QUADRO 2 – ALGORITMO DO MÉTODO QUASE-NEWTON COM EQUAÇÃO DE ATUALIZAÇÃO BFGS
 FONTE: FREITAS (2008)

Fazer $p_1 = 0$

Fazer $p_2 = 1$

Fazer $p_k = 1$

Fazer $MAXIT$ = número máximo de iterações permitido

Fazer $TOLX$ = tolerância

Fazer $C_1 = d_k R(\Delta U_k)$

Fazer $TOL = C_1$

Fazer $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$

Calcular $R(\Delta U_{k+1})$

Fazer $C_2 = d_k R(\Delta U_{k+1})$

Se $|C_1| < |C_2|$, fazer

$$p_k = p_1$$

$$p_L = p_2$$

$$SWAP = C_1$$

$$C_1 = C_2$$

$$C_2 = SWAP$$

Se não

$$p_L = p_1$$

$$p_k = p_2$$

Fim

Fazer $j = 1, MAXIT$

$$\delta p = \frac{(p_L - p_k)C_2}{(C_2 - C_1)}$$

$$p_L = p_k$$

$$C_1 = C_2$$

$$p_k = p_k + \delta p$$

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$$

Calcular $R(\Delta U_{k+1})$

$$C_2 = d_k \cdot R(\Delta U_{k+1})$$

Se $|\delta p| < TOLX$ ou $|C_2| < |TOL|$ finalizar a rotina, critério de convergência satisfeito.

Fim

QUADRO 3 – MÉTODO SECANTE UTILIZADO PARA DETERMINAR O TAMANHO DO PASSO p_k

FONTE: FREITAS (2008)

5.4. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO CONSTITUTIVA

Nessa seção, é apresentado o algoritmo que pode ser utilizado para resolver a equação constitutiva do processo de danificação. Por meio da equação constitutiva, $\Delta \alpha_d$ está relacionado com $\Delta \sigma$ e ΔA^d , conforme:

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (5.45)$$

onde:

$$\begin{aligned} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) = & \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \Delta \sigma \cdot \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) - \\ & - \Delta A^d \cdot \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) - \psi_C(\sigma, A^d) \end{aligned} \quad (5.46)$$

Conforme se pode observar nas equações (5.45) e (5.46), pretende-se encontrar os incrementos da variável interna, $\Delta\alpha_d$, relacionados com os incrementos de tensões e forças termodinâmicas $(\Delta\sigma, \Delta A^d)$.

A condição necessária e suficiente para que o vetor $\Delta\alpha_d$ seja solução do problema proposta nas equações (5.45) e (5.46) é:

$$(\Delta\alpha_d) \in \partial Ind_P(A^d + \Delta A^d) \quad (5.47)$$

Uma vez que a região P das forças termodinâmicas é definida através de uma única função de danificação, o problema de programação matemática obtido é resolvido de forma simples. Sendo conhecido o estado atual de forças termodinâmicas admissíveis A^d e dado um incremento $\Delta\varepsilon$, se:

$$f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) \leq 0 \quad (5.48)$$

não ocorre a danificação e:

$$\Delta\lambda = 0 \quad (5.49)$$

Logo:

$$\Delta\sigma = \overline{ID}(1 - \alpha_d)\Delta\varepsilon \quad (5.50)$$

$$\Delta\alpha_d = 0 \quad (5.51)$$

A situação em que ocorre a danificação, identificada através de:

$$f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) > 0 \quad (5.52)$$

recai em um problema de encontrar a menor raiz positiva da equação:

$$f(\Delta\lambda) = 0 \quad (5.53)$$

O método de Newton-Raphson pode ser utilizado para resolver o problema. No quadro 4, apresenta-se o algoritmo empregado na solução de problemas envolvendo materiais que podem sofrer o processo de danificação e critério de escoamento definido por uma única função.

$$\text{Calcular } A_{t+\Delta t}^d = A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon$$

$$\text{Calcular } f(A_{t+\Delta t}^d, \alpha_d)$$

$$\text{Calcular } \nabla_{A^d} f(A_{t+\Delta t}^d, \alpha_d)$$

Se $f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) > 0$

$$k = 0, \Delta\lambda^k = 0$$

Enquanto $\frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)} > e$

$$\Delta\lambda^{k+1} = \Delta\lambda^k - \frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)}$$

$$k = k + 1$$

Calcular $\alpha_d(\Delta\lambda^k)$

Calcular $f(\Delta\lambda^k)$

Calcular $\nabla f(\Delta\lambda^k)$

Fim

Fim

Fim

QUADRO 4 – ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON PARA PROBLEMAS ENVOLVENDO MATERIAIS COM CRITÉRIO DE DANIFICAÇÃO
FONTE: O autor (2009)

5.3.1 Aplicação do algoritmo de Newton Raphson para o modelo de dano

Nesta seção o modelo de dano é escrito de forma a ser implementado no algoritmo de Newton-Raphson. Uma vez estabelecido o incremento $\Delta\varepsilon$ a região admissível é representada por:

$$f(\Delta\lambda) = A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon - A_0^d - \frac{1}{C1} \left[\frac{\alpha_d + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_d + \Delta\lambda)} \right]^{C2} \quad (5.54)$$

A variável interna de dano poderá ser obtida através da equação:

$$\Delta\alpha_d = \nabla_{A^d} f(A^d + \Delta A^d) \Delta\lambda \quad (5.55)$$

Note que como a variável de dano possui natureza escalar sua evolução se dará seguindo a direção da reta que delimita seu domínio, assim:

$$\nabla_{A^d} f(A^d + \Delta A^d) = 1 \quad (5.56)$$

$$\Delta\alpha_d = \Delta\lambda \quad (5.57)$$

Logo:

$$(\alpha_d)_{t+\Delta t} = \alpha_d + \Delta\lambda \quad (5.58)$$

As equações (5.54), (5.56), e (5.58) são aplicadas diretamente no algoritmo utilizado neste trabalho, para simular o processo de danificação com critério de danificação definido por uma única função.

6. EXEMPLOS

Existem diversos problemas em engenharia que, apesar de sua natureza física e geométrica diferentes, recaem em problemas matemáticos semelhantes durante sua resolução.

Pretende-se, neste capítulo, exemplificar a teoria proposta anteriormente através de aplicações. Além da modelagem matemática, o intuito é também exemplificar o procedimento necessário quando da resolução de problemas práticos.

Inicialmente são apresentadas duas aplicações a modelos unidimensionais. Entende-se por modelos unidimensionais aqueles nos quais o domínio elástico no espaço das tensões é unidimensional, isto é, o valor de apenas uma das componentes de tensões não é nulo, continuando assim em todo o processo. O objetivo dessas aplicações é explicar de maneira simples o procedimento proposto.

A seguir são apresentados os resultados de duas simulações de tensões e deformações em modelos bidimensionais realizadas utilizando o programa desenvolvido no presente trabalho. A primeira simulação objetivou reproduzir um ensaio de tração realizado em um cimento odontológico. A segunda simulação teve por objetivo reproduzir ensaio realizado em um disco de dentina após ter sido tratado endodonticamente. Nessas simulações os efeitos térmicos foram desprezados, a hipótese de pequenas deformações foi adotada e admitiu-se que a deformação resultante de uma história de tensões não depende da velocidade com que o programa de carga se realiza.

6.1. EXEMPLO 1

Este exemplo apresenta uma barra, composta de um material elástico com a possibilidade de sofrer o processo de danificação, sujeita a um carregamento axial. Além de mostrar a modelagem do material, o intuito é exemplificar o procedimento necessário quando da solução de problemas práticos. Também procura-se esclarecer alguns pontos como a escolha do potencial termodinâmico, dos parâmetros de dano, da representação da região P das forças termodinâmicas admissíveis.

A figura 14 mostra a curva tensão-deformação para esse modelo devido a um programa de carga 0-1-2 e a região P .

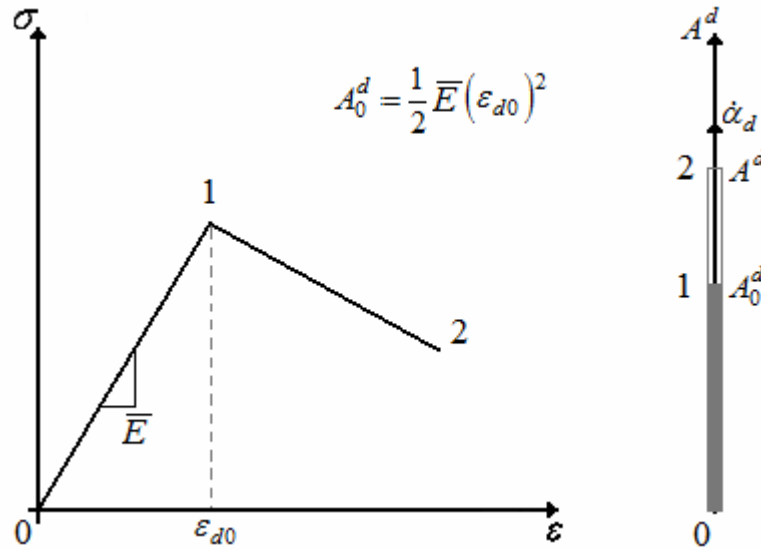


FIGURA 14 – PROGRAMA DE CARGA E REGIÃO ADMISSÍVEL
FONTE: O autor (2009)

Para a energia livre propõe-se a seguinte função quadrática:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} E (1 - \alpha_d) \varepsilon^2 \quad (5.1)$$

Onde E é o módulo de elasticidade, α_d é a variável interna relativa ao dano e ε é a deformação total. O potencial termodinâmico complementar tem a forma:

$$\psi_c(\sigma, A^d) = \begin{cases} \frac{1}{2E} \sigma^2 & \text{se } A^d < A_0^d \\ \frac{1}{2E} \left[1 + C1(A^d - A_0^d)^{C2} \right] \sigma^2 & \text{se } A^d > A_0^d \end{cases} \quad (5.2)$$

onde σ é a tensão, A^d é a força termodinâmica relativa ao dano, A_0^d é a força termodinâmica onde se inicia o processo de danificação.

A seguir define-se a função de danificação:

$$f(A^d) = A^d - A_0^d - \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{C2}} \quad (5.3)$$

Dessa forma a região P , das forças termodinamicamente admissíveis, será:

$$P = \left\{ A^d \mid A^d - A_0^d - \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{C2}} \leq 0 \right\} \quad (5.4)$$

A lei da normalidade, representada pela expressão (3.40), pode então ser escrita como:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \cdot \nabla_{A^d} f(A^d) = \lambda \quad (5.5)$$

onde $\dot{\alpha}_d$ é a taxa de variação da variável interna relativa ao dano, $\nabla_{A^d} f(A^d)$ representa o gradiente da função de danificação e λ é o multiplicador de Lagrange associado à função de danificação. Note-se que o multiplicador é dependente do processo e não do material.

Como α_d é proporcional a normal externa a f no ponto A^d , tem-se:

$$\lambda \geq 0 \quad (5.6)$$

A condição de consistência, apresentada na equação (3.70), particularizada para essa situação é descrita como:

$$\dot{\alpha}_d \cdot \dot{A}^d = \lambda \cdot \dot{A}^d = 0 \quad (5.7)$$

Dessa relação serão definidas as taxas de evolução das forças termodinâmicas A^d de forma consistente.

Para esse caso, a variável interna relativa ao dano α_d resulta indeterminada, pois, para uma mesma variação das forças termodinâmicas, inúmeras taxas de variação da variável interna relativa ao dano atendem a condição de consistência. A figura 15 ilustra algumas dessas possibilidades.

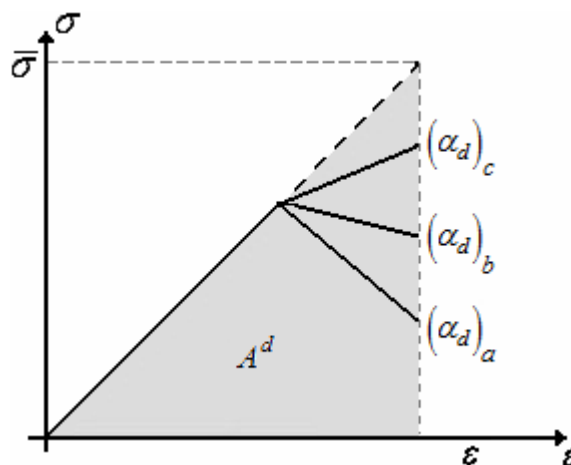


FIGURA 15 – POSSIBILIDADES QUE ATENDEM A CONDIÇÃO DE CONSISTÊNCIA

FONTE: O autor (2009)

6.2. EXEMPLO 2

Esse exemplo apresenta cinco barras, compostas de um material elástico com a possibilidade de sofrer o processo de danificação, que estão sujeitas a um carregamento axial. Recai-se na solução do seguinte problema: resolver um sistema composto por equações (equilíbrio, complementaridade linear entre a função de danificação e parâmetros de dano) e inequações (admissibilidade, positividade dos parâmetros de dano, indicando que as taxas desses parâmetros coincidem com a normal externa à região das forças termodinâmicas admissíveis).

Como será mostrado a seguir, a resolução de tais sistemas de equações e inequações é equivalente a encontrar a solução de um problema de programação matemática não linear ou otimização não linear (encontrar extremos de uma função ou funcional cujas variáveis estão restritas a certo domínio). Estas equações e inequações constituem-se nas condições de otimalidade ou de Kuhn-Tucker de tal problema de maximização ou minimização.

Cinco barras, como na figura 16 estão conectadas na extremidade "B" por um bloco rígido e sujeitas a uma carga axial seguindo um programa de cargas que está esquematizado na figura 17.

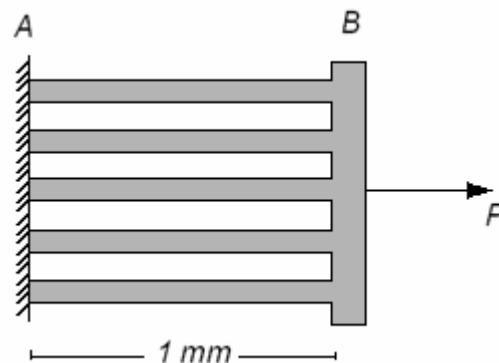


FIGURA 16 – ESTRUTURA PROPOSTA
FONTE: O autor (2009)

Suponha que as barras têm comprimento $L = 1 \text{ mm}$, que as áreas das seções transversais (A_1, A_2, A_3, A_4 e A_5) são iguais a 1 mm^2 , que são compostas de materiais com módulo de elasticidade ($\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{E}_3, \bar{E}_4$ e \bar{E}_5) iguais a 1 MPa , e a deformação onde se inicia a danificação do material, ε_{d01} , para as barras 1, 2, 4 e 5 é igual a $0,05 \text{ mm}$, e para a barra 3, ε_{d03} é igual a $0,01 \text{ mm}$. Além disso, as constantes $C1$ e $C2$ recebem, respectivamente, os valores 10000 e 2.

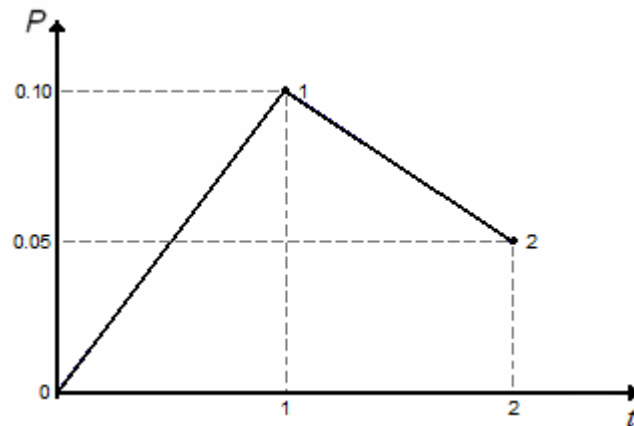


FIGURA 17 – PROGRAMA DE CARGA
FONTE: O autor (2009)

As variáveis cinemáticas para esse problema são: os deslocamentos, as deformações, as taxas de deslocamentos e a relação entre as taxas de deformações e as taxas de deslocamentos.

As deformações, ou alongamentos, podem ser calculados através de:

$$\varepsilon_{x1} = \varepsilon_{x2} = \varepsilon_{x3} = \varepsilon_{x4} = \varepsilon_{x5} = \frac{\Delta L}{L} = \frac{1}{L} u_B \quad (5.8)$$

A relação entre as taxas de deformações e as taxas de deslocamentos é obtida através de B :

$$B = \frac{1}{L} [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T \quad (5.9)$$

No quadro 4 são apresentadas as variáveis cinemáticas.

VARIÁVEL	REPRESENTAÇÃO
Deslocamentos	$u = [u_B]$
Deformações	$\varepsilon = [\varepsilon_{x1} \ \varepsilon_{x2} \ \varepsilon_{x3} \ \varepsilon_{x4} \ \varepsilon_{x5}]^T$
Taxas de deslocamentos	$v = \dot{u} = [\dot{u}_B]$
Taxas de deformações	$\dot{\varepsilon} = [\dot{\varepsilon}_{x1} \ \dot{\varepsilon}_{x2} \ \dot{\varepsilon}_{x3} \ \dot{\varepsilon}_{x4} \ \dot{\varepsilon}_{x5}]^T$
Relação entre taxas de deformações e as taxas de deslocamentos	$\dot{\varepsilon} = B\dot{u}$

QUADRO 5 – VARIÁVEIS CINEMÁTICAS
FONTE: O autor (2009)

As variáveis estáticas para esse problema são: as cargas aplicadas, os esforços internos, as taxas de cargas aplicadas, as taxas de esforços internos, o equilíbrio, a energia livre de Helmholtz e as forças termodinâmicas.

Os esforços internos são as forças normais N_x nas barras e são calculadas na barra i por:

$$N_{xi} = \int_{A_i} \sigma_{xi} dA \quad (5.10)$$

Sendo P a carga aplicada, o equilíbrio é dado por:

$$N_{x1} + N_{x2} + N_{x3} + N_{x4} + N_{x5} = P \quad (5.11)$$

O quadro 5 resume as variáveis estáticas.

VARIÁVEL	REPRESENTAÇÃO
Cargas aplicadas	$F_{ext} = [P]$
Esforços internos	$F_{int} = [N_{x1} \quad N_{x2} \quad N_{x3} \quad N_{x4} \quad N_{x5}]^T$
Taxas de cargas aplicadas	$\dot{F}_{ext} = [\dot{P}]$
Taxas de esforços internos	$\dot{F}_{int} = [\dot{N}_{x1} \quad \dot{N}_{x2} \quad \dot{N}_{x3} \quad \dot{N}_{x4} \quad \dot{N}_{x5}]^T$
Equilíbrio	$B^T \dot{F}_{int} = \dot{F}_{ext}$
Energia livre de Helmholtz	$\psi_{xi}(\varepsilon_{xi}, \alpha_{di}) = \frac{1}{2} \bar{E} (1 - \alpha_{di}) \varepsilon_{xi} \cdot \varepsilon_{xi}$
Força termodinâmica	$A_i^d = -\frac{\partial \psi_{xi}(\varepsilon_{xi}, \alpha_{di})}{\partial \alpha_{di}} = \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{xi} \cdot \varepsilon_{xi}$

QUADRO 5 – VARIÁVEIS ESTÁTICAS

FONTE: O autor (2009)

A relação constitutiva será então escrita da seguinte forma:

$$\varepsilon_{xi} = \frac{1}{\bar{E}} \bar{\sigma}_{xi} \quad \therefore \quad \bar{\sigma}_{xi} = \varepsilon_{xi} \bar{E} \quad (5.12)$$

onde:

$$\bar{\sigma}_{xi} = \frac{\sigma_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.13)$$

Em termos de variáveis generalizadas, a segunda relação (5.12) fica:

$$\bar{N}_{xi} = \bar{E}A_i \varepsilon_{xi} \quad (5.14)$$

e conseqüentemente:

$$\bar{N}_{xi} = \frac{N_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.15)$$

Reescrevendo a equação (5.14) em termos de taxas:

$$\dot{\bar{N}}_{xi} = \bar{E}A_i \dot{\varepsilon}_{xi} \quad (5.16)$$

da mesma forma a relação (5.15) é reescrita:

$$\dot{\bar{N}}_{xi} = \frac{\dot{N}_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.17)$$

resultando matricialmente em:

$$\begin{bmatrix} \dot{\bar{N}}_{x1} \\ \dot{\bar{N}}_{x2} \\ \dot{\bar{N}}_{x3} \\ \dot{\bar{N}}_{x4} \\ \dot{\bar{N}}_{x5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{E}A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{E}A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{E}A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{E}A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{E}A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_{x1} \\ \dot{\varepsilon}_{x2} \\ \dot{\varepsilon}_{x3} \\ \dot{\varepsilon}_{x4} \\ \dot{\varepsilon}_{x5} \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

ou ainda:

$$\dot{\bar{F}}_{\text{int}} = \bar{I}\bar{D}\dot{\varepsilon} \quad (5.19)$$

onde:

$$\bar{I}\bar{D} = \begin{bmatrix} \bar{E}A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{E}A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{E}A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{E}A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{E}A \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

Dessa forma:

$$\dot{\bar{F}}_{\text{int}} = \bar{I}\bar{D}S\dot{\varepsilon} \quad (5.21)$$

onde:

$$S = \begin{bmatrix} (1 - \alpha_{d1}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - \alpha_{d2}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \alpha_{d3}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - \alpha_{d4}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1 - \alpha_{d5}) \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

O critério de dano, proposto por Tao & Phillips (2005), é dado por:

$$f(A_i^d) = A_i^d - A_0^d - \frac{1}{10000} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{2}} \leq 0 \quad (5.23)$$

O critério de evolução da variável interna relativa ao dano é representado por:

$$\dot{\alpha}_{di} = \nabla_{A_i^d} f \cdot \lambda \therefore \dot{\alpha}_{di} = \lambda \quad (5.24)$$

onde λ é obtido de:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A_i^d) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A_i^d) = 0 \quad (5.25)$$

Além disso, se a componente $f_j = 0$:

$$\lambda_j \geq 0 \quad \dot{f}_j(A_i^d) \leq 0 \quad \lambda_j \cdot \dot{f}_j(A_i^d) \leq 0 \quad (5.26)$$

Para a solução supõe-se que o estado do corpo para um determinado instante de tempo t é conhecido, isto é, são conhecidos os campos de deslocamentos u_t , das deformações ε_t , da variável interna relativa ao dano $(\alpha_d)_t$, da energia livre de Helmholtz ψ_t , das forças termodinâmicas A_i^d e dos esforços internos generalizados $(F_{\text{int}})_t$. Sendo dado um incremento de carga ΔF_{ext} , pretende-se obter o estado do corpo em $t + \Delta t$, ou seja, com os valores de Δu , $\Delta \varepsilon$, $\Delta \alpha_d$ e ΔF_{int} correspondentes, serão obtidos os seguintes valores:

$$u_{t+\Delta t} = u_t + \Delta u, \quad \varepsilon_{t+\Delta t} = \varepsilon_t + \Delta \varepsilon, \quad (\alpha_d)_{t+\Delta t} = (\alpha_d)_t + \Delta \alpha_d \quad \text{e} \quad (5.27)$$

$$(F_{\text{int}})_{t+\Delta t} = (F_{\text{int}})_t + \Delta F_{\text{int}}$$

Utilizando uma aproximação de Euler da forma:

$$\dot{u} = \frac{\Delta u}{\Delta t}, \quad \dot{\varepsilon} = \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta t}, \quad \dot{\lambda} = \frac{\Delta \lambda}{\Delta t} \quad \text{e} \quad \dot{F}_{\text{int}} = \frac{\Delta F_{\text{int}}}{\Delta t} \quad (5.28)$$

e substituindo de forma adequada nas relações anteriormente descritas, será obtido o seguinte problema a ser resolvido:

$$\Delta \varepsilon = B \Delta u$$

$$\Delta \bar{F}_{\text{int}} = \bar{I} \bar{D} \Delta \varepsilon \quad \Delta F_{\text{int}} = \Delta \bar{F}_{\text{int}} S \quad (5.29)$$

$$\Delta \lambda \geq 0 \quad f(A_i^d)_t \leq 0 \quad \Delta \lambda \cdot f(A_i^d)_t = 0$$

podendo ser reescrito como:

$$(B^T \bar{I} \bar{D} B \Delta u) \cdot S = \Delta F_{\text{ext}} \quad (5.30)$$

$$\Delta\lambda \geq 0 \quad f(A_t^d)_t \leq 0 \quad \Delta\lambda \cdot f(A_t^d)_t = 0$$

Porém, quando o problema dado por (5.30) for solucionado, não necessariamente a força termodinâmica final $A_{t+\Delta t}^d$ será admissível. Para resolver esse inconveniente, neste momento, será substituído A_t^d por $A_{t+\Delta t}^d$ nas expressões (5.30), resultando finalmente em:

$$\begin{aligned} (B^T \bar{I} \bar{D} B \Delta u) \cdot S &= \Delta F_{ext} \\ \Delta\lambda &\geq 0 \\ \frac{1}{2} \bar{E} B_i(u_i)_{t+\Delta t} \cdot B_i(u_i)_{t+\Delta t} - \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} - \frac{1}{10000} \left[\frac{(\alpha_{di})_t + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_{di})_t - \Delta\lambda} \right]^{\frac{1}{2}} &\leq 0 \quad (5.31) \\ \Delta\lambda \cdot \left(\frac{1}{2} \bar{E} B_i(u_i)_{t+\Delta t} \cdot B_i(u_i)_{t+\Delta t} - \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} - \frac{1}{10000} \left[\frac{(\alpha_{di})_t + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_{di})_t - \Delta\lambda} \right]^{\frac{1}{2}} \right) &= 0 \end{aligned}$$

Utilizando os valores numéricos propostos anteriormente, o sistema (5.31) fornece a solução para cada trecho.

a) Primeiro passo de carga:

$$\begin{aligned} (N_{x1})_{t=0} = (N_{x2})_{t=0} = (N_{x3})_{t=0} = (N_{x4})_{t=0} = (N_{x5})_{t=0} &= 0 \\ \Delta F_{ext}^1 &= 0,1 \end{aligned} \quad (5.32)$$

A solução do sistema (5.31) fornece:

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0,024 \\ \Delta\lambda_1 = \Delta\lambda_2 = \Delta\lambda_4 = \Delta\lambda_5 &= 0 \\ \Delta\lambda_3 &= 0,82 \\ \Delta N_{x1} = \Delta N_{x2} = \Delta N_{x4} = \Delta N_{x5} &= 0,024 \\ \Delta N_{x3} &= 0,004 \end{aligned} \quad (5.33)$$

nesse caso:

$$\begin{aligned} (u)_{t=1} &= 0,024 \\ (\alpha_{d1})_{t=1} = (\alpha_{d2})_{t=1} = (\alpha_{d4})_{t=1} = (\alpha_{d5})_{t=1} &= 0 \\ (\alpha_{d3})_{t=1} &= 0,82 \\ (N_{x1})_{t=1} = (N_{x2})_{t=1} = (N_{x4})_{t=1} = (N_{x5})_{t=1} &= 0,024 \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004$$

Observa-se que ocorreu a perda de rigidez na barra 3, enquanto as outras barras permaneceram intactas. Da análise da figura 18, onde é mostrada a evolução da relação “força x deslocamento”, observa-se que a barra 3 efetuou no passo 1, um trecho elástico e um trecho onde ocorreu a danificação.

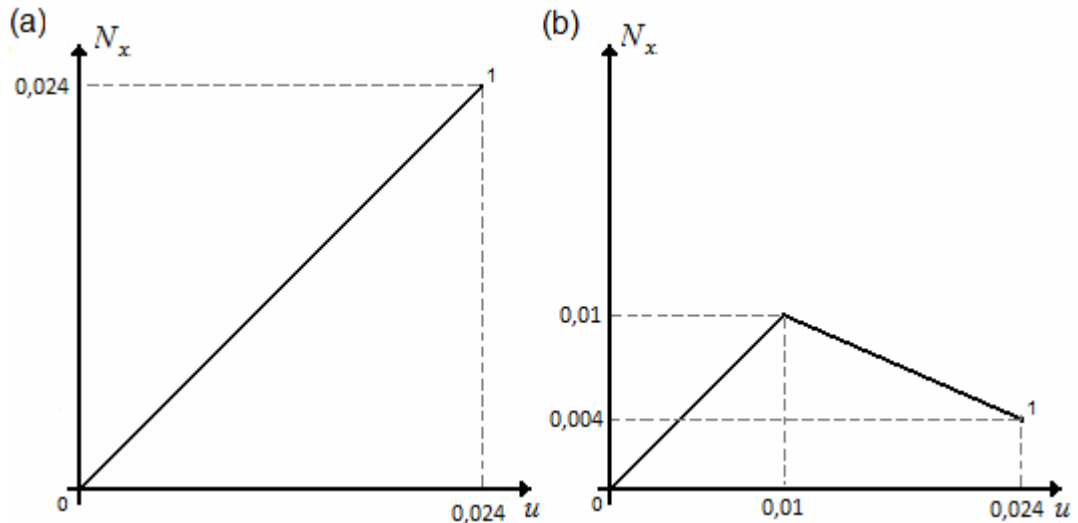


FIGURA 18 – RELAÇÃO “FORÇA X DESLOCAMENTO” APÓS O PRIMEIRO PASSO DE GARGA (a) NAS BARRAS 1, 2, 4 E 5 E (b) NA BARRA 3

FONTE: O autor (2009)

b) Segundo passo de cargas:

$$(N_{x1})_{t=1} = (N_{x2})_{t=1} = (N_{x4})_{t=1} = (N_{x5})_{t=1} = 0,024$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004 \quad (5.35)$$

$$\Delta F_{ext}^2 = -0,05$$

A solução do sistema (5.31) nos fornece:

$$\Delta u = -0,012$$

$$\Delta \lambda_1 = \Delta \lambda_2 = \Delta \lambda_3 = \Delta \lambda_4 = \Delta \lambda_5 = 0$$

$$\Delta N_{x1} = \Delta N_{x2} = \Delta N_{x4} = \Delta N_{x5} = -0,012 \quad (5.36)$$

$$\Delta N_{x3} = -0,002$$

nesse caso:

$$(u)_{t=2} = 0,024 - 0,012 = 0,012$$

$$(\alpha_{d1})_{t=2} = (\alpha_{d2})_{t=2} = (\alpha_{d4})_{t=2} = (\alpha_{d5})_{t=2} = 0 + 0 = 0 \quad (5.37)$$

$$(\alpha_{d3})_{t=2} = 0,82 + 0 = 0,82$$

$$(N_{x1})_{t=2} = (N_{x2})_{t=2} = (N_{x4})_{t=2} = (N_{x5})_{t=2} = 0,24 - 0,012 = 0,012$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004 - 0,002 = 0,002$$

É preciso salientar que, se o trecho 0-2 tivesse sido feito em apenas um passo de carga não seria possível detectar o processo de danificação. A figura 19 ilustra a relação “força x deslocamento” após o segundo passo de carga.

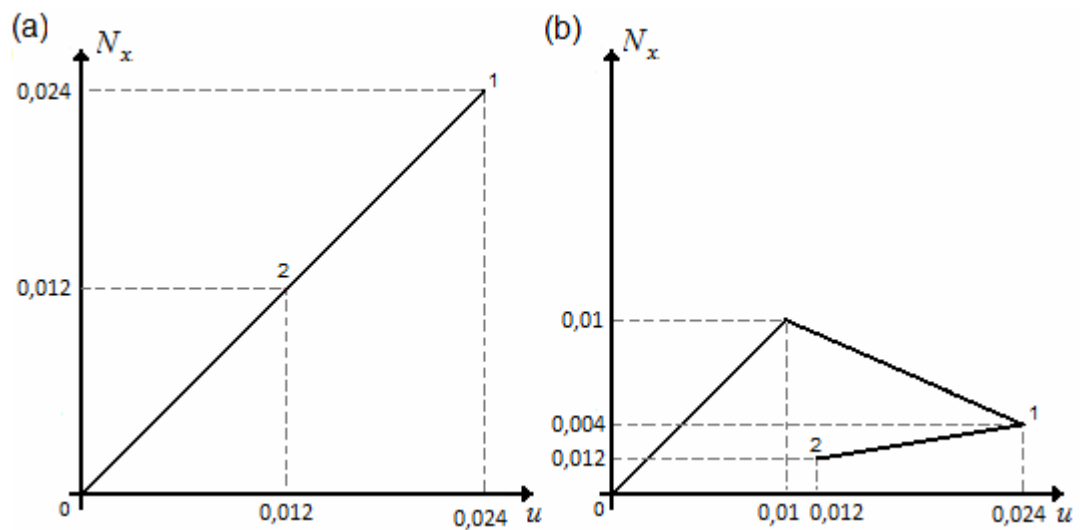


FIGURA 19 – RELAÇÃO “FORÇA X DESLOCAMENTO” APÓS O SEGUNDO PASSO DE CARGA (a) NAS BARRAS 1, 2, 4 E 5 E (b) NA BARRA 3

FONTE: O autor (2009)

6.3. EXEMPLO 3

Este exemplo tem como objetivo validar a metodologia proposta, bem como, “calibrar” as constantes $C1$ e $C2$ do modelo de dano comparando o resultado da simulação computacional com o resultado de um ensaio experimental de tração em um cimento resinoso realizado por Franco (2008).

Para os ensaios experimentais foram confeccionados cinco corpos-de-prova de cimento Cement-Post (Angelus®), com o formato de ampulheta de dimensões: comprimento total 77,00 mm; comprimento da porção central 14,00 mm; largura das extremidades da ampulheta de 6,00 mm; largura do centro da ampulheta de 2,00 mm. A figura 20 ilustra o corpo de prova.

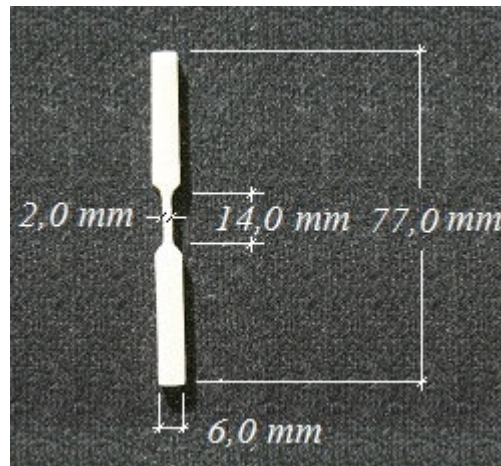


FIGURA 20 – CORPO DE PROVA ENSAIO DE TRAÇÃO
 FONTE: Franco (2008)

O comportamento constitutivo desse cimento foi simulado através do modelo de dano de Tao & Phillips (2005). O módulo de elasticidade do material intacto \bar{E} , o coeficiente de Poisson (ν) e a deformação a partir da qual se inicia o processo de danificação ε_{d0} foram retirados previamente dos ensaios experimentais realizados por Franco (2008). As constantes $C1$ e $C2$ do modelo de dano foram alteradas ao longo das diversas simulações realizadas de tal forma que a curva tensão versus deformação resultante do modelo numérico fosse análoga as curvas dos ensaios experimentais. Os valores das constantes utilizadas são apresentados no quadro 6.

VARIÁVEL	VALOR
Módulo de elasticidade (\bar{E})	1200 MPa
Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
ε_{d0}	0,05
$C1$	0,75
$C2$	0,61

QUADRO 6 – PROPRIEDADES MATERIAIS E PARÂMETROS EMPREGADOS NO EXEMPLO 03

FONTE: O autor (2009)

No programa desenvolvido a parte central do corpo de prova foi discretizada utilizando elementos isoparamétricos de oito nós. As condições de contorno do problema e a discretização espacial em elementos finitos são apresentadas na figura

21. A malha de elementos finitos possui 224 elementos com 745 nós, o carregamento foi imposto em 500 incrementos de carga iguais.

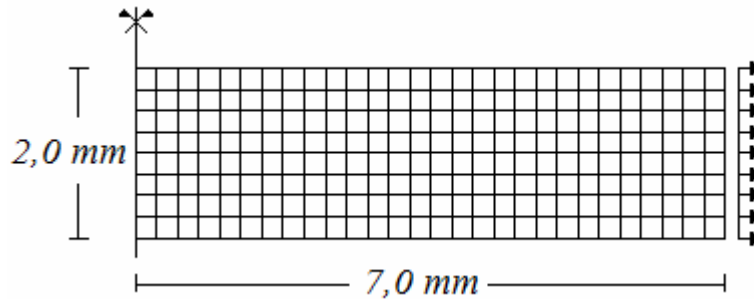


FIGURA 21 – CONDIÇÕES DE CONTORNO E DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL EM ELEMENTOS FINITOS PARA O EXEMPLO 3
FONTE: O autor (2009)

A figura 22 apresenta o gráfico de tensão (σ_{xx}) versus deformação (ϵ_{xx}) contendo os resultados experimentais de duas amostras obtidos por Franco (2008) e os resultados numéricos obtidos com o programa desenvolvido no presente trabalho.

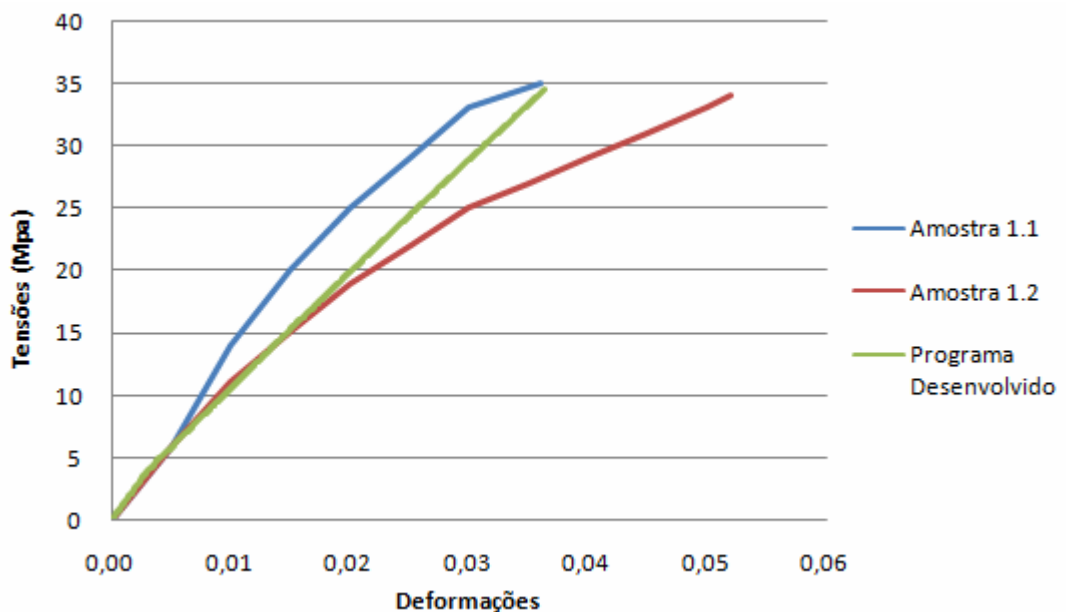


FIGURA 22 – GRÁFICO COMPARATIVO ENTRE OS RESULTADOS OBTIDOS POR FRANCO (2008) E PELO PROGRAMA DESENVOLVIDO
FONTE: O autor (2009)

Os resultados numéricos gerados pelo programa desenvolvido são condizentes com os resultados experimentais obtidos por Franco (2008). Destaca-se

o trecho final da curva relativa ao modelo numérico, onde se observa uma reposta global praticamente elástica.

Inúmeras tentativas foram realizadas em torno do valor da constante $C2$, a fim de acentuar a perda de rigidez no trecho final da curva. Contudo, o aumento do valor dessa constante levava ao rompimento prematuro do modelo, devido à falha de uma faixa de elementos próximos a aplicação do carregamento. Tal fato pode ser explicado através do fenômeno de “localização de deformações”, particularidade essa observada em simulações de materiais plásticos e frágeis, e que vem sendo bastante discutida na literatura desde os trabalhos pioneiros de Rice (1976) e Mayer & Hueckel (1979), passando pelo trabalho de Driemeier (1999). Toda via, uma vez que esse estudo foge ao escopo do presente trabalho, será sugerido como assunto de trabalhos futuros.

A figura 23 apresenta ainda a comparação entre o gráfico de tensões (σ_{xx}) versus deformações (ε_{xx}) de um ponto de Gauss da malha de elementos finitos com as curvas obtidas do ensaio experimental realizado por Franco (2008). Nota-se que apesar de alguns pontos de Gauss perderem rigidez ao longo de toda a simulação, a resposta global do modelo não necessariamente apresenta o mesmo comportamento constitutivo.

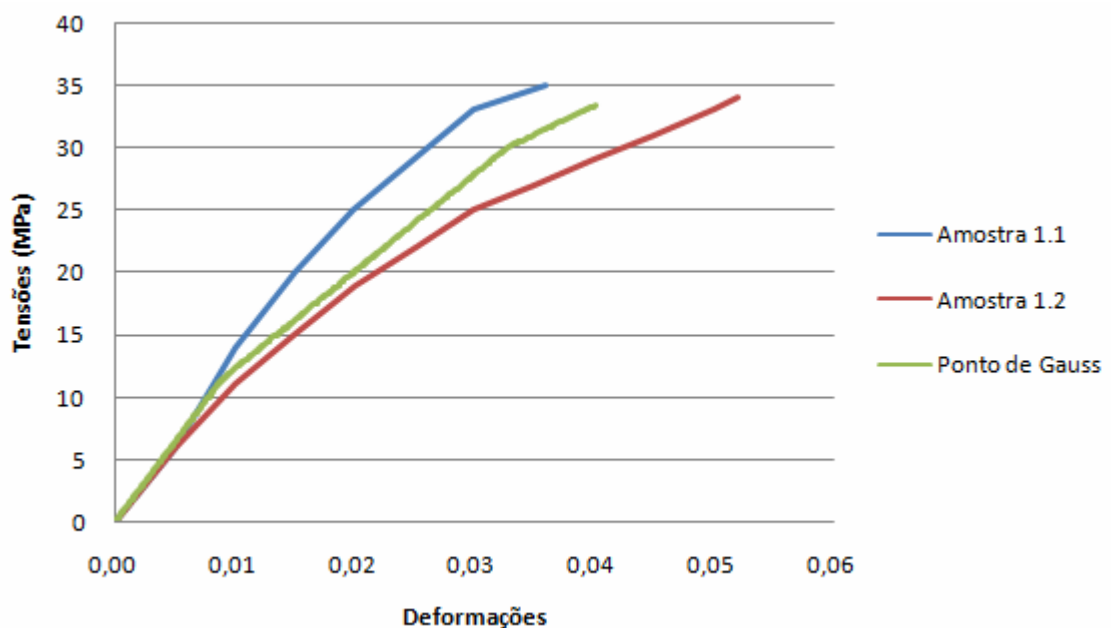


FIGURA 23 – GRÁFICO COMPARATIVO ENTRE OS RESULTADOS OBTIDOS POR FRANCO (2008) E PELO PROGRAMA DESENVOLVIDO EM UM PONTO DE GAUSS

FONTE: O autor (2009)

6.4. EXEMPLO 4

Uma vez “calibrados” os parâmetros do modelo de dano desenvolvido por Tao & Phillips (2005) para o cimento resinoso Cement-Post pode-se utilizar esses mesmos parâmetros para simular o processo de danificação em outras aplicações. Neste exemplo pretende-se verificar a influência da perda de rigidez no cimento resinoso e em suas interfaces durante a aplicação de carga em um disco de dentina tratado endodonticamente.

No trabalho desenvolvido por Franco (2008) dentes pré-molares foram tratados endodonticamente e logo após cortados formando discos de dentina, como pode se visto esquematicamente na figura 24, esses discos de dentina foram então submetidos a um teste de compressão com uma carga de 220 N a uma velocidade de 0,2 mm/min.

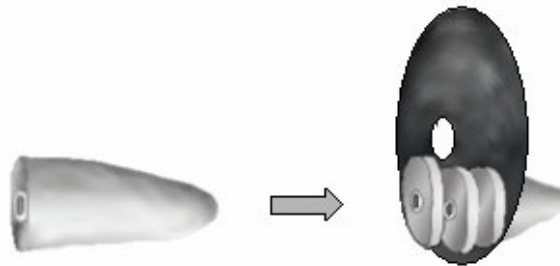


FIGURA 24 – ESQUEMA DE CORTE DOS DISCOS DE DENTINA
FONTE: Franco (2008)

No programa desenvolvido o disco de dentina foi simulado através de um modelo axissimétrico, ou seja, uma “fatia” do sólido é rotacionada em torno de eixo produzindo o sólido de revolução como pode ser observado na figura 25.

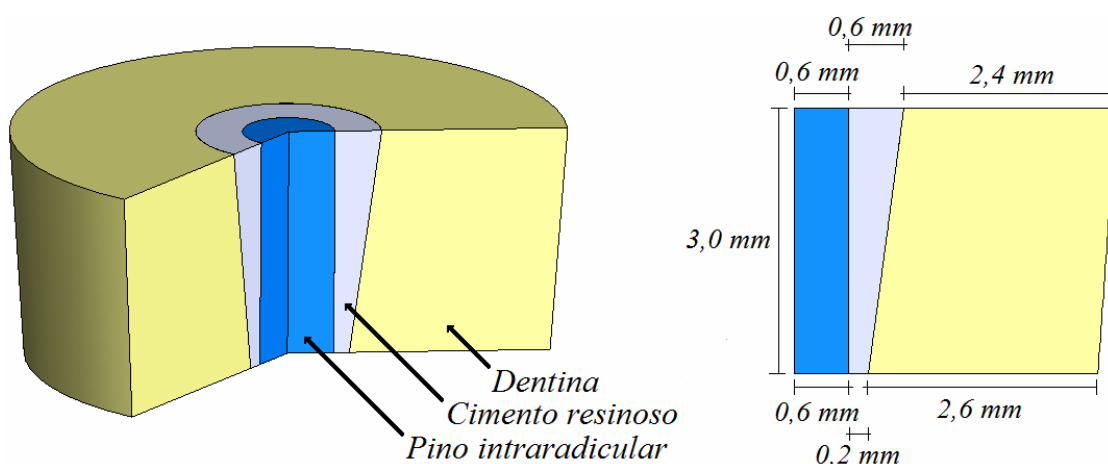


FIGURA 25 – MODELO AXISSIMETRICO DO DISCO DE DENTINA
FONTE: O autor (2009)

Esse modelo foi discretizado utilizando elementos isoparamétricos de oito nós e elementos de interface contendo seis nós. As condições de contorno do problema, a discretização espacial em elemento finitos e os materiais envolvidos na simulação são apresentados na figura 26. A malha de elementos finitos possui 1110 elementos com 3403 nós, o carregamento foi imposto em 500 incrementos de carga iguais.

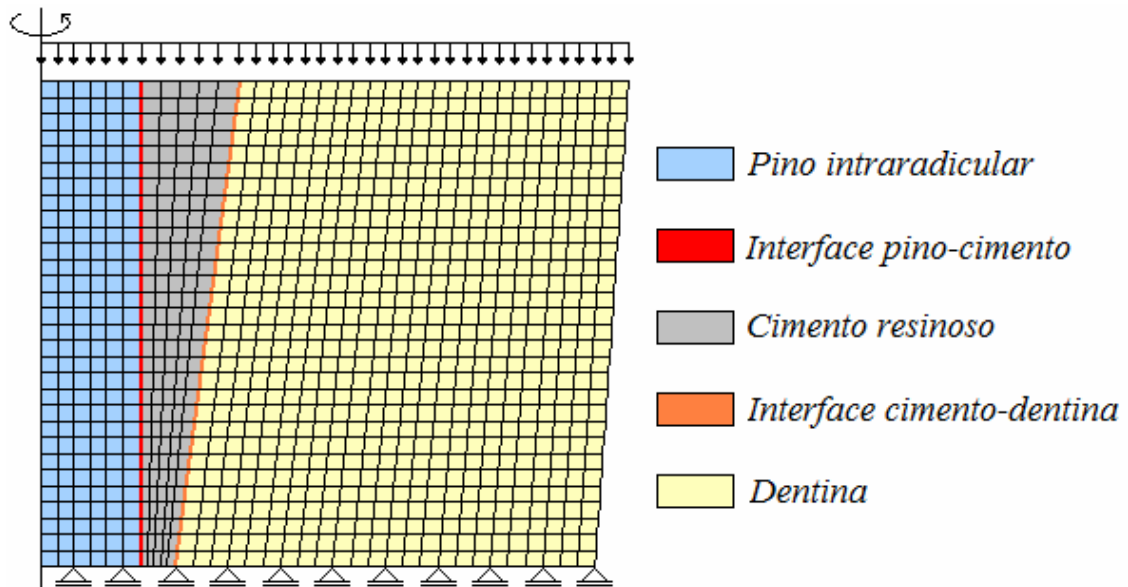


FIGURA 26 – CONDIÇÕES DE CONTORNO, DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL EM ELEMENTOS FINITOS E MATERIAIS SIMULADOS NO EXEMPLO 4
FONTE: O autor (2009)

Em um primeiro momento todos os materiais (pino intra-radicular, cimento, dentina e interfaces) foram simulados sob um regime perfeitamente elástico. A seguir, em uma nova simulação, foram introduzidos os parâmetros do modelo de dano de Tao & Phillips (2005), a fim de simular a perda de rigidez no cimento odontológico e nas interfaces adjacentes. As propriedades materiais e os parâmetros do modelo numérico, retirados de Marson (2003) e Franco (2008), são apresentados no quadro 6.

MATERIAL	VARIÁVEL	VALOR
Pino intra-radicular	Módulo de elasticidade (E)	85000 MPa
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,33
Interface pino-cimento	Módulo de elasticidade (E)	1200 MPa
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
	Módulo de cisalhamento	22,33 MPa

MATERIAL	VARIÁVEL	VALOR
Interface pino-cimento	ϑ_1	0,00
	ϑ_2	0,99
	ϑ_3	0,01
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
	$C2$	0,61
Cimento	Módulo de elasticidade (E)	1200 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
	$C2$	0,61
Interface cimento-dentina	Módulo de elasticidade (E)	1200 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
	Módulo de cisalhamento	16,80 <i>MPa</i>
	ϑ_1	0,00
	ϑ_2	0,01
	ϑ_3	0,99
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
	$C2$	0,61
Dentina	Módulo de elasticidade (E)	18600 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31

QUADRO 6 – PROPRIEDADES MATERIAIS E PARÂMETROS EMPREGADOS NO EXEMPLO 04

FONTE: O autor (2009)

Os resultados obtidos com o programa desenvolvido nesse trabalho para as distribuições de tensões e deformações são apresentados nas figuras 27 a 40, comparando os resultados da simulação com todos os materiais sob um regime perfeitamente elástico com os resultados da simulação contendo o modelo de dano. Para esse exemplo, as tensões são apresentadas em mega Pascals (*MPa*).

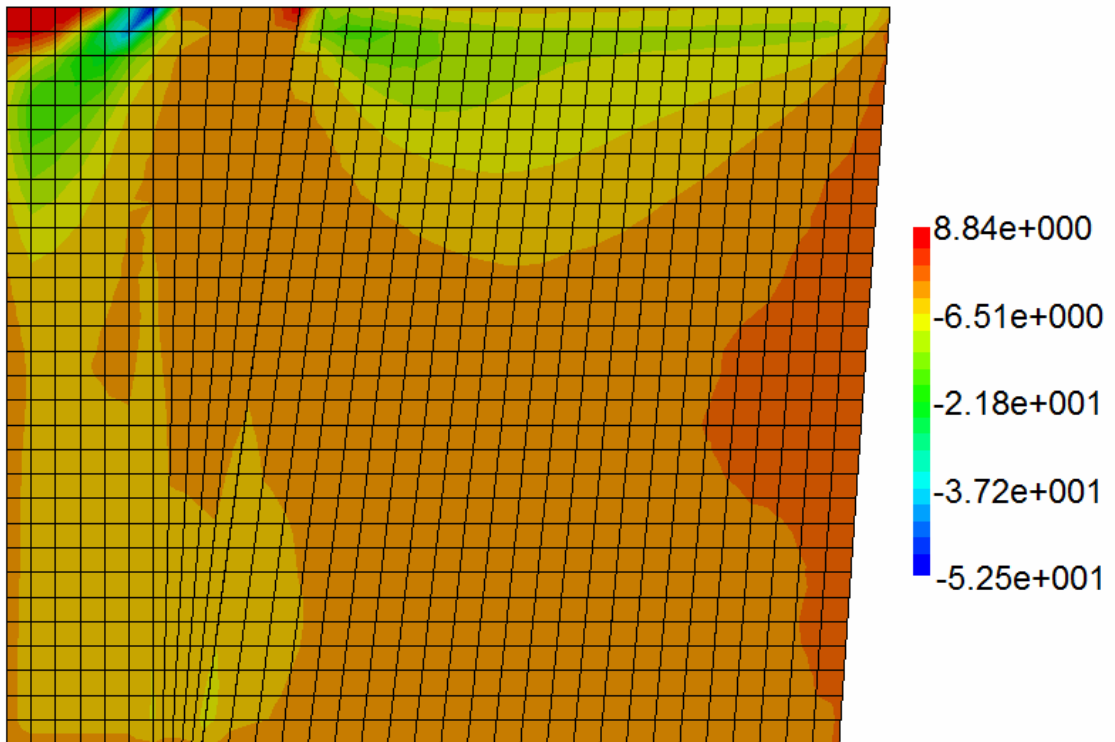


FIGURA 27 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

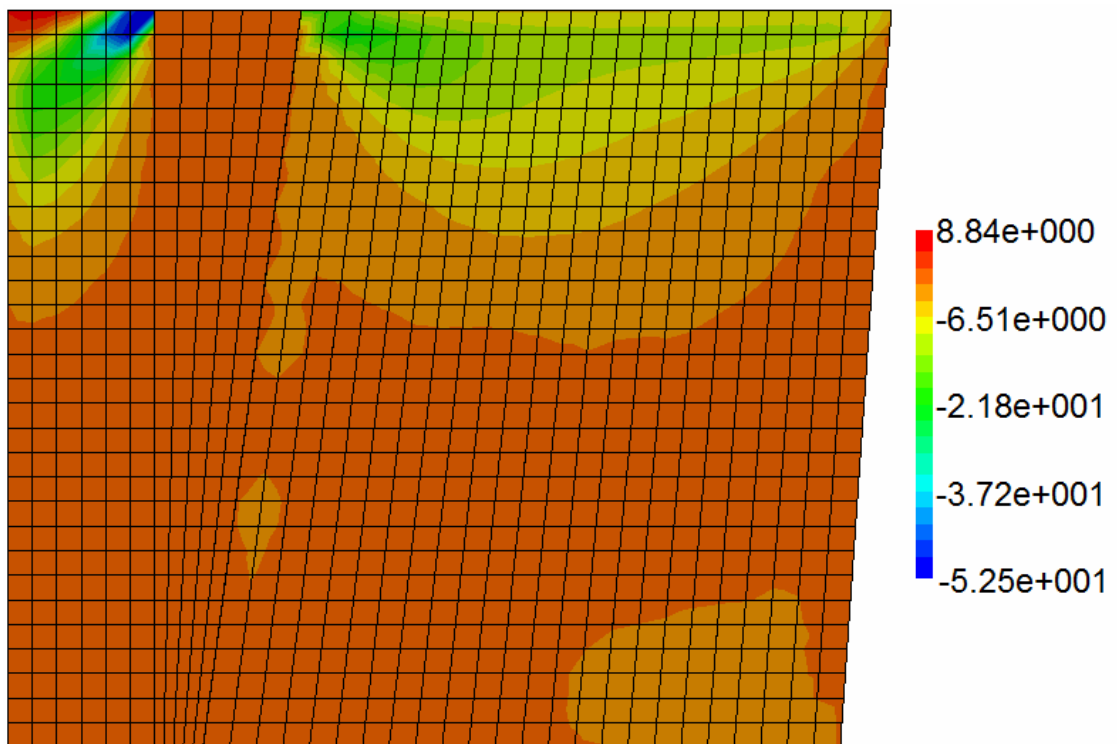


FIGURA 28 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

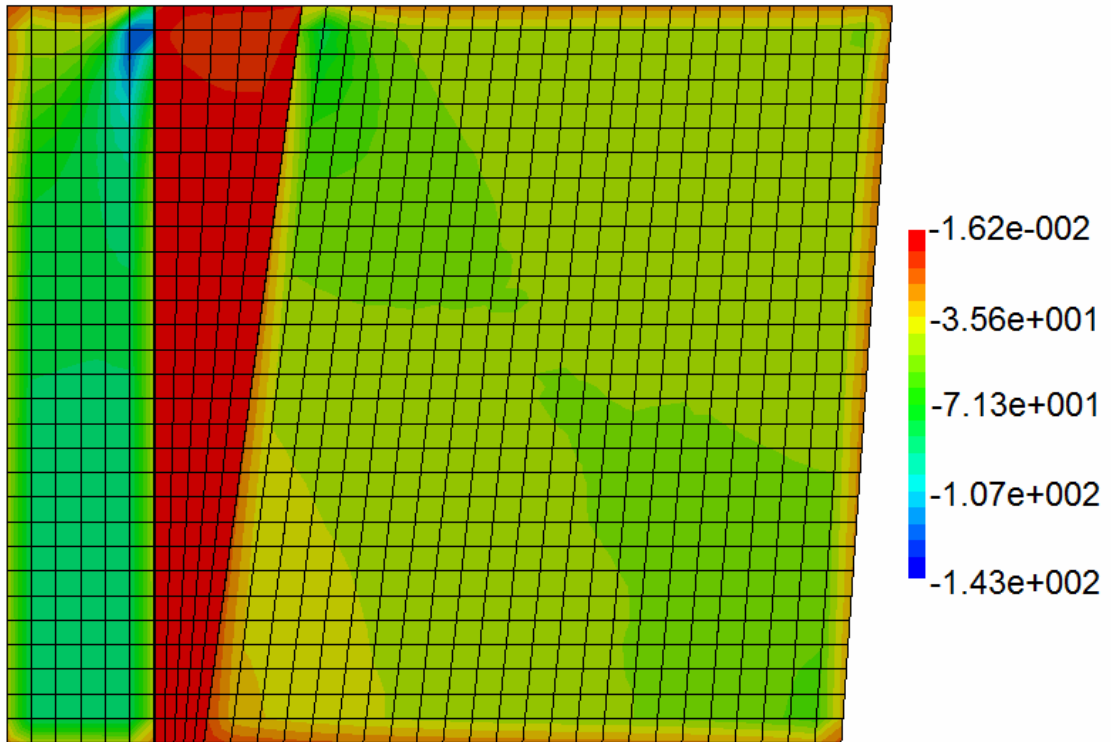


FIGURA 29 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{yy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

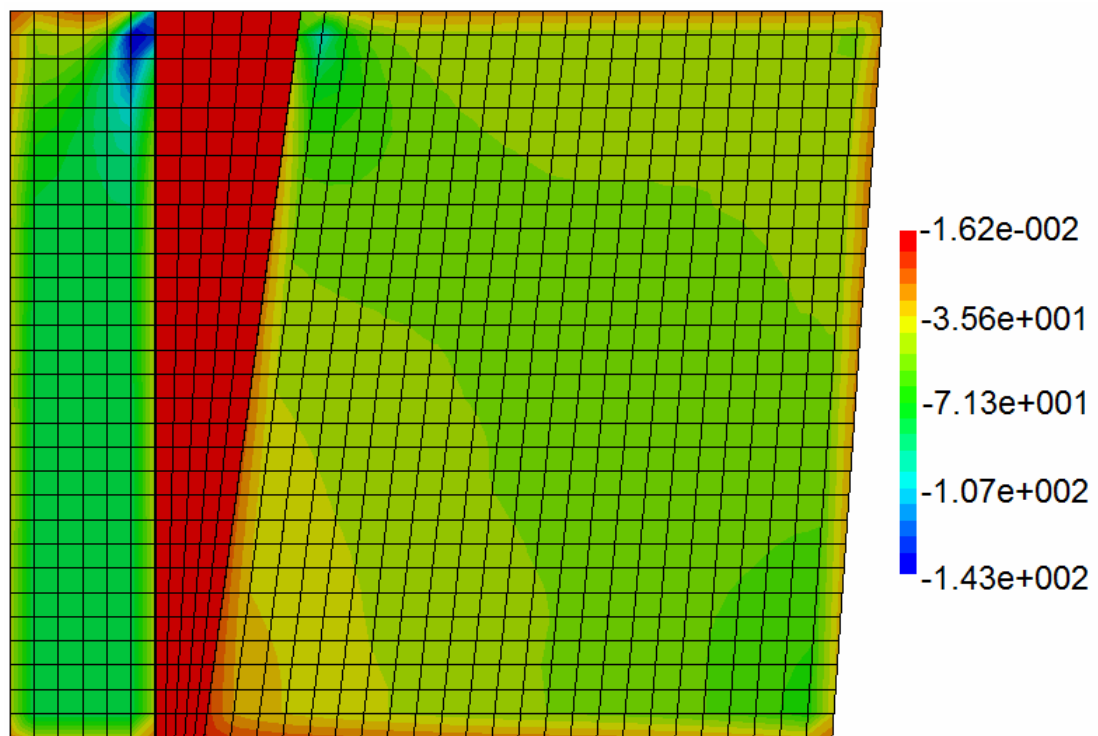


FIGURA 30 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{yy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

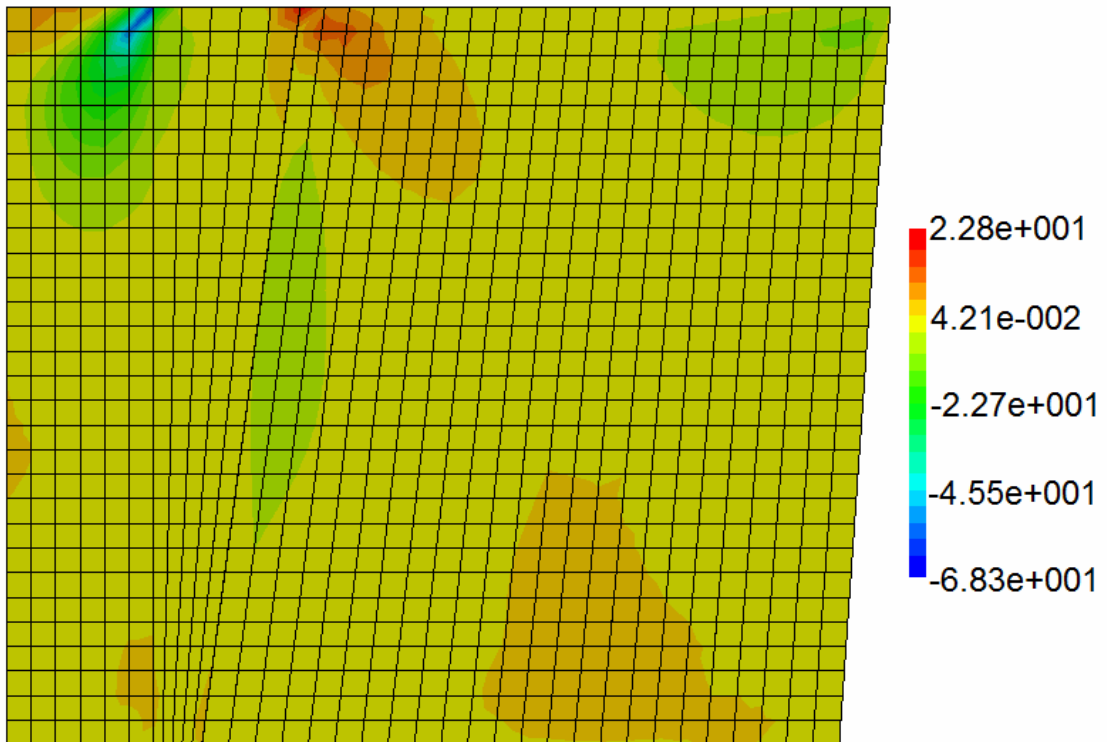


FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

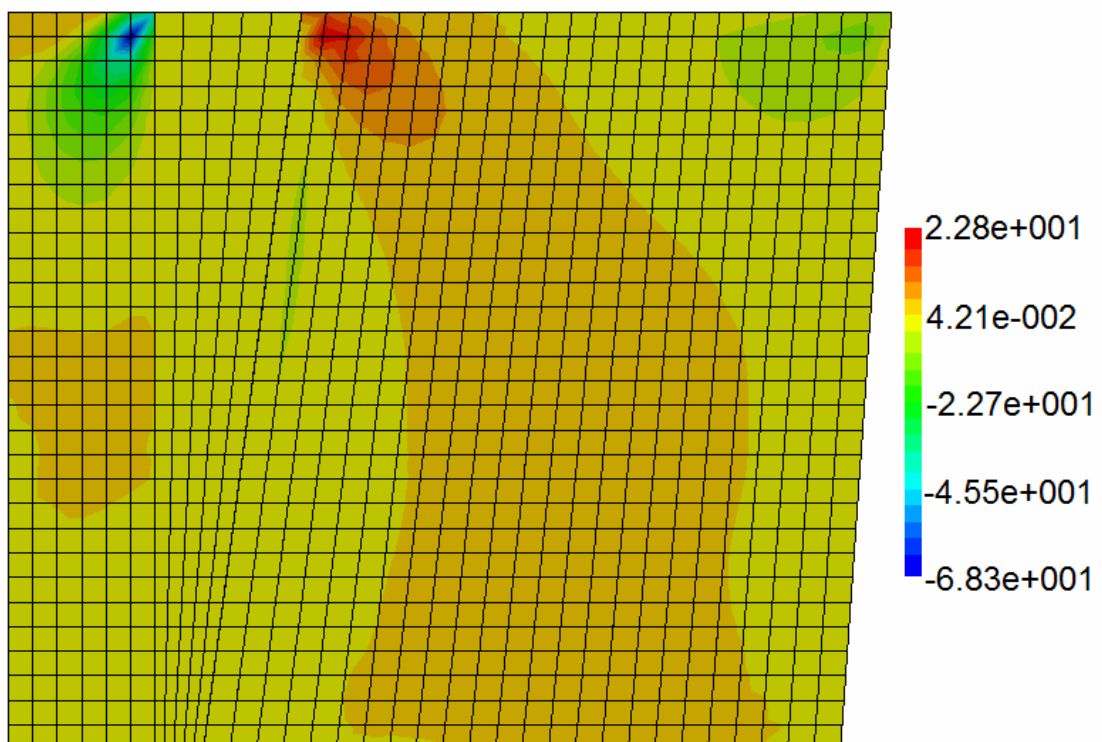


FIGURA 32 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

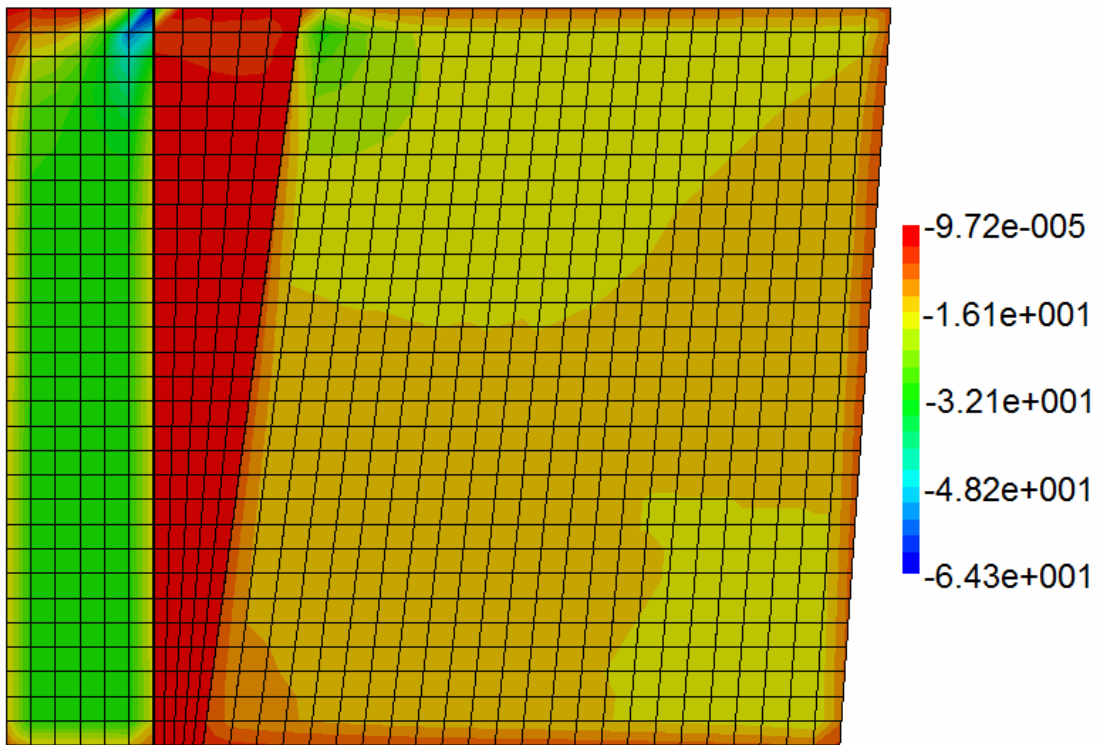


FIGURA 33 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

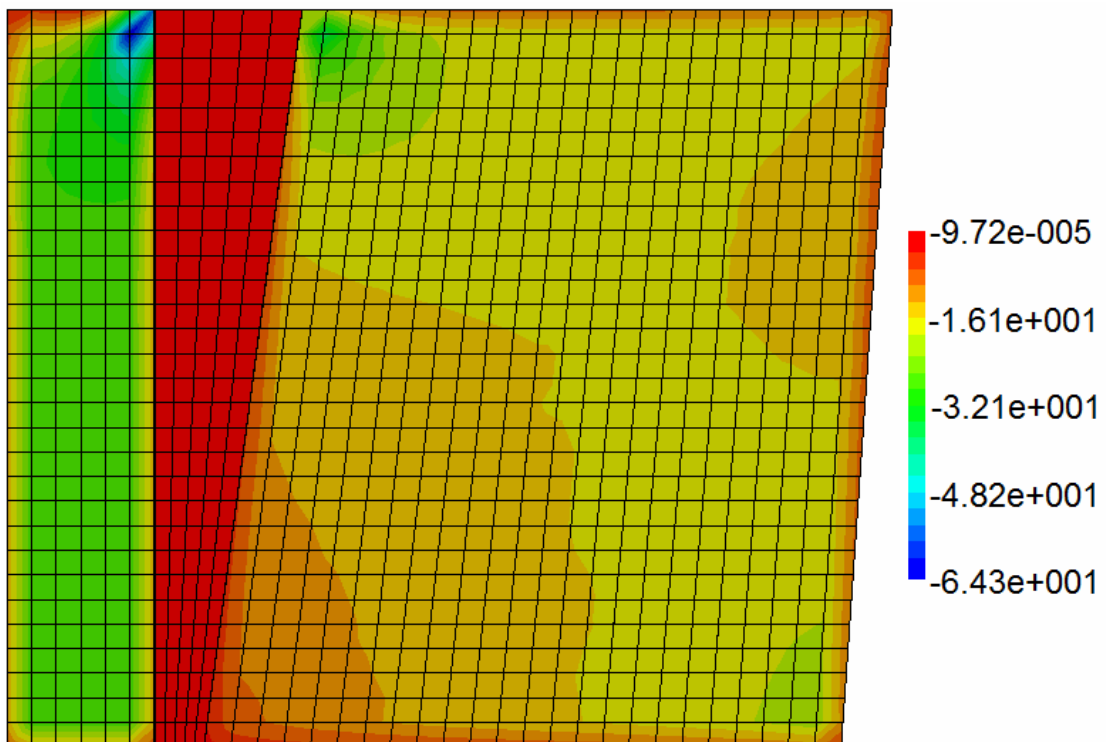


FIGURA 34 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

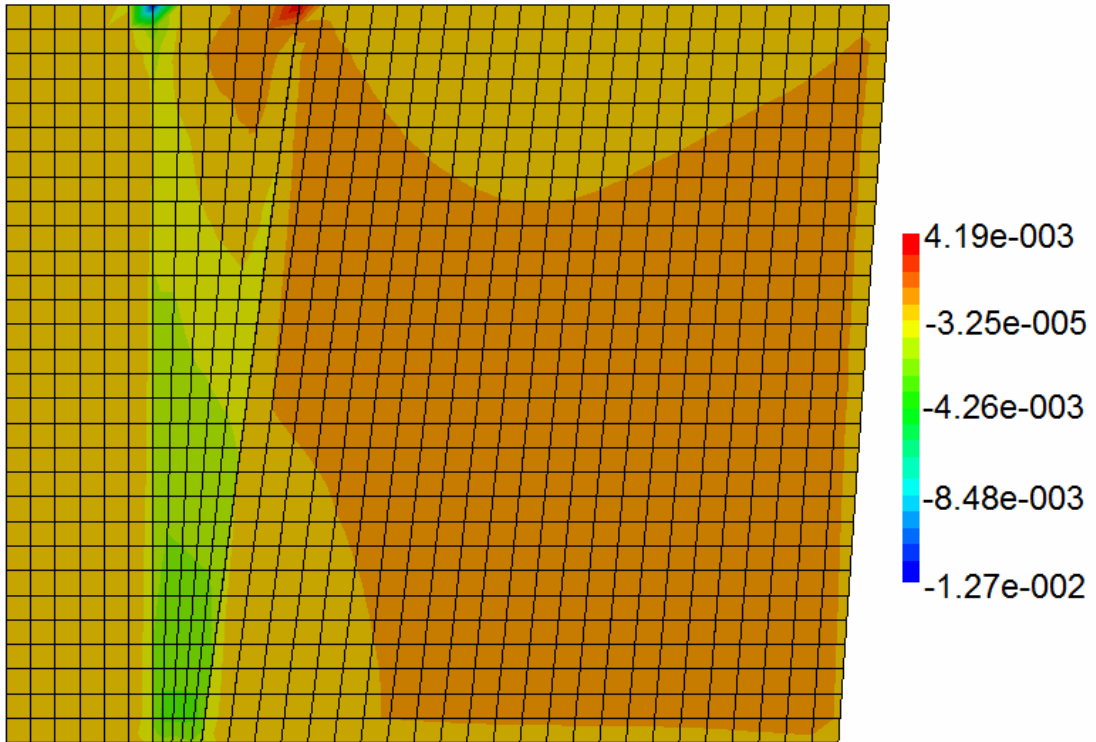


FIGURA 35 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xx} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

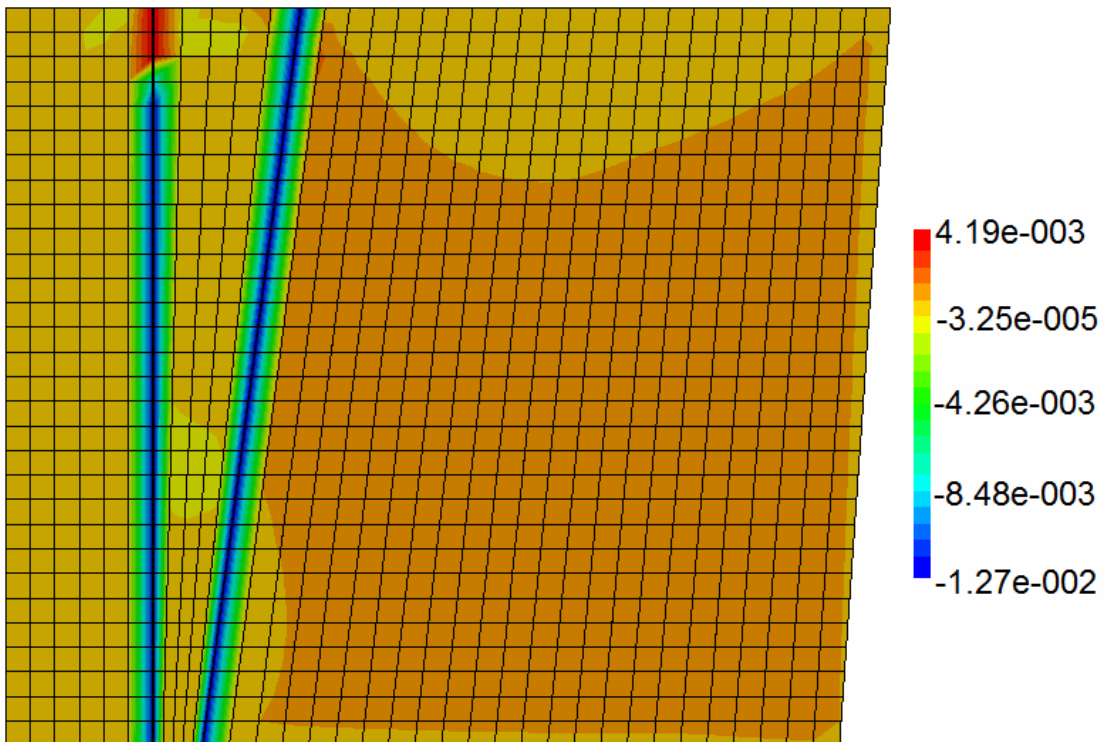


FIGURA 36 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xx} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

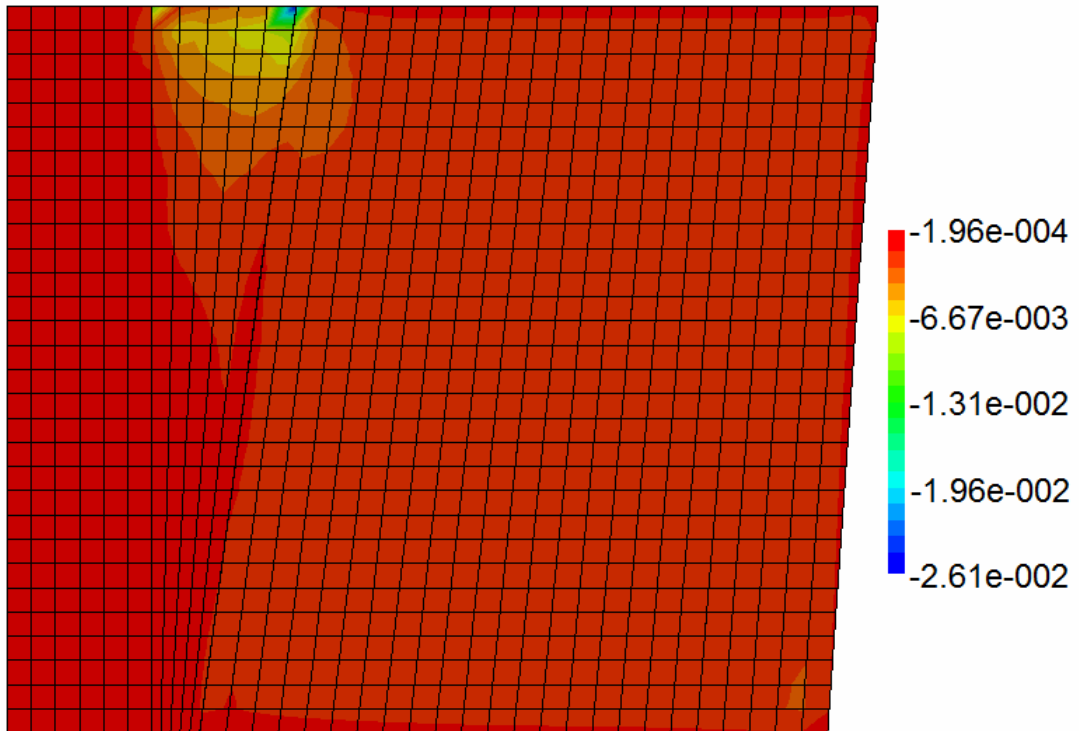


FIGURA 37 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{yy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

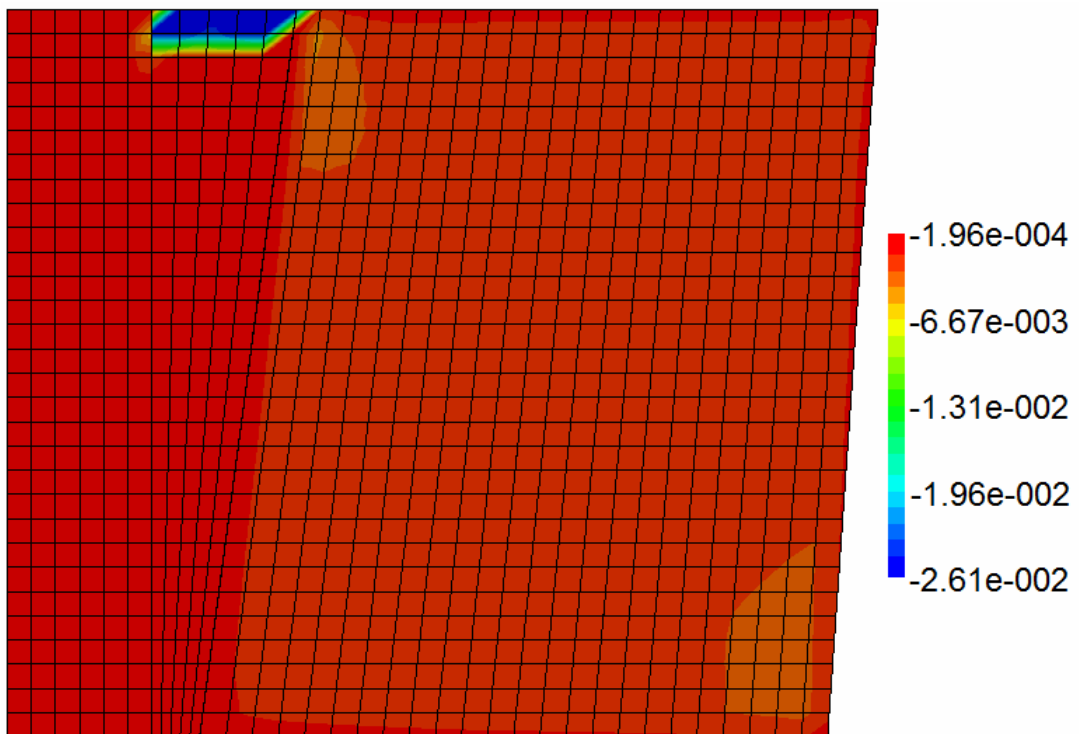


FIGURA 38 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{yy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

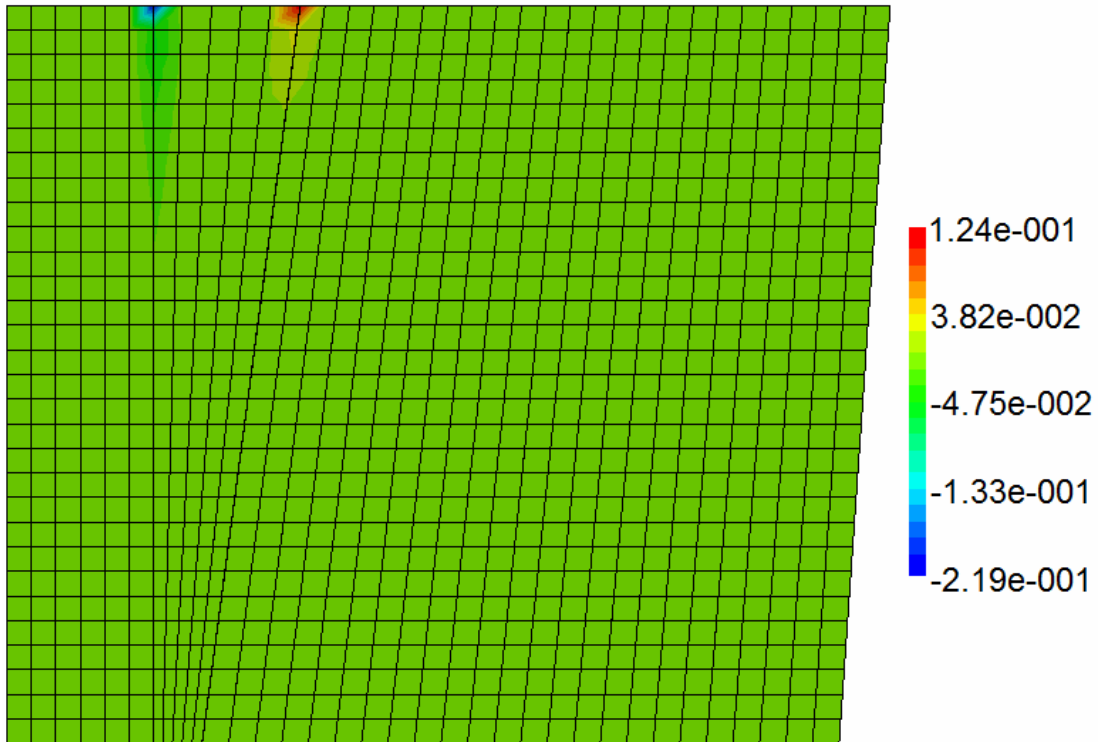


FIGURA 39 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
 FONTE: O autor (2009)

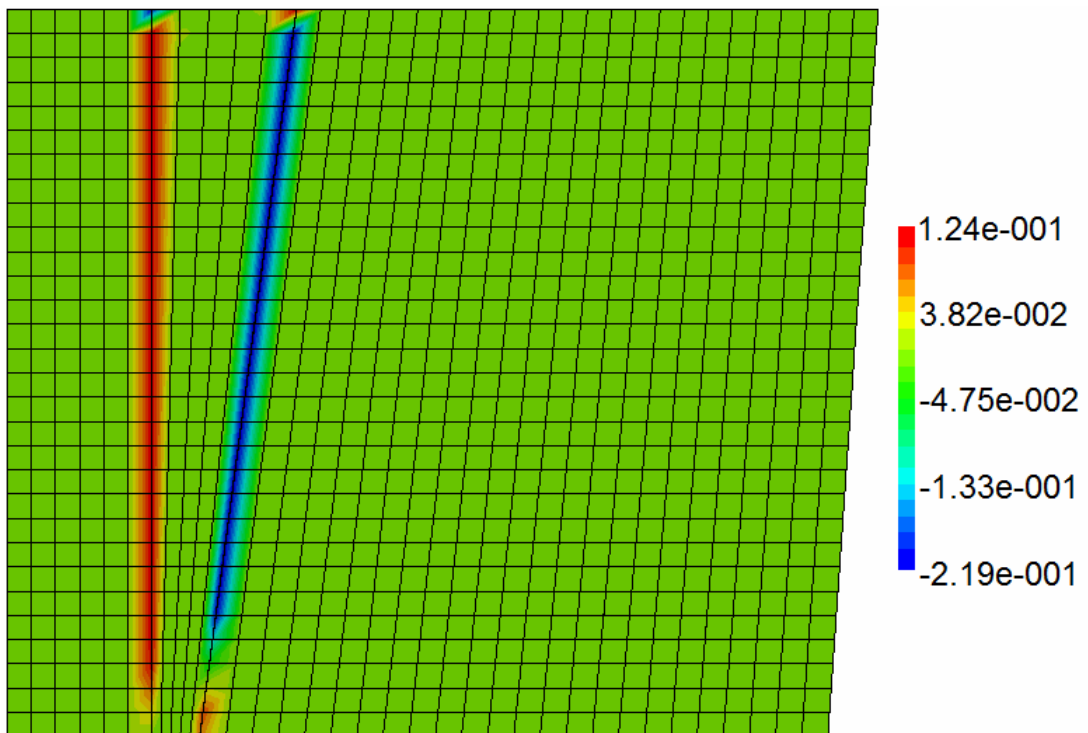


FIGURA 40 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
 FONTE: O autor (2009)

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

FELIPE RECKA DE ALMEIDA

FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA DA PERDA DE RIGIDEZ EM
INTERFACES UTILIZANDO POTENCIAIS TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS

CURITIBA
2009

FELIPE RECKA DE ALMEIDA

FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA DA PERDA DE RIGIDEZ EM
INTERFACES UTILIZANDO POTENCIAIS TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS

Dissertação apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Métodos
Numéricos em Engenharia, Setor de
Tecnologia, Universidade Federal do Paraná
como requisito parcial à obtenção do título de
Mestre em Ciências.

Professor orientador: Mildred Ballin
Hecke

CURITIBA
2009

ΕΠΙΓΡΑΦΕ

Corpus omne perseverare in status quo quiescendi
vel movendi uniformiter in directum, nisi quatenus
a viribus impressis cogitur statum illum mutare.

Sir Isaac Newton

AGRADECIMENTOS

Obrigado a todos, sem exceção.

RESUMO

Lesões cariosas extensas, amplas restaurações e fraturas dentais podem levar à necessidade de tratamento endodôntico. Dentes tratados endodonticamente tornam-se mais frágeis devido à perda de estrutura após a remoção da lesão cariosa ou da regularização da fratura e da instrumentação do canal radicular. Além disso, suas estruturas se apresentam desidratadas devido à falta de irrigação sanguínea, que antes era promovida pelo órgão pulpar. A desintegração dessas estruturas dentais pode tornar os dentes mais suscetíveis à fratura. Por esses motivos, foram desenvolvidos retentores intra-radulares com o intuito de reter o material restaurador. A função dos cimentos é selar a interface entre o pino e a dentina radicular, além de auxiliar em sua retenção. Neste trabalho é apresentado um modelo numérico-computacional capaz de simular o processo de perda de rigidez das interfaces pino-cimento-dentina por meio da Mecânica do Dano e da definição de dois potenciais termodinâmicos com o auxílio de técnicas da análise convexa. O procedimento de solução do equilíbrio global se dá através do método Quase-Newton, a discretização espacial é obtida aplicando o Método dos Elementos Finitos e a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial. A abordagem escolhida permite conhecer o comportamento constitutivo através de dois potenciais: um potencial de energia e um potencial de dissipação. Tal abordagem apresenta vantagens sobre a tradicional, entre as quais se destaca a obtenção de resultados que seguramente não violam as Leis da Termodinâmica. As equações de fluxo são derivadas a partir de potenciais termodinâmicos, onde o conceito de “materiais standard generalizados” é aplicado. Ao final são apresentados e discutidos alguns exemplos didáticos e, na seqüência, são discutidos também resultados obtidos a partir de simulações realizadas com o programa desenvolvido.

Palavras-chave: Mecânica do dano. Potenciais termodinâmicos. Método dos Elementos Finitos. Interface. Biomecânica.

ABSTRACT

Extensive carious lesions, large dental restorations and fractures can lead to the need for endodontic treatment. Endodontically treated teeth become more fragile due to loss of structure after removal of the carious lesion or the regularization of the fracture and the instrumentation of the root canal. Moreover, their structures have been dehydrated due to lack of blood, which was once promoted by the pulp. The disintegration of dental structures can make the teeth more susceptible to fracture. For these reasons, root posts were developed in order to retain the restorative material. The role of the cement is to seal the interface between the post and root dentin, and help in their retention. The purpose of this work is to present non-linear mathematical programming algorithm capable of simulating the loss of stiffness process in post-cement-dentin interfaces through the Continuum Damage Mechanics and the definition of two thermodynamic potentials with help of convex analysis. The procedure for solving the global balance occurs through the quasi-Newton method, the spatial discretization is performed by means of the Finite Element Method and temporal discretization was introduced independently of the spatial discretization. In the chosen approach, the constitutive behavior is determined from two thermodynamic potentials: a potential energy and a potential of dissipation. One of the advantages of the present approach is that the results obtained satisfy the fundamental laws of thermodynamics. The flow equations are derived from thermodynamic potential, where the concept of generalized standard materials is applied. At the end are presented and discussed a few didactical examples, and in sequence, are also discussed results from simulations performed with the program developed.

Key words: Continuum Damage Mechanics. Thermodynamic Potentials. Finite Element Method. Interface. Biomechanics.

LISTA DE SÍMBOLOS

P_{ext}	- potência mecânica ou externa
B	- volume
∂B	- superfície de um volume
\vec{a}	- força distribuída por unidade de superfície
\vec{b}	- força distribuída por unidade de massa
\vec{v}	- velocidade do ponto material
x	- abscissa de um ponto no espaço
ρ	- densidade de massa
Q_e	- taxa de calor
r	- calor gerado por unidade de massa
\vec{q}	- fluxo de calor
\vec{n}	- versor unitário
\dot{U}	- taxa de energia interna
e	- energia interna por unidade de massa
\dot{E}_c	- taxa de energia cinética
\dot{E}_T	- taxa de energia total de um sistema
σ	- tensor de tensões
D	- tensor taxa de deformações
$\dot{\epsilon}$	- tensor taxa de deformações para pequenas deformações
S	- entropia
s	- entropia por unidade de massa
θ	- temperatura absoluta
ψ	- energia livre
α_k	- variável de estado interna
A^k	- força termodinâmica
P	- região admissível
Ω	- interior da região admissível
$\partial\Omega$	- fronteira da região admissível
f	- função de escoamento
$\dot{\alpha}_k$	- taxa de variação da variável de estado interna
λ	- multiplicador de Lagrange
M	- ponto de um corpo
\vec{n}	- vetor
δS	- área de um plano que corta o volume representativo
δS_{D_x}	- área de interseção de todas as microfissuras e microcavidades em δS
α_d	- variável de estado interna relativa ao dano
δS_D	- área de interseção mais danificada em δS
$\bar{\sigma}$	- tensor de tensões efetivas
E	- módulo de elasticidade longitudinal

\bar{E}	- módulo de elasticidade efetivo
$\bar{\varepsilon}$	- tensor de deformações efetivas
A^d	- força termodinâmica relativa ao dano
ψ_C	- potencial termodinâmico complementar
$\bar{\psi}$	- energia livre relativa
Ind_P	- indicatriz do conjunto P
χ	- função de dissipação
$\dot{\sigma}$	- taxa de tensões
\dot{A}^d	- taxa da força termodinâmica relativa ao dano
$j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$	- potencial termodinâmico das taxas temporais de tensões e das taxas temporais da força termodinâmica relativa ao dano
$\dot{\varepsilon}$	- taxa de deformações
$\dot{\alpha}_d$	- taxa da variável interna relativa ao dano
$j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d)$	- potencial termodinâmico das taxas temporais de deformações e das taxas temporais da variável interna relativa ao dano
$\Delta\sigma$	- incremento de tensões
ΔA^d	- incremento de força termodinâmica relativa ao dano
$\Delta\varepsilon$	- incremento de deformações
$\Delta\alpha_d$	- incremento da variável interna relativa ao dano
$\bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d)$	- potencial termodinâmico dos incrementos de deformações e dos incrementos da variável interna relativa ao dano
A_0^d	- força termodinâmica a partir da qual se inicia o processo de danificação
ε_{d0}	- deformação a partir da qual o processo de danificação é iniciado
Z	- parâmetro responsável pelo endurecimento/amolecimento no modelo de dano
$C1$	- constante responsável pela magnitude da região das forças termodinâmicas admissíveis
$C2$	- constante responsável pela superfície da região das forças termodinâmicas admissíveis
Ω_e	- elemento da malha de elementos finitos
B^i	- operador do Método dos Elementos Finitos
$(B^i)^T$	- matriz transposta do operador do Método dos Elementos Finitos
N^i	- matriz de funções de forma
$(N^i)^T$	- matriz transposta da matriz de funções de forma
$\Delta\hat{U}^i$	- vetor com os componentes x e y dos deslocamentos nodais
Ψ	- função de forma do Método dos Elementos Finitos
L	- operador
F_{int}	- esforços internos
ΔF_{int}	- incremento de esforços internos
F_{int}^i	- esforços internos de um elemento da malha de elementos finitos
F_{ext}	- esforços externos
ΔF_{ext}	- incremento de esforços externo
F_{ext}^i	- esforços externos de um elemento da malha de elementos finitos

$R(\Delta U)$	- resíduo da equação de equilíbrio
$IQ4$	- elemento isoparamétrico de quatro nós
h	- altura do elemento
b	- comprimento do elemento
K_{IQ4}	- matriz de rigidez do elemento isoparamétrico de quatro nós
K_i	- coeficiente da matriz de rigidez
C	- matriz constitutiva do estado plano de deformações
C_{ijkl}	- componente da matriz constitutiva
C_{1111}	- componente normal da matriz constitutiva
C_{1212}	- componente cisalhante da matriz constitutiva
C_{1112}	- componente do efeito acoplado (normal e cisalhante) da matriz constitutiva
C_e^I	- matriz constitutiva do elemento de interface
ϱ_i	- pesos atribuídos a componente normal dos materiais que compõe a região de interface
φ	- parâmetro a ser atendido para a utilização do elemento de interface
E_N	- módulo de elasticidade longitudinal da interface
G_N	- módulo de elasticidade transversal da interface
B	- operador linear de deformações
d_k	- direção ao longo da qual se busca diminuir o valor de uma função do método de otimização na iteração k
p_k	- passo do método de otimização na iteração k
G_k	- matriz simétrica não singular do método de otimização na iteração k
H_k	- Aproximação do Hessiano na iteração k
y_k	- diferença entre os valores dos resíduos na iteração $k+1$ e na iteração k no método Quase-Newton
s_k	- diferença entre os valores dos deslocamentos na iteração $k+1$ e na iteração k no método Quase-Newton
ϖ	- termo empregado na atualização do Hessiano pelo método BFGS

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. OBJETIVOS	3
1.1.1. Objetivo geral	3
1.1.2. Objetivos específicos.....	4
1.2. ESTRUTURA DO TRABALHO.....	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	13
3.1. MODELOS TERMODINAMICAMENTE ADMISSÍVEIS.....	13
3.1.1. Considerações e definições gerais.....	13
3.1.2. Primeira Lei da Termodinâmica.....	14
3.1.3. Segunda Lei da Termodinâmica.....	17
3.1.4. A desigualdade de Clausius-Duhem.....	18
3.1.5. Potencial termodinâmico	19
3.1.6. Região admissível	21
3.1.7. Potencial de dissipação	22
3.2. MECÂNICA DO DANO.....	24
3.2.1. Variável interna de dano.....	25
3.2.2. Deformação equivalente.....	26
3.2.3. Tensão equivalente	28
3.3. MODELO CONSTITUTIVO	29
3.3.1. Potencial termodinâmico e Leis de estado	29
3.3.2. Potencial de dissipação	31
3.3.3. Equação constitutiva de dano em taxas	32
3.3.4. Equação constitutiva de dano em incrementos finitos.....	35
3.3.5. Relação entre função dissipação e função escoamento.....	37
4. UM MODELO DE DANO SEGUNDO ENFOQUE TERMODINÂMICO	40
5. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E ALGORITMOS	44
5.1. PROGRAMA DESENVOLVIDO	44
5.2. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	46
5.2.1 Elemento de interface.....	48
5.3. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EQUILÍBRIO.....	52
5.4. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO CONSTITUTIVA	58
5.3.1 Aplicação do algoritmo de Newton Raphson para o modelo de dano	60
6. EXEMPLOS	62
6.1. EXEMPLO 1	62
6.2. EXEMPLO 2.....	65
6.3. EXEMPLO 3.....	72
6.4. EXEMPLO 4.....	76
7. CONCLUSÕES	93
REFERÊNCIAS	95

1. INTRODUÇÃO

O tratamento endodôntico é uma técnica preconizada quando existem lesões cariosas extensas, amplas restaurações ou fraturas dentais. Segundo Assif & Gorfil (1994), a perda de estrutura após remover a lesão cariosa ou regularizar a fratura e fazer a instrumentação do canal radicular torna a estrutura dentinária mais frágil. Com a remoção do órgão pulpar a irrigação dessa estrutura dental é interrompida, tornando-a desidratada. Essa desidratação pode tornar os dentes mais propensos a fraturas. Na figura 01 é mostrada a preparação do canal radicular, etapa do tratamento endodôntico.



FIGURA 01 – TRATAMENTO ENDODÔNTICO
FONTE: Franco (2008)

A fim de contornar tais problemas foram desenvolvidos pinos intraradiculares com a função de devolver certa rigidez à estrutura, propiciando uma distribuição mais adequada das tensões pelas quais essa estrutura venha a ser solicitada. Esses pinos são fixados à dentina por meio de cimentos resinosos odontológicos, que selam a interface entre pino e a dentina radicular.

Como todo processo adesivo, o sucesso da fixação desses pinos está sujeito à qualidade da união pino-cimento-dentina, proporcionada pelos agentes adesivos intermediários. Na literatura é vasta a preocupação com a concentração de tensões e conseqüente falha da união entre cimento-dentina e cimento-pino. Podem ser destacados os trabalhos de Ferrari et al. (2000), Lanza et al. (2005), Tay et al. (2005) e Franco (2008).

A realização de estudos sobre o comportamento dos cimentos resinosos e das interfaces adesivas entre pino-cimento-dentina é fundamental para se obter uma adesão segura e para o desenvolvimento de futuros materiais. Sendo assim, o presente estudo desenvolve, tendo por base a Mecânica do Dano para Meios Contínuos, uma formulação para descrever o processo de perda de rigidez e sua conseqüente aplicação em interfaces. Na figura 02 a interface entre o cimento resinoso e a dentina pode ser identificada.

Situações de interação entre diferentes materiais são comumente encontradas na engenharia. O comportamento da região de fronteira entre esses materiais tem sido representado em modelos de elementos finitos por meio de elementos de interface. Sendo assim, com o objetivo de permitir a análise da distribuição de tensões e deformações, simulando diferentes condições e seqüências de carregamento, todo o comportamento constitutivo dos materiais envolvidos foi descrito através do Método dos Elementos Finitos.

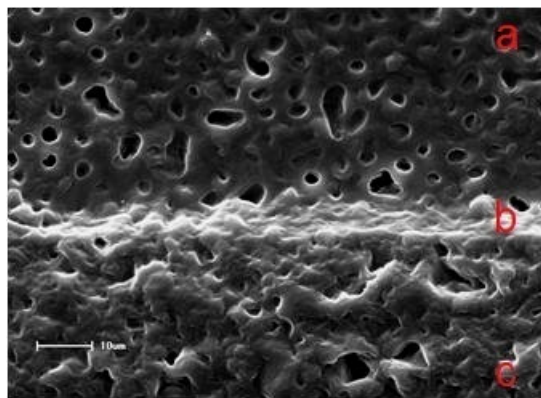


FIGURA 02 – FOTO DE MICROSCOPIA ELETRÔNICA ONDE PODEM SER OBSERVADOS: (a) CIMENTO RESINOSO, (b) INTERFADE E A (c) DENTINA

FONTE: Franco (2008)

A teoria do dano descreve localmente a evolução dos fenômenos que se desenvolvem entre um estado inicial, relativo a uma situação de material íntegro, e um estado final, representado pela perda total da resistência. No caso dos cimentos resinosos, um material em que a fissuração é o fenômeno dominante no comportamento não-linear, a Mecânica do Dano é capaz de formular modelos realistas.

O dano não é uma grandeza física mensurável diretamente, mas no âmbito de uma modelagem matemática é possível quantificá-lo através de uma redução

progressiva de uma propriedade mecânica global como, por exemplo, a rigidez do material. O modelo de dano implementado neste trabalho foi o modelo desenvolvido por Tao & Phillips (2005), onde somente o efeito isotrópico do dano é considerado. Esse modelo apresenta bons resultados mesmo sendo bastante simples e tem como virtude sua fácil implementação.

A termodinâmica desempenha um importante papel na formulação e desenvolvimento de modelos constitutivos. Para evitar resultados termodinamicamente inconsistentes, a primeira e a segunda leis da termodinâmica formam a base da abordagem presente neste trabalho, que tem como principal guia o trabalho desenvolvido por Houlsby & Puzrin (2000).

Muitos trabalhos sobre a aplicação dos conceitos termodinâmicos na mecânica do dano já foram desenvolvidos, sendo que a maioria desses se concentrou no estudo de estruturas de concreto. No presente trabalho, propõe-se o estudo de um modelo constitutivo aplicado às interfaces entre um cimento resinoso, um pino polimérico e a dentina. O desenvolvimento de modelos capazes de fornecer previsões mais realistas do comportamento da interface passa a ser importante para ampliar os conhecimentos de cirurgiões-dentistas, proporcionando a melhora das técnicas e dos materiais envolvidos no tratamento endodôntico, além de diminuir a necessidade de ensaios *in vivo* e *in vitro*.

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. Objetivo geral

Desenvolver um modelo numérico-computacional que permita simular o processo de danificação e conseqüente perda de rigidez das interfaces entre o cimento resinoso, o pino intra-radicular e a dentina a partir da definição de dois potenciais termodinâmicos com o auxílio de técnicas da análise convexa.

1.1.2. Objetivos específicos

- a) Aplicar a teoria termodinâmica com variáveis internas e técnicas da análise convexa à modelagem do comportamento mecânico de um cimento resinoso;
- b) Apresentar a formulação de um modelo constitutivo de dano segundo enfoque termodinâmico;
- c) Implementar algoritmos adequados à resolução do problema constitutivo;
- d) Aplicar o Método dos Elementos Finitos à discretização espacial do problema de perda de rigidez;
- e) Implementar um elemento adequado à simulação da região de interface;
- f) Realizar algumas simulações com o programa desenvolvido e comparar com resultados obtidos em ensaios experimentais.

1.2. ESTRUTURA DO TRABALHO

A seguir está descrito, de forma sucinta, o conteúdo de cada capítulo deste trabalho.

No primeiro capítulo foi feita uma introdução a respeito da técnica de tratar os dentes endodonticamente, o valor da união do cimento resinoso à dentina e ao pino intra-radicular no sucesso do tratamento e a importância de modelos mais realistas para prever o comportamento das interfaces entre esses materiais.

No segundo capítulo é apresentada uma breve revisão bibliográfica do desenvolvimento da Mecânica do Dano para Meios Contínuos, enfatizando-se aspectos relativos aos trabalhos realizados na área de modelagem constitutiva de materiais frágeis, além da descrição de alguns elementos de interface encontrados na literatura.

No terceiro capítulo conceitos da teoria da termodinâmica com variáveis internas são apresentados. A Mecânica do Dano para Meios Contínuos é revista seguindo a abordagem termodinâmica, a seguir, uma abordagem utilizando conceitos da análise convexa é introduzida e por fim o modelo constitutivo é apresentado.

No quarto capítulo o modelo de dano com o critério de danificação de Tao & Phillips (2005) é descrito segundo enfoque termodinâmico.

No quinto capítulo é descrito a forma na qual o programa desenvolvido foi estruturado, bem como se apresentam o elemento de interface e os algoritmos empregados para a resolução do problema de equilíbrio e constitutivo.

O sexto capítulo apresenta dois exemplos didáticos do problema constitutivo e resultados numéricos obtidos através do programa desenvolvido. Esses resultados são então comparados a resultados obtidos em ensaios experimentais.

No último capítulo, são apresentadas as conclusões deste trabalho.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A modelagem constitutiva de materiais frágeis tem sido objeto de estudo já há algumas décadas. O comportamento físico não-linear de sólidos, observado macroscopicamente, é uma manifestação de mudanças irreversíveis que ocorrem em sua microestrutura. Algumas dessas mudanças têm origem em microdefeitos constituídos por inclusões ou mesmo vazios, os quais, pelas suas características, favorecem a concentração de microtensões. Esses microdefeitos constituem o que se entende por dano inicial do material.

Dependendo das condições ambientais e devido à existência de solicitações mecânicas, mesmo que a resposta global do material se mantenha dentro dos limites do regime elástico, o dano inicial pode evoluir em consequência do rompimento das ligações entre átomos ou por rupturas na interface entre componentes distintos. Macroscopicamente, esse processo de evolução do dano inicial, ou danificação, acaba por influenciar diretamente as propriedades elásticas, conforme evidenciam as reduções de resistência e de rigidez. Já em um estágio mais avançado de solicitação, a danificação leva à formação e ao crescimento de microfissuras. Como essa fissuração ocorre de forma distribuída, a Mecânica do Dano é capaz de formular modelos muito realistas para os cimentos.

Com o intuito de estudar a ruptura, precocemente observada em relação ao esperado em metais em regime de deformação lenta, como uma consequência da existência de defeitos no material, Kachanov introduziu, em 1958, as primeiras idéias sobre danificação de meios contínuos. A partir de então, vários outros estudos sobre a Mecânica do Dano têm sido realizados tornando-a uma das mais populares teorias utilizadas para a simulação desse processo.

A terminologia Mecânica do Dano para Meios Contínuos ("*continuum damage mechanics*", CDM) foi usada por Janson & Hult (1977) para designar modelos da mecânica do contínuo que tratam das respostas constitutivas, considerando os efeitos de degradação em modo difuso e progressivo, por meio de redução das propriedades mecânicas, como resistência e rigidez do material.

É importante notar a diferença em relação à Mecânica da Fratura. Enquanto a Mecânica da Fratura lida com as condições de propagação de uma fissura macroscópica imersa em um meio contínuo íntegro, a Mecânica do Dano se ocupa

do efeito de um processo de microfissuração distribuída que se desenvolve em uma etapa preliminar a formação da fissura discreta.

Desde então inúmeras abordagens bem sucedidas utilizando o dano para modelar materiais diversos, como polímeros ou mesmo materiais frágeis, estão presentes na literatura como Krajcinovic (1983) e Ortiz (1985). Enquanto algumas delas têm como base apenas o comportamento fenomenológico, outras abordagens, baseadas na formulação da CDM, levam em conta princípios termodinâmicos.

Em 1985, Lemaitre desenvolveu bases teóricas de acordo com a formulação termodinâmica dos processos irreversíveis, propondo o uso de variáveis internas escalares, implicando na hipótese de deterioração isotrópica da rigidez. No entanto, a particularidade dessa nova abordagem está no conjunto de hipóteses fundamentais admitidas. São elas: os processos irreversíveis podem ser aproximados por uma seqüência de estados de equilíbrio aos quais correspondem valores instantâneos de um número finito de variáveis internas; as variáveis internas a serem escolhidas devem representar os processos dissipativos dominantes e a resposta do meio depende exclusivamente de seu estado atual.

Novos modelos então foram desenvolvidos. Entre os modelos puramente de dano podem ser destacados Kattan & Voyiadjis (1990), Maugin (1992) e Lemaitre (1992). Existem ainda outros modelos de dano com propriedades específicas, entre esse trabalhos destacam-se Murakami (1981) e Kachanov (1984) modelando a deterioração lenta do material; Mazars (1984) estudando o dano em estruturas de concreto armado; Lemaitre & Chaboche (1985) e Marigo (1985) na simulação da interação dano-fadiga; e Simo & Ju (1987) e Tai (1990) tratando sobre dano em materiais dúcteis.

Esses modelos de dano podem ser classificados como isotrópicos ou anisotrópicos, segundo a natureza da variável de dano utilizada. Os modelos isotrópicos, onde são empregadas variáveis escalares, são conceitualmente simples e têm a vantagem de necessitarem de um número reduzido de parâmetros a se identificar. Por outro lado, eles podem ter sua aplicação restrita a algumas situações. Alguns modelos, como o apresentado em Mazars & Pizaudier-Cabot (1989), chegam a empregar dois escalares para quantificar o dano, um para a tração outro para a compressão. Os modelos anisotrópicos, onde a variável de dano é uma grandeza tensorial apresentam uma gama de aplicação maior, porém com maior complexidade na identificação dos parâmetros do modelo.

Já na década de 90 uma série de trabalhos envolvendo a aplicação da termodinâmica para a modelagem constitutiva de materiais frágeis, como solos e o concreto, foram então desenvolvidos, pode-se destacar Maugin (1992), Hansen & Schreyer (1994) e Collins & Houlsby (1997). A maioria desses trabalhos une efeitos da perda de rigidez às deformações plásticas e ao dano. Esses modelos dividem-se em dois grandes grupos.

O primeiro grupo é composto pelos modelos chamados “desacoplados”, onde o dano e a plasticidade são processos independentes, embora possam, sob algumas condições, acontecer simultaneamente. O segundo grupo é formado pelos modelos ditos acoplados, onde o dano e a plasticidade sempre ocorrem simultaneamente.

No presente trabalho, a CDM foi expressa através da abordagem utilizada nos materiais standard generalizados e usando as idéias apresentadas por Houlsby & Puzrin (2000) quando trataram de modelos elastoplásticos. A principal característica desse tipo de abordagem é o fato do comportamento constitutivo de um material ser conhecido a partir da definição de somente dois potenciais termodinâmicos: uma função de energia (energia livre de Helmholtz, energia livre de Gibbs, entalpia ou energia interna) e uma função de dissipação.

A introdução de um potencial termodinâmico, como a energia livre de Helmholtz, conduz às leis de estado a partir das quais é possível relacionar variáveis de estado com suas variáveis associadas. A deformação total e um conjunto de variáveis internas associadas à perda de rigidez são adotados como as variáveis de estado. As variáveis associadas são as tensões e as forças termodinâmicas generalizadas. Toda formulação baseia-se no uso de variáveis internas para representar o programa de cargas sofrido pelo material.

O potencial de dissipação introduzido fornece as leis de fluxo permitindo avaliar a evolução das variáveis internas. A definição de uma região de forças termodinâmicas admissíveis completa o modelo.

A lei da Normalidade estabelece que os incrementos da variável interna são perpendiculares a uma superfície no espaço das forças termodinâmicas definida a partir de uma função potencial. Muitos modelos assumem que a função potencial possui a mesma forma da função de danificação, isto é, fluxo associado. No entanto essa consideração não é necessária e existem evidências de que a função de

escoamento/danificação e a função potencial não são idênticas em materiais frágeis, ou seja, pode ocorrer fluxo não associado.

Motivados pelo problema de simular o fenômeno de “pull out” nas armaduras de peças de concreto armado, onde problemas de convergência são bastante comuns, Tao & Phillips (2005) desenvolveram um modelo de dano isotrópico bi-axial bastante simples, porém com ótimos resultados. Desse modelo foi retirada a região de forças termodinâmicas admissíveis e definida assim a superfície de dano.

No ano de 2007, Einav, Houlsby e Nguyen demonstraram que essa abordagem termodinâmica é capaz de descrever o comportamento constitutivo de materiais sujeitos a perda de rigidez sem considerar a plasticidade, tornando-se assim a base para esse estudo. A diferença entre o modelo apresentado pelos autores e os demais modelos para a plasticidade recai sobre o papel físico das variáveis internas.

A preocupação com as mudanças do comportamento constitutivo de materiais que interagem entre si formando uma interface é de longa data na literatura. Em modelos de elementos finitos essa região é simulada através dos elementos de interface.

Um dos primeiros trabalhos empregando esse tipo de elemento foi proposto por Ngo & Scordelis (1967). Ele foi utilizado na análise do comportamento de vigas de concreto armado. Nessa análise os autores consideraram uma viga tridimensional composta pelo material concreto e pelo material aço. O padrão das fissuras principais encontradas em ensaios experimentais foi reproduzido pela inserção de elementos de interface. As mudanças estruturais devido à fissuração do concreto foram obtidas através do emprego de um critério de resistência máxima a tração.

Goodman, Taylor e Brekke (1968) propuseram um elemento de interface e o empregaram para a análise de estabilidade de maciços rochosos e escavações. Especificamente, estudaram o comportamento de modelos de túneis em formato trapezoidal e semicircular construídos através da remoção de blocos até constituírem a cavidade. Os elementos de interface foram empregados como meio de ligação entre esses blocos.

Também com o propósito de analisar problemas em escavações e estabilidade de encostas rochosas, Zienkiewicz et. al (1970) propuseram um elemento de interface composto por quatro nós, porém geometricamente esse elemento não possui espessura, sendo que esta é considerada apenas como um

parâmetro na modelagem. Os autores empregaram o comportamento não linear elástico e o modelo plástico representado pelo critério de Mohr-Coulomb para descrever o material utilizado nos elementos de interface. Esse elemento se demonstrou adequado a discretização de modelos com elementos triangulares.

Para a análise das descontinuidades representadas por ligações de rochas, falhas e interfaces, Ghaboussi, Wilson e Isenberg (1973) propuseram um elemento de interface com espessura não nula. Os autores empregaram um modelo elástico, perfeitamente plástico com critério de escoamento de Mohr-Coulomb na análise de fundações de formato circular e no problema de cunha, desenvolvendo assim a formulação para um elemento de interface com simetria axial. Em 1978 Herrmann utilizou a mesma geometria e graus de liberdade propostos por Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973), porém com a possibilidade de admitir o escorregamento e a perda de contato entre os elementos. Isso foi feito através da inclusão de um conjunto de molas discretas que conectam as faces do elemento. A limitação do efeito de escorregamento é introduzida pelo autor através do critério de Mohr-Coulomb. Esse modelo foi utilizado para simular peças de concreto armado e estacas sujeitas a forças de empuxo devido ao assentamento de solo adjacente.

Também inspirados pelas idéias de Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973), Pande & Sharma (1979) desenvolveram um elemento de interface isoparamétrico de oito nós formulado em termos de deslocamentos relativos. A determinação dos deslocamentos é feita de maneira igual à empregada no método dos elementos finitos para os elementos isoparamétricos. Depois de computada a matriz de rigidez global são calculados os deslocamentos. Contudo, esses ainda são deslocamentos globais e relativos, sendo necessária uma transformação para que os deslocamentos absolutos sejam obtidos. Só então é feito o procedimento padrão dos elementos isoparamétricos para computar as deformações e tensões.

Resultados obtidos por Veiga (2000) mostram a equivalência entre o elemento de interface proposto por Pande & Sharma (1979) e o elemento utilizado no presente trabalho proposto por Desai et al. (1984). Porém o elemento proposto por Pande & Sharma (1979) exige um esforço computacional maior, uma vez que necessita da transformação dos deslocamentos relativos em globais.

O elemento de interface proposto por Desai et al. (1984) foi utilizado originalmente na modelagem de solos e sua grande vantagem recae no desembaraço do emprego de sua formulação, posto que tanto a formulação do

contínuo quando do elemento em si são realizadas através de elementos quadriláteros planos. Dessa forma torna-se fácil a implementação desse elemento em um programa computacional.

Mais uma vez o elemento desenvolvido por Ghaboussi, Wilson e Isenber (1973) foi usado como base para uma nova formulação. As diferenças propostas por Beer (1985) foram: uma formulação isoparamétrica e a espessura nula do elemento de interface. Para modelos bidimensionais foram empregados elementos de linhas entre elementos de casca, enquanto que, para modelos tridimensionais foram utilizados elementos de interface planos entre elementos sólidos. Essa formulação foi vantajosa para modelar juntas e fraturas de rochas.

Em 2003, Coutinho et al. propuseram uma extensão do elemento proposto por Herrmann (1978), uma vez que apenas acrescentou uma mola central ao elemento em questão. O cálculo das tensões e deformações ocorre da mesma forma.

Além dessas, outras contribuições foram feitas por outros autores como Griffiths (1987) que se preocupou com a escolha dos elementos de interface, Frank, Guenot e Humbert (1982) que empregaram elementos de interface para a modelagem de contato ou Day & Potts (1994) que estudaram as dificuldades numéricas em simulações com a presença de elementos de interface.

Com a criação e evolução de diversas linhas de pesquisa ligadas à bioengenharia vários trabalhos vêm estudando as interfaces entre materiais inertes (cimentos, hastes, pinos, etc.) e tecidos vivos (osso, dentina, etc.). A preocupação com essas interfaces reside no fato de várias técnicas odontológicas (endodontia, implantodontia, etc.) dependerem do sucesso da fixação entre os materiais envolvidos.

Na última década vários trabalhos avaliaram a resistência de adesão entre pino, cimento e dentina. Dentre esses, podem ser destacados: Ferrari et al. (2000), avaliando a influência dos túbulos dentinários no interior dos canais radiculares, aumentando da área superficial de adesão e sendo assim responsáveis por uma melhor adesão; Santis et al. (2000), verificando a resistência de adesão entre pino de fibra e cimentos resinosos através do ensaio de pull-out; Bouillaguet et al. (2003), averiguando a resistência de adesão por meio de ensaios de micro-tração, Goracci et al. (2005) testando a adesão de pinos intra-radulares através de três tipos ensaios experimentais de resistência adesiva (micro-tração com espécimes em forma de ampulheta, micro-tração com espécimes em forma de palitos e pull-out);

Lanza et al. (2005) utilizando o Método do Elementos Finitos com o intuito de avaliar a união entre pino-cimento-dentina; Perez et al. (2006) verificando a influência da espessura da camada de cimento resinoso na resistência adesiva em dentes tratados endodonticamente; e Bonfante (2007) examinando a continuidade da interface entre cimento e dentina por meio de microscopia eletrônica de varredura.

Com essa breve revisão bibliográfica procurou-se demonstrar que a abordagem utilizada no presente trabalho está em concordância com os recentes trabalhos na área de Mecânica do Dano, que a escolha do elemento de interface objetivou elementos versáteis, mas que conservassem a simplicidade, e que essas ferramentas são necessárias a um melhor entendimento, e conseqüente desenvolvimento, de técnicas endodônticas.

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1. MODELOS TERMODINAMICAMENTE ADMISSÍVEIS

Este item tem por objetivo apresentar, inicialmente, alguns aspectos da Termodinâmica aplicados aos meios contínuos visando garantir que o modelo constitutivo seja fisicamente admissível. A seguir, tal formalismo termodinâmico foi empregado em conjunto com a Mecânica do Dano. O desenvolvimento apresentado nesse item pode ser encontrado nos textos de Proença & Pituba (2000).

3.1.1. Considerações e definições gerais

Para os propósitos da Mecânica dos Meios Contínuos Sólidos, um sistema termodinâmico fechado é uma quantidade de matéria contínua e invariante. A noção de continuidade permite considerar subsistemas que ocupam volumes muito pequenos. Se for possível definir em tais volumes quantidades médias representativas do fluxo de calor, da temperatura e do gradiente de deformação em qualquer um dos seus pontos, então as leis relacionadas ao balanço de energia podem ser expressas por formas diferenciais e consideradas válidas em um ponto. A quantidade de energia em um sistema termodinâmico referenciada por unidade de massa é chamada *energia interna*.

Quando é possível avaliar todas as informações necessárias para a caracterização do problema, diz-se que o *estado* do sistema é conhecido. Uma grandeza física, mensurável direta ou indiretamente, necessária para determinar a energia interna do sistema, em qualquer instante, é denominada *variável de estado*. As *variáveis de estado observáveis* são aquelas que podem ser medidas. Elas, geralmente, são a temperatura e o tensor de deformações

Postula-se que um número finito de variáveis de estado seja suficiente para a determinação unívoca da energia interna. De maneira mais geral a escolha sobre o número de variáveis é arbitrária, até certo ponto, estando dependente dos fenômenos que se pretende levar em conta em cada problema.

Um sistema está em *equilíbrio termodinâmico* quando as variáveis de estado não são alteradas com o tempo. Se existe uma mudança ao longo do tempo, diz-se que o sistema está sofrendo um *processo*.

Além da energia interna, pode-se associar ao sistema quantidades de energia cinética, ligadas ao seu movimento, e energia potencial, relacionada à sua posição ou cota, ambas dependentes do referencial adotado, em relação ao qual se medem a velocidade e a posição do corpo.

Nas análises que seguem, considera-se que as mudanças na energia total do sistema implicam em mudanças nas parcelas referentes à sua energia cinética e energia interna. Admite-se, por simplificação, que as transformações que o sistema poderá sofrer não levem em alterações significativas de sua cota, de modo que mudanças na energia potencial não serão consideradas.

A energia total do sistema pode variar se houver trabalho mecânico realizado em relação ao sistema por forças internas e/ou transferências de calor. Normalmente, para dar generalidade ao estudo essa variação de energia é analisada considerando-se as taxas de trabalho mecânico (potência) e de transferência de calor.

3.1.2. Primeira Lei da Termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica estabelece justamente o balanço de energia entre a potência mecânica e a taxa de calor transferidas para dentro do sistema com a taxa de variação da sua energia total.

A potência mecânica pode ser produzida por forças \vec{a} distribuídas por unidade de superfície e por forças \vec{b} por unidade de massa. O calor pode ser transmitido por condução através da superfície de corpo e/ou induzido diretamente na massa por irradiação ou então por alguma fonte interna.

A relação que define a potência mecânica, ou externa P_{ext} , introduzida sobre uma quantidade de massa que ocupa certo instante o volume B, limitado pela superfície ∂B , é expressa na seguinte forma:

$$P_{ext} = \int_{\partial B} \vec{a} \cdot \vec{v} d\partial B + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB \quad (3.1)$$

onde \vec{v} é vetor velocidade do ponto material que na configuração atual do corpo ocupa a posição x do espaço de pontos. Ainda na relação anterior aparece a densidade ρ , que multiplicada pela força \vec{b} é denominada força de corpo.

Por sua vez, a taxa de calor Q_e introduzida no sistema provém da condução através da superfície ∂B e do calor gerado por unidade de massa r . Então, por definição:

$$Q_e = - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB \quad (3.2)$$

onde \vec{q} é o vetor fluxo de calor e o sinal negativo indica o fluxo de fora para dentro do sistema, uma vez que \vec{n} é um versor que, em cada ponto do contorno, aponta para o exterior do corpo.

A primeira lei da termodinâmica diz respeito à conservação de energia do sistema, podendo-se enunciá-la da seguinte maneira: *a taxa de trabalho mecânico ou potência das cargas externas mais a taxa de calor introduzida no sistema é igual à taxa de energia cinética mais a taxa de variação da energia interna*. A relação que a exprime é a seguinte:

$$P_{ext} + Q_e = \dot{E}_c + \dot{U} \quad (3.3)$$

onde,

$$\dot{U} = \frac{d}{dt} \int_B \rho e dB \quad (3.3a)$$

é a taxa de energia interna (e é a densidade de energia interna por unidade de massa), e:

$$\dot{E}_c = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB \quad (3.3b)$$

é a taxa de energia cinética.

O segundo membro da equação (3.3) compõe a *taxa de energia total do sistema* (\dot{E}_T), de modo que:

$$\dot{E}_T = P_{ext} + Q_e \quad (3.4)$$

Substituindo-se (3.3) nas expressões das energias envolvidas, obtém-se:

$$\int_{\partial B} \vec{a} \cdot \vec{v} d\partial B + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} + \rho e \right] dB \quad (3.5)$$

A parcela referente à potência mecânica pode ser desenvolvida considerando-se os teoremas de Cauchy e da divergência.

Do teorema de Cauchy segue que $\vec{a} = \sigma \vec{n}$ em ∂B , onde \vec{n} é o versor normal ao contorno no ponto e σ é o tensor de tensões. Fazendo-se uso do teorema da divergência, a integral de contorno, correspondente ao carregamento distribuído na superfície, pode ser transformada em uma integral no volume. Dessa forma, a potência mecânica resulta:

$$P_{ext} = \int_B \text{div}(\sigma^T \vec{v}) dB + \int_B \rho \vec{b} \cdot \vec{v} dB \quad (3.6)$$

Lembrando-se da análise tensorial que: $\text{div}(\sigma^T \vec{v}) = \text{div} \sigma \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v}$, a expressão anterior passa a ser dada por:

$$P_{ext} = \int_B \left[(\text{div} \sigma + \rho \vec{b}) \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v} \right] dB \quad (3.7)$$

Finalmente, levando-se em conta a equação de balanço da quantidade de movimento linear e o princípio da conservação da massa, obtém-se:

$$\int_B \left(\rho \frac{d\vec{v}}{dt} \cdot \vec{v} + \sigma \cdot \text{grad} \vec{v} \right) dB = \frac{d}{dt} \int_B \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dB + \int_B \sigma \cdot D dB \quad (3.8)$$

e, portanto

$$P_{ext} = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB + \int_B \sigma \cdot D dB \quad (3.9)$$

A primeira parcela é a taxa de energia cinética do sistema e a segunda é denominada potência das tensões, sendo D o tensor taxa de deformação, igual à parte simétrica do tensor gradiente de velocidade ($\dot{\epsilon}$ no caso de pequenas deformações).

Assim a potência introduzida pode ser avaliada via taxa de trabalho realizado pelas forças externas ou de forma equivalente, pela variação da energia cinética mais a potência das tensões.

Utilizando-se de (3.9), a expressão (3.5) assume a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right] dB + \int_B \sigma \cdot D dB - \int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} d\partial B + \int_B \rho r dB = \frac{d}{dt} \int_B \left[\frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} + \rho e \right] dB \quad (3.10)$$

Admitindo-se, por um lado, um regime de pequenas deformações ($D = \dot{\epsilon}$) e, por outro lado, aplicando-se o teorema da divergência à parcela de fluxo de calor no contorno, valem as relações:

$$\sigma \cdot D = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} \quad (3.11)$$

$$\int_{\partial B} \vec{q} \cdot \vec{n} \, d\partial B = \int_B \text{div} \vec{q} \, dB \quad (3.12)$$

Assim sendo, considerando-se que a expressão (3.10) deve valer para qualquer porção do volume ocupado pelo sistema, uma forma local para a primeira lei pode ser escrita da seguinte forma:

$$\rho \dot{e} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \text{div} \vec{q} + \rho r \quad (3.13)$$

3.1.3. Segunda Lei da Termodinâmica

A primeira lei permite a transformação das diferentes formas de energia entre si, desde que haja um balanço entre elas, sem qualquer restrição sobre o sentido em que a conversão possa se processar. Nos processos reversíveis esse fato realmente não tem importância; entretanto nos processos irreversíveis, ou dissipativos, a ausência de restrição é relevante.

A segunda lei da termodinâmica introduz o conceito de entropia do sistema. Além disso, na ocorrência de um processo dissipativo, essa lei impõe a variação não-negativa dessa grandeza, restringindo as possibilidades de conversão entre as formas de energia.

Admite-se, de início, que ao volume B ocupado pelo sistema em cada instante t , se possa associar um número S chamado entropia de B , dado por:

$$S = \int_B \rho s \, dB \quad (3.14)$$

onde $s = s(x, t)$ é a entropia específica por unidade de massa da partícula que ocupa na configuração atual do corpo a posição x . Nos processos reversíveis, a variação de entropia tem correspondência com a quantidade de calor transferida. Em um sentido bastante simples, a entropia relaciona-se com o grau de desordem assumido pelo sistema em função da quantidade de calor transferida.

A segunda lei impõe que, em processos quaisquer de transformação que incluem os processos irreversíveis, a variação total de entropia de um sistema deve ser igual ou superar a variação provocada pela transferência de calor. A igualdade vale para processos reversíveis e a desigualdade para processos irreversíveis.

Nesse último caso, diz-se que existe produção interna de entropia. Em forma geral, a lei se exprime por:

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho s dB \geq \int_B \frac{r}{\theta} \rho dB + \int_{\partial B} -\frac{\vec{q}}{\theta} \cdot \vec{n} d\partial B \quad (3.15)$$

Na expressão (3.15) θ representa a temperatura absoluta, definida como um campo escalar de valores positivos em cada ponto do domínio B considerado. O segundo membro da inequação (3.15) é a taxa ou fluxo de entropia correspondente à transferência externa de calor.

A imposição da segunda lei implica que, ao contrário dos processos reversíveis, nos processos irreversíveis a energia interna não fica totalmente armazenada no sistema, mas parte dela acaba sendo empregada na evolução dos fenômenos internos que geram maior desordem no sistema. Normalmente, faz-se referência a essa parte da energia interna como energia dissipada.

Retornando a expressão (3.15) e empregando-se o teorema da divergência, aquela relação assume a seguinte forma:

$$\int_B \left(\rho \frac{ds}{dt} + \text{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \right) dB \geq 0 \quad (3.16)$$

Como essa desigualdade deve ser válida para qualquer volume B do corpo, torna-se válida a seguinte forma local:

$$\rho \dot{s} + \text{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \geq 0 \quad (3.17)$$

3.1.4. A desigualdade de Clausius-Duhem

A primeira e a segunda lei podem ser combinadas conduzindo a uma desigualdade que deve ser observada para que um processo seja termodinamicamente admissível. Considerando as relações que exprimem localmente a primeira e a segunda lei:

$$\rho \dot{e} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \text{div} \vec{q} + \rho r \quad (3.18)$$

$$\rho \dot{s} + \text{div} \frac{\vec{q}}{\theta} - \frac{\rho r}{\theta} \geq 0 \quad (3.19)$$

Da análise tensorial sabe-se que:

$$\operatorname{div} \frac{\bar{q}}{\theta} = \frac{1}{\theta} \operatorname{div} \bar{q} - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \quad (3.20)$$

Substituindo-se essa relação na expressão da segunda lei e combinando-se com a primeira resultam, sucessivamente:

$$\begin{aligned} \rho \dot{s} + \frac{1}{\theta} \operatorname{div} \bar{q} - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} - \rho \frac{r}{\theta} &\geq 0 \\ \rho \dot{s} + \frac{1}{\theta} (\sigma \cdot \dot{\varepsilon} + \rho r - \rho \dot{e}) - \frac{1}{\theta^2} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} - \rho \frac{r}{\theta} &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Finalmente, multiplicando-se a última expressão por θ e cancelando-se ρr obtém-se a desigualdade de Clausius-Duhem:

$$\rho \theta \dot{s} + \sigma \cdot \dot{\varepsilon} - \rho \dot{e} - \frac{1}{\theta} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \geq 0 \quad (3.22)$$

Processos nos quais a desigualdade de Clausius-Duhem é verificada localmente a cada instante são denominados “termodinamicamente admissíveis”.

3.1.5. Potencial termodinâmico

Pode-se ainda trabalhar com uma nova variável ψ denominada energia livre:

$$\psi = \rho e - \rho \theta s \quad (3.23)$$

Derivando essa energia em relação ao tempo, tem-se:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} &= \rho \dot{e} - \rho \theta \dot{s} - \rho \dot{\theta} s \\ \rho(\theta \dot{s} - \dot{e}) &= -(\dot{\psi} + \rho \dot{\theta} s) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Substituindo na desigualdade de Clausius-Duhem (3.22), obtém-se:

$$\sigma \cdot \dot{\varepsilon} - (\dot{\psi} + \rho \dot{\theta} s) - \frac{1}{\theta} \operatorname{grad} \theta \cdot \bar{q} \geq 0 \quad (3.25)$$

Definidas as variáveis de estado que se julgam serem relevantes ao modelo, define-se um potencial termodinâmico a partir do qual se derivam as leis de estado. Utilizando-se o potencial da energia livre ψ , escrito como função do tensor de deformações ε , da temperatura θ e das variáveis de estado internas α_k associadas a processos irreversíveis, tem-se:

$$\psi = \psi(\varepsilon, \theta, \alpha_k) \quad (3.26)$$

Nessa condição, a taxa de energia livre fica expressa por:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \cdot \dot{\varepsilon} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \cdot \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k \quad (3.27)$$

Combinando-se as relações (3.25) e (3.27), resulta que:

$$\left(\sigma - \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \right) \cdot \dot{\varepsilon} - \left(\rho s + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \cdot \dot{\theta} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \right) \cdot \dot{\alpha}_k - \frac{1}{\theta} \text{grad} \theta \cdot \vec{q} \geq 0 \quad (3.28)$$

A desigualdade (3.28) deve valer para qualquer processo, em especial os reversíveis.

Em um caso particular, considere um processo reversível, adiabático e com temperatura uniforme. Nesse caso, a única variável é o tensor de deformações elásticas (reversível) e a desigualdade (3.28) fica atendida se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} = \sigma \quad (3.29)$$

Em um segundo caso, considere um processo puramente térmico a temperatura constante, então a única variável de estado é a entropia e a desigualdade (3.24) fica atendida se:

$$\rho s = - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (3.30)$$

Voltando aos processos gerais e impondo a validade das expressões (3.29) e (3.30), o que implica em que as variáveis de estado possam ser agrupadas entre aquelas de natureza reversível e irreversível, a desigualdade (3.28) assume a forma:

$$- \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k - \frac{1}{\theta} \text{grad} \theta \cdot \vec{q} \geq 0 \quad (3.31)$$

Considerando-se, novamente, uma transformação a temperatura constante, a relação (3.31) fornece a seguinte condição, chamada desigualdade de dissipação:

$$- \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.32)$$

Por analogia as expressões (3.29) e (3.30) pode-se definir uma variável chamada força termodinâmica A^k . Assim como a tensão é uma quantidade conjugada da deformação, as forças termodinâmicas são conjugadas às variáveis internas:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \alpha_k} = -A^k \quad (3.33)$$

de forma que a expressão (3.32) passa a ser escrita como:

$$A^k \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.34)$$

Lembrando-se que o sinal negativo da relação (3.31) decorreu de uma correção do fluxo para que passasse a ser considerado positivo quando fosse para o interior do corpo, então a relação (3.34) indica que os processos irreversíveis definem a quantidade de energia dissipada.

O potencial termodinâmico descreve a relação entre as variáveis de estado e suas variáveis associadas. Observa-se que, na equação (3.32), estão presentes as taxas de variação das variáveis internas. Para materiais que sofrem o processo de danificação, nos quais as tensões e deformações atuais dependem da história de carregamento, as equações constitutivas apresentadas não são suficientes para descrever o comportamento do material. Fazem-se necessárias equações de evolução que determinem as taxas de variação de cada uma das variáveis internas.

Enquanto em modelos elásticos apenas um potencial termodinâmico é suficiente para descrever o comportamento constitutivo do material, em modelos de dano pelo menos dois potenciais termodinâmicos são utilizados. Esses são a energia livre e um potencial de dissipação. A introdução de um potencial termodinâmico, como a energia livre, conduz às leis de estado a partir das quais é possível relacionar variáveis de estado com as suas variáveis associadas, conforme já apresentado. Já a introdução de um potencial de dissipação fornece as leis de fluxo que permitem avaliar a evolução das variáveis internas. A definição de uma região de forças termodinâmicas admissíveis completa o modelo.

3.1.6. Região admissível

A região admissível P é definida como o conjunto de forças termodinâmicas possíveis para um dado material. A função de danificação $f(A^k)$ (análoga a função de escoamento em modelos elásto-plásticos) delimita uma região no espaço das forças termodinâmicas que se modifica conforme o processo de danificação ocorre. Dessa forma, enquanto se dá esse processo de danificação, a variável interna de dano é alterada e a região admissível no espaço das forças termodinâmicas se modifica.

Assim, a região P pode ser representada através de uma função f , denominada função de danificação:

$$P = \{A^k / f(A^k) \leq 0\} \quad (3.35)$$

A fronteira $\partial\Omega$ da região admissível, ou superfície de dano, é definida por:

$$\partial\Omega = \{A^k / f(A^k) = 0\} \quad (3.36)$$

Já o interior Ω da região admissível é descrito por:

$$\Omega = \{A^k / f(A^k) < 0\} \quad (3.37)$$

Pontos internos à região admissível representam estados a partir dos quais ocorrem processos elásticos sem a perda de rigidez. Forças termodinâmicas situadas na fronteira da região admissível são aquelas associadas a processos puramente elásticos, sem danificação, caso sejam seguidas de um descarregamento ou de início de processos de danificação, também elásticos, mediante aplicação de carga efetiva. Forças termodinâmicas exteriores a essa região são inadmissíveis. As taxas de variação das variáveis internas assumem valores segundo o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_k = 0 \text{ se } & \begin{cases} f(A^k) < 0 \\ f(A^k) = 0 \text{ e } \dot{f} < 0 \end{cases} \\ \dot{\alpha}_k \neq 0 \text{ se } & f(A^k) \text{ e } \dot{f} = 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

A danificação isotrópica caracteriza-se por uma modificação igual em todas as suas direções da superfície de dano no espaço das forças termodinâmicas. A alteração da superfície pode ser definida por uma única variável escalar. O processo de danificação anisotrópico, por sua vez, costuma ser descrito por uma variável tensorial.

3.1.7. Potencial de dissipação

Nesta seção são introduzidos os últimos conceitos necessários à modelagem do comportamento constitutivo de materiais através de modelos termodinamicamente admissíveis. A lei da normalidade e convexidade da região admissível são discutidas.

Voltando-se à equação (3.34), assume-se que a força termodinâmica $A^k = 0$ sempre pertence à região admissível. Dessa forma tem-se: dada uma força

termodinâmica onde se inicia o processo de danificação $A^k \in P$ e uma taxa da variável interna $\dot{\alpha}_k$, a desigualdade:

$$(A^k - A_*^k) \cdot \dot{\alpha}_k \geq 0 \quad (3.39)$$

é válida para qualquer valor de forças termodinâmicas $A_*^k \in P$. Observa-se que a equação (3.39), está de acordo com a forma local da desigualdade de dissipação descrita na equação (3.34) e satisfaz o postulado de estabilidade de Drucker no espaço das forças termodinâmicas.

A desigualdade (3.39) possui uma interpretação geométrica que estabelece que o vetor $(A^k - A_*^k)$ forma um ângulo agudo com $\dot{\alpha}_k$, implicando que todos os pontos A_*^k devem estar de um dos lados plano perpendicular a $\dot{\alpha}_k$ no ponto A^k que toca a superfície de dano. Assim, a superfície de dano deve ser convexa, conforme ilustrado na figura 03.

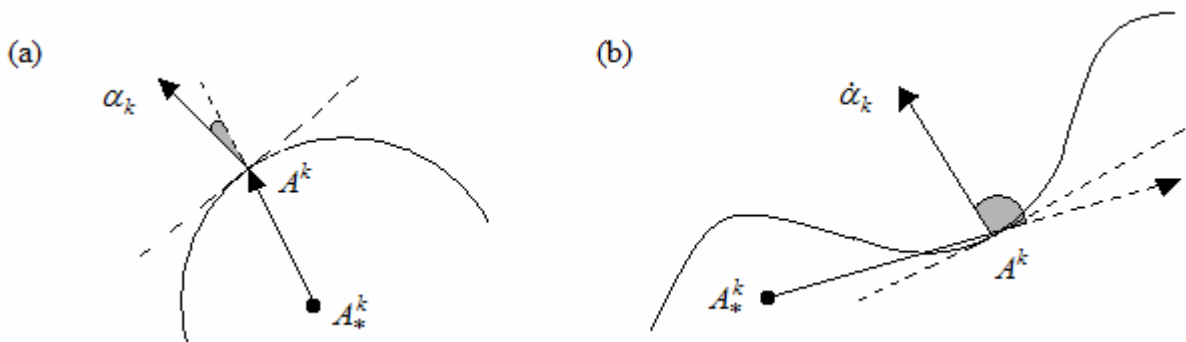


FIGURA 03 – CONVEXIDADE DA SUPERFÍCIE DE DANO: (a) SUPERFÍCIE DE DANO CONVEXA (b) SUPERFÍCIE DE DANO NÃO-CONVEXA
FONTE: O autor (2009)

Se a superfície de dano for regular em A^k , uma maneira de assegurar que todo A_*^k esteja em um dos lados do plano perpendicular a $\dot{\alpha}_k$ no ponto A^k é que $\dot{\alpha}_k$ seja normal a superfície de dano em A^k e, portanto, paralelo ao gradiente da função de danificação no ponto:

$$\dot{\alpha}_k = \lambda \nabla f(A^k) \quad (3.40)$$

A equação (3.40) descreve a Lei da Normalidade. O multiplicador de Lagrange λ é um escalar com valor não negativo. As restrições referentes a esse escalar são determinadas pela condição de complementaridade:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A^k) = 0 \quad (3.41)$$

a última condição da expressão (3.41) implica que λ possui valor positivo apenas quando a função de danificação é nula, isto é, quando ocorre danificação. Por sua vez quando a função de danificação assume valor negativo, λ assume valor nulo, caso em que a o processo de danificação não evolui.

Finalmente, assumindo que em um dado instante de tempo t , a condição $f(A^k(t))=0$ é satisfeita e, para qualquer instante de tempo, as forças termodinâmicas admissíveis são tais que $f \leq 0$, tem-se $\dot{f}(A^k(t)) \leq 0$. Se $\dot{f} < 0$, as forças termodinâmicas movem-se em direção ao interior da região admissível, isto é, tem-se descarregamento elástico e $\lambda = 0$. Logo, o dano, para os quais $\lambda > 0$, ocorrem quando $\dot{f} = 0$. Pode-se resumir essa condição em:

$$\text{Quando } f = 0 \text{ então } \lambda \geq 0, \dot{f} \leq 0 \text{ e } \lambda \cdot \dot{f} = 0 \quad (3.42)$$

O formalismo descrito até aqui apresenta, portanto, três aspectos fundamentais, a escolha das variáveis internas, a escolha da forma da energia livre e as equações que exprimem as leis de evolução das variáveis internas. Atendidos os três aspectos é possível que sejam formulados modelos constitutivos fenomenológicos, termodinamicamente consistentes e que refletem, através do conjunto de variáveis internas, os principais fenômenos físicos observados na estrutura.

3.2. MECÂNICA DO DANO

As idéias de representar o processo de danificação em meios contínuos foram desenvolvidas por Kashanov & Rabotnov em 1958. Entretanto, maiores avanços na Mecânica do Dano para meios contínuos se deram somente nas décadas de 70 e 80 com bases teóricas mais rigorosas, seguindo conceitos termodinâmicos. Desde então inúmeros modelos da Mecânica do Contínuo foram propostos a fim de modelar a resposta constitutiva de diversos tipos de materiais.

Este item tem por objetivo apresentar essas idéias para que, em conjunto com a teoria termodinâmica, o modelo constitutivo seja descrito.

3.2.1. Variável interna de dano

As grandezas da Mecânica do Contínuo são definidas em um ponto. No entanto, do ponto de vista geométrico, e levando-se em conta a heterogeneidade de um material, essas grandezas precisam ser consideradas apenas como valores médios dentro do que é chamado “elemento de volume representativo”. Entende-se como “representativo” um elemento com dimensões suficientemente grandes para considerar a distribuição de microdefeitos contínua e, ao mesmo tempo, um elemento suficientemente pequeno para ser considerado como um ponto material. Como consequência, as tensões e deformações da Mecânica do Contínuo devem ser interpretadas fisicamente como grandezas que atuam sobre esse elemento.

De forma similar, para definir o dano em um ponto M , é considerado um elemento de volume representativo orientado por um plano definido por sua normal \vec{n} e pela abscissa x na direção de \vec{n} . O valor de dano $\alpha_d(M, \vec{n}, x)$ em um ponto M na direção \vec{n} com abscissa x é definido por:

$$\alpha_d(M, \vec{n}, x) = \frac{\delta S_{D_x}}{\delta S} \quad (3.43)$$

onde δS é a área de interseção do plano considerado e do elemento de volume representativo, e δS_{D_x} é área de interseção de todas as microfissuras e microcavidades em δS . Neste trabalho, a variável de dano será denotada como α_d em vez do comum D . Isso foi feito a fim de enfatizar que essa é uma variável interna e será utilizada em conjunto com a abordagem anteriormente descrita. Na figura 04 são apresentados o elemento de volume representativo e as áreas de interesse.

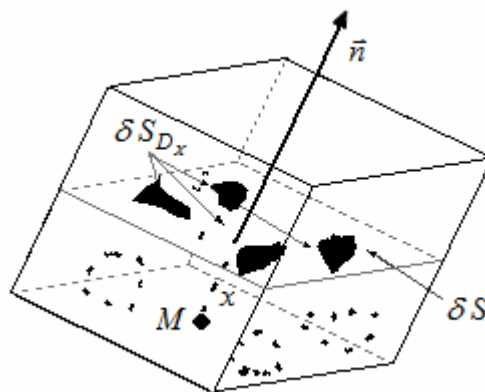


FIGURA 04 – ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO
 FONTE: Nguyen (2005)

A variável de dano assume valores no intervalo $0 \leq \alpha_d \leq 1$, sendo que $\alpha_d = 0$ representa o material íntegro e $\alpha_d = 1$ indica um estado de total deterioração. A falha do elemento de volume representativo na direção \vec{n} é definida na área mais danificada:

$$\alpha_d(M, \vec{n}) = \max_x \alpha_d(M, \vec{n}, x) = \frac{\delta S_D}{\delta S} \quad (3.44)$$

onde δS_D é a área de interseção mais danificada. Uma vez que o dano no elemento de volume representativo depende da direção \vec{n} , a natureza anisotrópica do dano está contemplada nessa definição e α_d passa a ter caráter tensorial. A teoria de dano proporciona um meio de caracterizar a deterioração de um material em um nível microscópico através de valores em um nível macroscópico. Se as microfissuras e microcavidades são uniformemente distribuídas no elemento de volume representativo, é adequado assumir o dano de forma isotrópica, afinal a variável de dano α_d , nesse caso, não depende da direção \vec{n} . No presente trabalho o estudo será restrito a casos com variável de dano escalar, ou seja, caso isotrópico.

3.2.2. Deformação equivalente

O conceito de tensão efetiva é resultado direto da definição de variável interna de dano.

Considere o caso de tração uniaxial com uma variável de dano escalar. Devido ao processo de danificação a área da seção transversal é reduzida e se torna uma área efetiva, $S - S_D$, na qual S é a seção transversal original e S_D é a área total de microfissuras. A tensão não mais pode ser representada por:

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (3.45)$$

devendo ser substituída pela tensão efetiva:

$$\bar{\sigma} = \frac{F}{(S - S_D)} = \frac{\sigma}{(1 - \alpha_d)} \geq \sigma \quad (3.46)$$

A tensão efetiva é definida como a tensão calculada utilizando-se a área da seção transversal que efetivamente resiste às forças aplicadas.

A extensão desse conceito ao caso de tensões multiaxiais com uma variável escalar de dano não exige mudanças uma vez que esse caso não depende da direção \vec{n} . Assim:

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma}{(1 - \alpha_d)} \quad (3.47)$$

onde σ e $\bar{\sigma}$ são o tensor de tensões e o tensor de tensões efetivas respectivamente.

No descarregamento, quando da mudança de tensões de tração para tensões de compressão, devido ao fenômeno de fechamento das microfissuras, a seção transversal efetiva é maior que $S - S_D$. Em um caso particular onde todos os microdefeitos se fecham $S_D = 0$ essa seção será igual a S e a tensão σ e a tensão efetiva $\bar{\sigma}$ serão iguais. Esse comportamento unilateral tem sua importância durante simulação de materiais frágeis, porém não foi introduzido no presente trabalho.

O princípio de deformações equivalentes apresentado por Lemaitre (1971) segue da definição de tensão efetiva e auxilia a evitar análises micromecânicas para cada tipo de defeito e cada tipo de mecanismo de dano. Esse princípio pode ser enunciado da seguinte forma: *Qualquer equação constitutiva empregada a fim de se obter as deformações de um material danificado deve ser tratada da mesma forma como se aplicada a um material íntegro exceto que a tensão deve ser substituída pela tensão efetiva.* A figura 05 ilustra o princípio de deformações equivalentes.

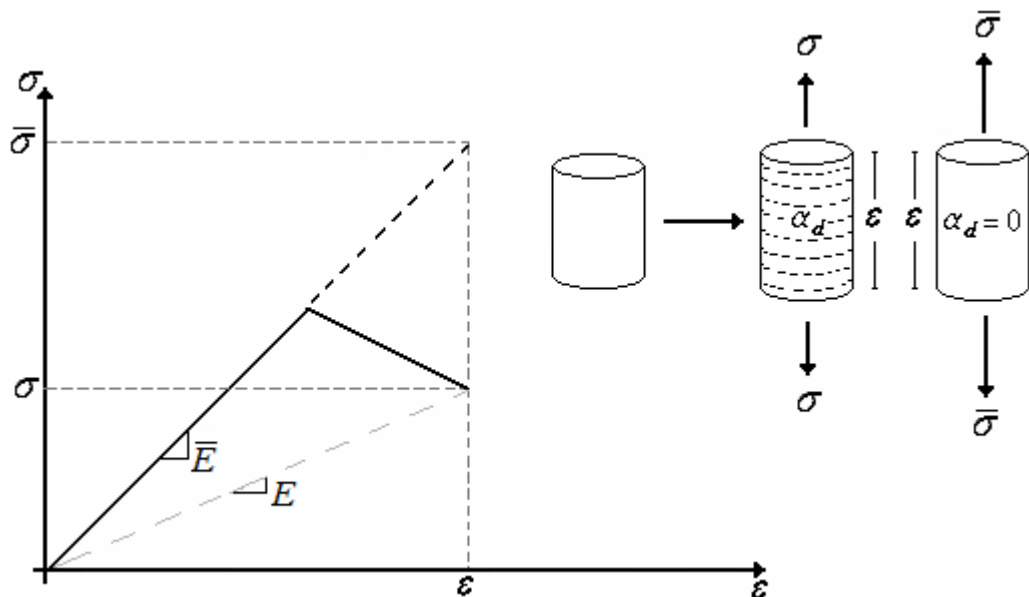


FIGURA 05 – PRINCÍPIO DAS DEFORMAÇÕES EQUIVALENTES
FONTE: O autor (2009)

Ainda segundo Lemaitre (1992), a aplicação da hipótese de deformações equivalentes resulta em um estado de junção entre dano e elasticidade. Essa junção vem da observação do fenômeno físico onde o processo de danificação resulta em uma mudança nas propriedades mecânicas de um material. Na modelagem constitutiva isso pode ser descrito para o caso uniaxial através da seguinte expressão:

$$\sigma = (1 - \alpha_d) \bar{E} \varepsilon \quad (3.48)$$

Essa expressão está de acordo com observações experimentais realizadas por Lemaitre (1992), onde o módulo de elasticidade efetivo E depende do valor da variável de dano:

$$E = (1 - \alpha_d) \bar{E} \quad (3.49)$$

Em formulações baseadas em deformações, o dano é caracterizado através da tensão efetiva em conjunto com a hipótese de deformações equivalentes

3.2.3. Tensão equivalente

Um conceito dual à hipótese de deformações equivalentes é a formulação baseada em tensões. A hipótese de tensão equivalente é proposta e o dano é apresentado através do conceito de deformação efetiva, no qual o tensor de deformações efetivas para o caso de dano isotrópico é descrito por:

$$\bar{\varepsilon} = (1 - \alpha_d) \varepsilon \quad (3.50)$$

A hipótese de tensão equivalente foi enunciada por Simo & Ju (1987) na seguinte forma: *a tensão associada a um estado de danificação obtido através da imposição de uma deformação é equivalente a tensão obtida em um material não danificado através da imposição da deformação efetiva*. A figura 06 ilustra a hipótese de tensões equivalentes.

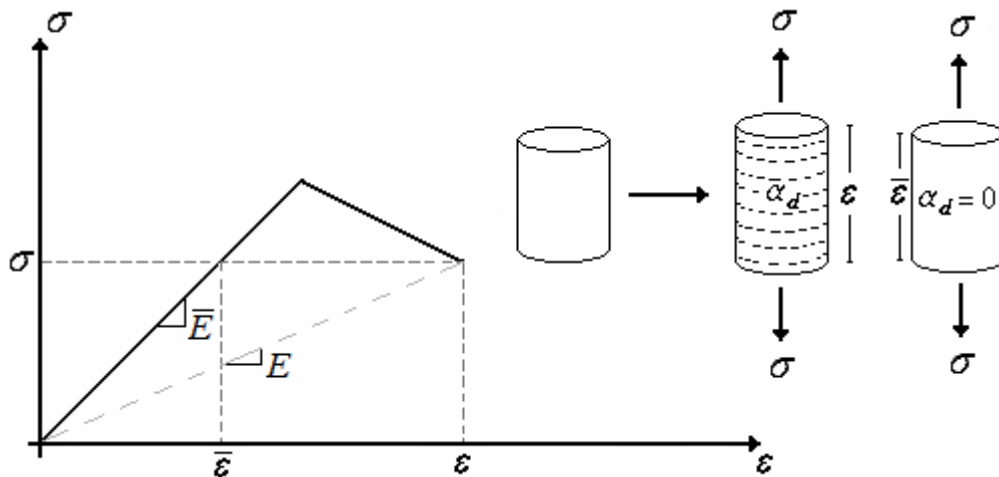


FIGURA 06 – HIPÓTESE DAS TENSÕES EQUIVALENTES
 FONTE: O autor (2009)

3.3. MODELO CONSTITUTIVO

Nesta seção, será apresentado o modelo constitutivo para a simulação do processo de danificação. A teoria anteriormente apresentada será descrita através de conceitos da análise convexa. A nova abordagem permitirá obter os mesmos resultados de uma maneira mais rigorosa, além de eliminar algumas restrições como, por exemplo, a necessidade de utilizar apenas funções suaves. No início da seção é definido um potencial termodinâmico, em seguida, as leis de estado apresentadas anteriormente, equações (3.29) e (3.33), são reescritas utilizando outra formulação. Em seguida o potencial termodinâmico complementar da energia livre de Helmholtz é obtido. Por fim, resultados da análise convexa são apresentados, o potencial de dissipação e as leis de evolução são determinados, completando o modelo. As demonstrações dos resultados da análise convexa encontram-se nos trabalhos de Rockafellar (1970) e Lemaréchal & Hiriart-Urruty (1991).

3.3.1. Potencial termodinâmico e Leis de estado

Como mostrado anteriormente o estado de um material, sofrendo um processo de danificação isotérmico, pode ser completamente definido através do conhecimento do tensor de deformações ε e da variável interna de dano α_d .

A primeira lei da termodinâmica estabelece uma função de estado, chamada energia interna. Em condições isotérmicas, essa função pode ser substituída pela energia livre de Helmholtz:

$$\psi = \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.51)$$

Se a energia livre de Helmholtz ψ for adotada, pode-se definir assim as leis de estado:

$$\sigma = \nabla_{\varepsilon} \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.52)$$

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} \psi(\varepsilon, \alpha_d) \quad (3.53)$$

Alternativamente, uma transformada de Legendre-Fenchel pode ser efetuada obtendo-se a função dual ou conjugada de ψ :

$$\psi_C = \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.54)$$

Onde σ é tensor de tensões de Cauchy e A^d são as forças termodinâmicas. Essas duas funções são relacionadas por:

$$\psi_C(\sigma, A^d) = \sup_{\varepsilon, \alpha} [\sigma \cdot \varepsilon + A^d \cdot \alpha_d - \psi(\varepsilon, \alpha_d)] \quad (3.55)$$

Por hipótese, assume-se que a função energia livre de Helmholtz ψ é estritamente convexa e diferenciável. Uma vez que ψ é estritamente convexa, o potencial conjugado ψ_C é diferenciável. Assim as variáveis de estado ε e α_d podem ser assim definidas:

$$\varepsilon = \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.56)$$

$$\alpha_d = \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.57)$$

Usando ainda a hipótese de deformação equivalente e considerando a energia livre de Helmholtz como:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d) \quad (3.58)$$

A variável de estado σ é definida como:

$$\sigma = \nabla_{\varepsilon} \bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d) \quad (3.59)$$

definição essa correspondente a formulação de Lemaitre (1971) se for identificada a tensão efetiva como:

$$\bar{\sigma} = \nabla_{\varepsilon} \bar{\psi}(\varepsilon) \quad (3.60)$$

É importante notar que a força termodinâmica, associada à perda de rigidez, tem a mesma dimensão de energia:

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} [\bar{\psi}(\varepsilon)(1 - \alpha_d)] = \bar{\psi}(\varepsilon) \quad (3.61)$$

3.3.2. Potencial de dissipação

A lei da normalidade e a convexidade da superfície de dano foram apresentadas, anteriormente, como conseqüências do princípio da potência máxima de Hill. Nesta seção, esses resultados são obtidos a partir da aplicação do teorema apresentado a seguir.

Teorema: Seja X um espaço reflexivo de Banach e seja $g : X \rightarrow R$ uma função própria, convexa e fraca semi-contínua (l.s.c.). Dados $x \in X$ e $x^* \in X^*$, então:

$$x^* \in \partial g(x) \leftrightarrow x \in \partial g^*(x^*)$$

onde g^* é uma função conjugada de g .

Na aplicação do teorema apresentado, assume-se que o espaço vetorial X corresponde ao espaço das taxas da variável interna de dano e o espaço X^* corresponde ao espaço das forças termodinâmicas associadas ao processo de danificação.

Define-se a função suporte da região convexa de forças termodinâmicas admissíveis P como:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \sup_{A_*^d} \{A_*^d \cdot \dot{\alpha}_d / A_*^d \in P\} = A^d \cdot \dot{\alpha}_d \quad (3.62)$$

onde A^d é o ponto onde o supremo é atingido. Nesse contexto, χ é a função de dissipação. Essa função é a função conjugada à função indicatriz da região admissível P e possui as seguintes propriedades: convexa, positiva homogênea, fraca semi-contínua (l.s.c.), não negativa e contém a origem. Portanto do teorema apresentado no início dessa seção, tem-se:

$$\dot{\alpha}_d \in \partial Ind_P \leftrightarrow A^d \in \partial \chi(\dot{\alpha}_d) \quad (3.63)$$

onde a função indicatriz de P , Ind_P , indica se um valor de A^d pertence a região P .

Para valores de $A^d \notin P$, $Ind_P = \infty$.

A equação acima é uma generalização da Lei da Normalidade, admitindo o caso de funções de escoamento não suaves. A formulação apresentada nessa seção permite descrever a Lei da Normalidade de duas formas equivalentes, conforme apresentado no quadro a seguir:

FORMULAÇÃO	DESCRIÇÃO
Tipo I	χ - função convexa, positiva homogênea, não negativa e contendo a origem. $A^d \in \partial\chi(\dot{a}_d)$
Tipo II	P - conjunto fechado, convexo e contendo a origem. $\chi_C^* = \text{Ind}_P$ - função indicatriz de P $\dot{\alpha} \in \partial\text{Ind}_P(A^d)$

QUADRO 1 – FORMULAÇÕES EQUIVALENTES DA LEI DE FLUXO
FONTE: FREITAS (2008)

Segundo Han & Reddy (1999) considerações práticas determinam qual das formulações é mais apropriada para a resolução de um determinado problema.

A formulação do tipo II é comumente mais utilizada e é a formulação adotada no presente trabalho. Segundo essa formulação, onde P representa a região admissível, Ω o interior dessa região e $\partial\Omega$ sua fronteira, identificam-se três situações distintas:

- $A^d \notin P \rightarrow \partial\text{Ind}_P(A^d) = \{ \}$ e, portanto, essa região é inacessível;
- $A^d \in \Omega \rightarrow \partial\text{Ind}_P(A^d) = \{0\}$ e, por essa razão, o interior de P é conhecido como região elástica;
- $A^d \in \partial\Omega \rightarrow \partial\text{Ind}_P(A^d) = \{ \dot{\alpha}_d / (A_*^d - A^d) \cdot \dot{\alpha} \leq 0, \forall A_*^d \in P \}$ representando o cone das normais externas a P em A^d .

3.3.3. Equação constitutiva de dano em taxas

Nessa seção, as relações constitutivas são enunciadas em termos de taxas temporais de tensão e deformação.

A fim de obter as leis de estado em taxas, as equações (3.56) e (3.57) são derivadas em relação ao tempo. Como resultado, obtém-se as seguintes expressões:

$$\dot{\varepsilon} = \nabla_{\sigma\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} + \nabla_{\sigma A^d}(\sigma, A^d) \dot{A}^d \quad (3.64)$$

$$\dot{\alpha}_d = \nabla_{A^d A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{A}^d + \nabla_{A^d \sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \quad (3.65)$$

Introduzindo o potencial $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$:

$$\begin{aligned} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) &= \frac{1}{2} \nabla_{\sigma\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \cdot \dot{\sigma} + \nabla_{\sigma A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{\sigma} \cdot \dot{A}^d + \\ &+ \frac{1}{2} \nabla_{A^d A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \dot{A}^d \cdot \dot{A}^d \end{aligned} \quad (3.66)$$

pode-se obter as leis de estado em taxas:

$$\dot{\varepsilon} = \nabla_{\dot{\sigma}} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) \quad (3.67)$$

$$\dot{\alpha}_d = \nabla_{\dot{A}^d} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d) \quad (3.68)$$

O potencial $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$ é um funcional quadrático, estritamente convexo, diferenciável, coercivo e com mínimo em zero. Por definição, o funcional complementar a esse potencial é também diferenciável e possui a forma:

$$j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) = \sup_{\sigma, A^d} [\dot{\sigma} \cdot \dot{\varepsilon} + A^d \cdot \dot{\alpha}_d - j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)] \quad (3.69)$$

Assim como as taxas de deformações e da variável interna de dano estão relacionadas ao potencial introduzido na equação (3.66), as taxas de tensões e das forças termodinâmicas podem ser obtidas do potencial $j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d)$:

$$\dot{\sigma} = \nabla_{\dot{\varepsilon}} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) \quad (3.70)$$

$$\dot{A}^d = -\nabla_{\dot{\alpha}_d} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d) \quad (3.71)$$

Para exprimir a relação constitutiva em taxas é necessário, ainda, encontrar uma relação de consistência que vinculará as taxas de forças termodinâmicas com as taxas da variável interna de dano. Essa relação de consistência é apresentada por:

$$\dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d = 0 \quad (3.72)$$

Faz-se necessário, também, definir a região convexa das taxas das forças termodinâmicas admissíveis. Como em Freitas (2008) e Hecke (1991) adota-se, para essa região, o cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_p(A^d)$, ou seja:

$$\dot{P} = [\partial \text{Ind}_p(A^d)]^- \quad (3.73)$$

Salienta-se que \dot{P} é um cone convexo com vértice na origem e definido por:

$$\dot{A}_*^d \in [\partial \text{Ind}_P(A^d)]^- \leftrightarrow \dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d \leq 0 \quad \forall \dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(A^d) \quad (3.74)$$

e esquematizado na figura 07.

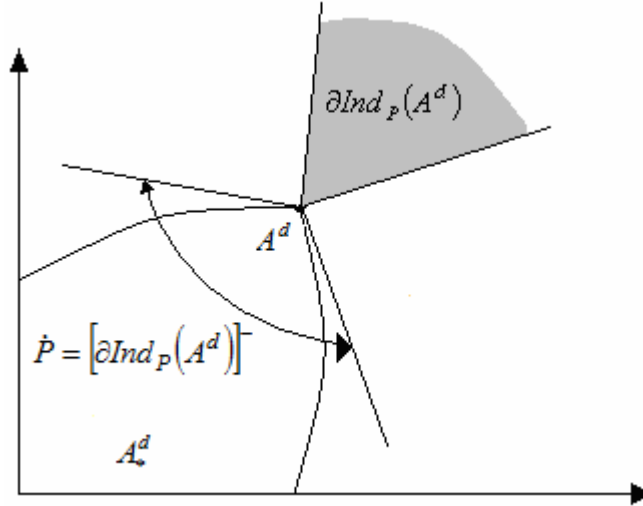


FIGURA 07 – CONE POLAR NEGATIVO DE $\partial \text{Ind}_P(A^d)$
FONTE: O autor (2009)

Dados os vetores A_*^d e A^d , o vetor $(A_*^d - A^d)$ encontra-se na região do cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$. Fazendo $A_*^d = A_{t+\Delta t}^d$ e $A^d = A_t^d$, obtém-se:

$$\dot{A}^d = \lim_{\Delta t} \frac{A_*^d - A^d}{\Delta t} = \frac{\Delta A^d}{\Delta t} \quad (3.75)$$

Assim as taxas de forças termodinâmicas admissíveis \dot{A}^d , também se encontram na região do cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$.

Considerando que a região das taxas das forças termodinâmicas admissíveis é o cone polar negativo de $\partial \text{Ind}_P(A^d)$, é possível demonstrar que dado $\dot{A}^d \in \dot{P}$, então $\dot{\alpha}_d$ é tal que:

- $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(A^d)$
- $\dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d = 0$ se, e somente se, $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(\dot{A}^d)$

É possível obter uma interpretação física para o fato de $\dot{\alpha}_d \in \partial \text{Ind}_P(\dot{A}^d)$, analisando as seguintes situações particulares:

- $A^d \in \Omega$, nesse caso, não ocorre danificação, pois a força termodinâmica nesse instante pertence ao interior da região

admissível, $\dot{\alpha} = 0$ e qualquer taxa de força termodinâmica é admissível;

- b) $A^d \in \partial\Omega$, nesse caso, onde a força termodinâmica pertence à superfície da região admissível, identificam-se três situações:
- i. $\dot{A}^d \in \Omega\{\dot{P}\}$. Sendo a taxa de forças termodinâmicas pertencente ao interior do cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$, o conjunto $\partial Ind_p(\dot{A}^d)$ possui somente o elemento nulo, interpreta-se que não ocorre danificação, isto é, $\dot{\alpha} = 0$. Esse é o caso em que ocorre descarregamento elástico local;
 - ii. $\dot{A}^d \in \partial\Omega\{\dot{P}\}$. Quando a taxa de forças termodinâmicas pertence à superfície do cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$ pode ocorrer danificação ou ainda um processo neutro. Nesse caso, $\dot{\alpha}_d \in \partial Ind_p(\dot{A}^d)$.
 - iii. $\dot{A}^d \notin \dot{P}$. Quando a taxa das forças termodinâmicas não pertence ao cone polar negativo de $\partial Ind_p(A^d)$ o conjunto $\partial Ind_p(\dot{A}^d)$ é vazio.

3.3.4. Equação constitutiva de dano em incrementos finitos

Processos evolutivos podem ser aproximados através da descrição do comportamento do material em certos instantes obtidos em intervalos de tempo selecionados. O problema de evolução consiste em avaliar as variáveis no fim do intervalo de tempo a partir de seus valores no início do intervalo e dos valores dos incrementos sofridos pelas variáveis ao longo do intervalo. Dessa forma, o estado de um corpo no instante $t + \Delta t$ é obtido a partir do estado do corpo em um instante t :

$$\sigma_{t+\Delta t} = \sigma_t + \Delta\sigma \quad (3.76)$$

$$A_{t+\Delta t}^d = A_t^d + \Delta A^d \quad (3.77)$$

$$\varepsilon_{t+\Delta t} = \varepsilon_t + \Delta\varepsilon \quad (3.78)$$

$$\alpha_{d,t+\Delta t} = \alpha_{d,t} + \Delta\alpha_d \quad (3.79)$$

As leis de estado, dadas pelas equações (3.56) e (3.57), são reescritas na forma incremental:

$$\Delta \varepsilon = \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.80)$$

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) \quad (3.81)$$

Introduzindo o potencial $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$:

$$\begin{aligned} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) = & \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \Delta \sigma \cdot \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) - \\ & - \Delta A^d \cdot \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) - \psi_C(\sigma, A^d) \end{aligned} \quad (3.82)$$

É possível obter os incrementos de deformação e os incrementos da variável interna relativa ao dano:

$$\Delta \varepsilon = \nabla_{\sigma} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (3.83)$$

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (3.84)$$

Adotando para potencial de dissipação a função:

$$\chi(\Delta \alpha_d) = \sup_{A_*^d} (A_*^d \cdot \alpha_d) \quad (3.85)$$

E para o potencial conjugado:

$$\chi_C(A^d + \Delta A^d) = \text{Ind}_P(A^d + \Delta A^d) \quad (3.86)$$

Obtêm-se as expressões:

$$(A^d + \Delta A^d) \in \partial \chi(\Delta \alpha_d) \quad (3.87)$$

$$\Delta \alpha_d = \partial \text{Ind}_P(A^d + \Delta A^d) \quad (3.88)$$

Salienta-se que o funcional $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$ é análogo ao funcional $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$, sendo que a diferença entre esses reside em dois pontos. Primeiramente, enquanto $j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d)$ é uma função quadrática das taxas temporais das tensões e das taxas temporais das forças termodinâmicas relativas ao dano, $\bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$ é uma função convexa e diferenciável dependente apenas de $\psi_C(\Delta \sigma, \Delta A^d)$. Além disso, na formulação em taxas, \dot{A}^d deve pertencer ao cone convexo das taxas admissíveis de \dot{P} , enquanto no problema em incrementos finitos as forças termodinâmicas relativas ao dano no final do passo $A^d + \Delta A^d$ devem ser admissíveis, isto é, contidas na região P .

O funcional $\bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d)$ é estritamente convexo, de forma que seu conjugado resulta diferenciável. A partir da relação:

$$\bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d) = \sup_{\Delta\sigma_*, \Delta A_*^d} \left[\Delta\sigma_* \cdot \Delta\varepsilon - \bar{j}_C(\Delta\sigma_*, \Delta A_*^d) \right] \quad (3.89)$$

E das propriedades do funcional conjugado, é possível obter a relação constitutiva inversa:

$$\Delta\sigma \in \nabla_{\varepsilon} \bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d) \leftrightarrow \Delta\varepsilon \in \nabla_{\sigma} \bar{j}_C(\Delta\sigma, \Delta A^d) \quad (3.90)$$

3.3.5. Relação entre função dissipação e função escoamento

Nessa seção a relação entre as funções de dissipação e de escoamento é apresentada, utilizando-se para isso o conceito de funções polares.

A função gauge ou função de Minkowski para um conjunto P é definida pela expressão a seguir:

$$g_P(A^d) = \inf \{ \mu > 0 / A^d \in \mu P \} \quad (3.91)$$

Conforme pode se observar, essa função assume o menor valor positivo pelo qual um conjunto P pode ser multiplicado, de forma que um elemento A^d do conjunto continue a fazer parte do mesmo.

Em conjuntos que contém a origem, a função gauge assume valor 1 para elementos na fronteira do conjunto e valor menor que 1 para elementos internos. Dessa forma como a função de danificação assume valor nulo para valores de forças termodinâmicas na fronteira da região admissível e valor menor que zero para forças termodinâmicas internas à região admissível, é possível definir a região admissível como:

$$P = \{ A^d / g_P(A^d) \leq 1 \} \quad (3.92)$$

Na equação (3.92), a função g_P a partir da qual a região admissível foi definida é denominada, por alguns autores, função de dano canônica.

A função g_P também pode ser definida da seguinte forma:

$$g_P(A^d) = \inf \{ \mu > 0 / \langle A^d \cdot \dot{\alpha}_d \rangle \leq \mu \chi(\dot{\alpha}_d) \} \quad (3.93)$$

Nessa equação χ representa a função de dissipação, isto é, a função suporte da região admissível P .

Assumindo que $\chi(\dot{\alpha}_d) = 0$, se e somente se, $\dot{\alpha}_d = 0$, então a função gauge e a função de dissipação podem ser relacionadas pela expressão:

$$g_P(A^d) = \sup_{A^d \in \text{dom } \chi} \frac{\langle A^d \cdot \dot{\alpha}_d \rangle}{\chi(\dot{\alpha}_d)} \quad (3.94)$$

A função (3.94) estabelece que as funções gauge e a função de danificação são funções conjugadas polares. O Lema apresentado a seguir permitirá obter a Lei da normalidade a partir das definições apresentadas.

Lema: Seja g uma função convexa não-negativa, com $g(0) = 0$ e seja A um ponto no interior do domínio de g , tal que $g(A) > 0$. Seja $P = \{X / g(X) \leq g(A)\}$. Então $\dot{\alpha} \in N_P(A)$, se e somente se, existir $\lambda \geq 0$, tal que $\dot{\alpha} \in \lambda \partial g(A)$.

Para funções diferenciáveis, obtém-se a forma clássica da Lei da Normalidade a partir do lema apresentado, isto é:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \nabla g(A^d) \quad (3.95)$$

Da definição de subdiferencial, determina-se o multiplicador λ . Fazendo $X = 0$ e depois $X = 2A^d$, na equação:

$$\lambda g(X) - \lambda g(A^d) \geq \dot{\alpha}_d \cdot (X - A^d) \quad (3.96)$$

E usando a propriedades de g , obtém-se a relação:

$$\lambda = \chi(\dot{\alpha}_d) \quad (3.97)$$

Para uma função de danificação f escrita sob uma forma qualquer, os vetores normais externos a P , em um ponto A^d da superfície de dano, também são proporcionais ao vetor gradiente da função f nesse ponto, de forma que:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \nabla_{A^d} f(A^d) \quad (3.98)$$

A condição de que somente pontos da superfície de dano podem apresentar danificação efetiva, isto é $\lambda \neq 0$, é condensada na condição de complementaridade:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A^k) = 0 \quad (3.99)$$

Com o auxílio da condição de consistência apresentada na equação (3.70) e da definição de cone polar negativo, a região das taxas de forças termodinâmicas admissíveis pode ser definida por:

$$\dot{P} = \{\dot{A}^d / \lambda \nabla_{A^d} f(A^d) \dot{A}^d, \forall \lambda \geq 0\} \quad (3.100)$$

A relação de consistência e a região definida na equação (3.100) permitem estabelecer as relações a seguir:

$$\text{se } f(A^d) = 0, \text{ então } \lambda \geq 0 \quad \dot{f}(A^k) \leq 0 \quad \lambda \cdot \dot{f}(A^k) = 0 \quad (3.101)$$

$$\text{onde } \dot{f} = \nabla_{A^d} f(A^d) \dot{A}^d \quad (3.102)$$

Caso a função de danificação não seja diferenciável, pode-se admitir que a região P é definida pela inserção de um número finito de regiões convexas, identificadas por funções f_j , suficientemente regulares, chamadas modos de danificação. Convencionou-se que f é o vetor cujo componente j é o valor da função f_j no ponto. Além disso, cada modo de danificação possui um multiplicador associado, ou seja, λ também é um vetor.

4. UM MODELO DE DANO SEGUNDO ENFOQUE TERMODINÂMICO

No presente capítulo o modelo de dano desenvolvido por Tao & Phillips (2005) é formulado segundo enfoque termodinâmico.

Para a energia livre, adota-se a seguinte função:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} \overline{ID} (1 - \alpha_d) \varepsilon \cdot \varepsilon \quad (4.1)$$

onde \overline{ID} é a matriz elástica apresentada na equação (4.2) em termos do módulo de elasticidade E e do coeficiente de Poisson ν .

$$\overline{ID} = \begin{bmatrix} \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} & \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+\nu)} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Na equação a seguir, a matriz elástica é apresentada para o caso de estado plano de deformações:

$$\overline{ID} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{(1-\nu)} & 0 \\ \frac{\nu}{(1-\nu)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

O potencial termodinâmico complementar possui a seguinte forma:

$$\psi_c(\sigma, A^d) = \begin{cases} \frac{1}{2\overline{ID}} \sigma \cdot \sigma & \text{se } A^d \leq A_0^d \\ \frac{1}{2\overline{ID}} \left[1 + C1(A^d - A_0^d)^{C2} \right] \sigma \cdot \sigma & \text{se } A^d > A_0^d \end{cases} \quad (4.4)$$

onde A_0^d é a força termodinâmica a partir da qual se inicia o processo de danificação calculada através da expressão (4.5), $C1$ e $C2$ são constantes do modelo responsáveis pela modificação da região admissível.

$$A_0^d = \frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} \quad (4.5)$$

Na expressão (4.5) ε_{d0} corresponde a deformação a partir da qual os processos não-lineares, como a danificação, ocorrem. Esse parâmetro é obtido através de ensaios de tração uniaxial, como pode ser visto na figura 08.

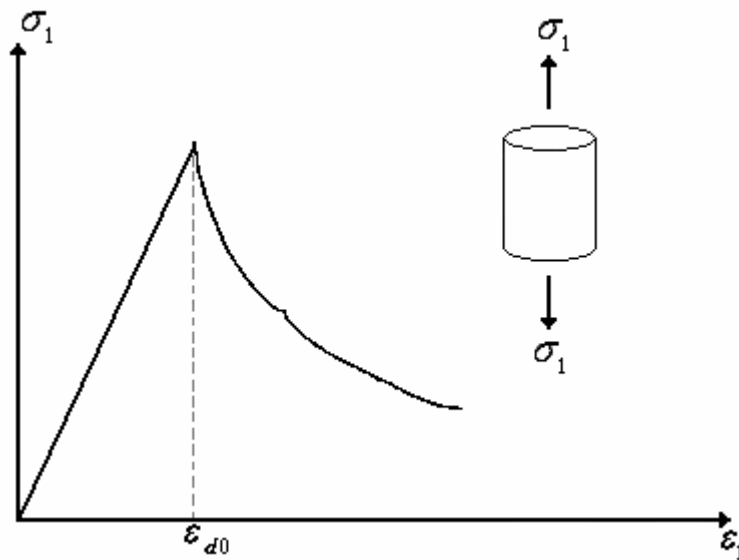


FIGURA 08 – ENSAIO DE TRAÇÃO UNIAXIAL: DEFINIÇÃO DE ε_{d0}
FONTE: Guello (2002)

A força termodinâmica relativa ao dano, por sua vez, se confunde com a energia livre, como pode ser observado na figura 09. Essa força termodinâmica pode ser interpretada como a energia livre do sistema se esse fosse perfeitamente elástico:

$$A^d = -\nabla_{\alpha_d} \psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon \cdot \varepsilon \quad (4.6)$$

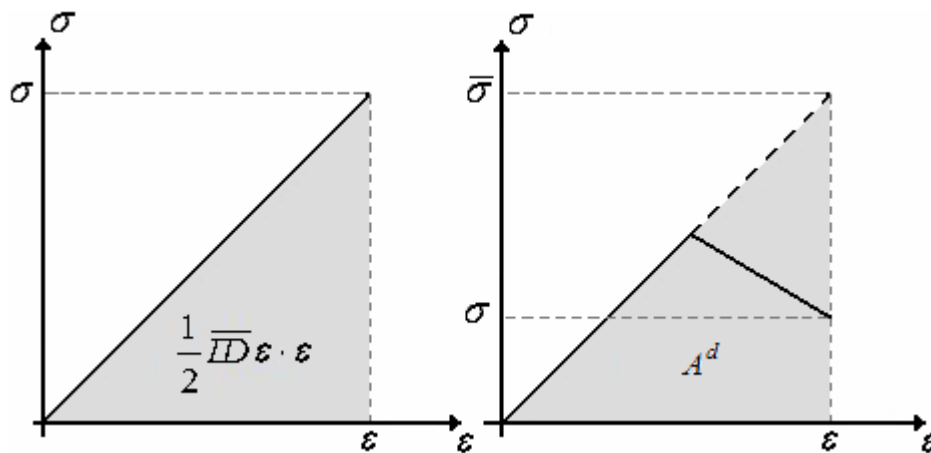


FIGURA 09 – COMPARAÇÃO ENTRE A ENERGIA LIVRE E A FORÇA TERMODINÂMICA
FONTE: O autor (2009)

A região das forças termodinâmicas admissíveis pode ser definida de forma similar a La Bordeire et al. (1992):

$$P = \{A^d - A_0^d - Z \leq 0\} \quad (4.7)$$

Segundo Tao & Phillips (2005), conforme o processo de danificação ocorre, a superfície inicial de danificação se altera em função do parâmetro de endurecimento/amolecimento Z . Esse parâmetro pode ser definido matematicamente de diferentes formas, através de polinômios, potenciais, funções exponenciais, etc. Segundo os autores ainda, potenciais e funções exponenciais representam de maneira mais acurada as curvas de carregamento de materiais cimentícios. Assim, Tao & Phillips (2005) definem o parâmetro Z como:

$$Z = \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_d}{1 - \alpha_d} \right)^{C2} \quad (4.8)$$

onde $C1$ e $C2$ são duas constantes a serem calibradas através de ensaios uniaxiais de tração e compressão. Os efeitos da variação dessas constantes sobre o parâmetro Z podem ser observados na figura 10.

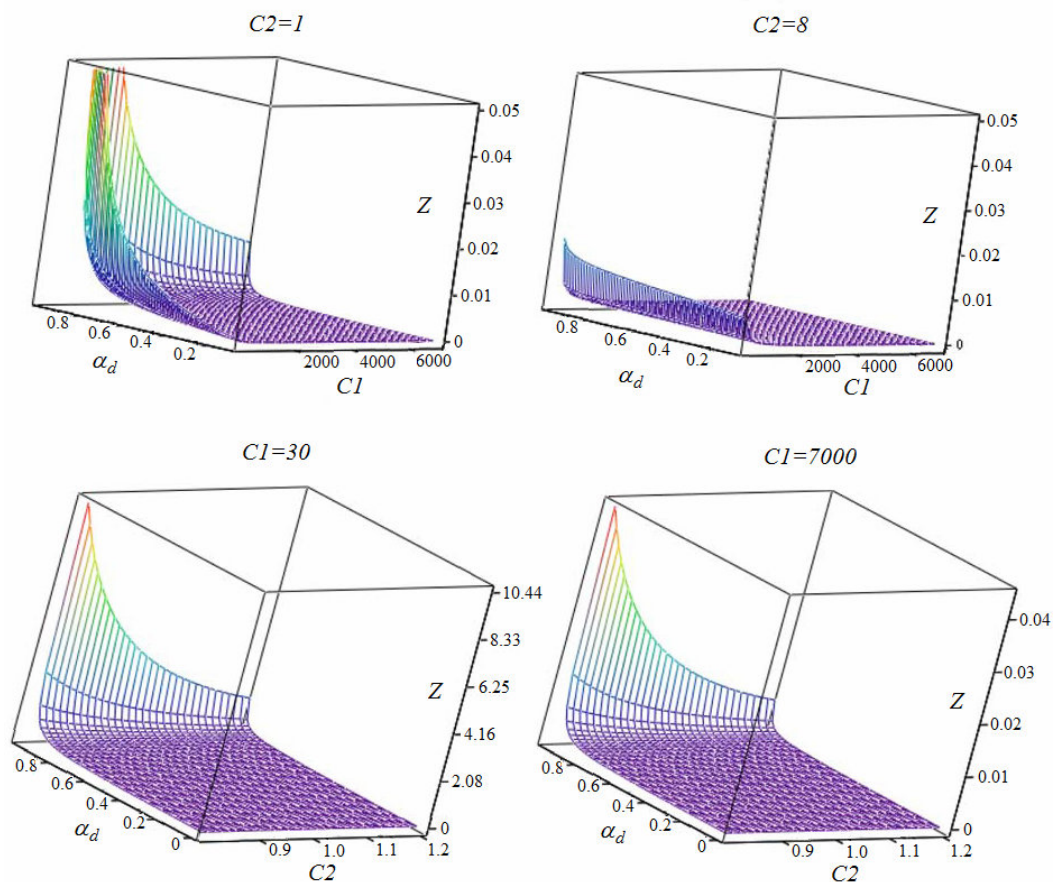


FIGURA 10 – EFEITO DE $C1$ E $C2$ EM Z
 FONTE: Tao & Phillips (2005)

Especificamente, $C1$ é responsável pela magnitude da região admissível e $C2$, por sua vez, é responsável pela superfície dessa região, influenciando a característica de endurecimento/amolecimento do material a ser simulado, como pode ser visto na figura 11. A escolha apropriada de $C1$ e $C2$ conduzirá a um parâmetro Z mais adequado aos diferentes tipos de cimentos e suas resistências a esforços de tração e compressão.

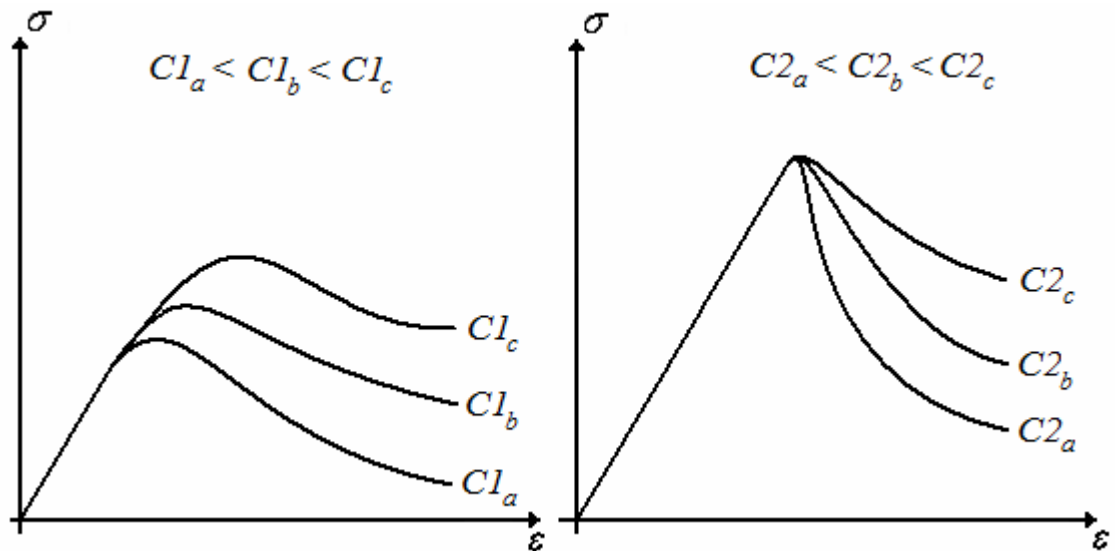


FIGURA 11 – SIGNIFICADO FÍSICO DE $C1$ E $C2$
 FONTE: O autor (2009)

Por definição, a função dissipação é o suporte da região admissível P , sendo determinada por:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \sup_{A^d \in P} \{A^d \cdot \dot{\alpha}_d\} \quad (4.9)$$

Assim a função de dissipação assume a forma:

$$\chi(\dot{\alpha}_d) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2} \overline{ID} \varepsilon \cdot \varepsilon\right) \dot{\alpha}_d, & \text{se } \dot{\alpha}_d > 0 \\ \infty, & \text{se } \dot{\alpha}_d \leq 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

O potencial termodinâmico complementar é então obtido a partir de:

$$\chi_C = \partial \text{Ind}_P(A^d) \quad (4.11)$$

5. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E ALGORITMOS

Este capítulo tem por objetivo descrever a estrutura do programa desenvolvido, detalhar o elemento de interface implementado, além de apresentar os métodos numéricos e algoritmos para resolver o problema de dano.

O procedimento de solução combina um método Quase-Newton para a resolução do equilíbrio global e um algoritmo de programação matemática (Newton-Raphson) para a resolução da equação constitutiva. A discretização espacial é obtida aplicando-se o método dos elementos finitos e a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial.

5.1. PROGRAMA DESENVOLVIDO

Com o intuito de simular a perda de rigidez em interfaces foi desenvolvido um programa numérico computacional. Esse programa foi implementado em linguagem FORTRAN 90, utilizando o software Compaq Visual Fortran, Copyright© 2000, Compaq Computer Corporation, baseando-se no programa desenvolvido por Freitas (2008) e com o auxílio de idéias contidas no Sistema de Desenvolvimento de Programas no Método dos Elementos Finitos (SDP) escrito por Feijóo & Gouvea (1985).

O código está estruturado em módulos, algumas sub-rotinas do programa de Freitas (2008) foram utilizadas a fim de possibilitar não só a simulação do processo de danificação, mas que também fosse capaz de realizar simulações de problemas elasto-idealmente-plásticos, com um critério de escoamento de Drucker-Prager, e simulações de problemas elastoplásticos, com um critério de escoamento definido a partir de um modelo cap.

O programa aceita como condições de contorno a imposição de cargas distribuídas, cargas concentradas e deslocamentos prescritos em determinados nós da malha de elementos finitos. Considera-se que os materiais em análise são isotrópicos, não havendo restrição quanto ao número de materiais que podem compor a estrutura analisada.

No programa desenvolvido para este estudo, o módulo denominado CODE contém o programa principal o qual realiza as chamadas dos módulos PREP,

responsável pela entrada de dados, e PROC, módulo que realiza a montagem e resolução do problema de equilíbrio para cada incremento de carga. Esses processos são realizados através da chamada de sub-rotinas contidas nesses dois módulos.

Para cada incremento de carga, a sub-rotina SOLVE resolve um problema de equilíbrio global, no qual são balanceadas as forças externas e as forças internas, calculadas ponto a ponto, seguindo a discretização espacial do Método dos Elementos Finitos. A sub-rotina FORMFK é responsável pela montagem da equação de equilíbrio. Essa por sua vez chama a sub-rotina ELEM responsável pela determinação das forças internas (tensões) a partir da resolução da equação constitutiva, em cada ponto de Gauss, a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial. As rotinas de integração numérica estão contidas no módulo INTEGRA. A figura 12 ilustra a estrutura do programa desenvolvido.

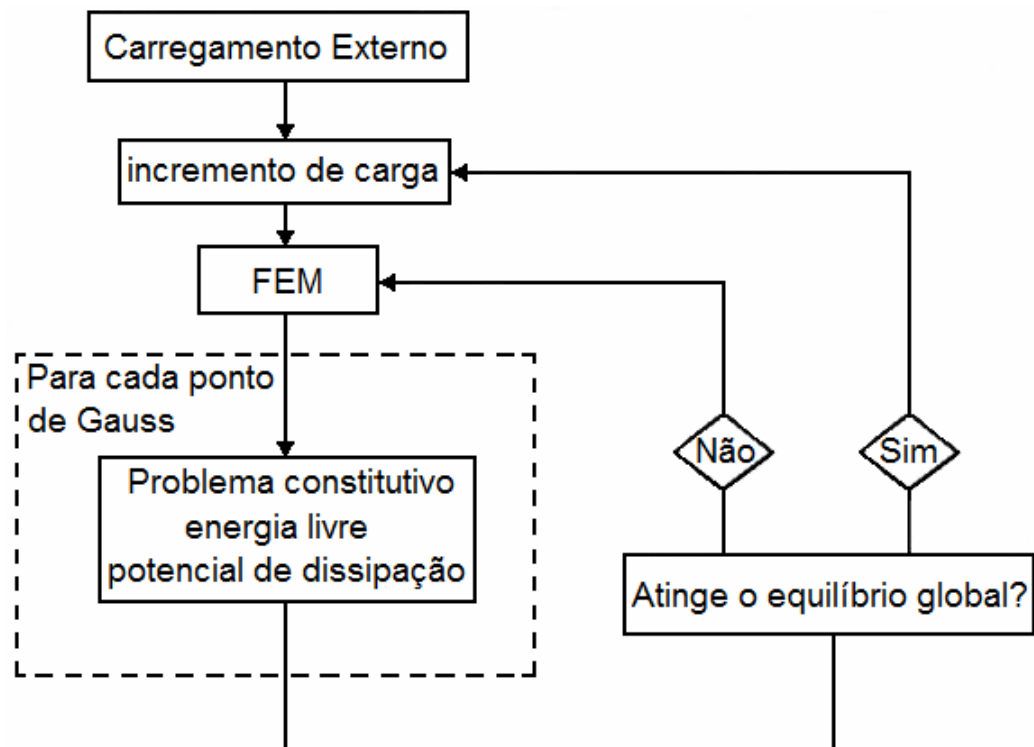


FIGURA 12 – ESTRUTURA DO PROGRAMA DESENVOLVIDO
FONTE: O autor (2009)

Inicialmente, o programa foi desenvolvido para resolver problemas de estado plano de tensões, de deformações e de sólidos axissimétricos, a extensão para análises tridimensionais poderá ser realizada com a implementação de elementos adequados.

5.2. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

A solução de um problema elástico plano é uma função que descreve os deslocamentos dos pontos do domínio. Essa função pertence a um espaço de dimensão infinita, podendo ser obtida a partir da combinação linear das infinitas funções que formam a base do espaço vetorial que faz parte.

O método de Galerkin propõe construir uma solução aproximada para o problema, tomando um número finito de funções que formam a base do espaço ao qual pertence a solução exata. Assim, a solução aproximada é formada a partir da combinação linear de um número finito de termos. Como Oden (1981) destacou, o método de Galerkin torna-se uma ferramenta útil a partir do momento em que se dispõe de uma técnica sistemática para a construção das funções que formam a base do espaço vetorial, denominadas funções base.

O Método dos Elementos Finitos é uma técnica que permite determinar as funções que formam a base do espaço vetorial aproximado. Segundo esse método, as funções base são construídas a partir de funções definidas em cada um dos elementos (subdomínios) no qual o domínio foi dividido. As funções definidas em cada elemento são denominadas funções de forma.

É possível definir um elemento máster com um sistema de coordenadas local com base no qual as funções de forma são definidas. A seguir, todos os cálculos do método são efetuados sobre esse elemento máster que se relaciona com os elementos da malha a partir de uma transformação (mudança de coordenadas). Por fim, as contribuições de cada elemento da malha são somadas com o intuito de se obter a solução aproximada do problema.

O problema de dano elástico pode ser definido para um elemento da malha Ω_e , pela seguinte equação:

$$\int_{\Omega_e} (B^i)^T (\sigma^i + \Delta\sigma^i) d\Omega = \int_{\Omega_e} (N^i)^T (b + \Delta b) d\Omega + \int_{\Gamma_q} (N^i)^T (t + \Delta t) d\Gamma \quad (5.1)$$

Na equação (5.1), $\Delta\sigma^i$ está relacionado com $\Delta\hat{U}^i$ pela relação constitutiva:

$$\Delta\sigma^i = \nabla_{\varepsilon} \bar{j} (B^i \Delta\hat{U}^i, \Delta\alpha_d) \quad (5.2)$$

O vetor local de incrementos de deslocamentos é formado a partir da combinação linear das funções de forma do elemento i , ou seja:

$$\Delta U^i(x, y) = [N^i(x, y)]^T \Delta \hat{U}^i(x, y) \quad (5.3)$$

$$(\Delta \hat{U}^i)^T = [U_{x1}^i \quad U_{y1}^i \quad U_{x2}^i \quad U_{y2}^i \quad \dots \quad U_{xn}^i \quad U_{yn}^i] \quad (5.4)$$

$$(N^i)^T = \begin{bmatrix} \Psi_1^i & 0 & \Psi_2^i & 0 & \dots & \Psi_n^i & 0 \\ 0 & \Psi_1^i & 0 & \Psi_2^i & \dots & 0 & \Psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\Delta U^i(x, y) = \begin{bmatrix} U_{x1}^i \Psi_1^i + U_{x2}^i \Psi_2^i + \dots + U_{xn}^i \Psi_n^i \\ U_{y1}^i \Psi_1^i + U_{y2}^i \Psi_2^i + \dots + U_{yn}^i \Psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Nas equações (5.3) a (5.6), Ψ representa as funções de forma, N^i representa a matriz contendo as funções de forma, $\Delta \hat{U}^i$ representa o vetor contendo as componentes x e y dos deslocamentos nodais e n representa o número de nós do elemento i .

A matriz B^i para campos de deslocamentos aproximados de deformação é dada por:

$$L \Delta U^i = L (N^i)^T \Delta \hat{U}^i = B^i \Delta \hat{U}^i \quad (5.7)$$

onde:

$$L = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

Finalmente, a equação de equilíbrio, fornecida pelo diferencial de $\bar{\Pi}(\Delta u)$ é dada por:

$$R(\Delta U) = (F_{\text{int}} + \Delta F_{\text{int}}) - (F_{\text{ext}} + \Delta F_{\text{ext}}) \quad (5.9)$$

Onde os termos F_{int} , ΔF_{int} , F_{ext} e ΔF_{ext} são obtidos a partir da soma das contribuições de todos os elementos:

$$F_{\text{int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \sigma^i d\Omega \quad (5.10)$$

$$\Delta F_{\text{int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \Delta \sigma^i d\Omega \quad (5.11)$$

$$F_{\text{ext}}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T b d\Omega + \int_{\Gamma_e} (N^i)^T t d\Gamma \quad (5.12)$$

$$\Delta F_{ext}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T \Delta b d\Omega + \int_{\Gamma_e} (N^i)^T \Delta t d\Gamma \quad (5.13)$$

5.2.1 Elemento de interface

O elemento aqui descrito foi inicialmente utilizado em problemas da mecânica dos solos, onde são comuns aproximações bidimensionais com o emprego das hipóteses simplificadoras do estado plano de deformações. Como os problemas axissimétricos são similares aos problemas de estado plano de deformações em coordenadas cilíndricas, o desenvolvimento utilizado por Desai et al. (1984) pode ser seguido sem maiores problemas.

Os autores partiram dessas hipóteses para chegar ao elemento de interface passando por um estado de transição. Esse estado de transição é caracterizado pela modificação do componente C_{1212} do estado plano de deformações. Essa alteração adveio de análises numéricas realizadas. Após esta primeira modificação, Desai e seus colaboradores, resolveram alguns problemas numéricos utilizando elementos isoparamétricos. Ao fim desse processo definiram as propriedades do elemento de interface propriamente dito. A esse estado de transição tem-se associado um elemento de transição, assim denominado o elemento que contém características do estado plano de deformações e da própria interface.

Para a análise do elemento de interface faz-se necessária a avaliação do comportamento do elemento em função da influência de sua espessura. Essa avaliação é realizada por intermédio de um elemento isoparamétrico de quatro nós $IQ4$, podendo ser estendida para o elemento com seis nós, empregado nesse trabalho para simular a região de interface.

A geometria do $IQ4$ é regular, sua altura tem dimensão h , comprimento b e sua matriz de rigidez foi calculada e integrada para uma dimensão unitária na direção X_3 , essa matriz de rigidez pode ser escrita como:

$$K_{IQ^4} = \begin{bmatrix} K_1 & K_3 & K_5 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & -K_3 & K_6 & -K_4 \\ K_3 & K_2 & -K_4 & K_7 & -K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_8 \\ K_5 & -K_4 & K_1 & -K_3 & K_6 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & K_3 \\ K_4 & K_7 & -K_3 & K_6 & -K_4 & K_8 & K_3 & \frac{-K_2}{2} \\ \frac{-K_1}{2} & -K_3 & K_6 & -K_4 & K_1 & K_3 & K_5 & K_4 \\ -K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_8 & K_3 & K_2 & -K_4 & K_7 \\ K_6 & K_4 & \frac{-K_1}{2} & K_3 & K_5 & -K_4 & K_1 & -K_3 \\ -K_4 & K_8 & K_3 & \frac{-K_2}{2} & K_4 & K_7 & -K_3 & K_2 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

onde:

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{1}{3bh} (h^2 C_{1111} + b^2 C_{1212}) & K_2 &= \frac{1}{3bh} (h^2 C_{1212} + b^2 C_{2222}) \\ K_3 &= \frac{1}{4} (C_{1122} + C_{1212}) & K_4 &= \frac{1}{4} (C_{1122} - C_{1212}) \\ K_5 &= -\frac{1}{6bh} (2h^2 C_{1111} - b^2 C_{1212}) & K_6 &= \frac{1}{6bh} (h^2 C_{1111} - 2b^2 C_{1212}) \\ K_7 &= -\frac{1}{6bh} (2h^2 C_{1212} - b^2 C_{2222}) & K_8 &= \frac{1}{6bh} (h^2 C_{1212} - 2b^2 C_{2222}) \end{aligned} \quad (5.15)$$

e:

$$C = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & 0 \\ C_{1122} & C_{2222} & 0 \\ 0 & 0 & C_{1212} \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

Na equação (5.16), a matriz C representa a matriz constitutiva do estado plano de deformações de um elemento contido no plano OX_1X_2 .

Se for considerado que o comprimento b é muito menor que sua altura h , como pode ser observado na figura 13, as equações anteriores podem ser aproximadas como:

$$K_1 = \frac{h}{3b} C_{1111} \quad K_2 = \frac{h}{3b} C_{1212}$$

$$\begin{aligned}
 K_3 &= \frac{1}{4}(C_{1122} + C_{1212}) & K_4 &= \frac{1}{4}(C_{1122} - C_{1212}) \\
 K_5 &= -\frac{h}{3b}C_{1111} = -K_1 & K_6 &= \frac{1}{6bh}C_{1111} = \frac{K_1}{2} \\
 K_7 &= -\frac{h}{3b}C_{1212} = -K_2 & K_8 &= \frac{h}{6b}C_{1212} = \frac{K_2}{2}
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Observa-se que o termo C_{2222} está ausente na equação (5.17). Também se pode notar que a matriz de rigidez pode ser escrita apenas em função dos termos K_1 a K_4 , onde os coeficientes K_1 e K_2 são dependentes, e K_3 e K_4 independentes da relação $\frac{h}{b}$.

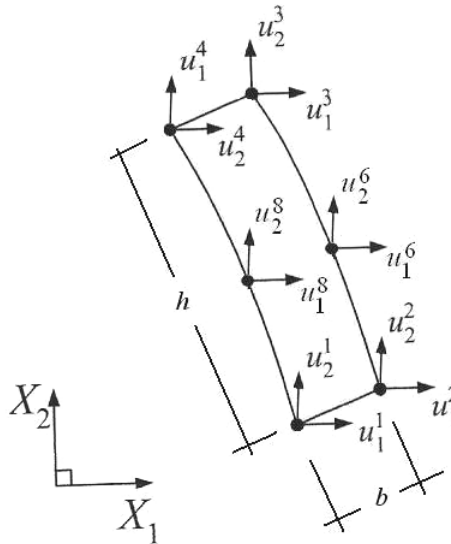


FIGURA 13 – ESBOÇO DO ELEMENTO DE INTERFACE
FONTE: O autor (2009)

A partir da constatação que o termo C_{2222} contribui muito pouco quando o comprimento do elemento tende a um valor muito baixo e o efeito da dilatação está presente é que Sharma & Desai (1992) propuseram que as propriedades da região sejam representadas por:

$$C_e^I = \begin{bmatrix} C_{1111} & 0 & C_{1112} \\ 0 & 0 & 0 \\ C_{1112} & 0 & C_{1212} \end{bmatrix} \tag{5.18}$$

Onde C_e^I é a matriz constitutiva elástica da interface, C_{1111} é a componente normal, C_{1212} é a componente cisalhante e C_{1112} a componente acoplada dos dois efeitos (normal e cisalhante). Porém, de acordo com os próprios autores, os efeitos

acoplados são difíceis de serem determinados por intermédio de testes, por isso neste trabalho, assim como em Lázaro (2004), foram negligenciados.

Como essa região de interface é fortemente influenciada pela presença dos materiais que estão em contato e sendo suas propriedades corretas difíceis de serem precisamente determinadas, Sharma e Desai (1992) propõem que a componente normal C_{1111} da região de interface seja uma função linear das propriedades dos materiais envolvidos e da própria interface, muitas vezes considerada com propriedades idênticas as de um dos dois materiais envolvidos. Dessa forma, a componente normal pode ser escrita como uma combinação linear das propriedades normais da interface C_{1111}^I e dos materiais envolvidos C_{1111}^a e C_{1111}^b , ou seja:

$$C_{1111} = \mathcal{G}_1 C_{1111}^I + \mathcal{G}_2 C_{1111}^a + \mathcal{G}_3 C_{1111}^b \quad (5.19)$$

onde os termos \mathcal{G}_i são pesos atribuídos a cada componente envolvido na estrutura.

A componente cisalhante C_{1212} , segundo Sharma e Desai (1992), pode ser obtida por ensaios de cisalhamento direto.

Sharma & Desai (1992) apresentam dois parâmetros adimensionais que devem ser satisfeitos concomitantemente para que o elemento de interface comporte-se de acordo com as aproximações e considerações feitas. Esses parâmetros foram retirados a partir da análise de vários conjuntos de simulações numéricas e ensaios laboratoriais e são utilizados como orientação para o emprego dos elementos de interface.

Um dos parâmetros é dado por:

$$\varphi = \frac{h}{b} \frac{(E_N G_N)^{\frac{1}{2}}}{(C_{1111} C_{1212})^{\frac{1}{2}}} \geq 10^4 \quad (5.20)$$

Onde E_N e G_N são, respectivamente, o módulo longitudinal e o módulo cisalhante dos materiais envolvidos. Uma adaptação é proposta para se determinar esses valores, posto que, existem materiais com módulos diferentes em contato com a interface. Essa adaptação consiste em empregar uma média aritmética para se encontrar os respectivos valores de E_N e G_N . Dessa forma eles podem ser obtidos a partir de:

$$E_N = \frac{E_a + E_b}{2} \quad (5.21)$$

$$G_N = \frac{G_a + G_b}{2} \quad (5.22)$$

onde E_i e G_i correspondem aos módulos dos materiais que estão diretamente em contato com a região de interface.

O outro parâmetro a ser respeitado, também obtido por Sharma & Desai (1992) através das análises numéricas e testes laboratoriais, corresponde à relação entre a altura e o comprimento do elemento de interface dado por:

$$\frac{b}{h} \leq 0,01 \quad (5.23)$$

Uma grande vantagem desse elemento fundamenta-se no desembaraço do emprego de sua formulação, posto que tanto a formulação do contínuo quanto do elemento de interface são realizadas através de elementos quadrilaterais planos. Dessa forma, torna-se fácil a implementação desse elemento em um programa computacional.

5.3. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EQUILÍBRIO

Esta seção descreve os procedimentos adotados para a solução do problema de equilíbrio. A forma variacional cinemática do problema de equilíbrio consiste em encontrar incrementos de deslocamentos cinematicamente admissíveis tais que a Equação (5.24) seja satisfeita:

$$\langle \sigma + \Delta\sigma, B(\Delta u^*) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta u^*), \forall \Delta u^* \in U \quad (5.24)$$

Na equação (5.24), $\Delta\sigma$ está relacionado com Δu através da equação constitutiva:

$$\Delta\sigma = \nabla_{\varepsilon} \bar{j}(B(\Delta u), \Delta\alpha_d) \quad (5.25)$$

Com o uso da propriedade de convexidade de $\bar{j}(\Delta\varepsilon, \Delta\alpha_d)$, chegou-se ao seguinte princípio de mínimo equivalente à forma variacional apresentada:

$$\inf_{\Delta u^* \in U} \bar{j}(B(\Delta u), \Delta\alpha_d) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle \quad (5.26)$$

Reconhece-se no princípio de mínimo apresentado, um problema de otimização. Nesse tipo de problema, pretende-se minimizar uma função objetivo

$f(x)$, onde $x \in \mathfrak{R}^n$. Os algoritmos de otimização que permitem resolver o problema descrito geram, a partir de um ponto inicial x_0 , uma seqüência de iterações $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ que termina quando não se pode fazer mais progresso ou quando se obteve um ponto suficientemente próximo da solução (Nocedal & Wright, 1999). Para gerar o próximo ponto da seqüência de iterações a partir de um ponto x_k , os algoritmos utilizam informações a respeito da função f em x_k e, possivelmente, informações das iterações anteriores x_0, x_1, \dots, x_{k-1} . Essas informações são utilizadas para encontrar um ponto x_{k+1} , no qual o valor da função f seja menor do que o valor de f em x_k .

Alguns métodos escolhem uma direção d_k e procuram ao longo dessa direção um novo ponto x_{k+1} , no qual o valor de f seja menor do que o valor de f em x_k . A iteração é dada por:

$$x_{k+1} = x_k + p_k d_k \quad (5.27)$$

O sucesso do método depende de escolhas eficientes da direção d_k e do tamanho do passo p_k .

A maioria dos métodos requer que d_k seja uma direção descendente, já que essa propriedade garante que o valor da função f diminua ao longo dessa direção. Assim, a direção d_k costuma ter a forma apresentada da seguinte forma:

$$d_k = -G_k^{-1} \nabla f_k \quad (5.28)$$

Na Equação (5.28), G_k é uma matriz simétrica não-singular. No método de Newton, G_k é o Hessiano $\nabla^2 f(x_k)$. Nos métodos de Quase-Newton, G_k é uma aproximação do Hessiano atualizada a cada iteração.

Fazendo $G_k^{-1} = H_k$, obtém-se:

$$d_k = -H_k \nabla f_k \quad (5.29)$$

$$x_{k+1} = x_k - p_k H_k \nabla f_k \quad (5.30)$$

Para o problema de equilíbrio em análise, a função objetivo f é dada por:

$$f = \bar{j}(B(\Delta u), \Delta \alpha_d) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle \quad (5.31)$$

No presente trabalho, a função objetivo será minimizada utilizando um Método de Quase-Newton. A aplicação desse método exige que se determine ∇f_k . Assim como nos trabalhos de Freitas (2008) e Hecke (1991) o funcional a ser minimizado é apenas uma vez diferenciável e a anulação de seu diferencial fornece a equação de equilíbrio. Por definição, um funcional $f : U \rightarrow \mathfrak{R}$ é dito diferenciável em $u \in U$, se existe um operador Df definido por:

$$Df(u)(v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[f(u + \theta v) - f(u)]}{\theta} \quad (5.32)$$

Se $U \subset \mathfrak{R}^n$, tem-se:

$$Df(u)(v) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial u_i} v_i = \nabla f \cdot v \quad (5.33)$$

Sendo a derivada de uma soma igual à soma das derivadas e aplicando as definições apresentadas em (5.32) e (5.33) a cada uma das parcelas do segundo membro da equação (5.31), tem-se:

$$\begin{aligned} D\bar{j}(B(\Delta u), \Delta \alpha_d)(B(\Delta v)) &= \nabla_{\varepsilon} \bar{j} \cdot B(\Delta v) = \int_{\Gamma} \nabla_{\varepsilon} \bar{j} \cdot D(\Delta v) d\Gamma \\ &= \langle \nabla_{\varepsilon} \bar{j}, B(\Delta v) \rangle = \langle \Delta \sigma, B(\Delta v) \rangle \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$DL_{t+\Delta t}(\Delta u)(\Delta v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[L_{t+\Delta t}(\Delta u + \theta \Delta v) - L_{t+\Delta t}(\Delta u)]}{\theta} = L_{t+\Delta t}(\Delta v) \quad (5.35)$$

$$D(\langle \sigma, B(\Delta u) \rangle)(\Delta v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[\langle \sigma, B(\Delta u + \theta \Delta v) \rangle - \langle \sigma, B(\Delta u) \rangle]}{\theta} = \langle \sigma, B(\Delta v) \rangle \quad (5.36)$$

Dessa forma, a anulação do diferencial do funcional a ser minimizado fornece a equação de equilíbrio:

$$\langle \Delta \sigma, B(\Delta v) \rangle + \langle \sigma, B(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t} = 0 \quad (5.37)$$

$$R = \langle \sigma_{t+\Delta t}, B(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t}(\Delta v) = 0 \quad (5.38)$$

$$\langle \sigma_{t+\Delta t}, B(\Delta v) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta v) \quad (5.39)$$

A função R , dada pela diferença entre as forças internas e as forças externas, é denominada resíduo e corresponde ao diferencial do funcional que se pretende minimizar. Assim, para o problema em análise a equação (5.30) assume a forma:

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k - d_k H_k R(\Delta U_k) \quad (5.40)$$

Nesse trabalho, a atualização de H_k foi realizada a partir do método BFGS. A teoria envolvida na derivação do método pode ser encontrada em Nocedal & Wright (1999). A fórmula de atualização de H_k proposta pelo método é descrita da seguinte forma:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{s_k \otimes s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{(H_k \cdot y_k) \otimes (H_k \cdot y_k)}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} + (y_k \cdot H_k \cdot y_k) \varpi \otimes \varpi \quad (5.41)$$

onde

$$y_k = R(\Delta U_{k+1}) - R(\Delta U_k) \quad (5.42)$$

$$s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k \quad (5.43)$$

$$\varpi = \frac{s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{H_k \cdot y_k}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} \quad (5.44)$$

A adoção de uma aproximação da matriz inversa do Hessiano possui uma vantagem, além do fato de não ser necessário determinar as derivadas segundas da função objetivo. Sabe-se que o Hessiano deve ser uma matriz positivo-definida. Segundo Press et al (1992), em geral, longe do mínimo, não há garantia de que o Hessiano seja positivo definido, de forma que incrementos de deslocamento na direção calculada pelo Método de Newton utilizando o Hessiano podem levar a pontos onde o valor da função está aumentando. A estratégia do método de Quase-Newton consiste em adotar uma matriz simétrica, positivo-definida como aproximação inicial do Hessiano e construir as demais aproximações H_k de forma que essa matriz permaneça simétrica e positivo-definida. Longe do mínimo, esse procedimento assegura que os incrementos de deslocamento ocorram ao longo da direção de decréscimo da função objetivo. Próximo ao mínimo, a fórmula de atualização de H_k aproxima-se do Hessiano, obtendo-se a convergência quadrática do Método de Newton.

Ainda segundo Press et al. (1992), quando não se está suficientemente próximo do mínimo, acrescentar ao deslocamento inicial todo o incremento calculado, $-H_k \nabla f_k$, pode não levar a um decréscimo da função objetivo, mesmo que a aproximação do Hessiano seja uma matriz positivo-definida. O único aspecto que se pode garantir é que inicialmente a função objetivo decresce na direção do incremento calculado. No entanto, após um decréscimo inicial, a função pode passar a crescer. Por essa razão, adotam-se métodos de cálculo de passo como, por

exemplo, o método secante para calcular o tamanho do passo a ser dado na direção determinada. Descrições do Método Secante podem ser encontradas em Press et al. (1992) e Akay (1994).

Nos quadros 2 e 3, são apresentados os algoritmos utilizados para resolver o problema de equilíbrio. Esses algoritmos podem ser encontrados em Freitas (2008) e Press et al. (1992).

```

Determinar  $\Delta U_1$ 
Determinar  $H_1$  (em geral,  $H_1 = I$ )
Determinar  $\nabla f_1 = R(\Delta U_1)$ 
Determinar  $d_1 = -R(\Delta U_1)$ 
Fazer para  $k = 1, ITMAX$  (número máximo de iterações admitido)
    Determinar  $p_k$ , tal que  $d_k [R(\Delta U_k + p_k d_k)] \leq TOL \{d_k [R(\Delta U_k)]\}$ 
     $TOL$  é um valor de tolerância.
    Fazer  $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$ 
    Fazer  $s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k$ 
    Calcular  $R(\Delta U_{k+1})$ 
     $TEST = 0.0$ 
     $TEMP = 0.0$ 
    Fazer  $TEST = (\Delta U_k) \cdot R(\Delta U_k)$ 
    Fazer  $TEMP = (\Delta U_{k+1}) \cdot R(\Delta U_{k+1})$ 
    Se  $|TEMP| \leq GTOL |TEST|$ , finalizar a rotina, critério de convergência satisfeito
    Fazer  $y_k = R(\Delta U_{k+1}) - R(\Delta U_k)$ 
    Fazer  $hy_k = H_k \cdot y_k$ 
    Fazer  $fac = y_k \cdot s_k$ 
    Fazer  $fae = y_k \cdot hy_k$ 
    Fazer  $sumy = y_k \cdot y_k$ 
    Fazer  $sums = s_k \cdot s_k$ 

```

Se fac menor que $\sqrt{EPS.sumy.sums}$, fazer

$$fac = \frac{1.0}{fac}$$

$$fad = \frac{1.0}{fae}$$

$$y_k = fac.s_k - fad.hy_k$$

$$H_{k+1} = fac.s_k.s_k - fad.hy_k.hy_k + fae.y_k.y_k$$

Fim

Fazer $d_{k+1} = -H_{k+1}.R(\Delta U_{k+1})$

Fim

QUADRO 2 – ALGORITMO DO MÉTODO QUASE-NEWTON COM EQUAÇÃO DE ATUALIZAÇÃO BFGS
 FONTE: FREITAS (2008)

Fazer $p_1 = 0$

Fazer $p_2 = 1$

Fazer $p_k = 1$

Fazer $MAXIT$ = número máximo de iterações permitido

Fazer $TOLX$ = tolerância

Fazer $C_1 = d_k R(\Delta U_k)$

Fazer $TOL = C_1$

Fazer $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$

Calcular $R(\Delta U_{k+1})$

Fazer $C_2 = d_k R(\Delta U_{k+1})$

Se $|C_1| < |C_2|$, fazer

$$p_k = p_1$$

$$p_L = p_2$$

$$SWAP = C_1$$

$$C_1 = C_2$$

$$C_2 = SWAP$$

Se não

$$p_L = p_1$$

$$p_k = p_2$$

Fim

Fazer $j = 1, MAXIT$

$$\delta p = \frac{(p_L - p_k)C_2}{(C_2 - C_1)}$$

$$p_L = p_k$$

$$C_1 = C_2$$

$$p_k = p_k + \delta p$$

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + p_k d_k$$

Calcular $R(\Delta U_{k+1})$

$$C_2 = d_k \cdot R(\Delta U_{k+1})$$

Se $|\delta p| < TOLX$ ou $|C_2| < |TOL|$ finalizar a rotina, critério de convergência satisfeito.

Fim

QUADRO 3 – MÉTODO SECANTE UTILIZADO PARA DETERMINAR O TAMANHO DO PASSO p_k

FONTE: FREITAS (2008)

5.4. ALGORITMO PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO CONSTITUTIVA

Nessa seção, é apresentado o algoritmo que pode ser utilizado para resolver a equação constitutiva do processo de danificação. Por meio da equação constitutiva, $\Delta \alpha_d$ está relacionado com $\Delta \sigma$ e ΔA^d , conforme:

$$\Delta \alpha_d = \nabla_{A^d} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) \quad (5.45)$$

onde:

$$\begin{aligned} \bar{j}_C(\Delta \sigma, \Delta A^d) = & \psi_C(\sigma + \Delta \sigma, A^d + \Delta A^d) - \Delta \sigma \cdot \nabla_{\sigma} \psi_C(\sigma, A^d) - \\ & - \Delta A^d \cdot \nabla_{A^d} \psi_C(\sigma, A^d) - \psi_C(\sigma, A^d) \end{aligned} \quad (5.46)$$

Conforme se pode observar nas equações (5.45) e (5.46), pretende-se encontrar os incrementos da variável interna, $\Delta\alpha_d$, relacionados com os incrementos de tensões e forças termodinâmicas $(\Delta\sigma, \Delta A^d)$.

A condição necessária e suficiente para que o vetor $\Delta\alpha_d$ seja solução do problema proposta nas equações (5.45) e (5.46) é:

$$(\Delta\alpha_d) \in \partial \text{Ind}_P(A^d + \Delta A^d) \quad (5.47)$$

Uma vez que a região P das forças termodinâmicas é definida através de uma única função de danificação, o problema de programação matemática obtido é resolvido de forma simples. Sendo conhecido o estado atual de forças termodinâmicas admissíveis A^d e dado um incremento $\Delta\varepsilon$, se:

$$f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) \leq 0 \quad (5.48)$$

não ocorre a danificação e:

$$\Delta\lambda = 0 \quad (5.49)$$

Logo:

$$\Delta\sigma = \overline{ID}(1 - \alpha_d)\Delta\varepsilon \quad (5.50)$$

$$\Delta\alpha_d = 0 \quad (5.51)$$

A situação em que ocorre a danificação, identificada através de:

$$f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) > 0 \quad (5.52)$$

recai em um problema de encontrar a menor raiz positiva da equação:

$$f(\Delta\lambda) = 0 \quad (5.53)$$

O método de Newton-Raphson pode ser utilizado para resolver o problema. No quadro 4, apresenta-se o algoritmo empregado na solução de problemas envolvendo materiais que podem sofrer o processo de danificação e critério de escoamento definido por uma única função.

$$\text{Calcular } A_{t+\Delta t}^d = A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon$$

$$\text{Calcular } f(A_{t+\Delta t}^d, \alpha_d)$$

$$\text{Calcular } \nabla_{A^d} f(A_{t+\Delta t}^d, \alpha_d)$$

Se $f\left(A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon, \alpha_d\right) > 0$

$$k = 0, \Delta\lambda^k = 0$$

Enquanto $\frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)} > e$

$$\Delta\lambda^{k+1} = \Delta\lambda^k - \frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)}$$

$$k = k + 1$$

Calcular $\alpha_d(\Delta\lambda^k)$

Calcular $f(\Delta\lambda^k)$

Calcular $\nabla f(\Delta\lambda^k)$

Fim

Fim

Fim

QUADRO 4 – ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON PARA PROBLEMAS ENVOLVENDO MATERIAIS COM CRITÉRIO DE DANIFICAÇÃO
FONTE: O autor (2009)

5.3.1 Aplicação do algoritmo de Newton Raphson para o modelo de dano

Nesta seção o modelo de dano é escrito de forma a ser implementado no algoritmo de Newton-Raphson. Uma vez estabelecido o incremento $\Delta\varepsilon$ a região admissível é representada por:

$$f(\Delta\lambda) = A^d + \frac{1}{2}\overline{ID}\Delta\varepsilon \cdot \Delta\varepsilon - A_0^d - \frac{1}{C1} \left[\frac{\alpha_d + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_d + \Delta\lambda)} \right]^{C2} \quad (5.54)$$

A variável interna de dano poderá ser obtida através da equação:

$$\Delta\alpha_d = \nabla_{A^d} f(A^d + \Delta A^d) \Delta\lambda \quad (5.55)$$

Note que como a variável de dano possui natureza escalar sua evolução se dará seguindo a direção da reta que delimita seu domínio, assim:

$$\nabla_{A^d} f(A^d + \Delta A^d) = 1 \quad (5.56)$$

$$\Delta\alpha_d = \Delta\lambda \quad (5.57)$$

Logo:

$$(\alpha_d)_{t+\Delta t} = \alpha_d + \Delta\lambda \quad (5.58)$$

As equações (5.54), (5.56), e (5.58) são aplicadas diretamente no algoritmo utilizado neste trabalho, para simular o processo de danificação com critério de danificação definido por uma única função.

6. EXEMPLOS

Existem diversos problemas em engenharia que, apesar de sua natureza física e geométrica diferentes, recaem em problemas matemáticos semelhantes durante sua resolução.

Pretende-se, neste capítulo, exemplificar a teoria proposta anteriormente através de aplicações. Além da modelagem matemática, o intuito é também exemplificar o procedimento necessário quando da resolução de problemas práticos.

Inicialmente são apresentadas duas aplicações a modelos unidimensionais. Entende-se por modelos unidimensionais aqueles nos quais o domínio elástico no espaço das tensões é unidimensional, isto é, o valor de apenas uma das componentes de tensões não é nulo, continuando assim em todo o processo. O objetivo dessas aplicações é explicar de maneira simples o procedimento proposto.

A seguir são apresentados os resultados de duas simulações de tensões e deformações em modelos bidimensionais realizadas utilizando o programa desenvolvido no presente trabalho. A primeira simulação objetivou reproduzir um ensaio de tração realizado em um cimento odontológico. A segunda simulação teve por objetivo reproduzir ensaio realizado em um disco de dentina após ter sido tratado endodonticamente. Nessas simulações os efeitos térmicos foram desprezados, a hipótese de pequenas deformações foi adotada e admitiu-se que a deformação resultante de uma história de tensões não depende da velocidade com que o programa de carga se realiza.

6.1. EXEMPLO 1

Este exemplo apresenta uma barra, composta de um material elástico com a possibilidade de sofrer o processo de danificação, sujeita a um carregamento axial. Além de mostrar a modelagem do material, o intuito é exemplificar o procedimento necessário quando da solução de problemas práticos. Também procura-se esclarecer alguns pontos como a escolha do potencial termodinâmico, dos parâmetros de dano, da representação da região P das forças termodinâmicas admissíveis.

A figura 14 mostra a curva tensão-deformação para esse modelo devido a um programa de carga 0-1-2 e a região P .

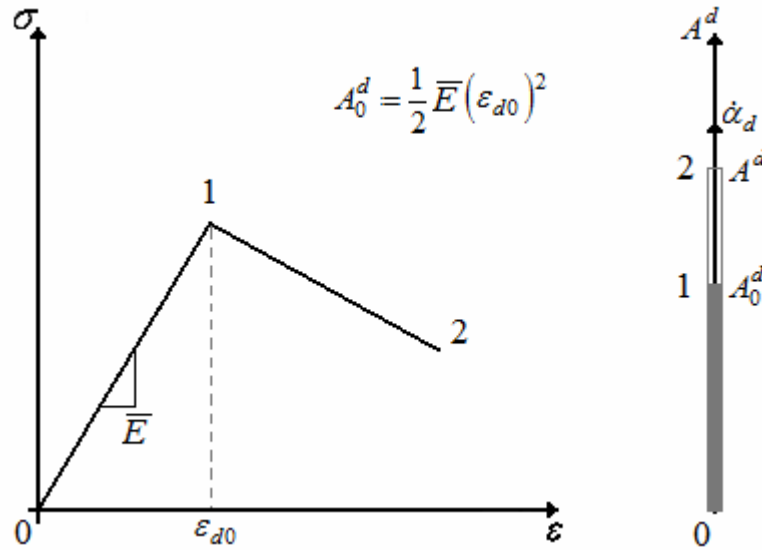


FIGURA 14 – PROGRAMA DE CARGA E REGIÃO ADMISSÍVEL
FONTE: O autor (2009)

Para a energia livre propõe-se a seguinte função quadrática:

$$\psi(\varepsilon, \alpha_d) = \frac{1}{2} E (1 - \alpha_d) \varepsilon^2 \quad (5.1)$$

Onde E é o módulo de elasticidade, α_d é a variável interna relativa ao dano e ε é a deformação total. O potencial termodinâmico complementar tem a forma:

$$\psi_c(\sigma, A^d) = \begin{cases} \frac{1}{2E} \sigma^2 & \text{se } A^d < A_0^d \\ \frac{1}{2E} \left[1 + C1 (A^d - A_0^d)^{C2} \right] \sigma^2 & \text{se } A^d > A_0^d \end{cases} \quad (5.2)$$

onde σ é a tensão, A^d é a força termodinâmica relativa ao dano, A_0^d é a força termodinâmica onde se inicia o processo de danificação.

A seguir define-se a função de danificação:

$$f(A^d) = A^d - A_0^d - \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{C2}} \quad (5.3)$$

Dessa forma a região P , das forças termodinamicamente admissíveis, será:

$$P = \left\{ A^d \mid A^d - A_0^d - \frac{1}{C1} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{C2}} \leq 0 \right\} \quad (5.4)$$

A lei da normalidade, representada pela expressão (3.40), pode então ser escrita como:

$$\dot{\alpha}_d = \lambda \cdot \nabla_{A^d} f(A^d) = \lambda \quad (5.5)$$

onde $\dot{\alpha}_d$ é a taxa de variação da variável interna relativa ao dano, $\nabla_{A^d} f(A^d)$ representa o gradiente da função de danificação e λ é o multiplicador de Lagrange associado à função de danificação. Note-se que o multiplicador é dependente do processo e não do material.

Como α_d é proporcional a normal externa a f no ponto A^d , tem-se:

$$\lambda \geq 0 \quad (5.6)$$

A condição de consistência, apresentada na equação (3.70), particularizada para essa situação é descrita como:

$$\dot{\alpha}_d \cdot \dot{A}^d = \lambda \cdot \dot{A}^d = 0 \quad (5.7)$$

Dessa relação serão definidas as taxas de evolução das forças termodinâmicas A^d de forma consistente.

Para esse caso, a variável interna relativa ao dano α_d resulta indeterminada, pois, para uma mesma variação das forças termodinâmicas, inúmeras taxas de variação da variável interna relativa ao dano atendem a condição de consistência. A figura 15 ilustra algumas dessas possibilidades.

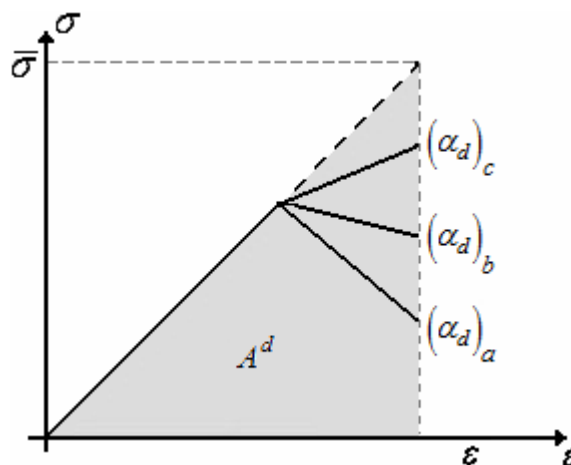


FIGURA 15 – POSSIBILIDADES QUE ATENDEM A CONDIÇÃO DE CONSISTÊNCIA

FONTE: O autor (2009)

6.2. EXEMPLO 2

Esse exemplo apresenta cinco barras, compostas de um material elástico com a possibilidade de sofrer o processo de danificação, que estão sujeitas a um carregamento axial. Recai-se na solução do seguinte problema: resolver um sistema composto por equações (equilíbrio, complementaridade linear entre a função de danificação e parâmetros de dano) e inequações (admissibilidade, positividade dos parâmetros de dano, indicando que as taxas desses parâmetros coincidem com a normal externa à região das forças termodinâmicas admissíveis).

Como será mostrado a seguir, a resolução de tais sistemas de equações e inequações é equivalente a encontrar a solução de um problema de programação matemática não linear ou otimização não linear (encontrar extremos de uma função ou funcional cujas variáveis estão restritas a certo domínio). Estas equações e inequações constituem-se nas condições de otimalidade ou de Kuhn-Tucker de tal problema de maximização ou minimização.

Cinco barras, como na figura 16 estão conectadas na extremidade "B" por um bloco rígido e sujeitas a uma carga axial seguindo um programa de cargas que está esquematizado na figura 17.

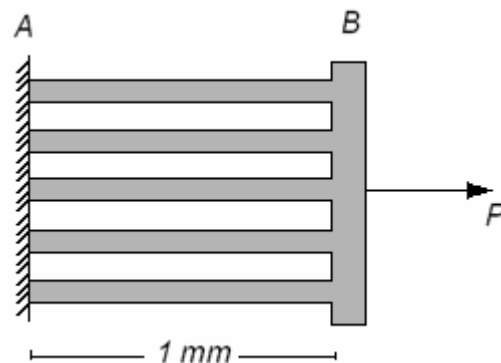


FIGURA 16 – ESTRUTURA PROPOSTA
FONTE: O autor (2009)

Suponha que as barras têm comprimento $L = 1 \text{ mm}$, que as áreas das seções transversais (A_1 , A_2 , A_3 , A_4 e A_5) são iguais a 1 mm^2 , que são compostas de materiais com módulo de elasticidade (\bar{E}_1 , \bar{E}_2 , \bar{E}_3 , \bar{E}_4 e \bar{E}_5) iguais a 1 MPa , e a deformação onde se inicia a danificação do material, ε_{d01} , para as barras 1, 2, 4 e 5 é igual a $0,05 \text{ mm}$, e para a barra 3, ε_{d03} é igual a $0,01 \text{ mm}$. Além disso, as constantes $C1$ e $C2$ recebem, respectivamente, os valores 10000 e 2.

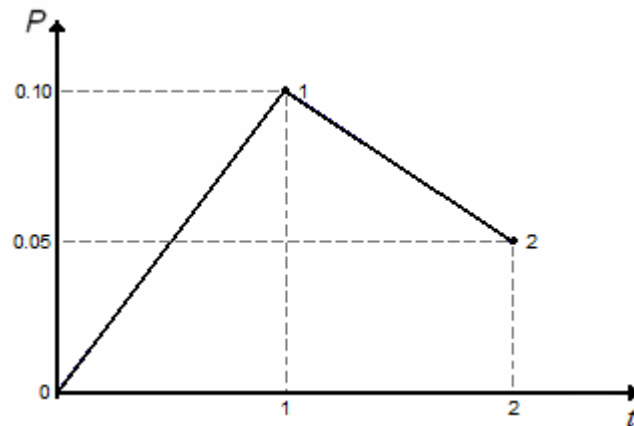


FIGURA 17 – PROGRAMA DE CARGA
FONTE: O autor (2009)

As variáveis cinemáticas para esse problema são: os deslocamentos, as deformações, as taxas de deslocamentos e a relação entre as taxas de deformações e as taxas de deslocamentos.

As deformações, ou alongamentos, podem ser calculados através de:

$$\varepsilon_{x1} = \varepsilon_{x2} = \varepsilon_{x3} = \varepsilon_{x4} = \varepsilon_{x5} = \frac{\Delta L}{L} = \frac{1}{L} u_B \quad (5.8)$$

A relação entre as taxas de deformações e as taxas de deslocamentos é obtida através de B :

$$B = \frac{1}{L} [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T \quad (5.9)$$

No quadro 4 são apresentadas as variáveis cinemáticas.

VARIÁVEL	REPRESENTAÇÃO
Deslocamentos	$u = [u_B]$
Deformações	$\varepsilon = [\varepsilon_{x1} \ \varepsilon_{x2} \ \varepsilon_{x3} \ \varepsilon_{x4} \ \varepsilon_{x5}]^T$
Taxas de deslocamentos	$v = \dot{u} = [\dot{u}_B]$
Taxas de deformações	$\dot{\varepsilon} = [\dot{\varepsilon}_{x1} \ \dot{\varepsilon}_{x2} \ \dot{\varepsilon}_{x3} \ \dot{\varepsilon}_{x4} \ \dot{\varepsilon}_{x5}]^T$
Relação entre taxas de deformações e as taxas de deslocamentos	$\dot{\varepsilon} = B\dot{u}$

QUADRO 5 – VARIÁVEIS CINEMÁTICAS
FONTE: O autor (2009)

As variáveis estáticas para esse problema são: as cargas aplicadas, os esforços internos, as taxas de cargas aplicadas, as taxas de esforços internos, o equilíbrio, a energia livre de Helmholtz e as forças termodinâmicas.

Os esforços internos são as forças normais N_x nas barras e são calculadas na barra i por:

$$N_{xi} = \int_{A_i} \sigma_{xi} dA \quad (5.10)$$

Sendo P a carga aplicada, o equilíbrio é dado por:

$$N_{x1} + N_{x2} + N_{x3} + N_{x4} + N_{x5} = P \quad (5.11)$$

O quadro 5 resume as variáveis estáticas.

VARIÁVEL	REPRESENTAÇÃO
Cargas aplicadas	$F_{ext} = [P]$
Esforços internos	$F_{int} = [N_{x1} \quad N_{x2} \quad N_{x3} \quad N_{x4} \quad N_{x5}]^T$
Taxas de cargas aplicadas	$\dot{F}_{ext} = [\dot{P}]$
Taxas de esforços internos	$\dot{F}_{int} = [\dot{N}_{x1} \quad \dot{N}_{x2} \quad \dot{N}_{x3} \quad \dot{N}_{x4} \quad \dot{N}_{x5}]^T$
Equilíbrio	$B^T \dot{F}_{int} = \dot{F}_{ext}$
Energia livre de Helmholtz	$\psi_{xi}(\varepsilon_{xi}, \alpha_{di}) = \frac{1}{2} \bar{E} (1 - \alpha_{di}) \varepsilon_{xi} \cdot \varepsilon_{xi}$
Força termodinâmica	$A_i^d = -\frac{\partial \psi_{xi}(\varepsilon_{xi}, \alpha_{di})}{\partial \alpha_{di}} = \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{xi} \cdot \varepsilon_{xi}$

QUADRO 5 – VARIÁVEIS ESTÁTICAS
FONTE: O autor (2009)

A relação constitutiva será então escrita da seguinte forma:

$$\varepsilon_{xi} = \frac{1}{\bar{E}} \bar{\sigma}_{xi} \quad \therefore \quad \bar{\sigma}_{xi} = \varepsilon_{xi} \bar{E} \quad (5.12)$$

onde:

$$\bar{\sigma}_{xi} = \frac{\sigma_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.13)$$

Em termos de variáveis generalizadas, a segunda relação (5.12) fica:

$$\bar{N}_{xi} = \bar{E}A_i \varepsilon_{xi} \quad (5.14)$$

e conseqüentemente:

$$\bar{N}_{xi} = \frac{N_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.15)$$

Reescrevendo a equação (5.14) em termos de taxas:

$$\dot{\bar{N}}_{xi} = \bar{E}A_i \dot{\varepsilon}_{xi} \quad (5.16)$$

da mesma forma a relação (5.15) é reescrita:

$$\dot{\bar{N}}_{xi} = \frac{\dot{N}_{xi}}{(1 - \alpha_{di})} \quad (5.17)$$

resultando matricialmente em:

$$\begin{bmatrix} \dot{\bar{N}}_{x1} \\ \dot{\bar{N}}_{x2} \\ \dot{\bar{N}}_{x3} \\ \dot{\bar{N}}_{x4} \\ \dot{\bar{N}}_{x5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{E}A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{E}A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{E}A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{E}A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{E}A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_{x1} \\ \dot{\varepsilon}_{x2} \\ \dot{\varepsilon}_{x3} \\ \dot{\varepsilon}_{x4} \\ \dot{\varepsilon}_{x5} \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

ou ainda:

$$\dot{\bar{F}}_{\text{int}} = \bar{I}\bar{D}\dot{\varepsilon} \quad (5.19)$$

onde:

$$\bar{I}\bar{D} = \begin{bmatrix} \bar{E}A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{E}A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{E}A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{E}A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{E}A \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

Dessa forma:

$$\dot{\bar{F}}_{\text{int}} = \bar{I}\bar{D}S\dot{\varepsilon} \quad (5.21)$$

onde:

$$S = \begin{bmatrix} (1 - \alpha_{d1}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - \alpha_{d2}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \alpha_{d3}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - \alpha_{d4}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1 - \alpha_{d5}) \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

O critério de dano, proposto por Tao & Phillips (2005), é dado por:

$$f(A_i^d) = A_i^d - A_0^d - \frac{1}{10000} \left(\frac{\alpha_{di}}{1 - \alpha_{di}} \right)^{\frac{1}{2}} \leq 0 \quad (5.23)$$

O critério de evolução da variável interna relativa ao dano é representado por:

$$\dot{\alpha}_{di} = \nabla_{A_i^d} f \cdot \lambda \therefore \dot{\alpha}_{di} = \lambda \quad (5.24)$$

onde λ é obtido de:

$$\lambda \geq 0 \quad f(A_i^d) \leq 0 \quad \lambda \cdot f(A_i^d) = 0 \quad (5.25)$$

Além disso, se a componente $f_j = 0$:

$$\lambda_j \geq 0 \quad \dot{f}_j(A_i^d) \leq 0 \quad \lambda_j \cdot \dot{f}_j(A_i^d) \leq 0 \quad (5.26)$$

Para a solução supõe-se que o estado do corpo para um determinado instante de tempo t é conhecido, isto é, são conhecidos os campos de deslocamentos u_t , das deformações ε_t , da variável interna relativa ao dano $(\alpha_d)_t$, da energia livre de Helmholtz ψ_t , das forças termodinâmicas A_i^d e dos esforços internos generalizados $(F_{\text{int}})_t$. Sendo dado um incremento de carga ΔF_{ext} , pretende-se obter o estado do corpo em $t + \Delta t$, ou seja, com os valores de Δu , $\Delta \varepsilon$, $\Delta \alpha_d$ e ΔF_{int} correspondentes, serão obtidos os seguintes valores:

$$u_{t+\Delta t} = u_t + \Delta u, \quad \varepsilon_{t+\Delta t} = \varepsilon_t + \Delta \varepsilon, \quad (\alpha_d)_{t+\Delta t} = (\alpha_d)_t + \Delta \alpha_d \quad \text{e} \quad (5.27)$$

$$(F_{\text{int}})_{t+\Delta t} = (F_{\text{int}})_t + \Delta F_{\text{int}}$$

Utilizando uma aproximação de Euler da forma:

$$\dot{u} = \frac{\Delta u}{\Delta t}, \quad \dot{\varepsilon} = \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta t}, \quad \dot{\lambda} = \frac{\Delta \lambda}{\Delta t} \quad \text{e} \quad \dot{F}_{\text{int}} = \frac{\Delta F_{\text{int}}}{\Delta t} \quad (5.28)$$

e substituindo de forma adequada nas relações anteriormente descritas, será obtido o seguinte problema a ser resolvido:

$$\Delta \varepsilon = B \Delta u$$

$$\Delta \bar{F}_{\text{int}} = \bar{I} \bar{D} \Delta \varepsilon \quad \Delta F_{\text{int}} = \Delta \bar{F}_{\text{int}} S \quad (5.29)$$

$$\Delta \lambda \geq 0 \quad f(A_i^d)_t \leq 0 \quad \Delta \lambda \cdot f(A_i^d)_t = 0$$

podendo ser reescrito como:

$$(B^T \bar{I} \bar{D} B \Delta u) \cdot S = \Delta F_{\text{ext}} \quad (5.30)$$

$$\Delta\lambda \geq 0 \quad f(A_t^d)_t \leq 0 \quad \Delta\lambda \cdot f(A_t^d)_t = 0$$

Porém, quando o problema dado por (5.30) for solucionado, não necessariamente a força termodinâmica final $A_{t+\Delta t}^d$ será admissível. Para resolver esse inconveniente, neste momento, será substituído A_t^d por $A_{t+\Delta t}^d$ nas expressões (5.30), resultando finalmente em:

$$\begin{aligned} (B^T \bar{I} \bar{D} B \Delta u) \cdot S &= \Delta F_{ext} \\ \Delta\lambda &\geq 0 \\ \frac{1}{2} \bar{E} B_i(u_i)_{t+\Delta t} \cdot B_i(u_i)_{t+\Delta t} - \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} - \frac{1}{10000} \left[\frac{(\alpha_{di})_t + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_{di})_t - \Delta\lambda} \right]^{\frac{1}{2}} &\leq 0 \quad (5.31) \\ \Delta\lambda \cdot \left(\frac{1}{2} \bar{E} B_i(u_i)_{t+\Delta t} \cdot B_i(u_i)_{t+\Delta t} - \frac{1}{2} \bar{E} \varepsilon_{d0} \cdot \varepsilon_{d0} - \frac{1}{10000} \left[\frac{(\alpha_{di})_t + \Delta\lambda}{1 - (\alpha_{di})_t - \Delta\lambda} \right]^{\frac{1}{2}} \right) &= 0 \end{aligned}$$

Utilizando os valores numéricos propostos anteriormente, o sistema (5.31) fornece a solução para cada trecho.

a) Primeiro passo de carga:

$$\begin{aligned} (N_{x1})_{t=0} = (N_{x2})_{t=0} = (N_{x3})_{t=0} = (N_{x4})_{t=0} = (N_{x5})_{t=0} &= 0 \\ \Delta F_{ext}^1 &= 0,1 \end{aligned} \quad (5.32)$$

A solução do sistema (5.31) fornece:

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0,024 \\ \Delta\lambda_1 = \Delta\lambda_2 = \Delta\lambda_4 = \Delta\lambda_5 &= 0 \\ \Delta\lambda_3 &= 0,82 \\ \Delta N_{x1} = \Delta N_{x2} = \Delta N_{x4} = \Delta N_{x5} &= 0,024 \\ \Delta N_{x3} &= 0,004 \end{aligned} \quad (5.33)$$

nesse caso:

$$\begin{aligned} (u)_{t=1} &= 0,024 \\ (\alpha_{d1})_{t=1} = (\alpha_{d2})_{t=1} = (\alpha_{d4})_{t=1} = (\alpha_{d5})_{t=1} &= 0 \\ (\alpha_{d3})_{t=1} &= 0,82 \\ (N_{x1})_{t=1} = (N_{x2})_{t=1} = (N_{x4})_{t=1} = (N_{x5})_{t=1} &= 0,024 \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004$$

Observa-se que ocorreu a perda de rigidez na barra 3, enquanto as outras barras permaneceram intactas. Da análise da figura 18, onde é mostrada a evolução da relação “força x deslocamento”, observa-se que a barra 3 efetuou no passo 1, um trecho elástico e um trecho onde ocorreu a danificação.

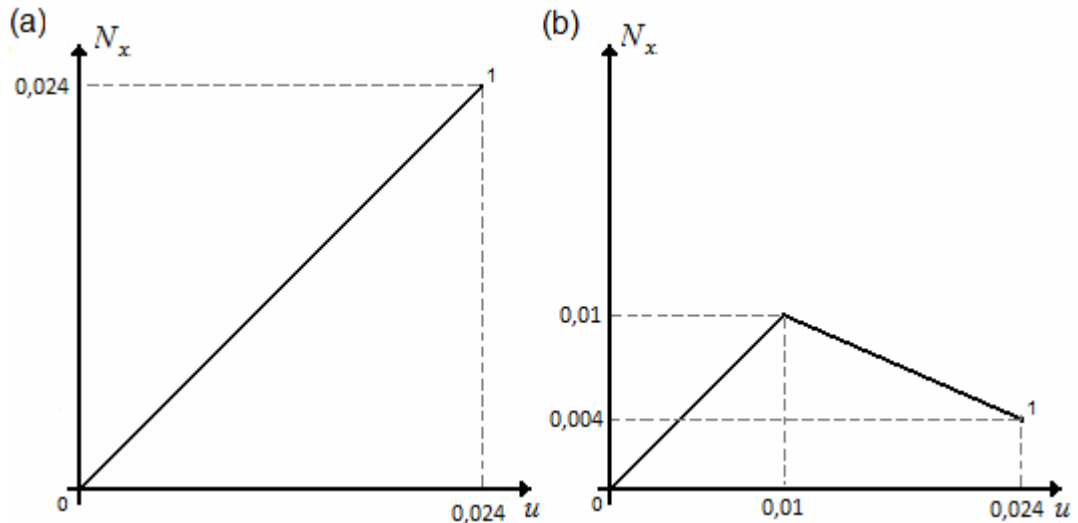


FIGURA 18 – RELAÇÃO “FORÇA X DESLOCAMENTO” APÓS O PRIMEIRO PASSO DE GARGA (a) NAS BARRAS 1, 2, 4 E 5 E (b) NA BARRA 3

FONTE: O autor (2009)

b) Segundo passo de cargas:

$$(N_{x1})_{t=1} = (N_{x2})_{t=1} = (N_{x4})_{t=1} = (N_{x5})_{t=1} = 0,024$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004 \quad (5.35)$$

$$\Delta F_{ext}^2 = -0,05$$

A solução do sistema (5.31) nos fornece:

$$\Delta u = -0,012$$

$$\Delta \lambda_1 = \Delta \lambda_2 = \Delta \lambda_3 = \Delta \lambda_4 = \Delta \lambda_5 = 0$$

$$\Delta N_{x1} = \Delta N_{x2} = \Delta N_{x4} = \Delta N_{x5} = -0,012 \quad (5.36)$$

$$\Delta N_{x3} = -0,002$$

nesse caso:

$$(u)_{t=2} = 0,024 - 0,012 = 0,012$$

$$(\alpha_{d1})_{t=2} = (\alpha_{d2})_{t=2} = (\alpha_{d4})_{t=2} = (\alpha_{d5})_{t=2} = 0 + 0 = 0 \quad (5.37)$$

$$(\alpha_{d3})_{t=2} = 0,82 + 0 = 0,82$$

$$(N_{x1})_{t=2} = (N_{x2})_{t=2} = (N_{x4})_{t=2} = (N_{x5})_{t=2} = 0,24 - 0,012 = 0,012$$

$$(N_{x3})_{t=1} = 0,004 - 0,002 = 0,002$$

É preciso salientar que, se o trecho 0-2 tivesse sido feito em apenas um passo de carga não seria possível detectar o processo de danificação. A figura 19 ilustra a relação “força x deslocamento” após o segundo passo de carga.

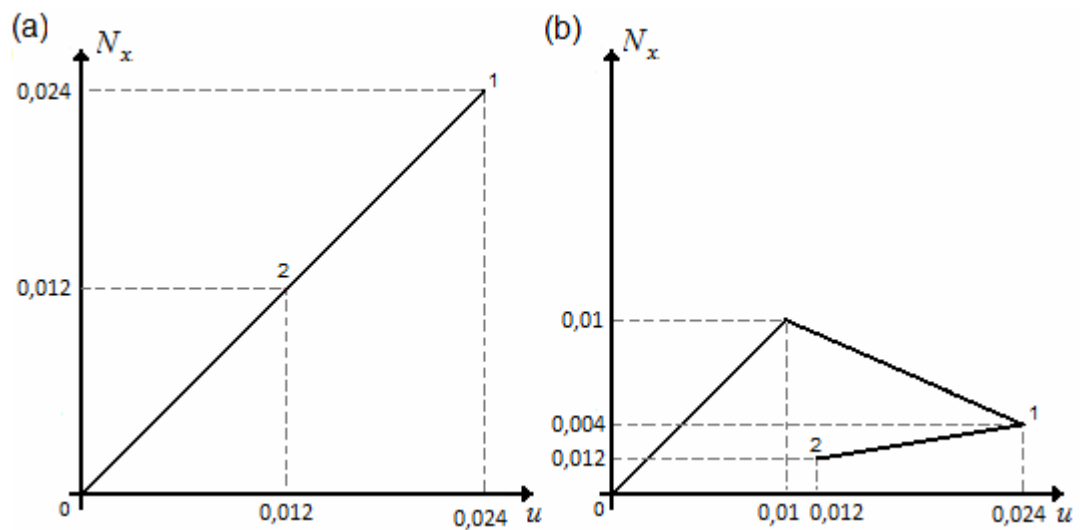


FIGURA 19 – RELAÇÃO “FORÇA X DESLOCAMENTO” APÓS O SEGUNDO PASSO DE CARGA (a) NAS BARRAS 1, 2, 4 E 5 E (b) NA BARRA 3

FONTE: O autor (2009)

6.3. EXEMPLO 3

Este exemplo tem como objetivo validar a metodologia proposta, bem como, “calibrar” as constantes $C1$ e $C2$ do modelo de dano comparando o resultado da simulação computacional com o resultado de um ensaio experimental de tração em um cimento resinoso realizado por Franco (2008).

Para os ensaios experimentais foram confeccionados cinco corpos-de-prova de cimento Cement-Post (Angelus®), com o formato de ampulheta de dimensões: comprimento total 77,00 mm; comprimento da porção central 14,00 mm; largura das extremidades da ampulheta de 6,00 mm; largura do centro da ampulheta de 2,00 mm. A figura 20 ilustra o corpo de prova.

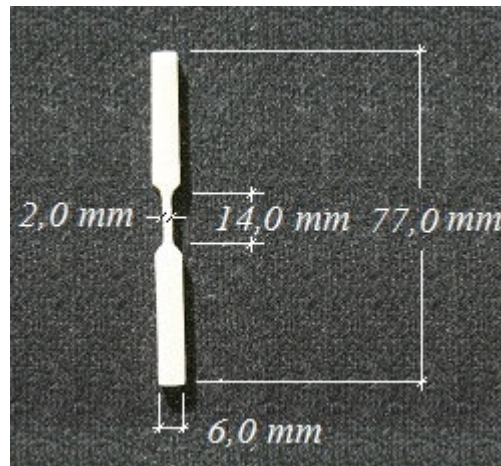


FIGURA 20 – CORPO DE PROVA ENSAIO DE TRAÇÃO
FONTE: Franco (2008)

O comportamento constitutivo desse cimento foi simulado através do modelo de dano de Tao & Phillips (2005). O módulo de elasticidade do material intacto \bar{E} , o coeficiente de Poisson (ν) e a deformação a partir da qual se inicia o processo de danificação ε_{d0} foram retirados previamente dos ensaios experimentais realizados por Franco (2008). As constantes $C1$ e $C2$ do modelo de dano foram alteradas ao longo das diversas simulações realizadas de tal forma que a curva tensão versus deformação resultante do modelo numérico fosse análoga as curvas dos ensaios experimentais. Os valores das constantes utilizadas são apresentados no quadro 6.

VARIÁVEL	VALOR
Módulo de elasticidade (\bar{E})	1200 MPa
Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
ε_{d0}	0,05
$C1$	0,75
$C2$	0,61

QUADRO 6 – PROPRIEDADES MATERIAIS E PARÂMETROS EMPREGADOS NO EXEMPLO 03

FONTE: O autor (2009)

No programa desenvolvido a parte central do corpo de prova foi discretizada utilizando elementos isoparamétricos de oito nós. As condições de contorno do problema e a discretização espacial em elementos finitos são apresentadas na figura

21. A malha de elementos finitos possui 224 elementos com 745 nós, o carregamento foi imposto em 500 incrementos de carga iguais.

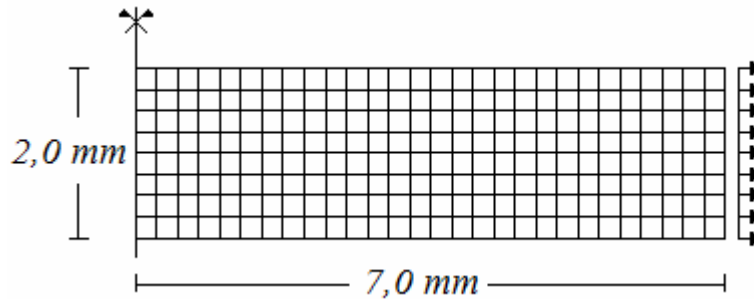


FIGURA 21 – CONDIÇÕES DE CONTORNO E DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL EM ELEMENTOS FINITOS PARA O EXEMPLO 3
FONTE: O autor (2009)

A figura 22 apresenta o gráfico de tensão (σ_{xx}) versus deformação (ϵ_{xx}) contendo os resultados experimentais de duas amostras obtidos por Franco (2008) e os resultados numéricos obtidos com o programa desenvolvido no presente trabalho.

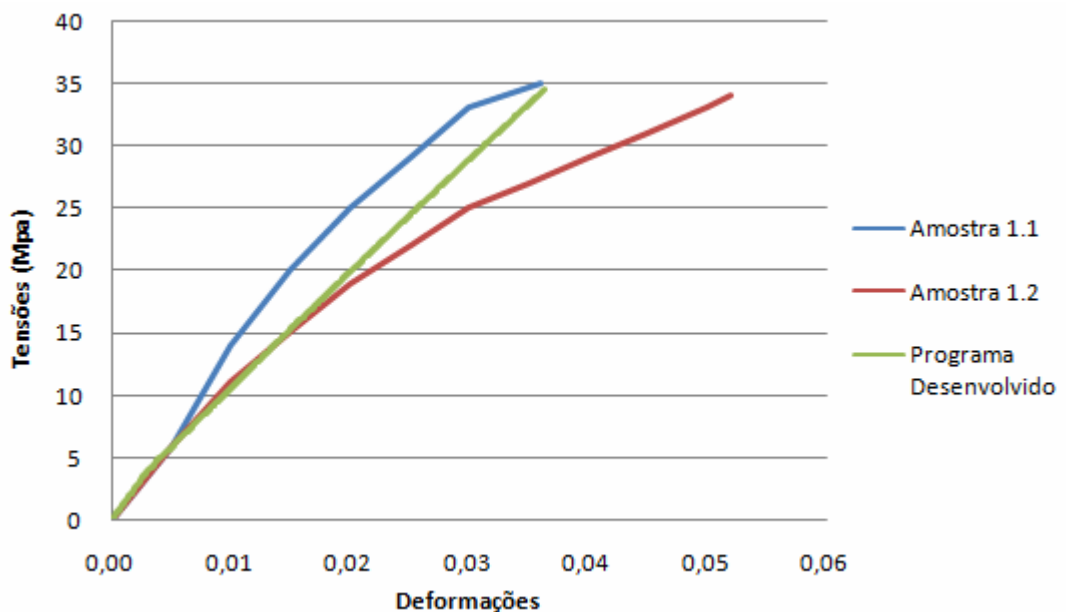


FIGURA 22 – GRÁFICO COMPARATIVO ENTRE OS RESULTADOS OBTIDOS POR FRANCO (2008) E PELO PROGRAMA DESENVOLVIDO
FONTE: O autor (2009)

Os resultados numéricos gerados pelo programa desenvolvido são condizentes com os resultados experimentais obtidos por Franco (2008). Destaca-se

o trecho final da curva relativa ao modelo numérico, onde se observa uma reposta global praticamente elástica.

Inúmeras tentativas foram realizadas em torno do valor da constante $C2$, a fim de acentuar a perda de rigidez no trecho final da curva. Contudo, o aumento do valor dessa constante levava ao rompimento prematuro do modelo, devido à falha de uma faixa de elementos próximos a aplicação do carregamento. Tal fato pode ser explicado através do fenômeno de “localização de deformações”, particularidade essa observada em simulações de materiais plásticos e frágeis, e que vem sendo bastante discutida na literatura desde os trabalhos pioneiros de Rice (1976) e Mayer & Hueckel (1979), passando pelo trabalho de Driemeier (1999). Toda via, uma vez que esse estudo foge ao escopo do presente trabalho, será sugerido como assunto de trabalhos futuros.

A figura 23 apresenta ainda a comparação entre o gráfico de tensões (σ_{xx}) versus deformações (ε_{xx}) de um ponto de Gauss da malha de elementos finitos com as curvas obtidas do ensaio experimental realizado por Franco (2008). Nota-se que apesar de alguns pontos de Gauss perderem rigidez ao longo de toda a simulação, a resposta global do modelo não necessariamente apresenta o mesmo comportamento constitutivo.

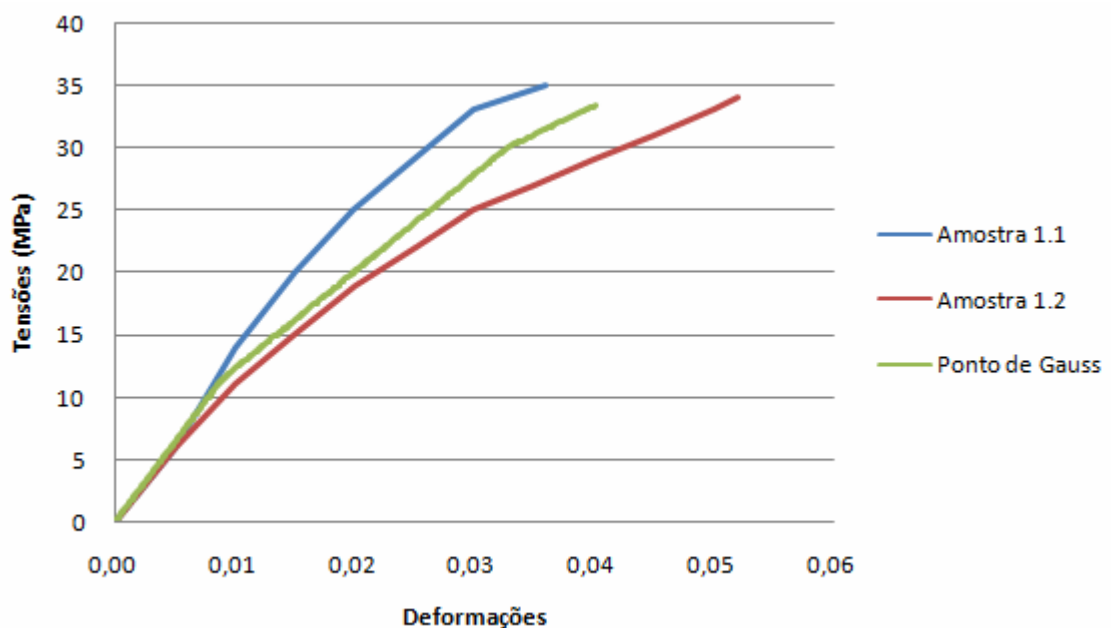


FIGURA 23 – GRÁFICO COMPARATIVO ENTRE OS RESULTADOS OBTIDOS POR FRANCO (2008) E PELO PROGRAMA DESENVOLVIDO EM UM PONTO DE GAUSS

FONTE: O autor (2009)

6.4. EXEMPLO 4

Uma vez “calibrados” os parâmetros do modelo de dano desenvolvido por Tao & Phillips (2005) para o cimento resinoso Cement-Post pode-se utilizar esses mesmos parâmetros para simular o processo de danificação em outras aplicações. Neste exemplo pretende-se verificar a influência da perda de rigidez no cimento resinoso e em suas interfaces durante a aplicação de carga em um disco de dentina tratado endodonticamente.

No trabalho desenvolvido por Franco (2008) dentes pré-molares foram tratados endodonticamente e logo após cortados formando discos de dentina, como pode se visto esquematicamente na figura 24, esses discos de dentina foram então submetidos a um teste de compressão com uma carga de 220 N a uma velocidade de 0,2 mm/min.

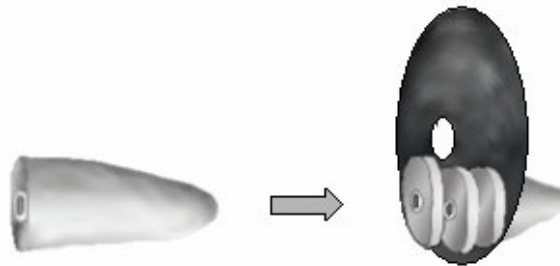


FIGURA 24 – ESQUEMA DE CORTE DOS DISCOS DE DENTINA
FONTE: Franco (2008)

No programa desenvolvido o disco de dentina foi simulado através de um modelo axissimétrico, ou seja, uma “fatia” do sólido é rotacionada em torno de eixo produzindo o sólido de revolução como pode ser observado na figura 25.

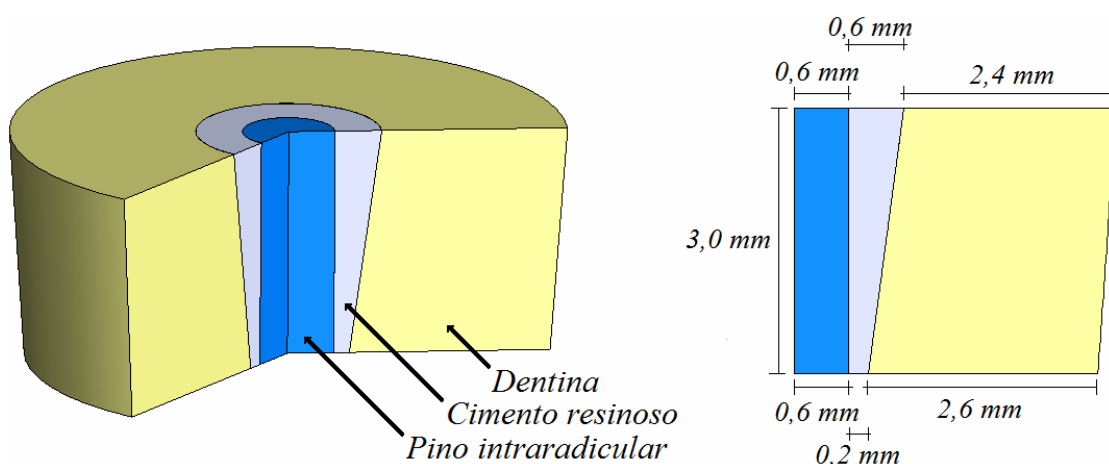


FIGURA 25 – MODELO AXISSIMETRICO DO DISCO DE DENTINA
FONTE: O autor (2009)

Esse modelo foi discretizado utilizando elementos isoparamétricos de oito nós e elementos de interface contendo seis nós. As condições de contorno do problema, a discretização espacial em elemento finitos e os materiais envolvidos na simulação são apresentados na figura 26. A malha de elementos finitos possui 1110 elementos com 3403 nós, o carregamento foi imposto em 500 incrementos de carga iguais.

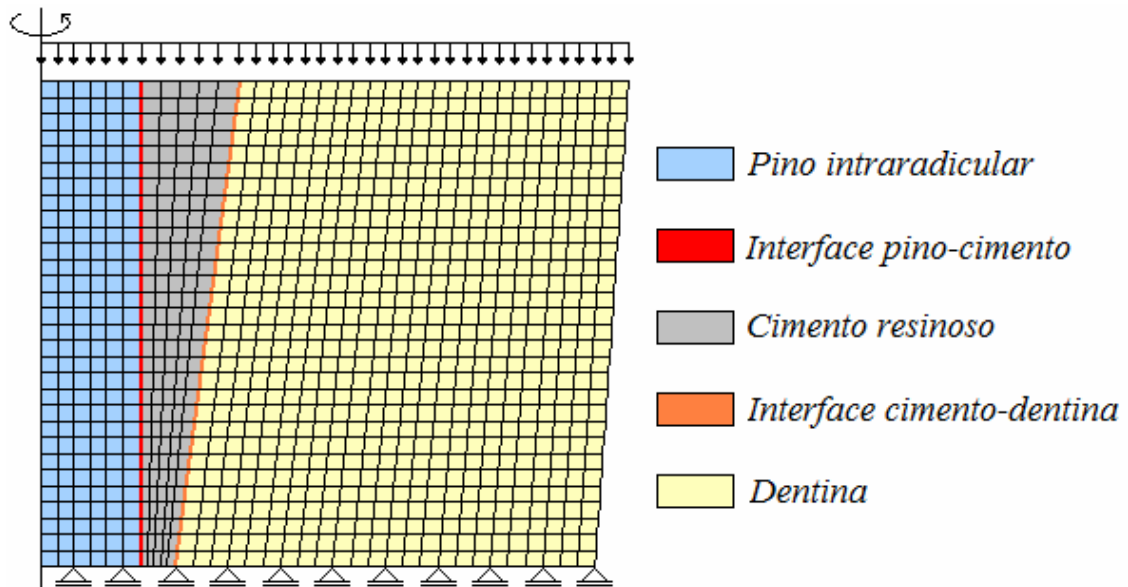


FIGURA 26 – CONDIÇÕES DE CONTORNO, DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL EM ELEMENTOS FINITOS E MATERIAIS SIMULADOS NO EXEMPLO 4
FONTE: O autor (2009)

Em um primeiro momento todos os materiais (pino intra-radicular, cimento, dentina e interfaces) foram simulados sob um regime perfeitamente elástico. A seguir, em uma nova simulação, foram introduzidos os parâmetros do modelo de dano de Tao & Phillips (2005), a fim de simular a perda de rigidez no cimento odontológico e nas interfaces adjacentes. As propriedades materiais e os parâmetros do modelo numérico, retirados de Marson (2003) e Franco (2008), são apresentados no quadro 6.

MATERIAL	VARIÁVEL	VALOR
Pino intra-radicular	Módulo de elasticidade (E)	85000 MPa
	Coefficiente de Poisson (ν)	0,33
Interface pino-cimento	Módulo de elasticidade (E)	1200 MPa
	Coefficiente de Poisson (ν)	0,31
	Módulo de cisalhamento	22,33 MPa

MATERIAL	VARIÁVEL	VALOR
Interface pino-cimento	ϑ_1	0,00
	ϑ_2	0,99
	ϑ_3	0,01
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
	$C2$	0,61
Cimento	Módulo de elasticidade (E)	1200 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
	$C2$	0,61
Interface cimento-dentina	Módulo de elasticidade (E)	1200 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31
	Módulo de cisalhamento	16,80 <i>MPa</i>
	ϑ_1	0,00
	ϑ_2	0,01
	ϑ_3	0,99
	ε_{d0}	0,05
	$C1$	0,75
$C2$	0,61	
Dentina	Módulo de elasticidade (E)	18600 <i>MPa</i>
	Coeficiente de Poisson (ν)	0,31

QUADRO 6 – PROPRIEDADES MATERIAIS E PARÂMETROS EMPREGADOS NO EXEMPLO 04

FONTE: O autor (2009)

Os resultados obtidos com o programa desenvolvido nesse trabalho para as distribuições de tensões e deformações são apresentados nas figuras 27 a 40, comparando os resultados da simulação com todos os materiais sob um regime perfeitamente elástico com os resultados da simulação contendo o modelo de dano. Para esse exemplo, as tensões são apresentadas em mega Pascals (*MPa*).

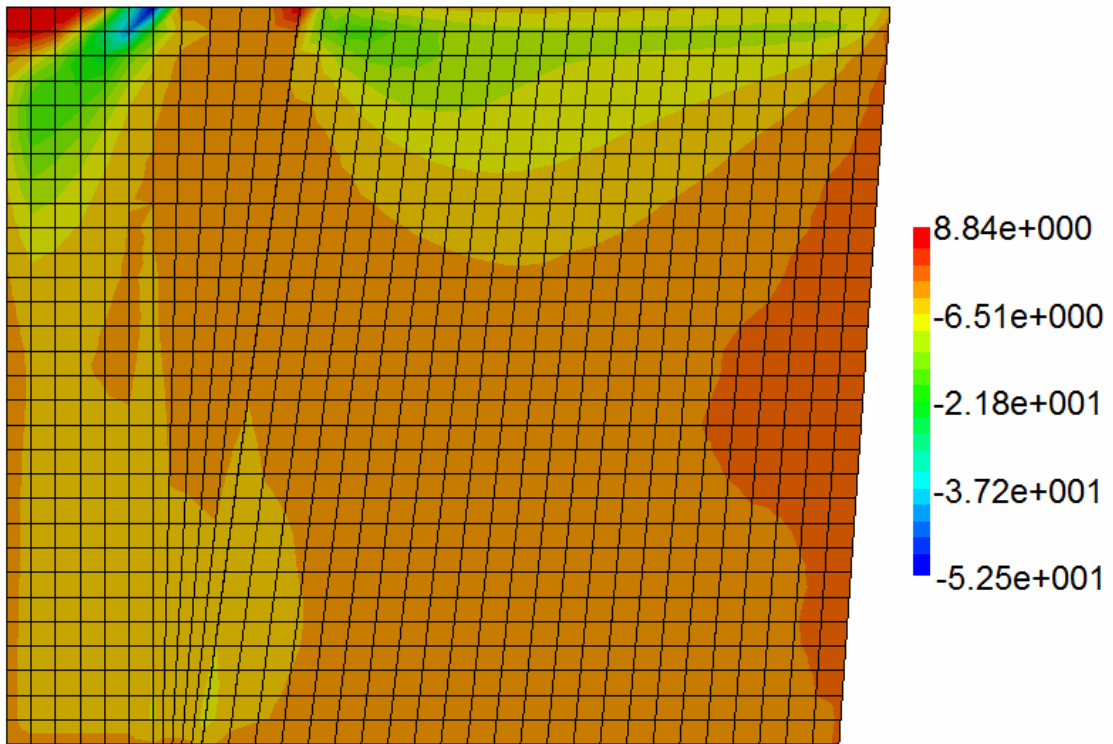


FIGURA 27 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

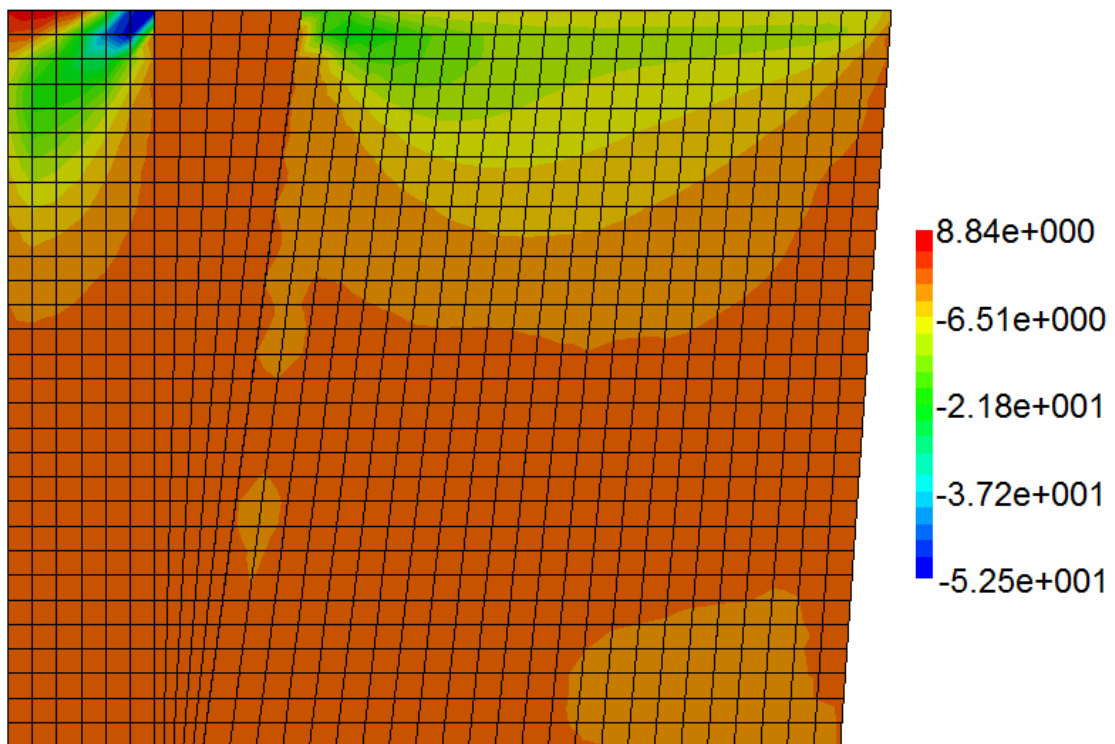


FIGURA 28 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

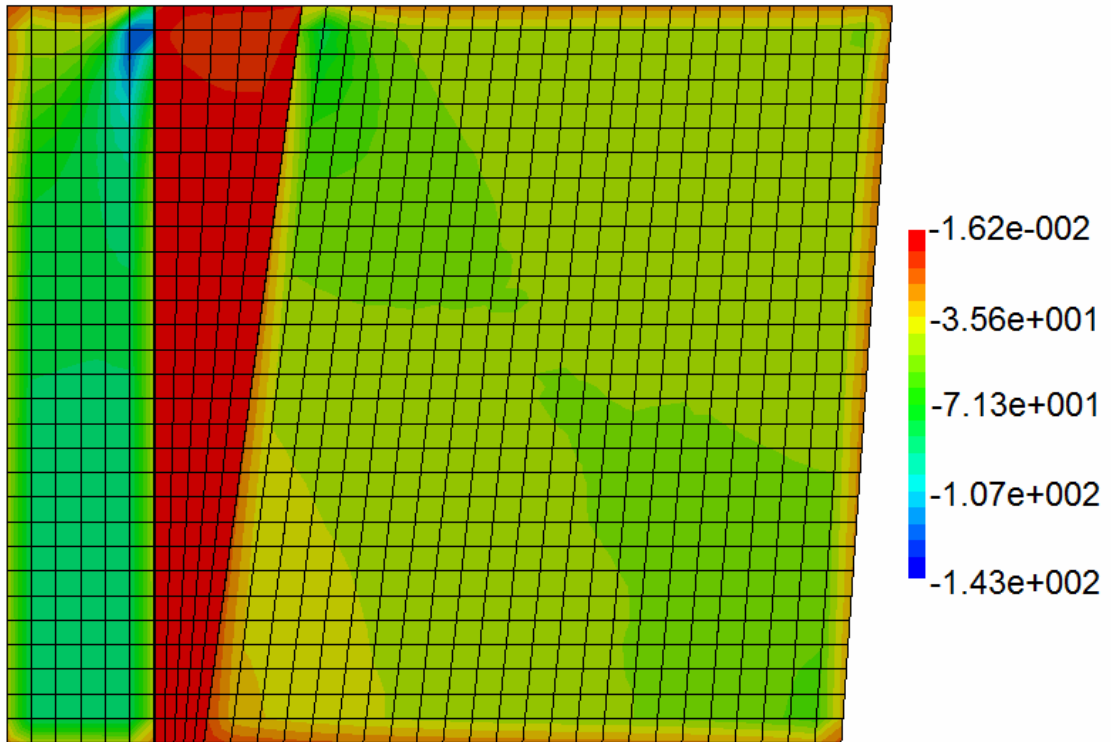


FIGURA 29 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{yy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

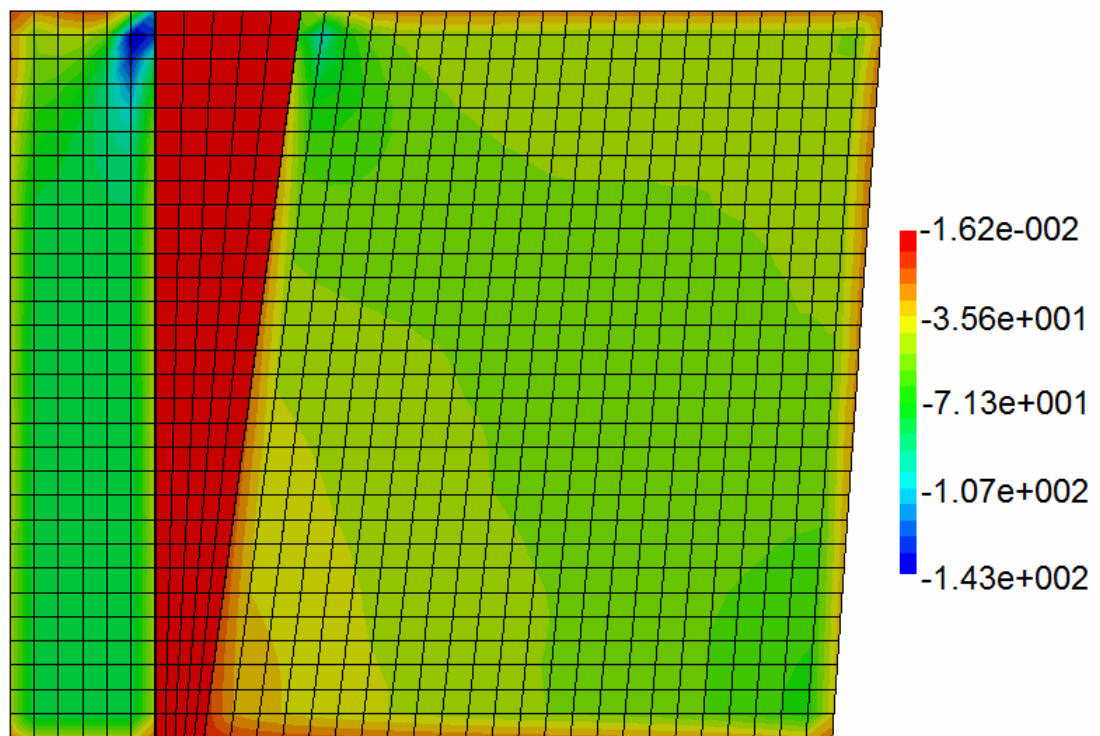


FIGURA 30 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{yy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

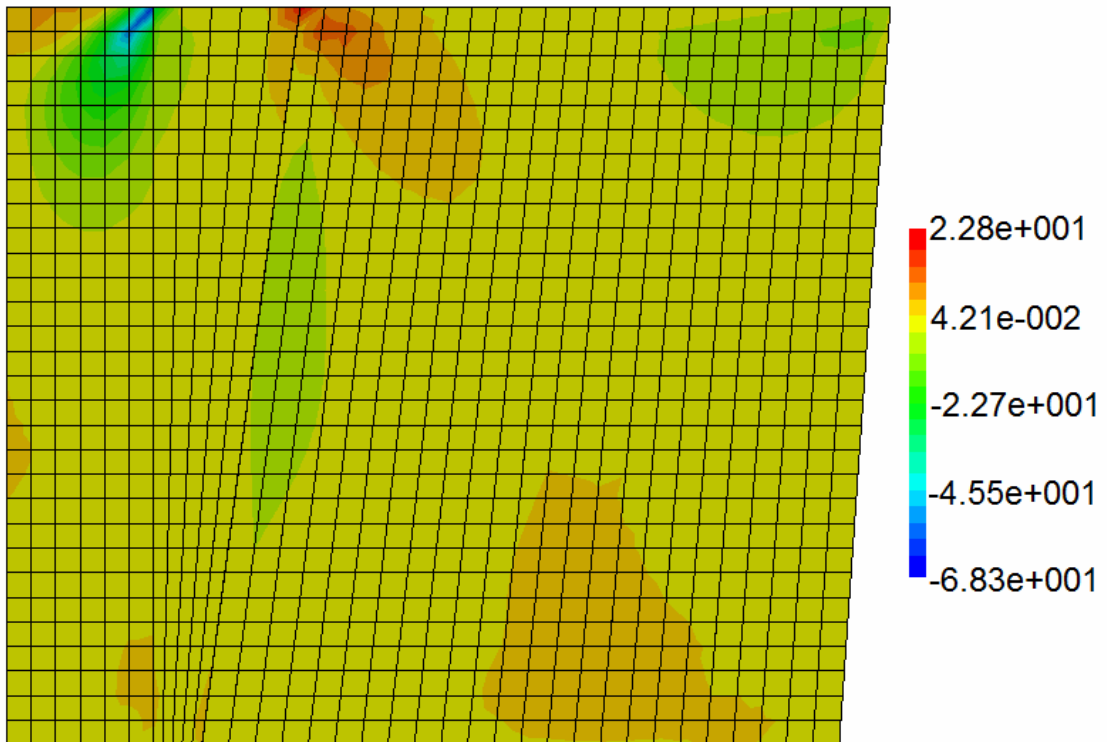


FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

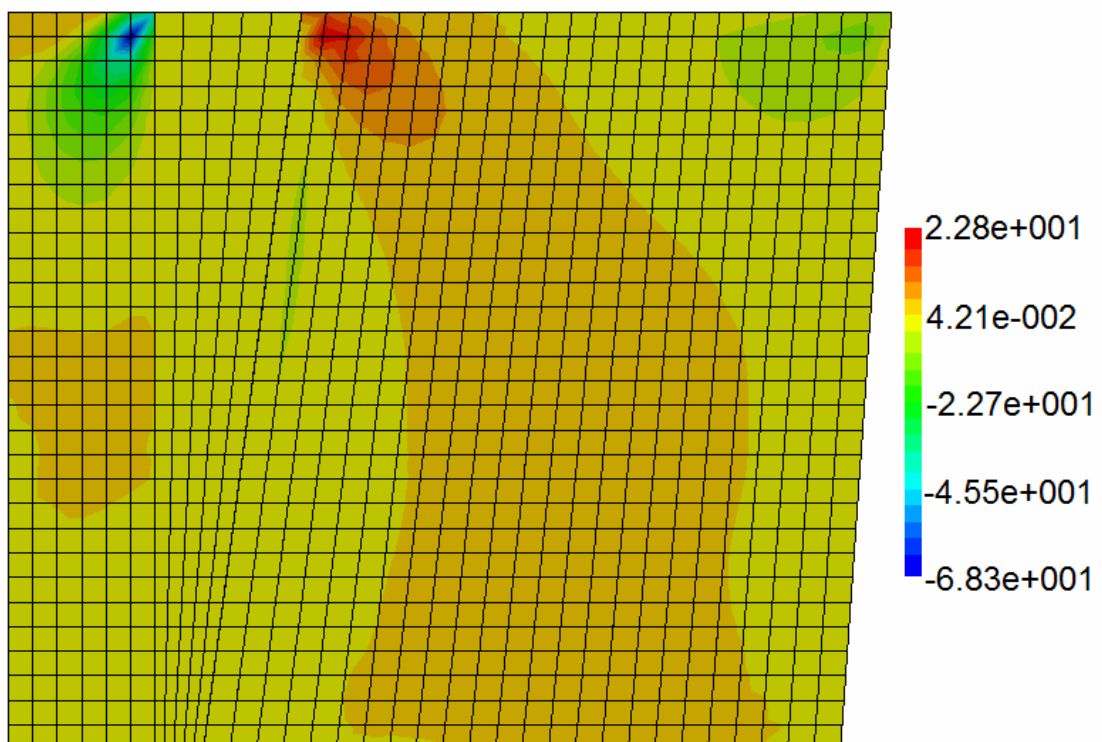


FIGURA 32 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

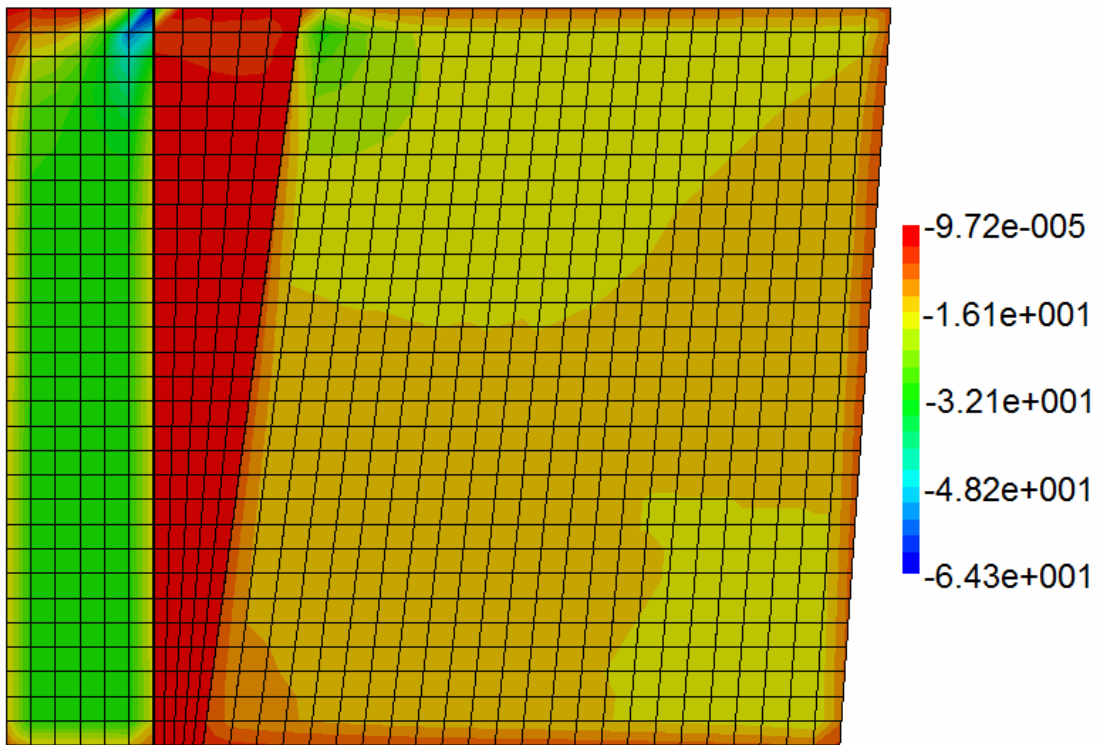


FIGURA 33 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

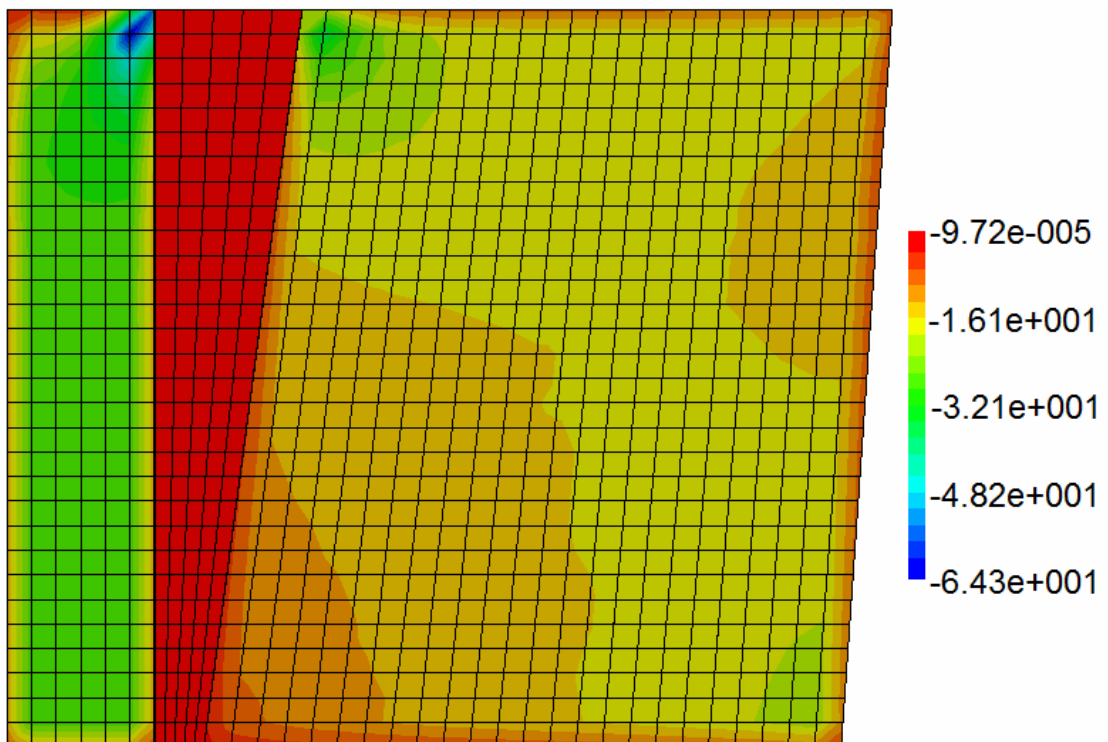


FIGURA 34 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR DE TENSÕES
(MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

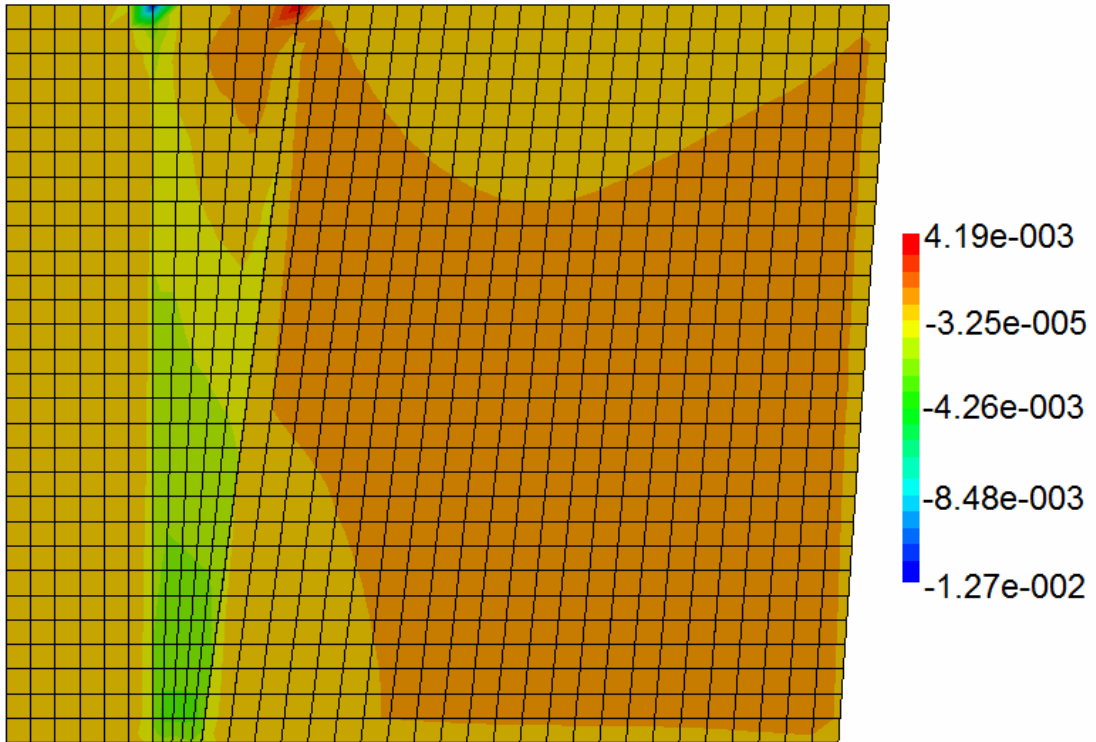


FIGURA 35 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xx} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

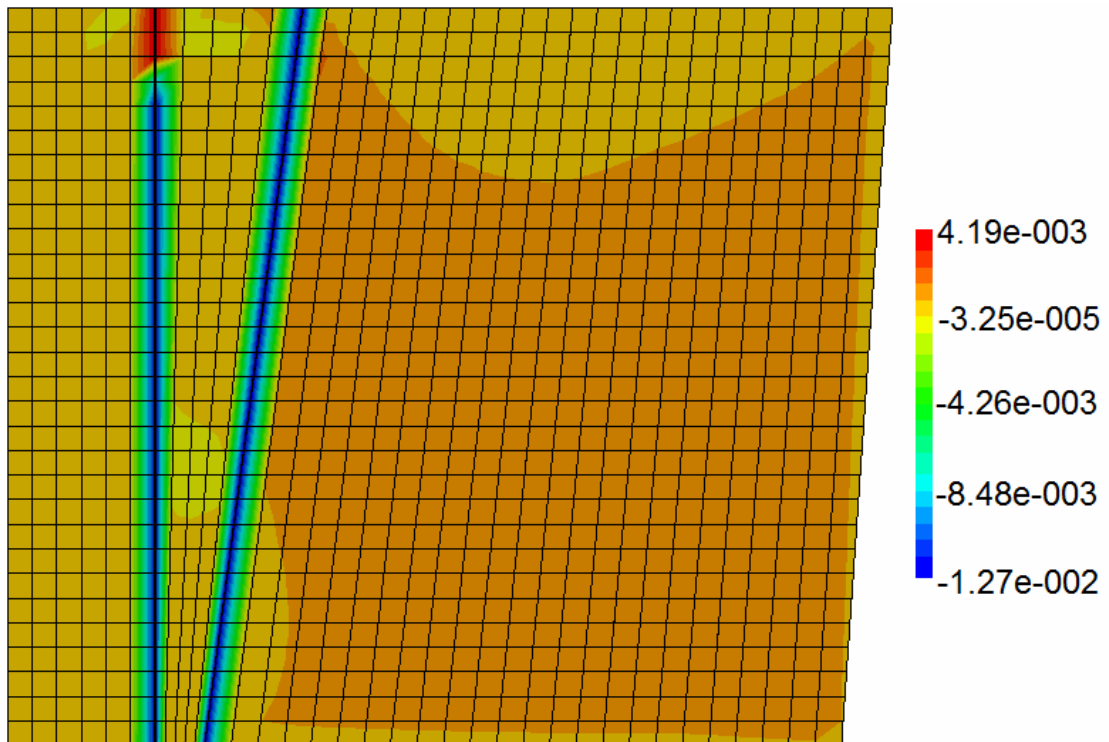


FIGURA 36 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xx} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

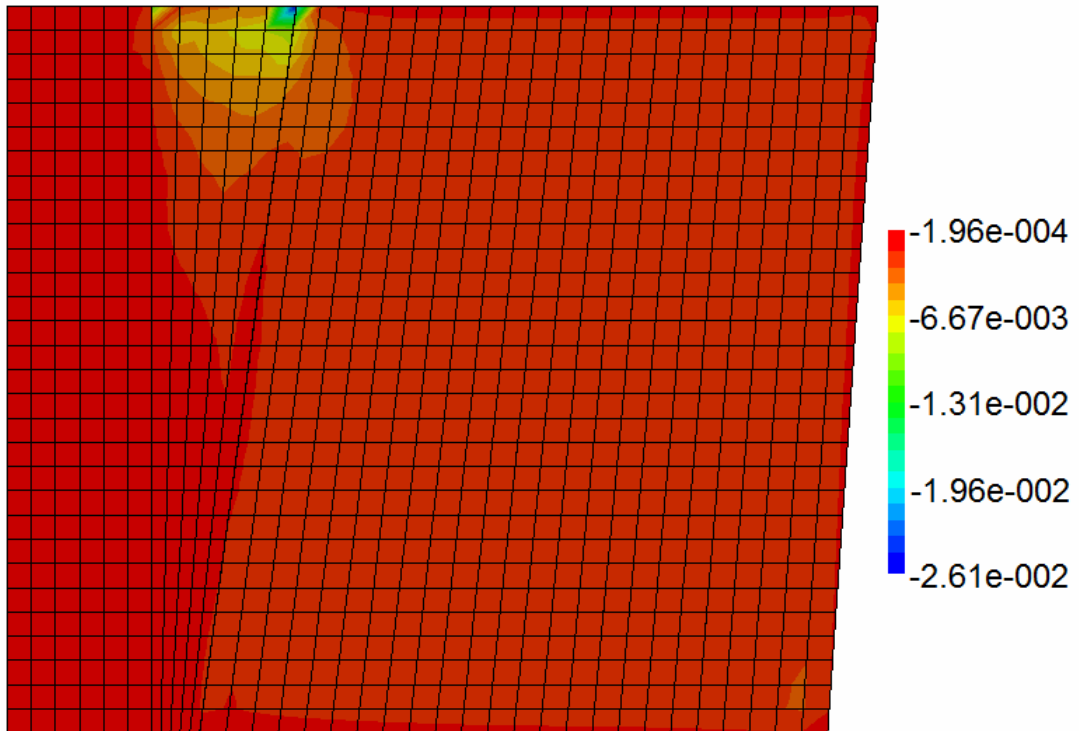


FIGURA 37 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{yy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

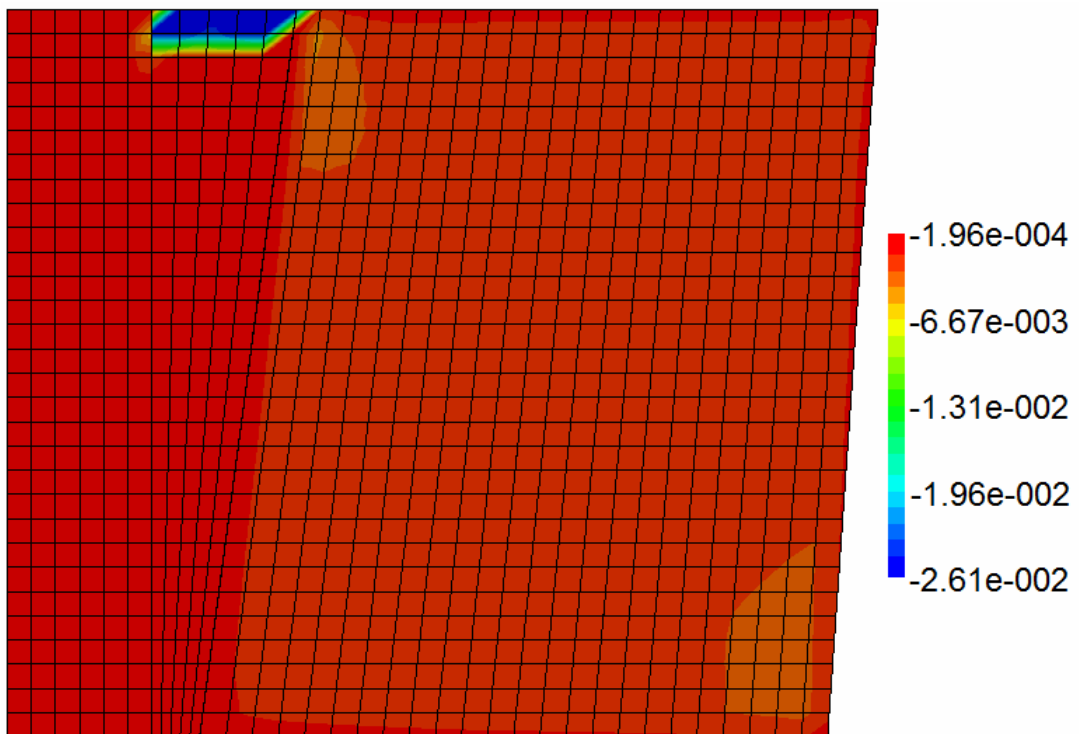


FIGURA 38 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{yy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
FONTE: O autor (2009)

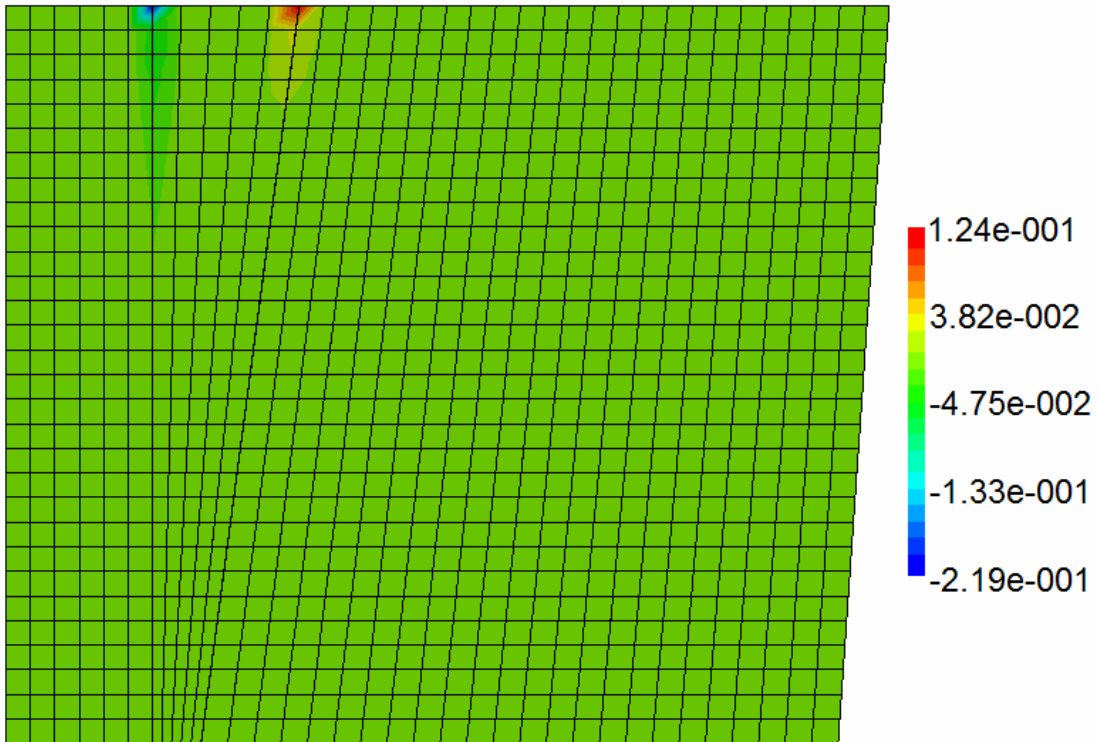


FIGURA 39 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
 FONTE: O autor (2009)

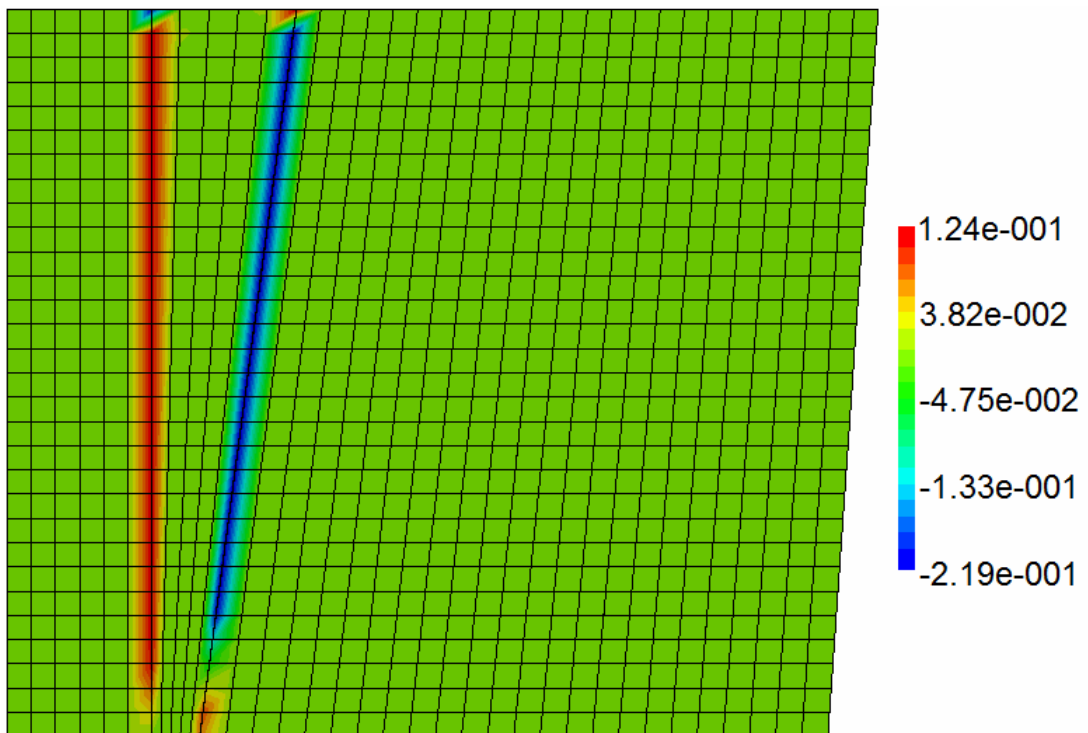


FIGURA 40 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES (MODELO PURAMENTE ELÁSTICO)
 FONTE: O autor (2009)

Observa-se que os materiais com maior módulo de elasticidade (pino intraradicular e dentina), como esperado, ofereceram maior resistência ao carregamento aplicado. Fato esse que foi acentuado na segunda simulação devido à danificação do cimento resinoso e de suas interfaces. É possível perceber que as regiões próximas as interfaces se deformaram mais quando simuladas levando-se em conta o modelo de dano enquanto, as tensões diminuíram, esse fato demonstra que o modelo de dano é capaz de simular o processo de perda de rigidez. Além disso, observa-se que a perda de rigidez no cimento resinoso tem pouca influência sobre a resposta global da geometria.

Nas figuras 41 a 46, a região contendo o cimento resinoso é destacada a fim de melhorar a visualização das distribuições de tensões e deformações. Mais uma vez as tensões são apresentadas em mega Pascals.

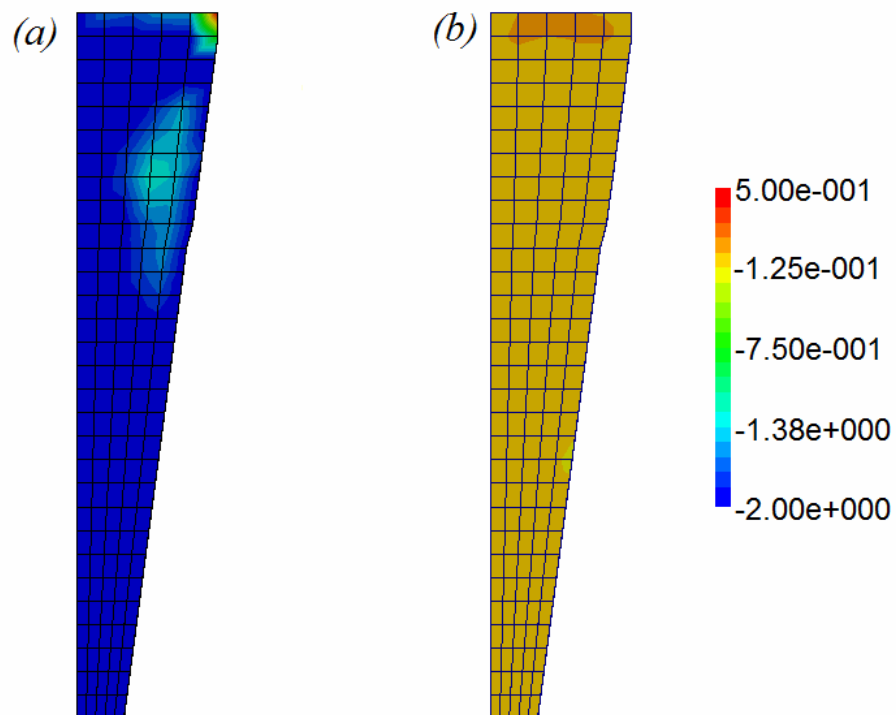


FIGURA 41 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR DE TENSÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

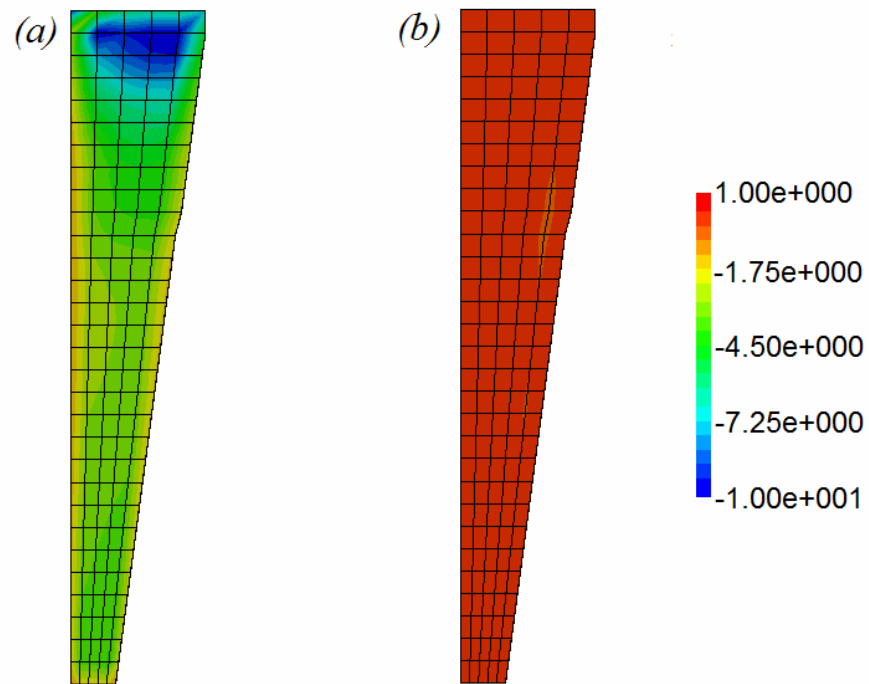


FIGURA 42 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{yy} DO TENSOR DE TENSÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

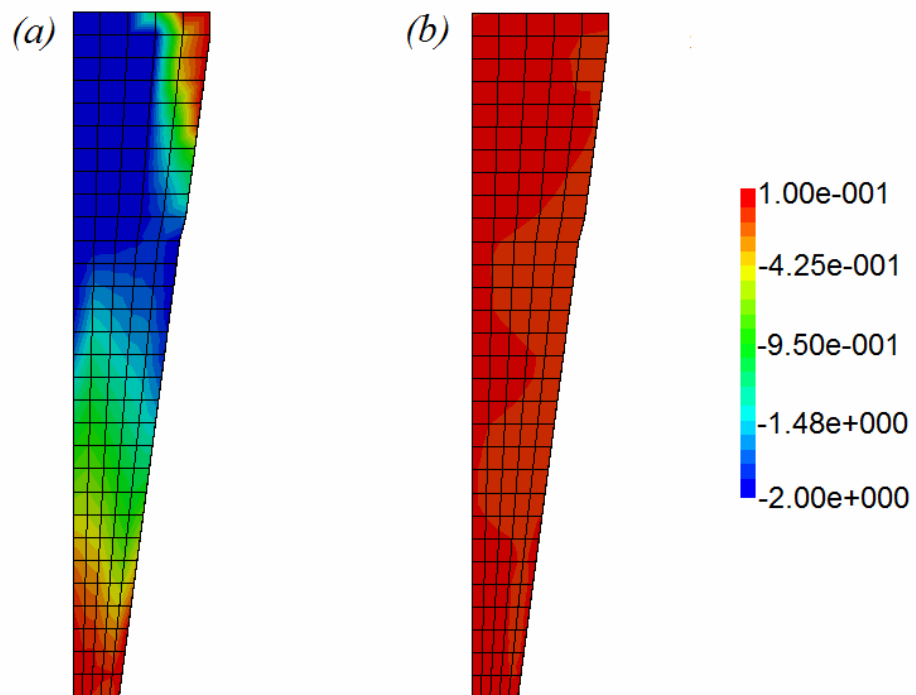


FIGURA 43 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR DE TENSÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

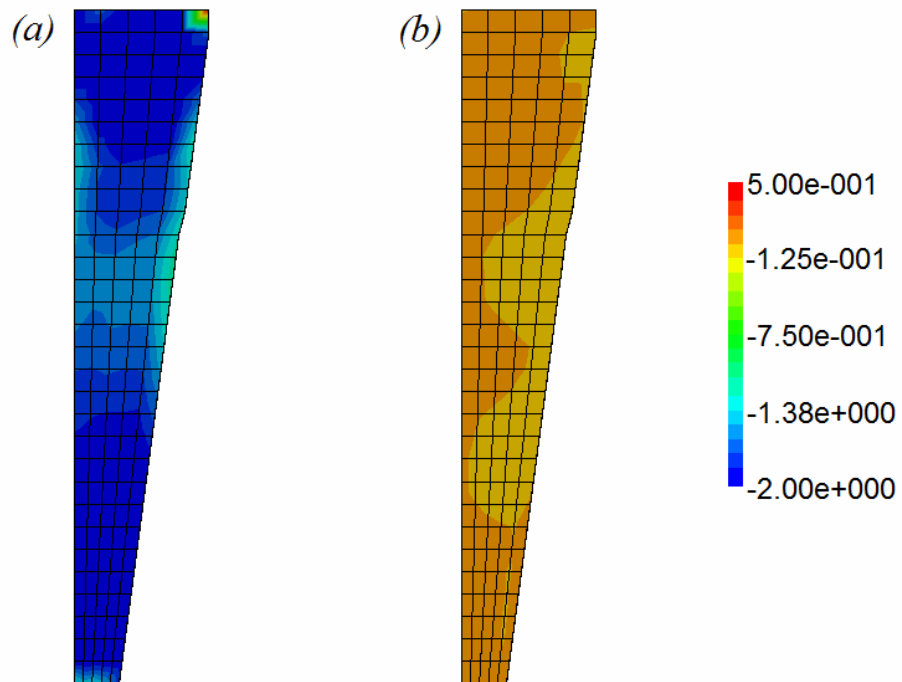


FIGURA 44 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR DE TENSÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

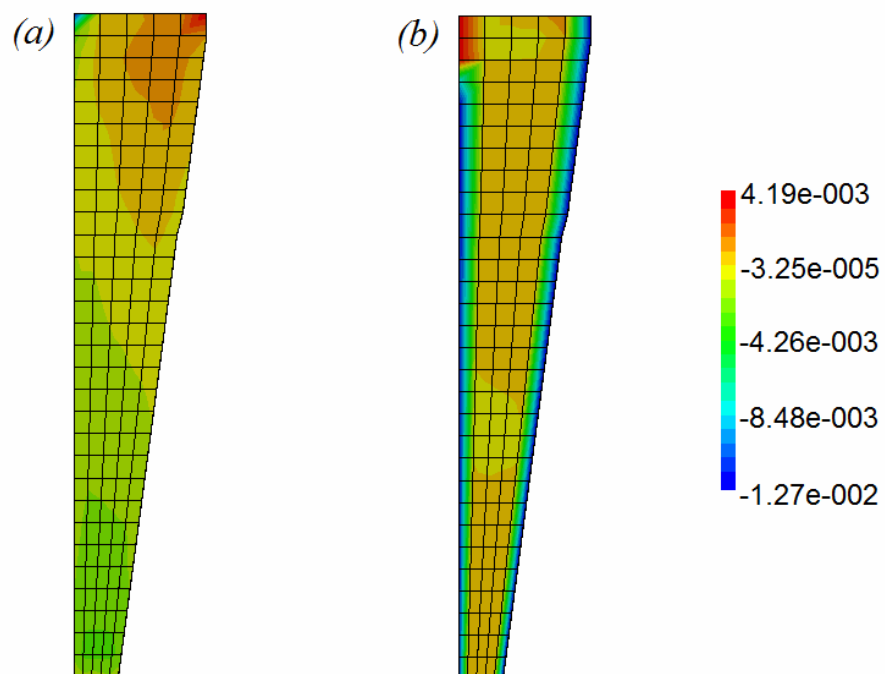


FIGURA 45 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ϵ_{xx} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

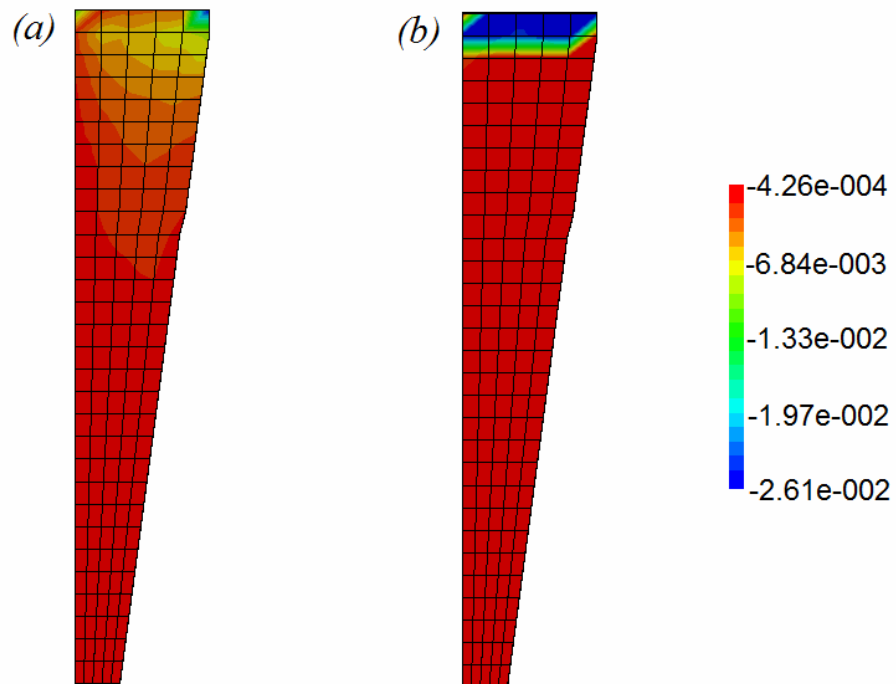


FIGURA 46 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{yy} DO TENSOR DE DEFORMAÇÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

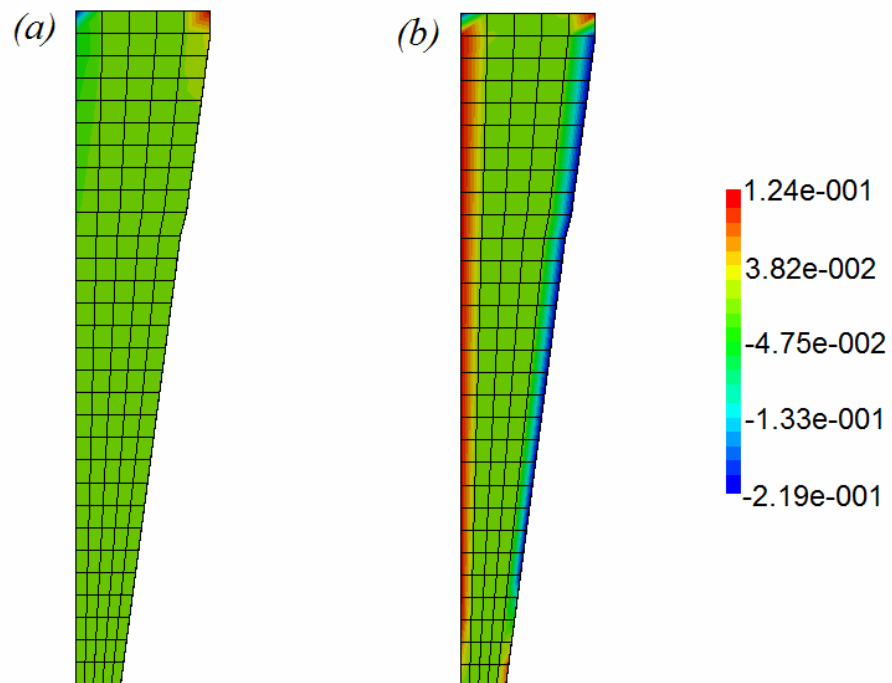


FIGURA 47 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DEFORMAÇÕES PARA O CIMENTO RESINOSO NO (a) MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO (b) MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

Comparando-se os valores de tensões e deformações na região onde foi discretizado o cimento resinoso nota-se que, de maneira geral, houve um aumento nas deformações e diminuição do valor das tensões na simulação onde o modelo de dano estava presente. Tal fato evidencia, mais uma vez, a perda de rigidez do material em estudo.

Devido à dimensão bastante reduzida dos elementos de interface não foi possível uma visualização apurada das tensões e deformações na região de interesse. Assim, nas figuras 48 a 53 são apresentados os gráficos de tensões e deformações ao longo das interfaces segundo a altura em relação à base do modelo computacional.

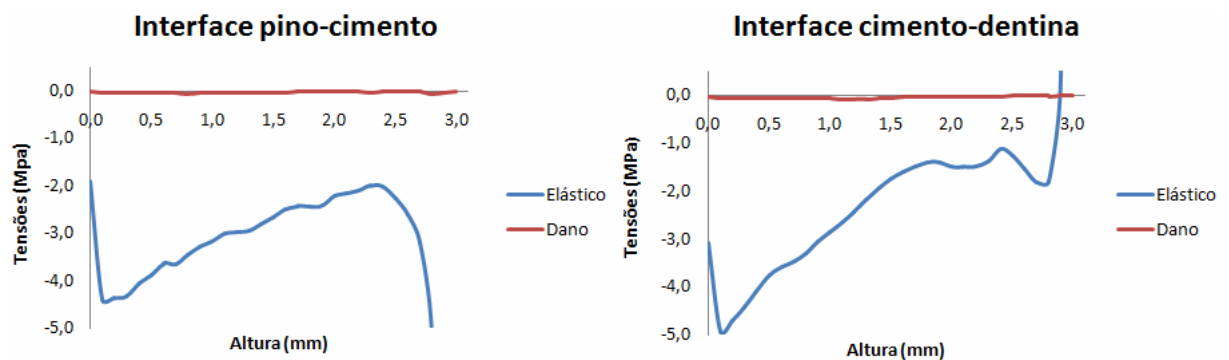


FIGURA 48 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xx} DO TENSOR TENSÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

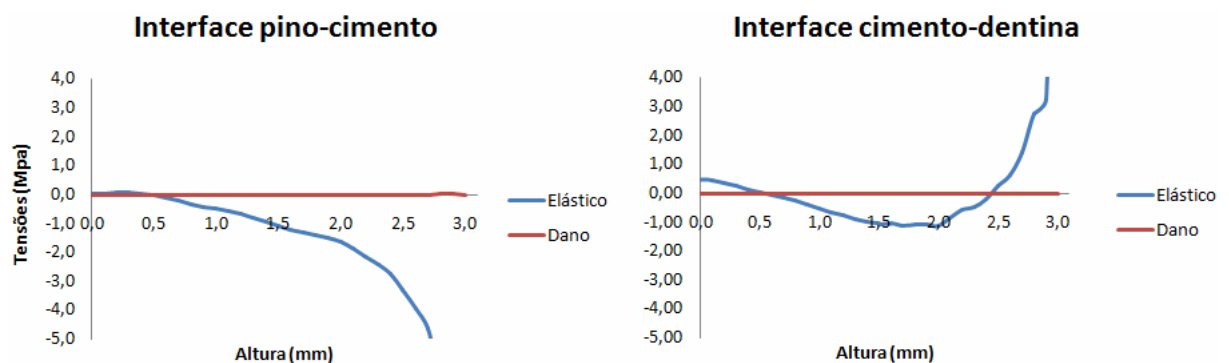


FIGURA 49 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{xy} DO TENSOR TENSÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

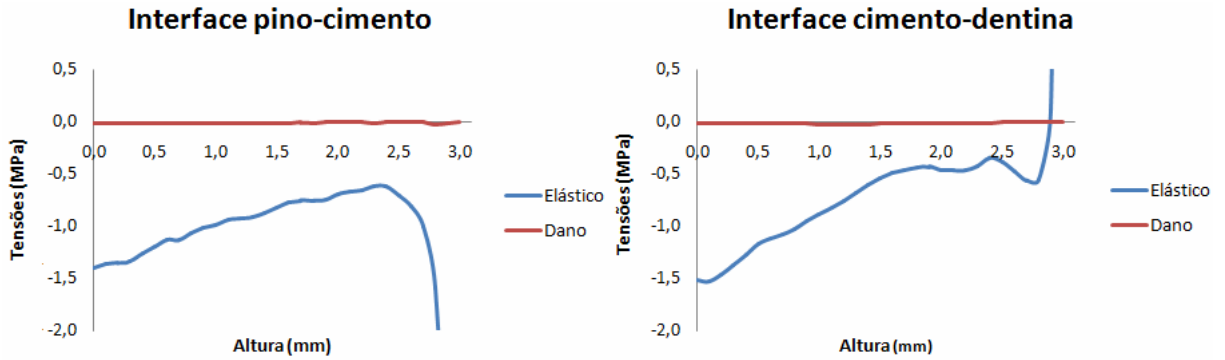


FIGURA 50 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE σ_{zz} DO TENSOR TENSÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

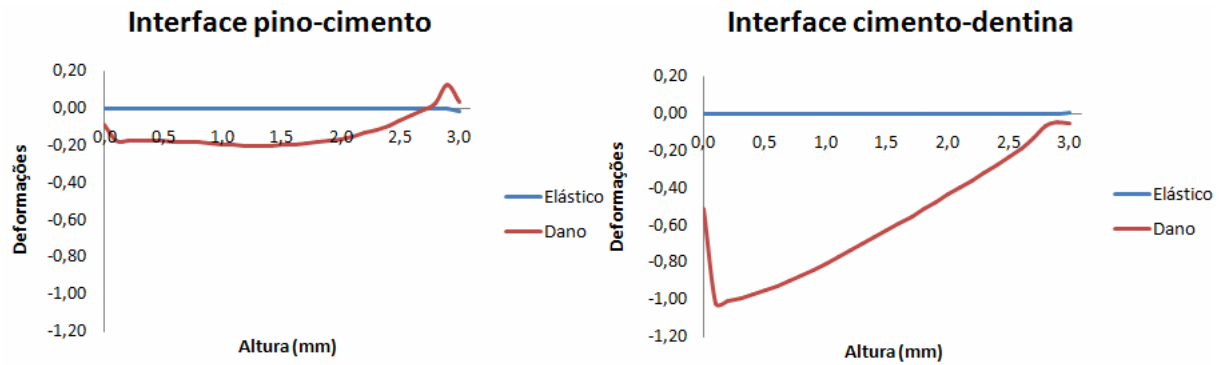


FIGURA 51 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ϵ_{xx} DO TENSOR DEFORMAÇÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

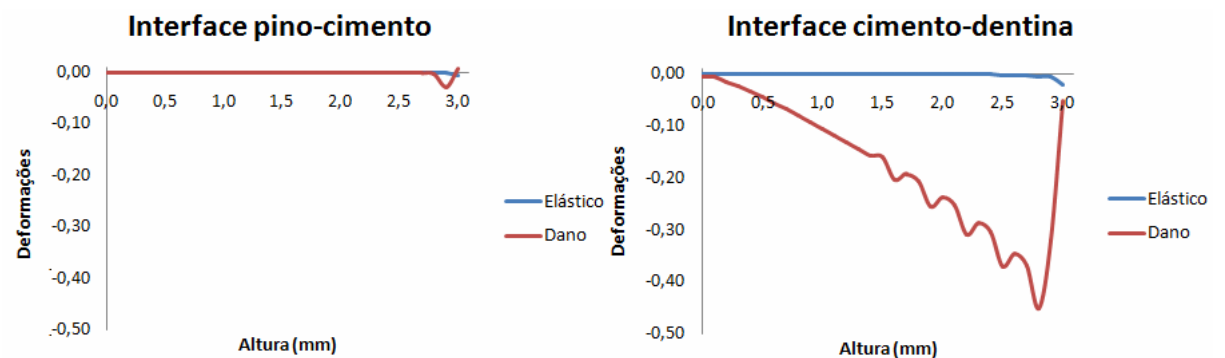


FIGURA 52 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ϵ_{yy} DO TENSOR DEFORMAÇÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

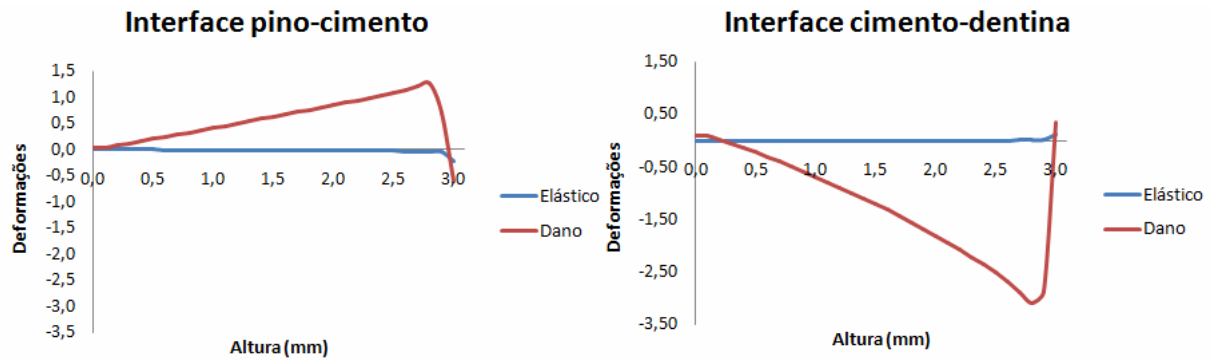


FIGURA 53 – DISTRIBUIÇÃO DA COMPONENTE ε_{xy} DO TENSOR DEFORMAÇÕES PARA AS INTERFACES NO MODELO PURAMENTE ELÁSTICO E NO MODELO DE DANO

FONTE: O autor (2009)

Assim como foi observado nas imagens anteriores, nas simulações onde o modelo de dano estava presente, nota-se um aumento das deformações e diminuição do valor das tensões quando comparadas ao modelo puramente elástico. Tal fato comprova a perda de rigidez também nas interfaces em estudo. Além disso, devido à formulação empregada no elemento de interface, a interface pino-cimento apresentou rigidez maior quando comparada a interface cimento-dentina.

7. CONCLUSÕES

A partir da pesquisa bibliográfica desenvolvida, da formulação apresentada para a equação constitutiva e para o problema de equilíbrio, dos algoritmos implementados e dos resultados obtidos, pode-se concluir que:

01. A aplicação da teoria da termodinâmica com variáveis internas à modelagem da danificação da interface permitiu definir a resposta constitutiva dos materiais que a compõem a partir de dois potenciais termodinâmicos. Os potenciais adotados permitiram obter as leis de estado, que relacionam variáveis de estado com variáveis associadas, e a lei de fluxo que governa a perda de rigidez.

02. A aplicação de conceitos da análise convexa como, por exemplo, os conceitos de funções convexas conjugadas e de função suporte de uma região convexa, permitiu obter a forma dos potenciais termodinâmicos para o modelo constitutivo a partir de métodos simples. Além disso, técnicas da análise convexa conduziram a uma lei de fluxo que estabelece que as taxas da variável interna pertençam ao subdiferencial da indicatriz da região de forças termodinâmicas admissíveis. Como consequência, é possível determinar a perda de rigidez em pontos singulares da região admissível sem o uso de ferramentas especiais.

03. A interpretação da variável interna de dano, em concordância com os conceitos de tensão e deformação efetiva, deve receber mais atenção. Estes dois conceitos têm a mesma interpretação apenas enquanto se consideram materiais elásticos, onde suas funções de energia são quadráticas.

04. O modelo de dano desenvolvido por Tao & Phillips (2005) e utilizado no presente trabalho apresentou bons resultados apesar de sua simplicidade.

05. Verificou-se a ocorrência do fenômeno de “acumulação de deformações” nas simulações, caracterizando dependência dos resultados com relação à discretização adotada. Portanto se aconselha o estudo de técnicas de regularização presentes na literatura a fim de minimizar esse problema.

06. Da análise dos resultados presentes no último exemplo, verificou-se que as tensões encontradas nas simulações onde foi considerado o modelo de dano são maiores das que as tensões encontradas nas simulações puramente elásticas. Ao passo que as deformações diminuíram de uma simulação para outra. Fato esse que ratifica o funcionamento do modelo de dano, simulando a perda de rigidez no cimento resinoso e nas interfaces pino-cimento-dentina.

07. A utilização de uma aproximação da matriz inversa do Hessiano, atualizada segundo o método BFGS, eliminou a necessidade de determinar as derivadas segundas da função objetivo.

08. O elemento de interface implementado apresentou-se adequado para o tipo de problema analisado, em virtude de seus atributos. Destaca-se entre eles a fácil implementação desse elemento no momento em que também se utilizam os elementos isoparamétricos para modelar o meio. Sugere-se a implementação da possibilidade de perda de contato empregando esse mesmo elemento desenvolvido por Desai et al (1984).

09. Mais ensaios experimentais são necessários para calibrar os parâmetros que regem a interface bem como o modelo de dano.

A continuação do presente trabalho, do ponto de vista do modelo constitutivo, poderia se dar com a inclusão de mais uma variável interna. Essa, função da variável já utilizada, capaz de quantificar a energia armazenada durante o processo de danificação mas que não é recuperável. Outra sugestão é a evolução da variável interna, de uma variável escalar, para uma variável tensorial, capaz de simular a danificação de forma anisotrópica. Além dessas, a implementação de um modelo já consagrado de dano também viria a agregar mais valor a um futuro trabalho.

Do ponto de vista computacional, a implementação dos algoritmos aqui apresentados a uma linguagem orientada a objeto tornaria o programa desenvolvido mais adequado a receber novas subrotinas, contribuindo assim com um avanço mais acelerado da linha de pesquisa. Muitas universidades brasileiras já matém bibliotecas bastante amplas de subrotinas construídas sob essa estrutura, tornando o desenvolvimento de novos códigos uma tarefa conjunta e dinâmica, e não mais uma iniciativa isolada e lenta.

REFERÊNCIAS

Akai, T.J. **Applied numerical methods for engineers**. USA: John Wiley & Sons, Inc, 1994.

Beer, G. An isoparametric joint interface element for finite element analysis. **International journal for numerical methods in engineering**, vol. 21, n. 4, p. 585-600, 1985.

Bonfante, EA. **Avaliação quantitativa da continuidade da interface cimento/dentina de cimentos resinosos com diferentes modos de polimerização empregados na cimentação de pinos de fibra de vidro**. Dissertação (Mestrado em Odontologia). Universidade de São Paulo, Bauru, 2007

Bouillaguet, S.; Troesch, S.; Wataha, J. C.; Krejci, I.; Meyer, J. M.; Pashley, D. H. Microtensile bond strength between adhesive cements and root canal dentine. **Dental Materials**, vol. 19, p. 199-205, 2003.

Collins, I.F.; Houlsby, G.T. Application of thermomechanical principles to the modeling of geotechnical materials. In: ROYAL SOCIETY MATHEMATICAL, PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES. **Proceedings of...**, Londres, 1997, vol. 453, n. 1964, p. 1975-2001.

Coutinho, A.L.G.A., Martins, M.A.D., Sydenstricker, R.M., Alves, J.L.D., Landau, L. Simple zero thickness kinematically consistent interface elements. **Computers and geomechanics**, vol. 30, n. 5, p. 347-374, 2003.

Day, R. A.; Potts, D. M. Zero thickness interface elements: numerical stability and application. **International journal for numerical and analytical methods in geomechanics**, vol. 18, n. 4, p. 689-708, 1994.

Desai, S.C.; Zaman, M.M., Lightner, J.G.; Siriwardane, H.J. Thin-layer element for interfaces and joints. **International journal for numerical and analytical methods in geomechanics**, vol. 8, n. 1, p. 19-43, 1984.

Driemeier, L. **Contribuição ao estudo da localização de deformações com modelos constitutivos de dano e plasticidade**. 123 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Estruturas), Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos.

Einav, I.; Houlsby, G.T.; Nguyen, G.D. Coupled damage and plasticity models derived from energy and dissipation potentials. **International Journal of Solids and Structures**, vol. 44, p. 2487-2508, 2007.

Ferrari, M.; Mannocci, F.; Vichi, A.; Cagidiaco, M.C.; Mjör, I.A. Bonding to root canal: Structural characteristics of the substrate. **American journal of dentistry**, vol. 13, n. 5, p. 255-260, 2000.

Feijóo, R.; Gouvea, J. El sistema SDP – MEF. In: CONGRESSO IBERO AMERICANO DE METODOS COMPUTACIONALES EM INGENIERÍA. **Anais do...**, Madrid, Espanha, 1985.

Franco, A. P. G. O. **Análise não-linear do mecanismo de cimentação de pinos intra-radulares utilizando o método dos elementos finitos**. 159 f. Dissertação (Mestrado em Odontologia), Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2008.

Freitas, L. A. R. U. **Modelagem constitutiva de solos utilizando potenciais termodinâmicos generalizados**. 120 f. Dissertação (Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2008.

Frank, R.; Guenot, A.; Humbert, P. Numerical analysis of contact in geomechanics. In: FORTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON NUMERICAL METHODS IN GEOMECHANICS. **Proceedings of...**, Rotterdam, 1992, p. 37-42.

Ghaboussi, J.; Wilson, E. L.; Isenberg, J. Finite element for rock joints and interfaces. **Journal of the soil mechanics and foundations division**, vol 99, n. 10, p. 833-848, 1973.

Goodman, R. E.; Taylor, R. L.; Brekke, T.L. A model for mechanics of jointed rock. **Journal of the soil mechanics and foundations division**, vol. 94, n. 3, p. 637-659, 1968.

Goracci, C.; Raffaelli, O.; Monticelli, F.; Balleri, B.; Bertelli, E.; Ferrari, M. The adhesion between prefabricated FRC posts and composite resin cores: microtensile bond strength with and without post-silanization. **Dental Materials**, vol 21, p. 437-444, 2005.

Griffths, D. V. Numerical studies of soil structure interaction using simple interface model. **Canadian geotechnical journal**, vol. 25, n. 1, p. 158-162, 1987.

Guello, G. A. **Simulação computacional de estruturas de concreto por meio da mecânica do dano**. 105 f. Dissertação (Mestrado em engenharia), Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2002.

Han, W., Reddy, B. D. **Plasticity – Mathematical theory and numerical analysis**. Springer-Verlag New York, Inc., 1999.

Hansen, N. R.; Schreyer, H. L. A thermodynamically consistent framework for theories of elastoplasticity coupled with damage. **International journal of solids and structures**, vol. 31, n. 3, p. 359-389, 1994.

Hecke, M. B. **Potenciais generalizados e otimização na análise elasto-plástica**. 140 f. Tese (Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica). Departamento de Engenharia Mecânica - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1991.

Herrmann, L. R. Finite element analysis of contact problems. **Journal of the soil mechanics and foundations division**, vol. 104, n. 5, p. 1043-1059, 1978.

Houlsby, G. T.; Puzrin, A. M. A thermodynamically framework for constitutive models for rate-independent dissipative materials. **International journal of plasticity**, vol. 16, n. 9, p. 1017-1047, 2000.

Janson, J.; Hult, J. Fracture mechanics and damage mechanics a combined approach. **Journal de mécanique appliqué**, vol.1, n.1, 69-84, 1977.

Kashanov, L. M. On rupture time under condition of creep. **IVZ Akademi naukovi URSS**, vol. 8, p. 26-31, 1958.

Kashanov, L. M. On brittle fracture of thin plastic interlayer in creep condition. In: Dvorak, G.; Shield, R. **Mechanics of material behavior**. Amsterdam: Elsevier, 1984.

Kattan, P. I.; Voyiadjis, G. Z. A coupled theory of damage mechanics and finite strain elasto-plasticity – I. Damage and elastic deformations. **International journal of engineering science**, vol. 28, n. 5, p. 421-435, 1990.

Krajcinovic, D. Constitutive equations for damaging materials. **Journal of applied mechanics**, vol. 50, p. 355-360, 1983.

La Bordeire, C., Mazars, J., Pijaudier-Cabot, G. Response of plain and reinforced concrete structures under cyclic loading. **American Concrete Institute – Special Publication**, vol.134, p. 147–72, 1992.

Lanza, A.; Aversa, R.; Rengo, S.; Apicella, D.; Apicella, A. 3D FEA of cemented steel, glass and carbon post in a maxillary incisor. **Dental materials**, vol. 21, n. 8, p. 709-715, 2005.

Lazaro, F. P., 2004. **Análise não-linear da interação solo-duto em encostas empregando elementos de interface**. 93 f. Dissertação (Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004.

Lemaitre, J. A continuous damage mechanics model for ductile fracture. **Journal of engineering materials and technology**, vol. 107, p. 83-89, 1985.

Lemaitre, J. **A course in damage mechanics**. Berlin: Springer, 1992.

Lemaitre, J.; Chaboche, J.C. **Mécanique des matériaux solide**. Paris: Dunod-Bordas, 1985.

Lemaitre, J. Evaluation of dissipation and damage in metals submitted to dynamic loading. In: INTERNATIONAL CONGRESS OF MATHEMATICIANS, **Proceedings of...**, Japão, vol. 1, 1971.

Lemaréchal, Hiriart-Urruty, J. B. **Convex analysis and minimization algorithms I**. USA: Springer-Verlag, 1991.

Maier, G., Hueckel, T. Non associated and coupled flow rules of elastoplasticity for rock-like materials. **International journal of rock mechanics and mining science**, vol. 16, p. 77-92, 1979.

Marigo, J.J. Modelling of brittle and fatigue for elastic material by growth of microvoids. **Engineering. fracture. mechanics.**, vol. 21, p. 861-874, 1985.

Marson, F.C. **Resistência adesiva a microtração de cimentos resinosos na interface entre cerâmica e dentina**. 89 f. Dissertação (Mestrado em Odontologia), Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2003.

Maugin, G.A. **The thermomechanics of plasticity and Fracture**. Cambridge university press, 1992.

Mazars, J. **Application de la mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure.** Tese (Doutorado), Universidade de Paris, Paris, 1984.

Mazars, J.; Pijaudier-Cabot, G. Continuum damage theory – application to concrete. **Journal of engineering mechanics**, vol. 115, n. 2, p. 345-365, 1989.

Murakami, S. Effect on cavity distribution in constitutive equations of creep and creep damage. In: **EUROMECH COLLOQUE ON DAMAGE MECHANICS**, Cachan, 1981.

Nguyen, G.D. **A thermodynamic approach to constitutive modeling of concrete using damage mechanics and plasticity theory.** Tese (Doutorado), Universidade de Oxford, Oxford, 2005.

Ngo, D.; Scordelis, C. Finite element analysis of reinforced concrete beams. **Journal American Concrete Institute**, vol. 64, n. 3, p.152-163, 1967.

Nocedal, J.; Wright, S. **Numerical optimization.** New York: Springer-Verlag, 1999.

Oden, J.T.; Carey, G.F.; Becker, E.B. **Finite elements – An introduction.** EUA: Printice Hall International, 1981.

Ortiz, M. A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete. **Mechanic materials**, vol. 4, p. 67-93, 1985.

Perez, B. E.; Barbosa, S. H.; Melo, R. M.; Zamboni, S. C.; Özcan, M.; Valandro, L. F. Does the thickness of the resin cement affect the bond strength of a fiber post to the root dentin? **International Journal Prosthodontics**, vol. 19, p. 606-609, 2006.

Press, W. H.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T.; Flannery, B. P. **Numerical recipes in Fortran 77: The art of scientific computing.** Cambridge university press, 1992.

Pande, G.N.; Sharma, K. G. On joint interface elements and associated problems of numerical ill conditioning. **International journal for numerical and analytical methods in geomechanics**, vol. 3, n. 3, p. 293-300, 1979.

Proença, S. P. B., Pituba, J. J. C. **Introdução à mecânica do dano e fraturamento.** São Carlos, 2000.

Rice, J. R. The localization of plastic deformations, In: THEORETICAL AND APPLEID MECHANICS, North-Holland Publication Company, 1976.

Rockafellar, R.T. **Convex analysis**. Princeton university press, 1970.

Santis, R.; Prisco, D.; Apicella, A.; Ambrosio, L.; Rengo, S.; Nicolais, L. Carbon fiber post adhesion to resin luting cement in the restoration of endodontically treated teeth. **Journal of Materials Science: Material in Medicine**, vol. 11, p. 201-206, 2000.

Sharma, K.G.; Desai, C.S. Analysis and implementation of thin-layer element for interfaces and joints. **Journal of engineering mechanics**, vol. 118, n. 12, p. 2242-2462, 1992.

Simo, J.C.; Ju, J.W. Strain and stress based continuum damage models j. formulation. **International journal of solids & structures**, vol. 23, p. 821-840, 1987.

Tai, W.H. Plastic damage and ductile fracture in mild steels. **Engineering fracture mechanics**, vol. 37, p. 853-880, 1990.

Tao, X.; Phillips, D.V. A simplified isotropic damage model for concrete under bi-axial stress states. **Cement & Concrete composites**, vol. 27, p. 716-726, 2005.

Tay, F.R.; Loushine, R.J.; Lambrechts, P.; Weller, R.N.; Pashley D.H. Geometric factors affecting dentin bonding in root canals: a theoretical modeling approach. **Journal of endodontics**, vol. 31, n. 8, p. 584-589, 2005.

Veiga, J. **Análise de problemas tridimensionais solo-estrutura pelo método dos elementos finitos no domínio de Fourier**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil - Geotecnia), Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2000.

Zienkiewicz, O.C.; Best, B.; Dullage, C.; Stagg, K.G. Analysis of nonlinear problems in rock mechanics with particular reference to jointed rock systems. In: SECOND INTERNATIONAL CONGRESS ON ROCK MECHANICS. **Proceeding of...**, vol. 3, Belgrad, 1970, p. 8-14.