



Andres Felipe Galvis Rodriguez

# **Análise Multiescala de Falha Dinâmica em Materiais Policristalinos usando o Método dos Elementos de Contorno**

73/2014

CAMPINAS  
2014



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**


Andres Felipe Galvis Rodriguez

# **Análise Multiescala de Falha Dinâmica em Materiais Policristalinos usando o Método dos Elementos de Contorno**

Orientador: Prof. Dr. Paulo Sollero  
Coorientador:

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, na Área de Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO Andres Felipe Galvis Rodriguez, E ORIENTADO PELO PROF. DR. Paulo Sollero.

  
.....  
ASSINATURA DO ORIENTADOR

CAMPINAS  
2014

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura  
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

G139a Galvis Rodriguez, Andres Felipe, 1989-  
Análise multiescala de falha dinâmica em materiais policristalinos usando o método dos elementos de contorno \ Andres Felipe Galvis Rodriguez. – Campinas, SP: [s.n.], 2014.

Orientador: Paulo Sollero.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Multiescala. 2. Método dos elementos de contorno. 3. Anisotropía. 4. Dinâmica. 5. Homogeneização. I. Sollero, Paulo, 1950-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Análise multiescala de falha dinâmica em materiais policristalinos usando o método dos elementos de contorno.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em inglês:** Multiscale analysis of dynamic failure in polycrystalline materials using the boundary element method.

**Palavras-chave em Inglês:** Multiscale, Boundary element method, Anisotropy, Dynamic, Homogenization.

**Área de concentração:** Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico

**Titulação:** Mestre em Engenharia Mecânica

**Banca Examinadora:**

Paulo Sollero [Orientador]

Renato Pavanello

Roberto Gomes de Aguiar Veiga

**Data da defesa:** 30-07-2014

**Programa de Pós Graduação:** Engenharia Mecânica

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA  
DEPARTAMENTO DE PROJETO MECÂNICO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

# Análise Multiescala de Falha Dinâmica em Materiais Policristalinos usando o Método dos Elementos de Contorno

Autor: Andres Felipe Galvis Rodriguez

Orientador: Paulo Sollero

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:



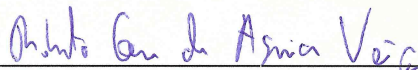
---

**Prof. Dr. Paulo Sollero, Presidente**  
DMC/FEM/UNICAMP



---

**Prof. Dr. Renato Pavanello**  
DMC/FEM/UNICAMP



---

**Dr. Roberto Gomes de Aguiar Veiga**  
USP/Poli - São Paulo

Campinas, 30 de Julho de 2014.



## **Dedicat3ria**

A mis padres, Julio Cesar y Ruby, a mi hermana Mar3a Alejandra y a mi t3a Martha a los cuales agradezco su apoyo y paciencia.

## **Agradecimentos**

À Deus, por seu amor e imensa generosidade por me permitir finalizar este trabalho.

A CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior pelo apoio financeiro durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Paulo Sollero, pela supervisão e apoio durante o desenvolvimento deste trabalho

A mi papá mi mamá y el resto de mi familia gracias por el apoyo incondicional.

A mi amigo de toda la vida Andrés Felipe Ramirez

Ao René e Diogo pela ajuda e discussões durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus amigos e companheiros da sala Renan, Mohammad e Kevin, pela colaboração e apoio

Ao René, Sergio e Cesar grandes amigos que me ajudaram durante este processo.

## Resumo

GALVIS RODRIGUEZ, Andrés Felipe. Análise Multiescala de Falha Dinâmica em Materiais Policristalinos usando o Método dos Elementos de Contorno. 2014. 119p. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

Este trabalho apresenta uma análise numérica de falha dinâmica em materiais policristalinos usando modelagem multiescala. O problema foi descrito em duas escalas, a escala micro ou mesoescala e a escala atômica. A estrutura policristalina (mesoescala) é gerada usando o diagrama de Voronoi com diferentes níveis de tamanho de grão homogêneo. As equações constitutivas para materiais anisotrópicos são apresentadas segundo o tipo de estrutura atômica do material, considerando a orientação cristalina aleatória e as propriedades do material rotacionadas em um ângulo aleatório no plano para cada grão. O campo de deslocamentos na mesoescala é calculado usando o Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual para materiais anisotrópicos, considerando as forças de corpo no domínio do tempo. A fratura intergranular é estudada com a Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas, incluindo zonas coesivas nas interfaces. Para a análise da escala atômica é preciso o gradiente de deformação efetivo utilizando a homogeneização de Hill-Mandel, e o tensor de tensão efetivo usando o potencial de Lennar-Jones e o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff na zona coesiva, empregando o campo de deslocamentos da mesoescala. A regra de Cauchy-Born define que todos os átomos contidos na zona coesiva têm um gradiente de deformação constante, sendo preciso utilizar apenas uma célula atômica unitária em cada zona coesiva, reduzindo o tempo de processamento computacional da simulação. Conhecidas as propriedades efetivas na zona coesiva, as forças coesivas que definem a separação do material são calculadas na mesoescala com o tensor de tensão efetivo e a geometria da estrutura. A separação do material e a propagação da trinca são definidas pelas forças coesivas ao longo de cada passo de tempo.

*Palavras-chave:* Materiais Policristalinos, Falha Dinâmica, Método dos Elementos de Contorno, Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas, Mesoescala, Zona Coesiva, Escala Atômica, Homogeneização, Propagação da Trinca.

## Abstract

GALVIS RODRIGUEZ, Andrés Felipe. Multiscale Analysis of Dynamic Failure in Polycrystalline Materials using the Boundary Element Method. 2014. 119p. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

This work presents a numerical analysis of dynamic failure in polycrystalline materials using multiscale modeling. The problem was describe by two scales, the micro or mesoscale and the atomistic scale. The polycrystalline structure (mesoscale) is generated using the Voronoi diagram with different levels of grain size homogenization. The constitutive equations for anisotropic materials are presented depending of the type of atomic structure, considering random crystal and material properties orientation. The displacement field of the mesoscale is calculate using the Dual Reciprocity Boundary Element Method for anisotropic materials, considering the body forces in the time domain. The intergranular fracture is studied with the Multiscale Cohesive Zone Model, including cohesive zones in the interfaces. To analyse the atomistic scale, is require the effective deformation gradient using the Hill-Mandel homogenization, and the effective stress tensor employing the Lennard-Jones potential and the first Piola-Kirchhoff tensor in the cohesive zone, using the displacement field from the mesoscale. The Cauchy-Rule defines that all atoms inside the cohesive zone have a constant deformation gradient, then is just require the use of a unit atomic cell in each cohesive zone, reducing the computational load of the simulation. With the known effective properties in the cohesive zone, the cohesive forces that define the material separation are determined in the mesoscale with the effective stress tensor and the geometry of the structure. The material separation and crack propagation are define by the cohesive forces through each time step.

*Keywords:* Polycrystalline Materials, Dynamic Failure, Boundary Element Method, Multiscale Cohesive Zone Model, Mesoscale, Cohesive Zone, Atomistic Scale, Homogenization, Crack Propagation.

## Lista de Ilustrações

1.1	Modelo multiescala de um material policristalino. . . . .	2
2.1	Mecanismos de falha em metais, (CROCKER ET AL., 2005). . . . .	6
2.2	Trinca transgranular em $\text{Si}_3\text{N}_4$ , (II ET AL., 2005). . . . .	7
2.3	Aparência típica de Ti-8Al-1Mo-1V em contato com cobre, (AKERFELDT ET AL., 2013). . . . .	7
2.4	Representação da zona coesiva. . . . .	8
2.5	Quatro tipos de leis coesivas: Primeira linha mostra a tração normal ( $T_n$ ) em função dos deslocamentos de abertura normal ( $\Delta_n$ ). Na segunda linha mostra a tração tangencial ( $T_t$ ) em função dos deslocamentos de abertura tangencial ( $\Delta_n$ ), (VAN DEN BOSCH ET AL., 2006). . . . .	9
2.6	Modos de fratura: (a) Modo I, (b) Modo II e (c) Modo III . . . . .	10
2.7	Deslocamentos e forças de tração coesivos na interface . . . . .	10
3.1	Sistemas cristalinos: (a) cúbica de corpo centrado (ccc), (b) cúbica de face centrada (cfc) e (c) hexagonal compacta (hc). . . . .	17
3.2	Estrutura policristalina artificial gerada com distribuição aleatória da orientação cristalina e das propriedades do material. . . . .	19
3.3	Sistema de coordenadas da geometria ( $x,y$ ) e da orientação do material (1,2) para cada grão. . . . .	20
3.4	Planos cristalinos considerados nas estruturas ccc e cfc . . . . .	20
3.5	Planos cristalinos considerados na estrutura hc. . . . .	20
3.6	Orientação cristalina: (a) caso 1 $1 \equiv z$ , (b) caso 2 $2 \equiv z$ e (c) caso 3 $3 \equiv z$ . . . . .	21
4.1	Ponto fonte localizado no contorno, circundado por uma região semi-circular. . . . .	38
4.2	Elementos: (a) quadrático descontínuo, (b) quadrático contínuo. . . . .	44
4.3	Tipos de grão: (a) grão interior, (b) grão no contorno. . . . .	47
4.4	Dominio com duas sub-regiões . . . . .	47
5.1	Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas. . . . .	53
5.2	Potencial de Lennard-Jones. . . . .	55
5.3	Modelagem do potencial interfacial na zona coesiva. . . . .	56
5.4	Modelo do potencial entre um átomo e uma superfície plana. . . . .	56
5.5	Modelo da zona coesiva. . . . .	58

5.6	Comparação de potencial x deslocamento e força x deslocamento entre a zona coesiva e o meio granular. . . . .	59
5.7	Caráter multiescala da deformação não uniforme na zona coesiva. . . . .	59
5.8	Ilustração das multiples escalas do modelo. . . . .	60
5.9	Posição deformada de um ponto interior na zona coesiva. . . . .	61
5.10	Domínios na macroescala e microescala. . . . .	63
5.11	Gradiente de deformação efetivo na zona coesiva. . . . .	64
5.12	Regra de Cauchy-Born. . . . .	66
5.13	Células unitárias: (a) hc e (b) cfc. . . . .	67
5.14	Propriedades homogeneizadas na zona coesiva. . . . .	69
5.15	Comportamento homogeneizado na zona coesiva. . . . .	70
5.16	Lei coesiva: (a) Força normal x separação normal (Modo I) e (b) Força tangencial x separação tangencial (Modo II). . . . .	71
5.17	Deslocamentos aplicados para ilustrar as leis coesivas, (Modo I) e (Modo II). . . . .	72
6.1	Diagrama de Voronoi plano . . . . .	74
6.2	Fluxograma do algoritmo do gerador da estrutura policristalina artificial . . . . .	75
6.3	Microestrutura artificial: (a) pseudo-random e (b) quasi-random. . . . .	76
6.4	Modificação da microestrutura artificial para incluir as zonas coesivas. . . . .	76
6.5	Tamanho da zona coesiva. . . . .	77
6.6	Malha do problema. . . . .	77
6.7	Configurações para determinar a lei coesiva do material. . . . .	78
6.8	Análise da escala atômica. . . . .	79
6.9	Fluxograma do programa computacional. . . . .	80
7.1	Tira infinita sob tração uniforme . . . . .	82
7.2	Carregamento tipo degrau . . . . .	82
7.3	Discretização para parte da tira de comprimento infinito: (a) (ALBUQUERQUE, 2001), (b)Sub-regiões . . . . .	83
7.4	Deslocamento vertical no topo da tira do problema quase-isotrópico . . . . .	84
7.5	Deslocamento vertical no topo da tira para diferentes razões entre os módulos de elasticidade . . . . .	84
7.6	Rotação das propriedades do material entre os grãos e a zona coesiva. . . . .	85
7.7	Condições de contorno. . . . .	86
7.8	Carregamento aplicado na simulação. . . . .	86
7.9	Lei coesiva para o zinco. . . . .	88
7.10	Resultado: 50 grãos (zinco), força = 40 N, tempo = 4 $\mu$ s . . . . .	88



7.11	Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1040 N e tempo = 0.104 ms. . . . .	89
7.12	Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1440 N e tempo = 0.144 ms. . . . .	89
7.13	Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1680 N e tempo = 0.168 ms. . . . .	90
7.14	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 40 N e tempo = 4 $\mu$ s. . . . .	90
7.15	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1120 N e tempo = 0.112 ms. . . . .	91
7.16	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1240 N e tempo = 0.124 ms. . . . .	91
7.17	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1360 N e tempo = 0.136 ms. . . . .	92
7.18	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1480 N e força = 1480 N e tempo = 0.148 ms. . . . .	92
7.19	Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1680 N e tempo = 0.168 ms. . . . .	93
7.20	Lei coesiva para o cobre. . . . .	94
7.21	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 40 N e tempo = 4 $\mu$ s. . . . .	94
7.22	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3120 N e tempo = 0.312 ms. . . . .	95
7.23	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3320 N e tempo = 0.332 ms. . . . .	95
7.24	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3600 N e tempo = 0.360 ms. . . . .	96
7.25	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3760 N e tempo = 0.376 ms. . . . .	96
7.26	Resultado: 50 grãos (cobre), força = 4000 N e tempo = 0.4 ms. . . . .	97
7.27	Resultado: 75 grãos (cobre), força = 40 N e tempo = 4 $\mu$ s. . . . .	97
7.28	Resultado: 75 grãos (cobre), força = 1800 N e tempo = 0.18 ms. . . . .	98
7.29	Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2480 N e tempo = 0.248 ms. . . . .	98
7.30	Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2680 N e tempo = 0.268 ms. . . . .	99
7.31	Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2920 N e tempo = 0.292 ms. . . . .	99

## Lista de Tabelas

- 3.1 Componentes do tensor de flexibilidade para o caso de esforço plano . . . . . 22
- 3.2 Componentes do tensor de flexibilidade para o caso de deformação plana . . . . . 22

# SUMÁRIO

<b>Lista de Ilustrações</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xix</b>
<b>SUMÁRIO</b>	<b>xxi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação . . . . .	1
1.2 Objetivos . . . . .	3
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Falha em Materiais Policristalinos . . . . .	5
2.2 Modelos Coesivos de Fratura . . . . .	8
2.2.1 Critério de falha coesivo . . . . .	10
2.3 Modelos Multiescala Coesivos de Fratura . . . . .	11
<b>3 Equações da Elasticidade Anisotrópica</b>	<b>13</b>
3.1 Elasticidade Anisotrópica . . . . .	13
3.2 Equação Constitutiva de um Material Policristalino . . . . .	16
<b>4 Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual</b>	<b>25</b>
4.1 Formulação Integral . . . . .	25
4.2 Soluções Fundamentais de Anisotropia . . . . .	29
4.3 Transformação da Integral de Domínio . . . . .	35
4.4 Equações Integrais Singulares . . . . .	38
4.5 Formulação dos Elementos de Contorno Discretizada . . . . .	39
4.6 Integração no Espaço . . . . .	42
4.7 Formulação por Sub-regiões . . . . .	46
4.8 Formulação no Domínio do Tempo . . . . .	50
<b>5 Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas</b>	<b>53</b>
5.1 Aproximação do Potencial nas Interfaces . . . . .	54

5.2	Gradiente de Deformação Efetivo na Zona Coesiva . . . . .	59
5.3	Regra de Cauchy-Born no Campo Efetivo . . . . .	66
5.4	Lei Coesiva do Material . . . . .	71
<b>6</b>	<b>Implementação Computacional</b>	<b>73</b>
6.1	Gerador da estrutura policristalina artificial . . . . .	73
6.2	Zonas coesivas e modelagem da escala atômica . . . . .	76
6.3	Código computacional multiescala . . . . .	79
<b>7</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>81</b>
7.1	Validação do Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual . . . . .	81
7.1.1	Tira infinita sob tração uniforme . . . . .	81
7.2	Simulações de Fratura Frágil Intergranular . . . . .	85
7.2.1	Falha intergranular em zinco . . . . .	87
7.2.2	Falha intergranular em cobre . . . . .	93
<b>8</b>	<b>Disposições Finais</b>	<b>101</b>
8.1	Conclusões . . . . .	101
8.2	Sugestões para Trabalhos Futuros . . . . .	102
	<b>Referências</b>	<b>103</b>

# 1 Introdução

## 1.1 Motivação

A falha em materiais policristalinos como metais ou cerâmicos tem sido bastante analisada nos últimos anos pela comunidade científica. Devido à utilização destes materiais em diferentes aplicações da engenharia, o comportamento dos materiais policristalinos sob diferentes condições agressivas de trabalho que debilitam o material tornou-se um objetivo importante do estudo. Recentemente a fratura destes materiais tem-se desenvolvido em uma escala micro, considerando fatores importantes como a anisotropia devido à variação das propriedades do material e a dependência do problema com a geometria granular, obtendo simulações para uma estrutura policristalina com caráter aleatório.

A simulação do comportamento de materiais policristalinos demanda um grande custo computacional, devido ao elevado número de graus de liberdade resultante do nível de discretização empregado a solução do sistema precisa de computadores mais poderosos. Técnicas da modelagem da fratura do material, como o Modelo das Zonas Coesivas (MZC) usando o Método dos Elementos Finitos desenvolvido inicialmente por Xu and Needleman (1994) e aplicado à simulação de materiais policristalinos frágeis por Camacho and Ortiz (1996), Maiti and Geubelle (2004), Espinosa et al. (1998), Espinosa and Zavattieri (2003b), Espinosa and Zavattieri (2003a).

A abordagem multiescala para a simulação de materiais policristalinos refere-se ao estudo do comportamento do material em diferentes escalas de tempo e tamanho, gerando resultados bem mais precisos, pois a análise multiescala estuda os fenômenos físicos das escalas menores que não são consideradas nos métodos convencionais. Diferentes técnicas de homogeneização devem ser utilizadas para acoplar os resultados individuais das escalas.

A análise multiescala dos modelos de fratura, a Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas (MMZC), foi recentemente desenvolvida por Zeng and Li (2010), proposta como um avanço do MZC convencional. Esta modelagem foi utilizada para diferentes aplicações como em problemas de fratura dúctil e frágil, impacto a alta velocidade, fratura dinâmica em material policristalino em (LI ET AL., 2010), (ZENG AND LI, 2010), (QIAN AND LI, 2011), (LI ET AL., 2012), (ZENG AND LI, 2012). Nesses trabalhos foi desenvolvido o estudo da falha em materiais policristalinos

analisando a escala atômica do material reformulando as leis coesivas de separação do material dos métodos convencionais. Na Figura 1.1 mostra-se o modelo multiescala adotado na literatura para a simulação de um material policristalino.

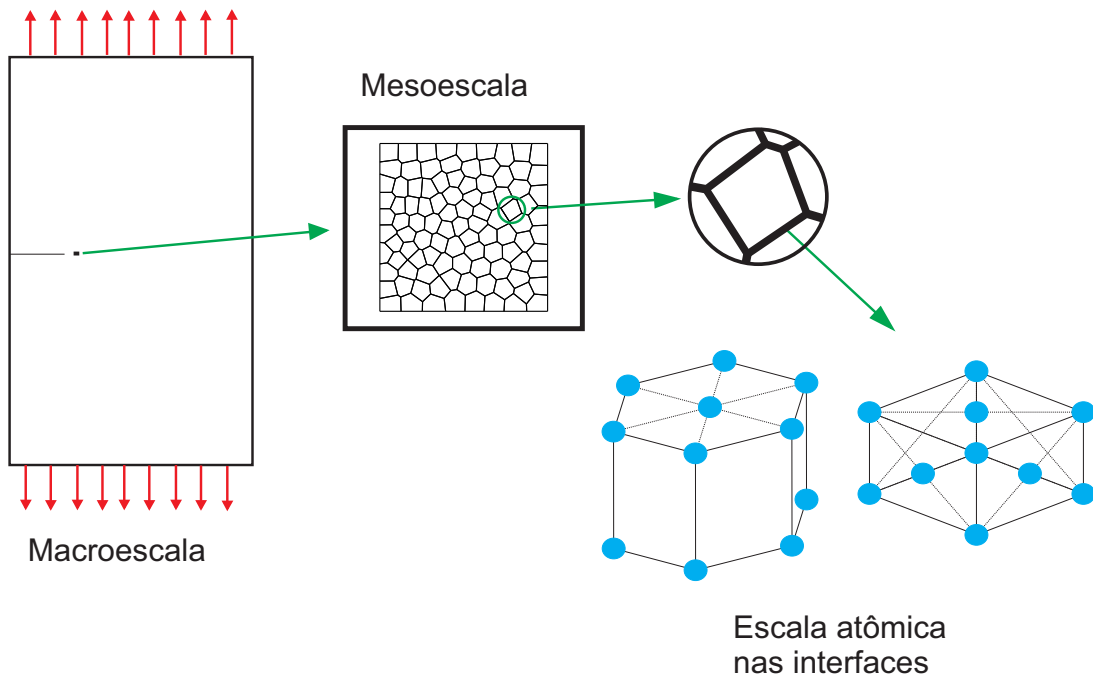


Figura 1.1: Modelo multiescala de um material policristalino.

O método numérico mais popular utilizado no MZC e na MMZC é o Método dos Elementos Finitos (MEF), como no caso das publicações citadas anteriormente. Devido a que o Método dos Elementos de Contorno (MEC) tem a característica de reduzir consideravelmente a dimensão do problema pela natureza da malha e que permite uma alta resolução dos campos de tensões e deslocamentos, aproximações adaptando o MEC foram desenvolvidas no MZC para fratura estática intergranular em (SFANTOS AND ALIABADI, 2007a), (BENEDETTI AND ALIABADI, 2013) para simulações de materiais policristalinos, e em (SFANTOS AND ALIABADI, 2007b) usando uma técnica de homogeneização para trabalhar da macroescala e mesoescala.

Neste trabalho tem-se como motivação principal o desenvolvimento da MMZC usando o MEC.



## 1.2 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo principal desenvolver uma análise de fratura intergranular dinâmica em materiais policristalinos, baseando-se em uma modelagem multiescala de materiais anisotrópicos, utilizando a MMZC sendo o critério de falha a separação dos enlaces atômicos na interface utilizando o Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual (MECRD) no domínio do tempo. As seguintes etapas foram realizadas:

- Revisão bibliográfica sobre os materiais policristalinos, os modos de falha, o MZC, a MMZC e o MECRD no domínio do tempo.
- Estudo das relações constitutivas para elasticidade para materiais anisotrópicos e tipos de estruturas atômicas.
- Estudo da Formulação do MECRD para materiais anisotrópicos, sub-regiões e no domínio do tempo na mesoescala.
- Estudo da formulação da MMZC, o potencial atômico, a regra de Cauchy-Born, propriedades efetivas na escala atômica e as forças coesivas na mesoescala.
- Implementação de um gerador de malha da estrutura policristalina usando o diagrama de Voronoi e incorporando as zonas coesivas no software MATLAB
- Implementação do MECRD, sub-regiões no domínio do tempo, adaptação da MMZC usando elementos de contorno e o critério de falha, na linguagem de programação FORTRAN 90.
- Simulações e resultados

## 2 Revisão Bibliográfica

Recentemente tem-se desenvolvido trabalhos de simulação dos diferentes tipos de falha em materiais metálicos, empregando diversos métodos numéricos. Neste capítulo são apresentadas as diferentes estratégias utilizadas na análise da fratura de materiais policristalinos. São dadas as definições dos tipos de fratura que caracterizam a falha nestes materiais segundo a teoria de falha adotada. Neste trabalho é tratado o problema da fratura frágil intergranular em materiais policristalinos, para isto são expostas abordagens propostas com base em modelos coesivos de fratura, tal como o Modelo das Zonas Coesivas convencional e a Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas.

### 2.1 Falha em Materiais Policristalinos

No estudo da falha em materiais policristalinos, tem-se 2 tipos de mecanismos de fratura (CROCKER ET AL., 2005), definidos como fratura dúctil que começa pela nucleação, crescimento e a coalescência dos micro-vazios que iniciam nas partículas de segunda fase ou precipitações, e a fratura frágil que pode-se propagar no contorno e no interior dos grãos (transgranular) ou só pelo contorno (intergranular). Ambas são dependentes das orientações cristalográficas e da orientação das propriedade do material em cada grão. Na sequência, apresenta-se uma breve definição para cada um desses tipos de fratura. Na Figura 2.1 pode-se observar esses tipos de falha.

#### o **Fratura dúctil:**

A maioria dos materiais comerciais contém precipitações de segunda fase, inclusões e impurezas atômicas. A falha dúctil pode ocorrer no processo de deformação como laminação, extrusão e trefilação. A fratura dúctil começa pela formação de micro-vazios e posteriormente pelo crescimento destes espaços nas inclusões até a falha se completar (CROCKER ET AL., 2005). Quando um material dúctil está sob um carregamento uniaxial alcança a instabilidade aparecendo assim uma zona de estrangulamento que gera uma série de micro-trincas na frente da macro-trinca, propagando-se devido à coalescência entre as micro-trincas, (WILSDORF, 1975).

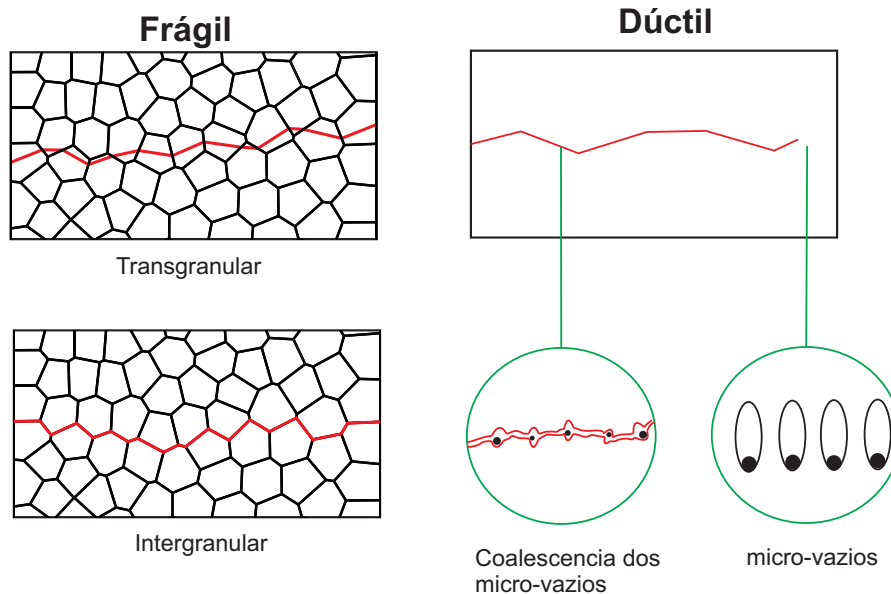


Figura 2.1: Mecanismos de falha em metais, (CROCKER ET AL., 2005).

○ **Fratura transgranular:**

Neste tipo de falha, a trinca passa através dos grãos e pelas interfaces, ocorre em planos cristalográficos definidos onde a densidade do pacote atômico é alta e tem-se uma pequena deformação plástica associada, onde as ligações atômicas são quebradas ao longo de um plano cristalino, dependendo da pureza do material (CROCKER ET AL., 2005). Estudos experimentais de fratura transgranular feitos por Li et al. (2005) são comparados com simulações de dinâmica molecular para materiais cerâmicos de alta pureza, mostrando que a propagação da trinca no interior do grão desses materiais é reta atravessando o grão, Figura 2.2, usando esse mesmo critério, simulações foram feitas em alumina para estudar os efeitos da geometria dos grãos na fratura transgranular (KRAFT AND MOLINARI, 2008), o modelamento deste tipo de fratura é também mostrado em (CROCKER ET AL., 2005).

○ **Fratura intergranular:**

Neste tipo de fratura tem-se propagação pelas interfaces entre os grãos, os parâmetros que são importantes quando a análise do processo de iniciação da fratura o qual envolve a separação ao longo das interfaces são as propriedades coesivas e a força máxima necessária para separar as superfícies da interface (CROCKER ET AL., 2005). A fratura intergranular é associada à

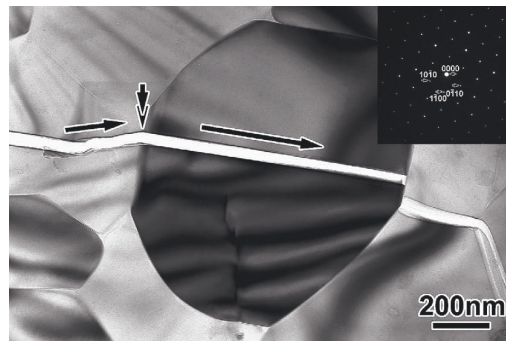


Figura 2.2: Trinca transgranular em  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , (II ET AL., 2005).

composição química nas bordas do grão que influencia as propriedades da resistência e ductilidade do material. Para cada átomo na interface é necessário conhecer o ambiente ao redor dele para definir se tem existência de defeitos na estrutura da rede. Testes experimentais são feitos por Akerfeldt et al. (2013), usando materiais fragilizados com orientações cristalinhas aleatórias, obtendo um padrão de fratura intergranular para estes materiais, Figura 2.3.

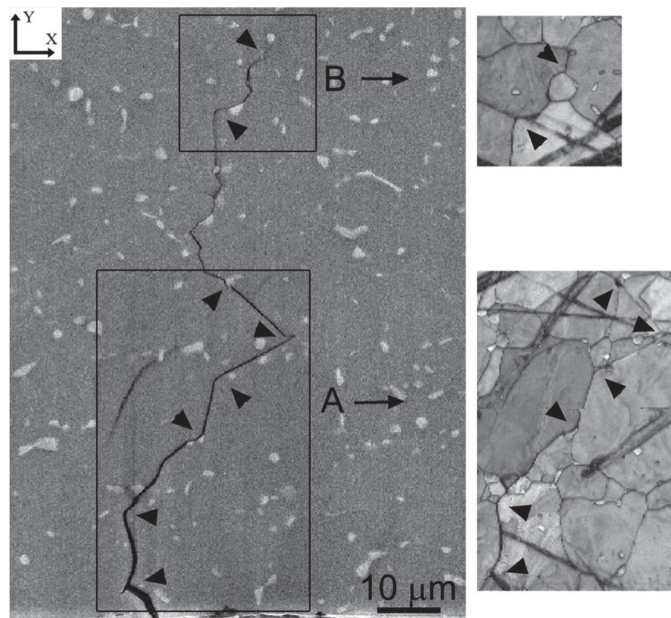


Figura 2.3: Aparência típica de Ti-8Al-1Mo-1V em contato com cobre, (AKERFELDT ET AL., 2013).

## 2.2 Modelos Coesivos de Fratura

O interesse da comunidade científica no estudo dos modelos coesivos de fratura para descrever a falha por separação do material tem aumentado nos últimos anos. O conceito do modelo coesivo foi inicialmente proposto por Barenblantt (1959) e Dugdale (1960), os quais são amplamente utilizados na análise da falha em materiais policristalinos, sendo adequados pela descrição detalhada que fazem do processo interfacial da falha sob carregamento relevante. As zonas coesivas criam os mecanismos de dano e de propagação da trinca nas interfaces, estes mecanismos de dano geram as leis coesivas, ou seja a variação das forças coesivas em diferentes estados de tempo.

A diferença que entre os métodos de falha coesivos e a tradicional Mecânica da Fratura Elástica Linear (MFEL) é que a zona do processo de fratura da MFEL deve ser pequena comparada com as dimensões da estrutura, (DE BORST, 2003). Se não é o caso anterior, as forças coesivas existentes na zona da fratura devem ser levadas em consideração, exigindo o uso de um modelo de zonas coesivas. Em um modelo de zona coesiva, os mecanismos de fratura são colocados em conjunto em uma linha sendo (2D) ou em um plano (3D), Figura 2.4, e finalmente as relações de tensão-deslocamento ao longo da linha ou plano são a representação dos mecanismos de fratura na zona coesiva, (DE BORST, 2003).

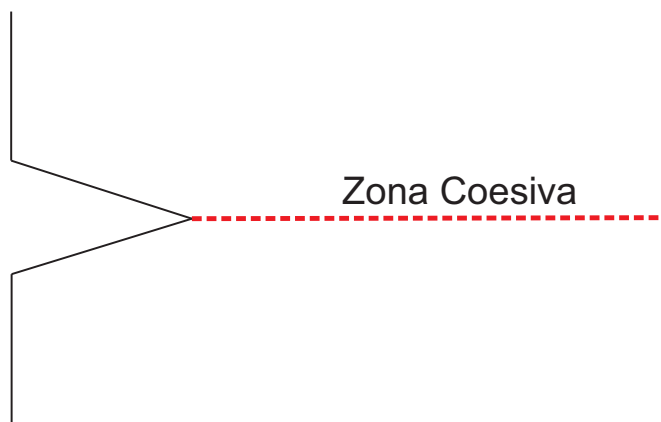


Figura 2.4: Representação da zona coesiva.

Na literatura pode-se encontrar um diverso número de leis coesivas, algumas descritas em (VAN DEN BOSCH ET AL., 2006), separadas em 4 tipos: (a) polinomial (TVERGAARD, 1990), (b) trapezoidal (TVERGAARD AND HUTCHINSON, 1992), (c) exponencial (XU AND NEEDLE-

MAN, 1993) e (d) linear (CAMACHO AND ORTIZ, 1996), mostradas na Figura 2.5, onde na primeira linha são dadas as forças de tração normal ( $T_n$ ) em função dos deslocamentos de abertura normal ( $\Delta_n$ ) e na segunda linha a força tração tangencial ( $T_t$ ) em função dos deslocamentos de abertura tangencial ( $\Delta_t$ ). A máxima força de tração normal e tangencial  $T_{n,max}$  e  $T_{t,max}$ , respectivamente. Os deslocamentos característicos normal e tangencial, são denotados por  $\delta_n$  e  $\delta_t$ , respectivamente. As áreas abaixo das curvas representam o trabalho de separação normal e tangencial  $\phi_n$  e  $\phi_t$ , respectivamente.

As leis coesivas mostradas podem ser apresentadas acopladas ou desacopladas. Quando se tem os efeitos tangenciais e normais independentes é desacoplada como é mostrado na Figura 2.5. Sendo os efeitos normais e tangenciais um dependente do outro a lei coesiva é acoplada (VAN DEN BOSCH ET AL., 2006).

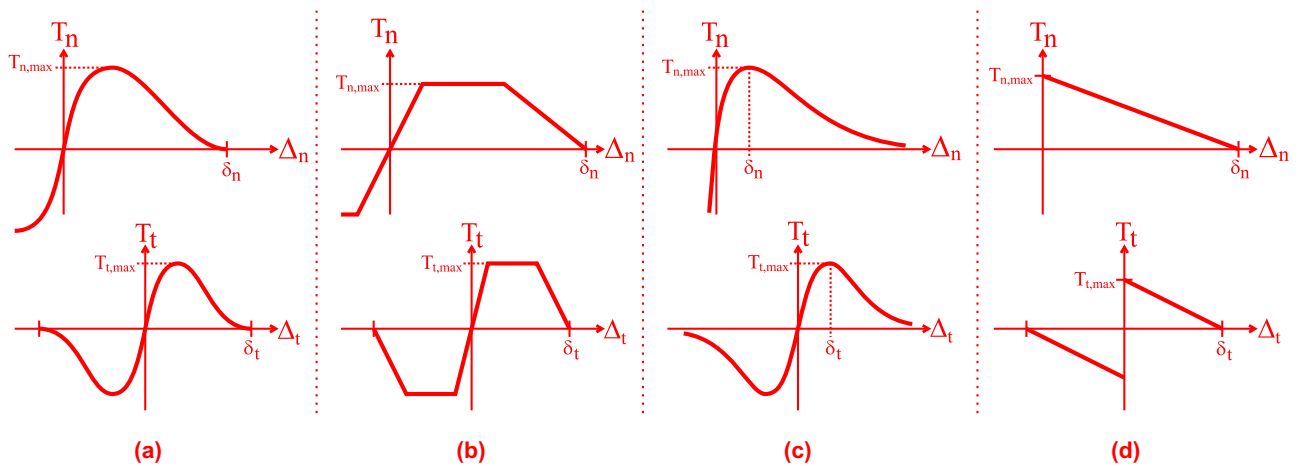


Figura 2.5: Quatro tipos de leis coesivas: Primeira linha mostra a tração normal ( $T_n$ ) em função dos deslocamentos de abertura normal ( $\Delta_n$ ). Na segunda linha mostra a tração tangencial ( $T_t$ ) em função dos deslocamentos de abertura tangencial ( $\Delta_t$ ), (VAN DEN BOSCH ET AL., 2006).

Na Figura 2.6 são mostrados os modos de fratura tradicionalmente definidos na literatura, utilizando as leis coesivas desacopladas é possível abordar problemas quando o processo de separação do material ocorre em (Modo I) ou (Modo II), normal e tangencial respectivamente e no modo misto de fratura (Modo I) e (Modo II).



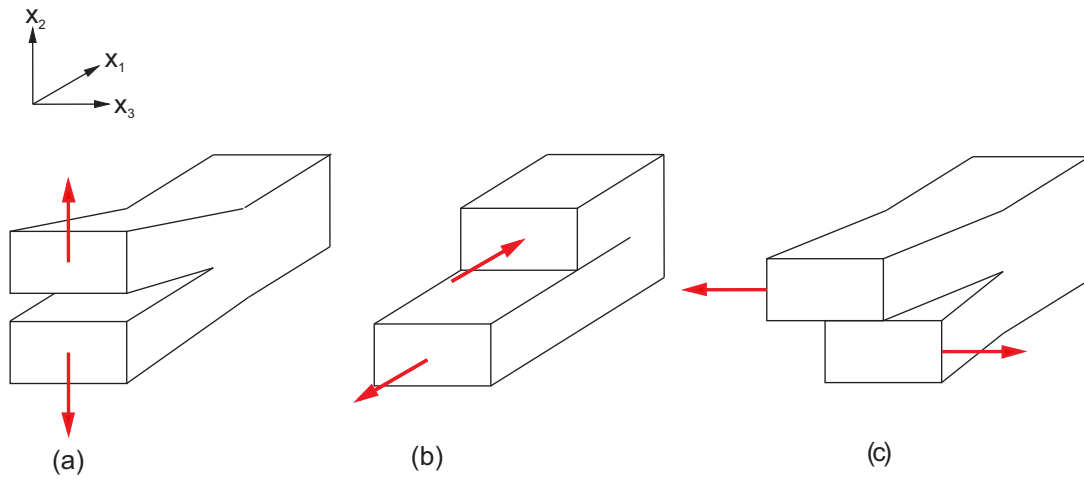


Figura 2.6: Modos de fratura: (a) Modo I, (b) Modo II e (c) Modo III

### 2.2.1 Critério de falha coesivo

As leis coesivas determinam o trabalho de separação ou a energia de fratura requerida para completar a formação da superfície livre (CAMACHO AND ORTIZ, 1996). A modelagem da separação em termos do potencial na interface, especifica a dependência das trações ( $T_n$ ) e ( $T_t$ ) nos deslocamentos ( $\Delta_n$ ) e ( $\Delta_t$ ), mostrados na Figura 2.7.

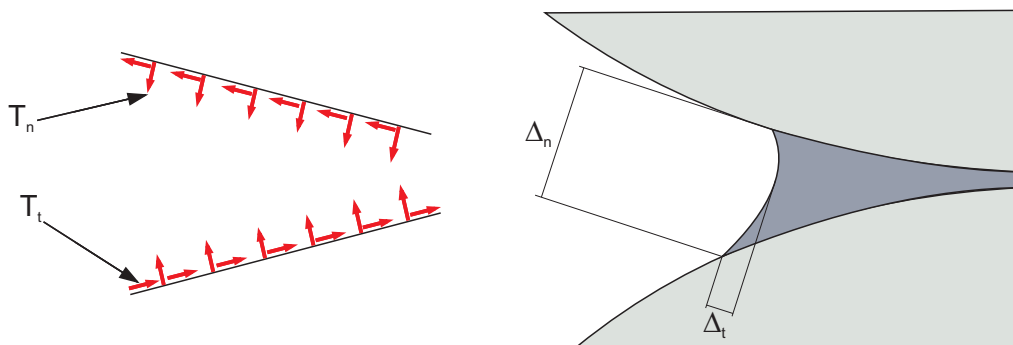


Figura 2.7: Deslocamentos e forças de tração coesivos na interface

Na Figura 2.7, é mostrado que os valores positivos de ( $\Delta_n$ ) correspondem ao incremento interfacial de separação normal, (TVERGAARD, 1990). As relações constitutivas na interface são

dadas em termos do potencial, que dependendo da lei coesiva utilizada, Figura 2.5, é especificada a variação de  $(T_n)$  desde um valor 0 em  $\Delta_n = 0$ , através do máximo valor  $T_{n, \max}$  e finalmente sendo 0 de novo, onde finalmente é assumido que a separação ocorre em Modo I. Fazendo uma análise nas curvas das propriedades coesivas tangenciais, Figura 2.5, tem-se que para Modo II a separação pode ter valores negativos de  $(T_n)$  e  $\Delta_t = 0$  segundo o ponto de referência das coordenadas.

Finalmente pode-se dizer que a falha do material em Modo I e Modo II é caracterizada pelas propriedades coesivas interfaciais descritas nas curvas apresentadas na Figura 2.5.

### **2.3 Modelos Multiescala Coesivos de Fratura**

A análise dos modelos de fratura considerando uma abordagem multiescala foi desenvolvida como a Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas, que foi recentemente proposta por Zeng and Li (2010) como um avanço na modelagem do Modelo das Zonas Coesivas. Com esta nova análise multiescala, é possível simular a falha transgranular e intergranular em materiais cristalinos. O método trabalha na mesoescala, Figura 1.1, a resposta do campo de deslocamentos nas interfaces são a entrada necessária para a análise na escala atômica, assim as forças coesivas determinadas a partir da força interatômica modelada com o potencial de Lennard-Jones nas interfaces definem a lei coesiva que é diferente para cada material.

A Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas é amplamente estudada neste trabalho no capítulo 5 onde é apresentada a formulação e as demonstrações correspondentes.

### 3 Equações da Elasticidade Anisotrópica

Neste capítulo, apresentam-se os conceitos da teoria da elasticidade, as equações constitutivas e de equilíbrio usadas na modelagem de materiais anisotrópicos. São mostradas as equações constitutivas para materiais policristalinos, fazendo uma análise das possíveis estruturas cristalinas para obter os tensores de flexibilidade e rigidez dependendo da estrutura presente no material. A orientação cristalina e as propriedades rotacionadas do material no plano são atribuídas para cada grão aleatoriamente. Finalmente as equações constitutivas gerais são aplicadas no caso bidimensional trabalhando em diferentes planos em estado de deformação plana ou tensão plana.

#### 3.1 Elasticidade Anisotrópica

O equilíbrio de forças em um elemento infinitesimal de um domínio  $\Omega$  considerando as forças de corpo é expresso por

$$\sigma_{ij,j} + \rho b_i - \rho \ddot{u}_i = 0 \quad (3.1)$$

onde  $b_i$  é o vetor de forças de corpo,  $\ddot{u}_i$  é o vetor de acelerações, segunda derivada do vetor de deslocamentos  $u_i$  em um instante de tempo  $t$  e o tensor de tensões  $\sigma_{ij,j}$  é simétrico, equação 3.2.

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (3.2)$$

O vetor de forças de superfície em um ponto do contorno  $\Gamma$  de um domínio  $\Omega$  é expresso por

$$t_i = \sigma_{ij} n_j \quad (3.3)$$

onde  $n_j$  é o vetor normal ao contorno  $\Gamma$ . As componentes do tensor de deformação, são dadas por

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) + \frac{1}{2}u_{k,i}u_{k,j} \quad (3.4)$$

Em elasticidade linear consideram-se os deslocamentos e suas derivadas como infinitesimais, ou seja, que seus produtos podem ser não considerados, o tensor de deformação finalmente será

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3.5)$$

A equação 3.5 representa um sistema de equações diferenciais parciais para determinar as componentes dos deslocamentos  $u_i$ . Para assegurar a unicidade dos deslocamentos e que a equação 3.5 tenha uma solução, as componentes do tensor de deformações não podem ser arbitrárias, devendo satisfazer certas condições de compatibilidade, a equação de compatibilidade é dada por

$$\varepsilon_{ij,kl} + \varepsilon_{kl,ij} - \varepsilon_{ik,jl} - \varepsilon_{jl,ik} = 0 \quad (3.6)$$

Para o caso bidimensional a equação 3.6 é reduzida à forma

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2} = 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y} \quad (3.7)$$

A equação que define a relação entre o tensor de tensões e o tensor de deformações é dada por

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (3.8)$$

onde  $C_{ijkl}$  é o tensor de rigidez de quarta ordem com (81 elementos) que contém as constantes elásticas do material. Pela simetria dos tensores de tensões e deformações tem-se que

$$C_{ijkl} = C_{jikl}, C_{ijkl} = C_{ijlk} \quad (3.9)$$

Simetrias adicionais mostradas da equação 3.10, são requeridas para obter uma equação de energia de deformação.

$$C_{ijkl} = C_{klij} \quad (3.10)$$

Com as condições de simetria antes descritas, o número de constantes elásticas vai de 81 para 21, equação 3.11

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ C_{1123} & C_{2223} & C_{3323} & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ C_{1113} & C_{2213} & C_{3313} & C_{2313} & C_{1313} & C_{1312} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{3312} & C_{2312} & C_{1312} & C_{1212} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

Usando a notação tensorial reduzida de Voigt usada em (SFANTOS AND ALIABADI, 2007a).

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

A equação 3.8 também pode ser escrita como

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (3.13)$$

onde  $S_{ijkl}$  é conhecido como tensor de flexibilidade de quarta ordem, fazendo a mesma análise que foi feito para o tensor de constantes elásticas, esse tensor possui também 21 elementos, na equação 3.14 é dado diretamente em notação reduzida

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{13} & S_{23} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{14} & S_{24} & S_{34} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{15} & S_{25} & S_{35} & S_{45} & S_{55} & S_{56} \\ S_{16} & S_{26} & S_{36} & S_{46} & S_{56} & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

### 3.2 Equação Constitutiva de um Material Policristalino

Existem diferentes tipos de estruturas cristalinas dos materiais, cúbica de corpo centrado (ccc), cúbica de face centrada (cfc) e hexagonal compacta (hc), entre outros, (CALLISTER, 1997). A equação constitutiva de um material policristalino varia consideravelmente dependendo do tipo de estrutura cristalina que o metal possui, então, mesmo o material sendo isotrópico macroscopicamente apresenta anisotropia na escala microscópica.

Na Figura 3.1, mostram-se 3 tipos de sistema cristalino ccc, cfc e hc. Nos sistemas cúbicos ccc e cfc o número de constantes elásticas independentes são 3, no sistema hexagonal hc são 5, (HUNTINGTON, 1958), devido à simetria da estrutura.

Considerando as simetrias das estruturas, as 3 constantes elásticas independentes dos materiais com estrutura cristalina ccc e cfc são  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  e  $C_{44}$ , assim a equação 3.12, fica expressa pela equação 3.15.



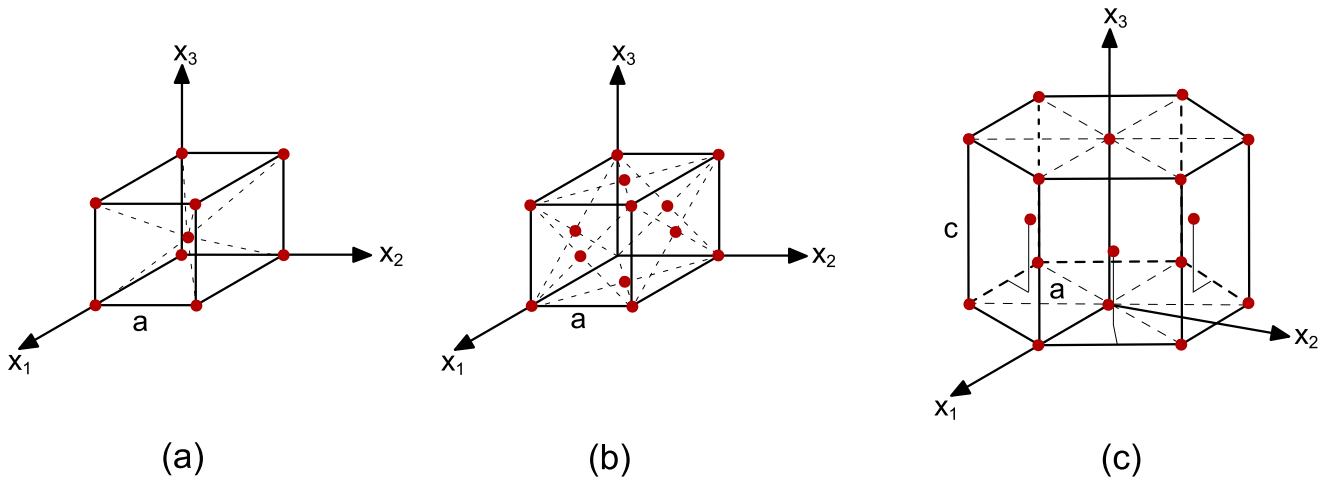


Figura 3.1: Sistemas cristalinos: (a) cúbica de corpo centrado (ccc), (b) cúbica de face centrada (cfc) e (c) hexagonal compacta (hc).

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

A equação inversa de deformação-tensão é dada por

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

A estrutura cristalina hc possui 5 constantes elásticas independentes que são  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,

$C_{33}$  e  $C_{44}$ , assim a equação 3.12, fica expressa pela equação 3.17, (TROMANS, 2011).

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

A equação inversa de deformação-tensão é dada por

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

onde  $C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$  e  $S_{66} = 2(S_{11} - S_{12})$ . Agora são apresentadas as componentes do tensor de flexibilidade de um material especialmente ortotrópico, (DANIEL AND SHAI, 2006).

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 1/E_1 & -v_{12}/E_1 & -v_{13}/E_1 & 0 & 0 & 0 \\ & 1/E_2 & -v_{23}/E_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & 1/E_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1/G_{23} & 0 & 0 \\ & sym & & & 1/G_{13} & 0 \\ & & & & & 1/G_{12} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Aplicando também as relações da equação 3.20.

$$\frac{v_{ij}}{E_i} = \frac{v_{ji}}{E_j} \quad (3.20)$$

Neste trabalho considera-se a estrutura policristalina do material como a mesoescala ou microescala, Figura 3.2, contendo uma distribuição aleatória das propriedades do material para cada um dos grãos considerando as diferentes orientações cristalinas presentes no metal, cada grão é assumido como ortotrópico e a variação da orientação principal do material muda de grão para grão com um ângulo  $0^\circ \leq \theta \leq 360^\circ$  para cobrir as possíveis variações das propriedades no plano, (SFANTOS AND ALIABADI, 2007a) e (ESPINOSA AND ZAVATTIERI, 2003a).

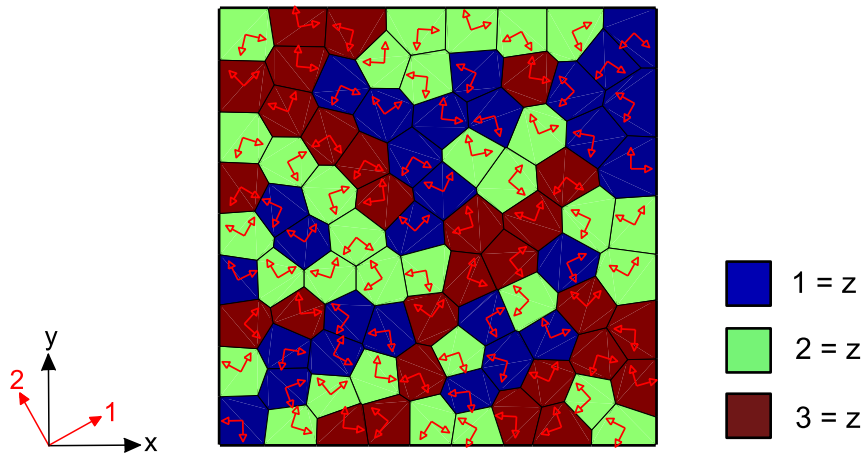


Figura 3.2: Estrutura policristalina artificial gerada com distribuição aleatória da orientação cristalina e das propriedades do material.

Na Figura 3.2, tem-se o sistema de coordenadas geométrico  $(x,y)$  e o sistema de coordenadas da orientação do material  $(1,2)$ , nesta situação, a relação constitutiva para cada grão deve ser transformada para o sistema de eixos  $(1,2)$  da orientação, Figura 3.3.

Com o objetivo de manter um comportamento aleatório e geral da estrutura, neste trabalho por simplicidade consideram-se três planos cristalográficos, no caso dos sistemas cúbicos os planos  $(100)$ ,  $(010)$  e  $(001)$  mostrados na Figura 3.4 e no caso do sistema hexagonal compacto os planos  $(2\bar{1}\bar{1}0)$ ,  $(01\bar{1}0)$  e  $(0001)$  mostrados na Figura 3.5.

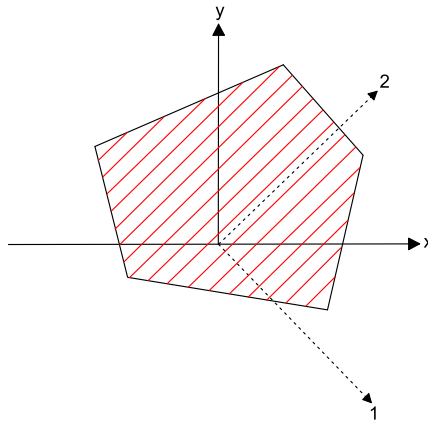


Figura 3.3: Sistema de coordenadas da geometria  $(x,y)$  e da orientação do material  $(1,2)$  para cada grão.

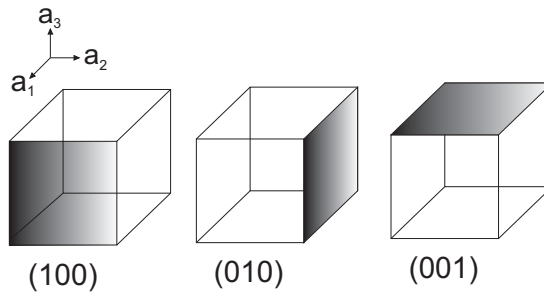


Figura 3.4: Planos cristalinos considerados nas estruturas ccc e cfc

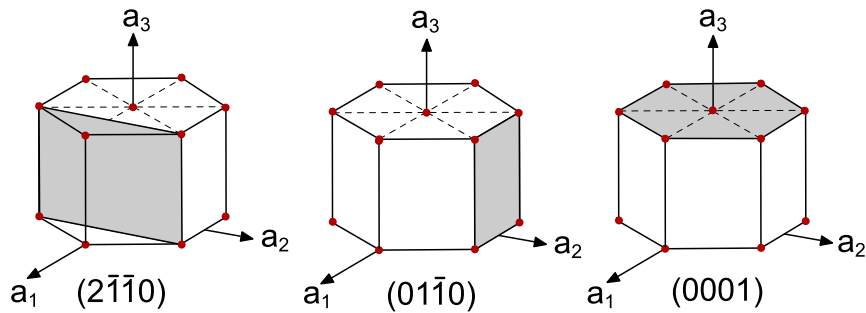


Figura 3.5: Planos cristalinos considerados na estrutura hc.

Definindo um sistema de coordenadas geométrico  $(x,y,z)$  e um sistema de coordenadas da orientação do material  $(1,2,3)$ , são apresentados os casos quando cada um dos eixos da orientação do material coincide com o eixo  $z$  saindo do plano  $x,y$ , então caso 1:  $1 \equiv z$ , caso 2:  $2 \equiv z$ , caso3:  $3 \equiv z$ . Na Figura 3.2 pode-se observar as diferentes cores de cada um dos casos e na Figura 3.6 a representação destes casos na estrutura cristalina hc. Para materiais cúbicos tipo ccc ou cfc, não é preciso ter esse comportamento, pois os parâmetros do material são os mesmos nos três casos, (HUNTINGTON, 1958), se forem considerados planos com orientações aleatórias devem ser estudados os diferentes casos para sistemas ccc e cfc.

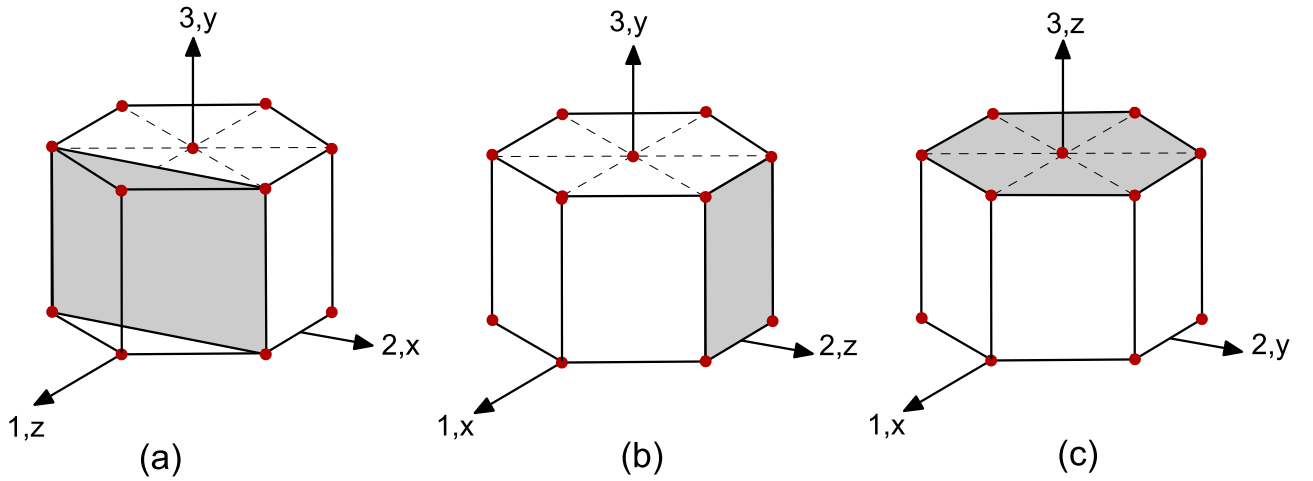


Figura 3.6: Orientação cristalina: (a) caso 1  $1 \equiv z$ , (b) caso 2  $2 \equiv z$  e (c) caso 3  $3 \equiv z$ .

No caso bidimensional de materiais ortotrópicos com três planos de simetria do material, as componentes do tensor de flexibilidade e de rigidez são reduzidas para 9, partindo da equação 3.18, tem-se que,  $s_{14} = s_{15} = s_{16} = 0$ ,  $s_{24} = s_{25} = s_{26} = 0$ ,  $s_{34} = s_{35} = s_{36} = 0$  e  $s_{45} = s_{46} = s_{56} = 0$ , (ALIABADI, 2002), o tensor de flexibilidade é dado por

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S'_{11} & S'_{12} & S'_{16} \\ S'_{12} & S'_{22} & S'_{26} \\ S'_{16} & S'_{26} & S'_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

As componentes do tensor  $S'_{ij}$ , dependem dos casos explicados anteriormente, na Tabela 3.1 apresenta-se a variação do tensor de flexibilidade para o estado plano de tensão. As componentes para o estado plano de deformação são dadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.1: Componentes do tensor de flexibilidade para o caso de esforço plano

$s'_{ij}$	$\mathbf{1} \equiv \mathbf{z}$	$\mathbf{2} \equiv \mathbf{z}$	$\mathbf{3} \equiv \mathbf{z}$
$s'_{11}$	$s_{22}$	$s_{11}$	$s_{11}$
$s'_{22}$	$s_{33}$	$s_{33}$	$s_{22}$
$s'_{12}$	$s_{23}$	$s_{13}$	$s_{12}$
$s'_{66}$	$s_{44}$	$s_{55}$	$s_{66}$

Tabela 3.2: Componentes do tensor de flexibilidade para o caso de deformação plana

$\mathbf{1} \equiv \mathbf{z}$	$\mathbf{2} \equiv \mathbf{z}$	$\mathbf{3} \equiv \mathbf{z}$
$s'_{ij} = s_{kl} - \frac{s_{k1}s_{l1}}{s_{11}}$	$s'_{ij} = s_{kl} - \frac{s_{k2}s_{l2}}{s_{22}}$	$s'_{ij} = s_{kl} - \frac{s_{k3}s_{l3}}{s_{33}}$
$\left\{ \begin{matrix} i,j \\ k,l \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} 1,2,6 \\ 2,3,4 \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} i,j \\ k,l \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} 1,2,6 \\ 1,3,5 \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} i,j \\ k,l \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} 1,2,6 \\ 1,2,6 \end{matrix} \right\}$

Quando os eixos do sistema geométrico  $(x,y)$  coincidem com os eixos do sistema de orientação do material  $(1,2)$ , tem-se,  $s_{16} = s_{26} = 0$ . No caso da rotação das propriedades do material, tem-se que rotacionar o tensor de rigidez  $C_{ijkl}$  ou o tensor de flexibilidade  $S_{ijkl}$ , para isto foi usado o método apresentado em (TING, 1996) e (DANIEL AND SHAI, 2006).

Tem-se a rotação das propriedades no plano de trabalho segundo cada um dos casos mostrados na Figura 3.6, a matriz de transformação  $\Omega$  para cada caso é expressa pelas seguintes equações

Caso 1, rotação no eixo 1

$$\Omega^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & m & n \\ 0 & -n & m \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

Caso 2, rotação no eixo 2

$$\mathbf{\Omega}^* = \begin{bmatrix} m & 0 & -n \\ 0 & 1 & 0 \\ n & 0 & m \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Caso 2, rotação no eixo 3

$$\mathbf{\Omega}^* = \begin{bmatrix} m & n & 0 \\ -n & m & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

onde  $m = \cos \theta$  e  $n = \sin \theta$ . A matriz transformação geral tridimensional  $\mathbf{K}$  é dada por

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_1 & 2\mathbf{K}_2 \\ \mathbf{K}_3 & \mathbf{K}_4 \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

onde separadamente cada um dos termos da equação 3.25 é dado pelas equações

$$\mathbf{K}_1 = \begin{bmatrix} \Omega_{11}^* & \Omega_{12}^* & \Omega_{13}^* \\ \Omega_{21}^* & \Omega_{22}^* & \Omega_{23}^* \\ \Omega_{31}^* & \Omega_{32}^* & \Omega_{33}^* \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

$$\mathbf{K}_2 = \begin{bmatrix} \Omega_{12}^*\Omega_{13}^* & \Omega_{13}^*\Omega_{11}^* & \Omega_{11}^*\Omega_{12}^* \\ \Omega_{22}^*\Omega_{23}^* & \Omega_{23}^*\Omega_{21}^* & \Omega_{21}^*\Omega_{22}^* \\ \Omega_{32}^*\Omega_{33}^* & \Omega_{33}^*\Omega_{31}^* & \Omega_{31}^*\Omega_{32}^* \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

$$\mathbf{K}_3 = \begin{bmatrix} \Omega_{21}^*\Omega_{31}^* & \Omega_{22}^*\Omega_{32}^* & \Omega_{23}^*\Omega_{33}^* \\ \Omega_{31}^*\Omega_{11}^* & \Omega_{32}^*\Omega_{12}^* & \Omega_{33}^*\Omega_{13}^* \\ \Omega_{11}^*\Omega_{21}^* & \Omega_{12}^*\Omega_{22}^* & \Omega_{13}^*\Omega_{23}^* \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

$$\mathbf{K}_4 = \begin{bmatrix} \Omega_{22}^* \Omega_{33}^* + \Omega_{23}^* \Omega_{32}^* & \Omega_{23}^* \Omega_{31}^* + \Omega_{21}^* \Omega_{33}^* & \Omega_{21}^* \Omega_{32}^* + \Omega_{22}^* \Omega_{31}^* \\ \Omega_{32}^* \Omega_{13}^* + \Omega_{33}^* \Omega_{12}^* & \Omega_{33}^* \Omega_{11}^* + \Omega_{31}^* \Omega_{13}^* & \Omega_{31}^* \Omega_{12}^* + \Omega_{32}^* \Omega_{11}^* \\ \Omega_{12}^* \Omega_{23}^* + \Omega_{13}^* \Omega_{22}^* & \Omega_{13}^* \Omega_{21}^* + \Omega_{11}^* \Omega_{23}^* & \Omega_{11}^* \Omega_{22}^* + \Omega_{12}^* \Omega_{21}^* \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

Finalmente, a transformação dos tensores de rigidez e flexibilidade é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^* &= \mathbf{KCK}^T \\ \mathbf{S}^* &= (\mathbf{K}^{-1})^T \mathbf{SK}^{-1} \end{aligned} \quad (3.30)$$



## 4 Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual

Neste capítulo é apresentada a formulação do método dos elementos de contorno para a solução de problemas de elasticidade plana em materiais anisotrópicos considerando as forças de corpo no domínio do tempo, partindo do princípio do trabalho virtual e o teorema recíproco. Da mesma forma são mostradas as soluções fundamentais dos campos de deslocamento e forças de superfície para estes materiais. As integrais de domínio que aparecem na formulação são transformadas em integrais de contorno usando o Método dos Elementos de contorno de Reciprocidade Dual, a formulação do método por sub-regiões é apresentada para formular problemas com material policristalino de múltiplos domínios.

### 4.1 Formulação Integral

A equação para o equilíbrio dinâmico integrando sobre um domínio  $\Omega$  e um contorno  $\Gamma$ , a partir da equação 3.1 é expressa por

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij,j} d\Omega + \int_{\Omega} \rho b_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i d\Omega = 0 \quad (4.1)$$

Um sistema de equilíbrio equivalente pode ser obtido pela multiplicação da equação 4.1 por um escalar arbitrário como função de peso  $w$ . A expressão anterior contém 3 índices livres que representam 3 equações, então para a função de peso  $w$  serão adicionados 3 componentes com diferentes pesos  $w_i$

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij,j} w_i d\Omega + \int_{\Omega} \rho b_i w_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i w_i d\Omega = 0 \quad (4.2)$$

O primeiro termo da equação 4.2 tem uma derivada, usando a regra de derivação do produto

$$(\sigma_{ij} w_i)_{,j} = \sigma_{ij,j} w_i + \sigma_{ij} w_{i,j} \quad (4.3)$$

A equação 4.2 torna-se

$$\int_{\Omega} [(\sigma_{ij}w_i)_{,j} - \sigma_{ij}w_{i,j}] d\Omega + \int_{\Omega} \rho b_i w_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i w_i d\Omega = 0 \quad (4.4)$$

$$- \int_{\Omega} \sigma_{ij}w_{i,j} d\Omega + \int_{\Omega} (\sigma_{ij}w_i)_{,j} d\Omega + \int_{\Omega} \rho b_i w_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i w_i d\Omega = 0 \quad (4.5)$$

O termo  $(\sigma_{ij}w_i)_{,j}$  pode ser reconhecido como a divergência de  $(\sigma_{ij}w_i)$ , aplicando o teorema da divergência

$$\int_{\Omega} (\sigma_{ij}w_i)_{,j} d\Omega = \int_{\Gamma} (\sigma_{ij}w_i) n_j d\Gamma = \int_{\Gamma} t_i w_i d\Gamma \quad (4.6)$$

onde

$$t_i = \sigma_{ij}n_j \quad (4.7)$$

Substituindo a equação 4.6 na equação 4.5, tem-se

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij}w_{i,j} d\Omega = \int_{\Gamma} t_i w_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho b_i w_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i w_i d\Omega \quad (4.8)$$

Pode-se escrever  $w_i$  como a soma de um tensor simétrico e um anti-simétrico, da seguinte forma

$$w_{i,j} = \frac{1}{2}(w_{i,j} + w_{j,i}) + \frac{1}{2}(w_{i,j} - w_{j,i}) = s_{ij} + a_{ij} \quad (4.9)$$

Sendo o tensor de esforços  $\sigma_{ij}$  simétrico, a equação 4.8 torna-se

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij} \frac{1}{2} (w_{i,j} + w_{j,i}) d\Omega = \int_{\Gamma} t_i w_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho b_i w_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i w_i d\Omega \quad (4.10)$$

Na equação 4.10 as funções de peso podem ser consideradas como uma função vetorial contínua  $\delta u_i$ , que representa o deslocamento de um estado elasto-estático virtual, a equação 4.7 é dada por

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (4.11)$$

Substituindo a equação 4.11 na equação 4.10, tem-se

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} d\Omega = \int_{\Gamma} t_i \delta u_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho b_i \delta u_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i \delta u_i d\Omega \quad (4.12)$$

A equação 4.12 representa o princípio do trabalho virtual, se partirmos da equação 3.1 como sendo a correspondente ao estado  $\delta u_i$ , e sendo a função de peso neste caso  $u_i$ , tem-se

$$\int_{\Omega} \delta \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega = \int_{\Gamma} \delta t_i u_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho \delta b_i u_i d\Omega - \int_{\Omega} \rho \delta \ddot{u}_i u_i d\Omega \quad (4.13)$$

Pelo teorema recíproco dois estados de um mesmo material podem ser relacionados por  $\delta \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}$ . Assim desta forma, igualando-se as equações 4.13 e 4.12, tem-se

$$\int_{\Gamma} t_i \delta u_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho \delta u_i (b_i - \ddot{u}_i) d\Omega = \int_{\Gamma} \delta t_i u_i d\Gamma + \int_{\Omega} \rho u_i (\delta b_i - \delta \ddot{u}_i) d\Omega \quad (4.14)$$

A equação integral 4.14 relaciona o comportamento de dois estados quaisquer de tensões,

para conseguir usar esta formulação em problemas de elasticidade em meio contínuo, um destes estados será conhecido, e o outro para determinar. Para trabalhar com elementos de contorno, o estado conhecido é chamado estado fundamental que corresponde à resposta ou perturbação de um corpo infinito a uma carga concentrada unitária em um ponto  $\mathbf{x}'$ . A carga concentrada representada pelo delta de Dirac é usada para reduzir o número de integrais de domínio empregando a propriedade da seleção.

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\Omega = f(\mathbf{x}') \quad (4.15)$$

para um ponto  $\mathbf{x}' \in \Omega$ .

Considerando o estado virtual " $\delta$ ", como o estado fundamental conhecido de um problema estático sem consideração das forças de corpo, e assumindo que as forças de corpo são aplicadas com forma do delta de Dirac, segundo o Problema de Kelvin, (KANE, 1994), a equação 4.14 pode ser escrita como

$$\int_{\Gamma} t_i U_{ik} d\Gamma + \int_{\Omega} p_i U_{ik} d\Omega = \int_{\Gamma} T_{ik} u_i d\Gamma + \int_{\Omega} \delta_{ik} u_i d\Omega \quad (4.16)$$

onde  $p_i = \rho(b_i - \ddot{u}_i)$  são as forças de corpo,  $U_{ik}$  e  $T_{ik}$ , são as soluções conhecidas do estado elasto-estático virtual, também conhecidas como as soluções fundamentais para o campo de deslocamentos e tensões, que representam a resposta na direção  $k$ , no ponto  $\mathbf{x}$ , devido a uma força concentrada unitária aplicada de forma estática no ponto  $\mathbf{x}'$  na direção  $i$ . Aplicando a equação 4.15, a equação 4.16 torna-se

$$u_i + \int_{\Gamma} T_{ik} u_i d\Gamma = \int_{\Gamma} U_{ik} t_i d\Gamma - \int_{\Omega} p_i U_{ik} d\Omega \quad (4.17)$$

A integral de domínio que ainda aparece na equação 4.17 será tratada através do método dos elementos de contorno de reciprocidade dual.

## 4.2 Soluções Fundamentais de Anisotropia

A equação de equilíbrio de forças escrita em função dos deslocamentos é obtida substituindo as equações 3.5 e 3.8 na equação 3.1.

$$C_{ijkl}u_{k,jl} + p_i = 0 \quad (4.18)$$

onde  $p_i = \rho (b_i - \ddot{u}_i)$  é o termo que contém as forças de corpo.

As componentes do tensor de esforço podem ser dadas em termos de duas funções,  $F(x,y)$  chamadas funções de tensão de airy (LEKHNITSKII, 1981), que satisfazem as equações de equilíbrio.

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= F_{,22} + \bar{U} \\ \sigma_{22} &= F_{,11} + \bar{U} \\ \sigma_{12} &= -F_{,12} \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde  $\bar{U}$  é uma função de potencial na qual

$$\bar{U}_{,i} = p_i \quad (4.20)$$

Substituindo as equações 4.19 na equação 3.21 e depois na equação de compatibilidade 3.7, procedimento usado em (LEKHNITSKII, 1968), o resultado é a equação diferencial para funções de tensão  $F(x,y)$ .

$$\begin{aligned} a_{11}F_{,2222} - 2a_{16}F_{,1222} + (2a_{12} + a_{66})F_{,1122} - 2a_{66}F_{,1112} + a_{22}F_{,1111} = \\ - (a_{12} + a_{22})\bar{U}_{,11} + (a_{16} + a_{26})\bar{U}_{,12} - (a_{11} + a_{12})\bar{U}_{,22} \end{aligned} \quad (4.21)$$

No caso de ausência de forças de corpo a equação 4.21 pode ser escrita como

$$a_{11}F_{,2222} - 2a_{16}F_{,1222} + (2a_{12} + a_{66})F_{,1122} - 2a_{66}F_{,1112} + a_{22}F_{,1111} = 0 \quad (4.22)$$

O problema bidimensional da teoria da elasticidade é reduzido à determinação das funções de tensão  $F(x,y)$ , sobre um domínio  $\Omega$ , que deve satisfazer a equação diferencial de quarta ordem 4.22. Essa equação pode ser integrada usando o operador diferencial, (LEKHNITSKII, 1968).

$$D_k = \frac{\partial}{\partial x_2} - \mu_k \frac{\partial}{\partial x_1}, (k = 1,2,3,4) \quad (4.23)$$

Aplicando-se o operador diferencial na equação 4.22

$$D_1 D_2 D_3 D_4 F = 0 \quad (4.24)$$

onde o termo  $\mu_k$  da equação 4.22 são as raízes da equação característica, dada por

$$a_{11}\mu^4 - 2a_{16}\mu^3 + (2a_{12} + a_{66})\mu^2 - 2a_{66}\mu + a_{22} = 0 \quad (4.25)$$

As raízes da equação 4.25 são sempre complexas ou imaginárias puras conjugadas, como é mostrado em (LEKHNITSKII, 1968), isto sempre ocorre em corpos elásticos ideais, se a equação característica tem coeficientes  $a_{11}$ ,  $(2a_{12} + a_{66})$  e  $a_{22}$  diferentes de zero.

Criando-se a variável

$$z_k = x_1 + \mu_k x_2 \quad (4.26)$$

tem-se

$$D_k = \frac{\partial}{\partial x_2} - \mu_k \frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{d}{dz_k}, (k = 1,2) \quad (4.27)$$

Considerando que a função de tensão deve ser real, tem-se

$$F(x,y) = 2\text{Re} [F(z_1) + F(z_2)] \quad (4.28)$$

Introduzindo a notação

$$\frac{dF_k(z_k)}{dz_k} = \Psi_k(z_k) \quad (4.29)$$

Substituindo a equação 4.28 na equação 4.19, obtém-se as componentes de tensão

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= 2\text{Re} [\mu_1^2 \Psi^{(1)}_1(z_2) + \mu_2^2 \Psi^{(1)}_2(z_2)] \\ \sigma_{22} &= 2\text{Re} [\Psi^{(1)}_1(z_2) + \Psi^{(1)}_2(z_2)] \\ \sigma_{12} &= -2\text{Re} [\mu_1 \Psi^{(1)}_1(z_2) + \mu_2 \Psi^{(1)}_2(z_2)] \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde  $\Psi_k^{(1)}$  é a primeira derivada de  $\Psi_k$ .

Substituindo a equação 4.30 na equação 3.21 e depois na equação 4.18, desprezando-se os movimentos de corpos rígidos e integrando, obtém-se os deslocamentos

$$\begin{aligned} u_1 &= 2\text{Re} [q_{11} \Psi_1(z_1) + q_{12} \Psi_2(z_2)] \\ u_2 &= 2\text{Re} [q_{21} \Psi_1(z_1) + q_{22} \Psi_2(z_2)] \end{aligned} \quad (4.31)$$

onde

$$q_{ik} = \begin{bmatrix} a_{11}\mu_k^2 + a_{12} - a_{16}\mu_k \\ a_{12}\mu_k + a_{22}/\mu_k - a_{26} \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

As soluções fundamentais  $U_{ik}$  e  $T_{ik}$  são os deslocamentos e as forças de superfície gerados na direção  $k$  no ponto  $\mathbf{z}$  devido a uma força unitária ou perturbação na direção  $i$  no ponto  $\mathbf{z}'$ . Os pontos  $\mathbf{z}$  e  $\mathbf{z}'$  são conhecidos como o ponto campo e o ponto fonte respectivamente, são definidos como

$$\mathbf{z}' = \begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x'_1 + \mu_1 x'_2 \\ x'_1 + \mu_2 x'_2 \end{Bmatrix} \quad (4.33)$$

$$\mathbf{z} = \begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x_1 + \mu_1 x_2 \\ x_1 + \mu_2 x_2 \end{Bmatrix} \quad (4.34)$$

onde  $\mu_k$  são as raízes complexas da equação 4.25.

Considerando um contorno fechado  $\Gamma$  ao redor do ponto fonte  $\mathbf{z}'$ , e usando a equação 3.3 e as tensões da equação 4.30, tem-se

$$\int_{\Gamma} t_1 d\Gamma = 2\text{Re} \llbracket \mu_1 \Psi_1 + \mu_2 \Psi_2 \rrbracket \quad (4.35)$$

$$\int_{\Gamma} t_2 d\Gamma = 2\text{Re} \llbracket \Psi_1 + \Psi_2 \rrbracket$$

Os colchetes duplos representam o salto na função para um contorno fechado ao redor do ponto fonte  $\mathbf{z}'$ , então o resultado das equações 4.35 não será zero.

As soluções fundamentais em um plano infinito anisotrópicos podem ser encontradas usando-se a função tensão de Airy resultante das forças de superfície fundamentais, dadas pela equação 4.35, e a equação de equilíbrio de forças 3.2, sem consideração das forças de corpo e os efeitos de inércia.



A função tensão de Airy para um ponto carregado na direção  $x_i$  pode ser representada por  $\Psi_{ik}$ . As integrais de contorno da equação 4.35 possuem sinais opostos a carga aplicada, ela pode ser expressa para um ponto fonte como

$$\begin{aligned} 2\text{Re} \llbracket \mu_1 \Psi_{i1} + \mu_2 \Psi_{i2} \rrbracket &= -\delta_{i1}, \\ 2\text{Re} \llbracket \Psi_{i1} + \Psi_{i2} \rrbracket &= \delta_{i2} \end{aligned} \tag{4.36}$$

As equações 4.36 são satisfeitas para qualquer contorno fechado, se a função  $\Psi_{ik}$  é definida como

$$\Psi_{ik} = A_{ik} \ln(\mathbf{z} - \mathbf{z}') \tag{4.37}$$

onde  $A_{ik}$  são constantes complexas. Usando propriedades de funções complexas, pode-se demonstrar que para um contorno fechado o ponto  $\mathbf{z}'$

$$\ln(\mathbf{z} - \mathbf{z}') = 2\pi i \tag{4.38}$$

Usando as equações 4.36, 4.37 e 4.38, são encontradas duas equações para determinar as constantes desconhecidas  $A_{ik}$

$$\begin{aligned} A_{i1} - \bar{A}_{i1} + A_{i2} - \bar{A}_{i2} &= \delta_{i2}/(2\pi i) \\ \mu_1 A_{i1} - \bar{\mu}_1 \bar{A}_{i1} + \mu_2 A_{i2} - \bar{\mu}_2 \bar{A}_{i2} &= -\delta_{i1}/(2\pi i) \end{aligned} \tag{4.39}$$

As duas equações adicionais necessárias para determinar  $A_{ik}$ , resultam da exigência que os deslocamentos tenham valores únicos, ou seja

$$\llbracket u_i \rrbracket = 0 \tag{4.40}$$

Usando as equações de deslocamentos 4.31, a equação 4.37 e a equação 4.38, a equação 4.40 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} q_{11}A_{i1} - \bar{q}_{11}\bar{A}_{i1} + q_{12}A_{i2} - \bar{q}_{12}\bar{A}_{i2} &= 0 \\ q_{21}A_{i1} - \bar{q}_{21}\bar{A}_{i1} + q_{22}A_{i2} - \bar{q}_{22}\bar{A}_{i2} &= 0 \end{aligned} \quad (4.41)$$

Na forma matricial, as equações 4.39 e 4.41

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ \mu_1 & -\bar{\mu}_1 & \mu_2 & -\bar{\mu}_2 \\ q_{11} & -\bar{q}_{11} & q_{12} & -\bar{q}_{12} \\ q_{21} & -\bar{q}_{21} & q_{22} & -\bar{q}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j1} \\ \bar{A}_{j1} \\ A_{j2} \\ \bar{A}_{j2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{j2}/(2\pi i) \\ -\delta_{j1}/(2\pi i) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

Substituindo a equação 4.41 nas equações de deslocamentos 4.31, são determinadas as soluções fundamentais para deslocamentos

$$U_{ik}(\mathbf{z}', \mathbf{z}) = 2\text{Re} [q_{i1}A_{j1} \ln(\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}'_1) + q_{i2}A_{j2} \ln(\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}'_2)] \quad (4.43)$$

As soluções fundamentais para forças de superfície são obtidas pela substituição da equação 4.41 nas equações de tensão 4.30 e usando a equação 3.3, tem-se

$$T_{ik}(\mathbf{z}', \mathbf{z}) = 2\text{Re} \left[ \frac{1}{(\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}'_1)} p_{i1} (\mu_1 n_1 - n_2) A_{j1} + \frac{1}{(\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}'_2)} p_{i2} (\mu_1 n_1 - n_2) A_{j2} \right] \quad (4.44)$$

onde

$$p_{ik} = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

Quando se usa esta formulação em materiais isotrópicos, a equação característica 4.25 se torna biquadrada com duas raízes iguais a  $i$  e duas iguais a  $-i$ , estes valores fazem que o sistema de equações 4.42 seja singular. Por isso não é possível o uso de materiais isotrópicos para comprar esta formulação com a formulação usada em (CZYZ ET AL., 2013). Para fazer a comparação deverão ser usado materiais quase-isotrópicos

$$E_2 = E_1 + e \cong E \quad (4.46)$$

$$e \leq 10^{-2} E_1 \quad (4.47)$$

$$G_{12} = \frac{E_1}{2(1 + \nu_{12})} \quad (4.48)$$

Quando o ponto fonte tende ao ponto campo, as soluções fundamentais para deslocamento e forças de superfície são singulares, no caso da solução fundamental para deslocamentos tem-se uma singularidade é fraca  $\ln(r)$ . No caso da solução fundamental para forças de superfície tem-se uma singularidade forte  $\ln(1/r)$ .

### 4.3 Transformação da Integral de Domínio

O método dos elementos de contorno de reciprocidade dual foi apresentado pela primeira vez por Nardini and Brebbia (1983) para análise de vibrações livres em problemas bidimensionais com materiais anisotrópicos.

O vetor de forças de corpo  $p_i$  da equação 4.17, pode ser aproximado sobre o domínio usando um conjunto de coeficientes desconhecidos  $\alpha_i^m$  e uma classe de funções denotadas por  $f^m(x)$ , a aproximação de  $p_i$  é dada por

$$p_i = \sum_{m=1}^M \alpha_i^m f^m(x) \quad (4.49)$$

A integral sobre o domínio da equação 4.17 pode ser expressa como

$$\int_{\Omega} p_i U_{ik} d\Omega = \sum_{m=1}^M \alpha_i^m \int_{\Omega} U_{ik} f^m d\Omega \quad (4.50)$$

Analogamente, soluções particulares  $\hat{u}_i$ , podem ser encontradas satisfazendo a equação de equilíbrio

$$C_{mnrs} \hat{u}_{rk,ns}^j = f_{mk}^j \quad (4.51)$$

A relação recíproca entre a solução fundamental e a solução particular pode ser escrita da forma

$$\hat{u}_{kn}^m + \int_{\Gamma} T_{ki} \hat{u}_{in}^m d\Gamma = - \int_{\Omega} f_{in}^m U_{ki} d\Omega + \int_{\Gamma} U_{ki} \hat{t}_{in}^m d\Gamma \quad (4.52)$$

Substituindo a equação 4.52 na equação 4.50, tem-se

$$\int_{\Omega} p_i U_{ik} d\Omega = \sum_{m=1}^M \alpha_n^m \left\{ -\hat{u}_{kn}^m + \int_{\Gamma} U_{ki} \hat{t}_{in}^m d\Gamma - \int_{\Gamma} T_{ki} \hat{u}_{in}^m d\Gamma \right\} \quad (4.53)$$

Substituindo a equação 4.53 na equação 4.17, tem-se

$$u_k + \int_{\Gamma} T_{ki} u_i d\Gamma = \int_{\Gamma} U_{ki} t_i d\Gamma + \sum_{m=1}^M \alpha_n^m \left\{ \hat{u}_{kn}^m - \int_{\Gamma} U_{ki} \hat{t}_{in}^m d\Gamma + \int_{\Gamma} T_{ki} \hat{u}_{in}^m d\Gamma \right\} \quad (4.54)$$

A equação 4.54 é a equação do método dos elementos de contorno de reciprocidade dual, onde não aparecem integrais de domínio.

As soluções particulares devem satisfazer a equação de equilíbrio, equação 4.51. O procedimento tradicional em problemas de elasticidade isotrópica e problemas de potenciais é adotar uma função  $f^j$  e encontrar a solução particular  $\hat{u}^j$ , no caso de elasticidade anisotrópica, torna-se bastante difícil devido à complexidade da equação 4.51. Um procedimento alternativo é proposto por Schclar (1994) que assume soluções particulares  $\hat{u}^j$  para se encontrar as funções  $f^j$ . Neste trabalho foram utilizadas as funções adotadas por Albuquerque et al. (2003) para problemas dinâmicos de fratura em materiais anisotrópicos.

Adotando-se como solução particular

$$\hat{u}_{mk} = cr^3 \delta_{km} \quad (4.55)$$

onde  $c$  é uma constante escolhida arbitrariamente, a função de aproximação será

$$f_{im} = C_{ijkl} \{ cr (r_{,l} r_{,j} \delta_{km} + \delta_{jl} \delta_{km}) \} \quad (4.56)$$

As forças de superfície são dadas por

$$\hat{t}_{mk} = \sigma_{mrs} n_s \quad (4.57)$$

Derivando-se a equação 4.55 e usando a equação 3.8, tem-se

$$\sigma_{mrs} = C_{rsjk} \left\{ c \frac{3r^2}{2} (r_{,k} \delta_{mj} + r_{,j} \delta_{mk}) \right\} \quad (4.58)$$

#### 4.4 Equações Integrais Singulares

A equação 4.54 foi definida para um ponto do interior do domínio. Quando o ponto fonte é interno,  $r \neq 0$  onde  $r$  é dado por  $|z - z'|$ , a equação 4.54 contém integrandos não singulares. A análise do limite da transição quando o ponto fonte tende ao contorno  $r \rightarrow 0$ . Esta operação será feita como é mostrado em (PORTELA, 1992), colocando o ponto fonte no contorno e diminuindo o domínio do problema por uma região semi-circular, com contorno  $\Gamma_e^*$  e raio  $e$ , centrado no ponto fonte, conforme mostrado na Figura 4.1. Com esta configuração o contorno é dividido em duas partes, na forma

$$\Gamma = \lim_{e \rightarrow 0} (\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*) \quad (4.59)$$

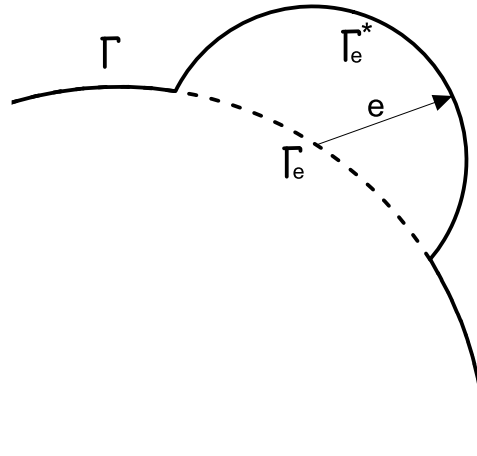


Figura 4.1: Ponto fonte localizado no contorno, circundado por uma região semi-circular.

A equação 4.54, pode ser escrita como

$$u_k + \lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*} T_{ki} u_i d\Gamma = \lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*} U_{ki} t_i d\Gamma + \sum_{m=1}^M \alpha_n^m \left\{ \hat{u}_{kn}^m - \int_{\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*} U_{ki} \hat{t}_{in}^m d\Gamma + \int_{\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*} T_{ki} \hat{u}_{in}^m d\Gamma \right\} \quad (4.60)$$

A primeira integral do lado direito da equação 4.60 contém um integrando de singularidade fraca da ordem  $\ln(r)$  e é integrável como uma integral imprópria. A integral do lado esquerdo

tem uma singularidade forte, da ordem  $1/r$ , que pode ser regularizada com o primeiro termo da expansão de Taylor em torno do ponto fonte, ou seja

$$\lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma - \Gamma_e + \Gamma_e^*} T_{ki} u_i(\mathbf{z}) d\Gamma = \lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma_e^*} T_{ki} [u_i(\mathbf{z}) - u_i(\mathbf{z}')] d\Gamma + u_i(\mathbf{z}') \lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma_e^*} T_{ki} d\Gamma + \lim_{e \rightarrow 0} \int_{\Gamma - \Gamma_e} T_{ki} u_i(\mathbf{z}) d\Gamma \quad (4.61)$$

Assumindo que os deslocamentos são contínuos no ponto fonte, o primeiro termo do lado direito da equação 4.60 é integrável e desaparece no processo de limite. Os segundo termo da equação representa um salto nos deslocamentos dado por  $A_{ij}(\mathbf{z}') u_j(\mathbf{z}')$ , no qual  $A_{ij}(\mathbf{z}')$  é uma constante que depende da geometria local e das constantes elásticas. Finalmente, o terceiro termo do lado direito da equação resulta em uma integral imprópria que é calculada no sentido do valor principal de Cauchy. Quando  $e \rightarrow 0$ , o ponto fonte tende ao contorno, no limite, a equação 4.60 pode ser escrita na forma

$$c_{ki} u_k + \int_{\Gamma} T_{ki} u_i d\Gamma = \int_{\Gamma} U_{ki} t_i d\Gamma + \sum_{m=1}^M \alpha_n^m \left\{ c_{ki} \hat{u}_{kn}^m - \int_{\Gamma} U_{ki} \hat{t}_{in}^m d\Gamma + \int_{\Gamma} T_{ki} \hat{u}_{in}^m d\Gamma \right\} \quad (4.62)$$

onde  $\int$  representa integral no sentido do valor principal de Cauchy e o coeficiente  $c_{ki}(\mathbf{z}')$  é dado por  $\delta_{ij} + A_{ij}(\mathbf{z}')$ , no qual  $\delta_{ij}$  representa o delta de Kronecker.

#### 4.5 Formulação dos Elementos de Contorno Discretizada

Para obter a solução do problema elasto-dinâmico, o contorno é dividido em uma série de elementos nos quais os deslocamentos e as forças de superfície são escritos em termos de seus valores nodais. Neste trabalho serão usados elementos quadráticos (3 nós por elemento) descontínuos.

Nesta formulação será mais conveniente trabalhar com vetores, do que usar notação indicial, desta forma tem-se

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= \boldsymbol{\phi} \mathbf{u}^{(i)} \\
\mathbf{t} &= \boldsymbol{\phi} \mathbf{t}^{(i)} \\
\hat{\mathbf{u}} &= \boldsymbol{\phi} \hat{\mathbf{u}}^{(i)} \\
\hat{\mathbf{t}} &= \boldsymbol{\phi} \hat{\mathbf{t}}^{(i)}
\end{aligned} \tag{4.63}$$

As variáveis em negrito são vetores de dimensões  $2N$ , onde  $N$  é o número de nós,  $\mathbf{u}^{(i)}$  e  $\mathbf{t}^{(i)}$  representam os valores nodais dos deslocamentos e forças de superfície, respectivamente,  $\boldsymbol{\phi}$  é o valor das funções de forma,  $\mathbf{u}$  e  $\mathbf{t}$  são os deslocamentos e as tensões ao longo do elemento, finalmente  $\hat{\mathbf{u}}^{(i)}$  e  $\hat{\mathbf{t}}^{(i)}$  representam os vetores nodais das soluções particulares de deslocamento e forças de superfície, respectivamente.

Sendo o domínio dividido em  $NE$  elementos de contorno, substituindo as equações 4.63 na equação 4.62, tem-se

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}^l \mathbf{u}^l + \sum_{j=1}^{NE} \left\{ \int_{\Gamma_j} \mathbf{T} \boldsymbol{\phi} d\Gamma \right\} \mathbf{u}^j &= \sum_{j=1}^{NE} \left\{ \int_{\Gamma_j} \mathbf{U} \boldsymbol{\phi} d\Gamma \right\} \mathbf{t}^j + \\
\sum_{m=1}^M \left[ \mathbf{c}^l \hat{\mathbf{u}}^l - \sum_{j=1}^{NE} \left\{ \int_{\Gamma_j} \mathbf{U} \boldsymbol{\phi} d\Gamma \right\} \hat{\mathbf{T}}^{jm} + \sum_{j=1}^{NE} \left\{ \int_{\Gamma_j} \mathbf{T} \boldsymbol{\phi} d\Gamma \right\} \hat{\mathbf{U}}^{jm} \right] \boldsymbol{\alpha}^m &
\end{aligned} \tag{4.64}$$

sendo que

$$\int_{\Gamma_j} \mathbf{T} \boldsymbol{\phi} d\Gamma = \mathbf{H} \tag{4.65}$$

$$\int_{\Gamma_j} \mathbf{U} \boldsymbol{\phi} d\Gamma = \mathbf{G} \tag{4.66}$$

tem-se

$$\sum_{j=1}^N H^{lj} u^j = \sum_{j=1}^N G^{lj} t^j + \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^N (H^{lj} \hat{u}^{jm} - G^{lj} \hat{t}^{jm}) \alpha^m \tag{4.67}$$



Os  $M$  vetores  $\boldsymbol{\alpha}^m$  ( $2 \times 1$ ) correspondentes as diferentes funções de aproximação  $f^m$  podem ser agrupados em um vetor  $\boldsymbol{\alpha}^m$  ( $2M \times 1$ ) e relacionado com o vetor de forças de corpo  $\mathbf{p}^m$  ( $2M \times 1$ ) contendo as forças de corpo para todos os nós do contorno, assim a equação 4.49 pode ser escrita como

$$\mathbf{p} = \mathbf{F}\boldsymbol{\alpha} \quad (4.68)$$

onde os elementos da matriz  $\mathbf{F}$  são os valores das funções  $f^m(x)$  em todos os nós. Fazendo a inversão da matriz  $\mathbf{F}$ , tem-se

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{E}\mathbf{p} \quad (4.69)$$

onde  $\mathbf{E} = \mathbf{F}^{-1}$ .

Substituindo a equação 4.69 na equação 4.67, tem-se

$$\mathbf{H}\mathbf{u} = \mathbf{G}\mathbf{t} + \left[ \mathbf{H}\hat{\mathbf{U}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{T}} \right] \mathbf{E}\mathbf{p} \quad (4.70)$$

sendo

$$\mathbf{M} = \left[ \mathbf{G}\hat{\mathbf{T}} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{U}} \right] \mathbf{E}\mathbf{p} \quad (4.71)$$

A equação 4.69 torna-se

$$\mathbf{M}\mathbf{p} + \mathbf{H}\mathbf{u} = \mathbf{G}\mathbf{t} \quad (4.72)$$

A equação 4.72 tem o mesmo aspecto das equações de equilíbrio de elementos finitos, uma

matriz de massa  $\mathbf{M}$ , uma matriz de rigidez  $\mathbf{H}$  e um vetor de força  $\mathbf{Gt}$ , onde as matrizes são de tamanho  $(2N \times 2N)$  e o vetor de tamanho  $(2N \times 1)$

## 4.6 Integração no Espaço

Neste trabalho foram utilizadas as funções de forma quadráticas que permitem o modelamento de elementos curvos. Para facilitar a simulação do comportamento de materiais cristalinos, Figura 3.2, é conveniente o uso de elementos quadráticos descontínuos, devido a que estes elementos não tem nós nas pontas, evitando assim que um mesmo nó seja compartilhado por vários grãos facilitando a construção das matrizes do método.

Os deslocamentos e forças de superfície são representados em um elemento quadrático padrão como

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} & 0 \\ 0 & \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1^{(1)} \\ u_2^{(1)} \\ u_1^{(2)} \\ u_2^{(2)} \\ u_1^{(3)} \\ u_2^{(3)} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\phi} \mathbf{u}^{(n)} \quad (4.73)$$

$$\mathbf{t} = \begin{Bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} & 0 \\ 0 & \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t_1^{(1)} \\ t_2^{(1)} \\ t_1^{(2)} \\ t_2^{(2)} \\ t_1^{(3)} \\ t_2^{(3)} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\phi} \mathbf{t}^{(n)} \quad (4.74)$$

onde  $u_i^{(n)}$  e  $t_i^{(n)}$  são os valores nodais de deslocamentos e forças de superfície, respectivamente, e

$\phi^{(i)}$  são as funções de forma para elementos quadráticos descontínuos definidas em (KANE, 1994), pelas seguintes equações

$$\phi^{(1)} = \frac{9}{8}a \left( a - \frac{2}{3} \right) \quad (4.75)$$

$$\phi^{(2)} = \frac{9}{4} \left( \frac{4}{9} - a^2 \right) \quad (4.76)$$

$$\phi^{(3)} = \frac{9}{8}a \left( a + \frac{2}{3} \right) \quad (4.77)$$

Os pontos de campo  $\mathbf{z}'$  são mapeados por meio de funções de forma de elementos contínuos

$$\phi^{(1)} = \frac{1}{2}a (a - 1) \quad (4.78)$$

$$\phi^{(2)} = 1 - a^2 \quad (4.79)$$

$$\phi^{(3)} = \frac{1}{2}a (a + 1) \quad (4.80)$$

onde  $a$  representa uma coordenada isoparamétrica ao longo do elemento, Figura 4.2. Sendo a transformação de coordenadas de  $(x_1, x_2)$  para  $a$  e o elemento isoparamétrico, a geometria pode ser também representadas pelas funções de forma  $\phi^{(i)}$ , equação 4.81.

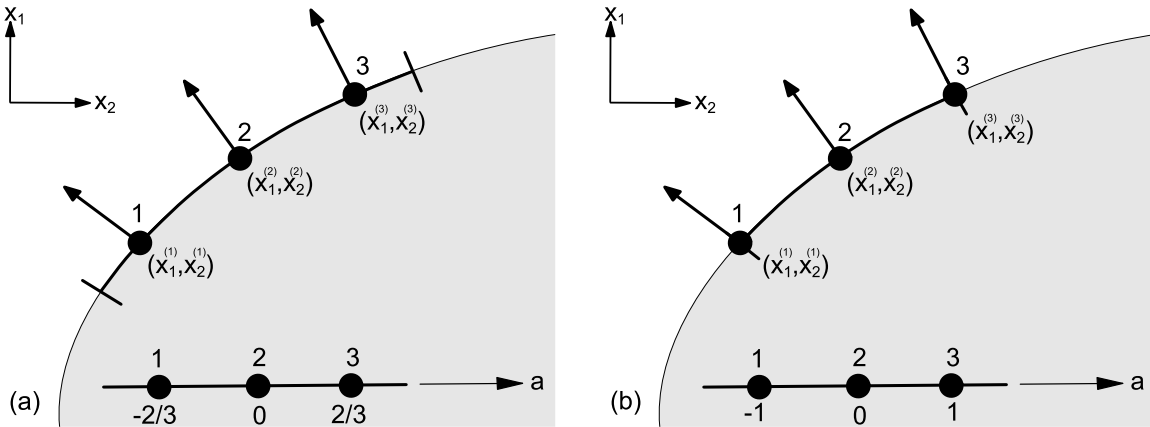


Figura 4.2: Elementos: (a) quadrático descontínuo, (b) quadrático contínuo.

$$\mathbf{x} = \begin{Bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} & 0 \\ 0 & \phi^{(1)} & 0 & \phi^{(2)} & 0 & \phi^{(3)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ x_1^{(2)} \\ x_2^{(2)} \\ x_1^{(3)} \\ x_2^{(3)} \end{Bmatrix} = \phi \mathbf{x}^{(n)} \quad (4.81)$$

As integrais de contorno podem ser escritas como

$$H^{(j)} = \int_{\Gamma_j} T_{lk} \phi^{(j)} d\Gamma = \int_{-1}^1 T_{lk} \phi^{(j)} |J| da \quad (4.82)$$

$$G^{(j)} = \int_{\Gamma_j} U_{lk} \phi^{(j)} d\Gamma = \int_{-1}^1 U_{lk} \phi^{(j)} |J| da \quad (4.83)$$

onde  $|J|$  representa o módulo do Jacobiano da transformação  $(x_1, x_2) \rightarrow a$ , e é dado por Brebbia and Dominguez (1992) e Kane (1994)

$$|J| = \frac{d\Gamma}{da} = \left\{ \left( \frac{dx_1}{da} \right)^2 + \left( \frac{dx_2}{da} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (4.84)$$

onde  $dx_1/da$  e  $dx_2/da$  são obtidos derivando as funções de forma da equação 4.81 em relação a  $a$ .

Integrais da ordem  $O(\ln r)$  podem ser avaliadas usando a quadratura logarítmica de Gauss, amplamente explicada em (KANE, 1994). Segundo o método, as singularidades logarítmicas podem ser integradas por

$$I = \int_0^1 \ln \left( \frac{1}{a} \right) f(a) da \cong \sum_{i=1}^N w_i f(a) \quad (4.85)$$

onde  $N$  é o número de pontos de Gauss logarítmico. A coordenada do ponto de integração  $a_i$  e o fator de peso  $w_i$  podem ser encontrados na literatura (BREBBIA AND DOMINGUEZ, 1992) e (KANE, 1994).

Os termos não singulares das matrizes  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{G}$  são integrados usando a quadratura de Gauss padrão com 10 pontos de integração, (KANE, 1994).

$$I = \int_{-1}^1 f(a) da \cong \sum_{i=1}^N w_i f(a) \quad (4.86)$$

Os termos singulares da matriz  $\mathbf{G}$  são do tipo  $\ln r$  sendo integrados usando a quadratura logarítmica de Gauss com 10 pontos de integração. Os termos singulares da matriz  $\mathbf{H}$  são do tipo  $1/r$  e precisam ser calculados no sentido do valor principal de Cauchy. A matriz  $\mathbf{H}$  no método dos elementos de contorno de reciprocidade dual é a mesma da formulação elasto-estática, pode-se tratar esta singularidade usando as considerações de corpos rígidos dadas por Brebbia and Dominguez (1992), assumindo que os deslocamentos do corpo sejam de um valor unitário e que não existam forças de corpo  $p_i$  na direção de um dos eixos de coordenadas, as forças de superfície em qualquer ponto do contorno devem ser zero. A equação 4.72 torna-se

$$\mathbf{H}\mathbf{v}^q = 0 \quad (4.87)$$

onde  $\mathbf{v}^q$  é um vetor que para todos os nós que tem deslocamento unitário ao longo da direção  $q$  e zero na outra direção. Para satisfazer a equação 4.87 tem-se

$$H_{ii} = - \sum_{j=1}^N H_{ij}, (i \neq j) \quad (4.88)$$

O termo da diagonal de  $\mathbf{H}$  é igual à soma de todos os outros termos fora da diagonal no grau de liberdade em consideração.

#### 4.7 Formulação por Sub-regiões

O método das sub-regiões é utilizado em diferentes aplicações, em problemas de mecânica da fratura foi adotado para evitar os inconvenientes dos nós pertencentes às faces opostas das trincas que possuem as mesmas coordenadas, como é mostrado em (ALBUQUERQUE, 2001) e (USECHE ET AL., 2012). Uma outra aplicação na qual o método é usado em problemas que contém múltiplos domínios em (GALVIS ET AL., 2013), também usado em problemas de potencial em (RODRIGUEZ ET AL., 2013), fazendo a análise de múltiplas inclusões (fibras) no interior de um outro domínio (matriz).

Neste trabalho o método das sub-regiões é desenvolvido para a formulação dos elementos de contorno de reciprocidade dual em materiais anisotrópicos e considerando as forças de corpo aplicado a problemas de fratura em estruturas policristalinas, devido à natureza da geometria. Para a análise de uma estrutura policristalina, tem-se duas situações, quando o grão pertence ao contorno possui condições de contorno de forças ou deslocamento conhecidas e quando o grão está situado no interior da estrutura e suas condições de contorno são totalmente desconhecidas, como é mostrado na Figura 4.3.

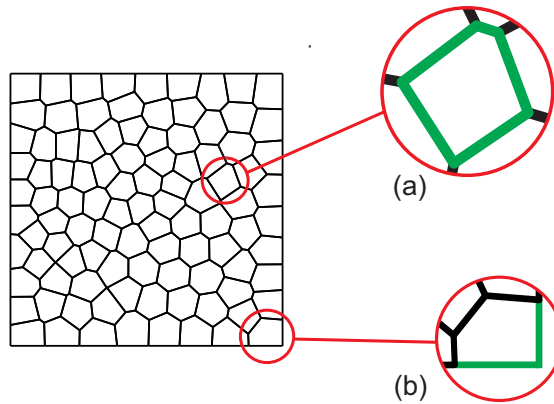


Figura 4.3: Tipos de grão: (a) grão interior, (b) grão no contorno.

Considerando um corpo dividido em dois domínios  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ , cujos contornos na interface são  $\Gamma_1$  e  $\Gamma_2$ , respectivamente. Na Figura 4.4 mostra-se um problema simples de duas regiões para o desenvolvimento da formulação.

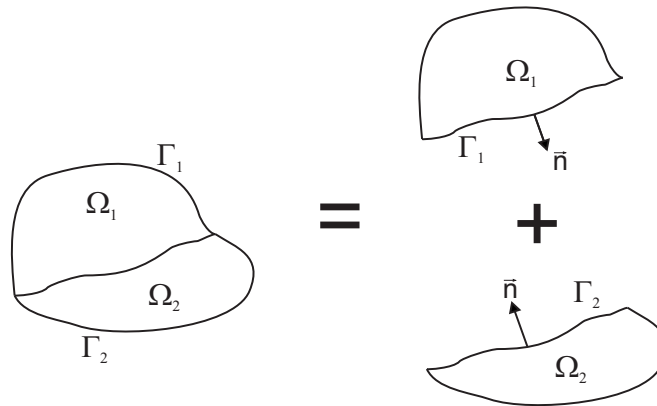


Figura 4.4: Domínio com duas sub-regiões

Para resolver o problema, tem-se que considerar a compatibilidade dos deslocamentos e o equilíbrio de forças de superfície na interface  $\Gamma_i^I$ , para  $i = 1, 2$ , tem-se

$$u_1^I = u_2^I \quad (4.89)$$

$$t_1^I = -t_2^I \quad (4.90)$$

sendo  $u_i^I$  e  $t_i^I$  desconhecidos na interface  $I$ .

A equação matricial da região 1 pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_1^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_1^I \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_1^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_1^I \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_1^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_1^I \end{Bmatrix} \quad (4.91)$$

A equação matricial da região 2 é dada por

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_2 & \mathbf{H}_2^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_2^I \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_2 & \mathbf{G}_2^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_2 \\ \mathbf{t}_2^I \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_2 & \mathbf{M}_2^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_2^I \end{Bmatrix} \quad (4.92)$$

Existem diferentes tipos de arranjo para juntar as equações e formar um sistema matricial para todo o problema, basicamente as matrizes finais do problema serão preenchidas por blocos, um tipo de organização é o apresentado por Katsikadelis (2002), que sugere fazer o arranjo começando pelos blocos que contêm os termos dos segmentos que contêm condições de contorno conhecidas, um outro é o proposto por Kane (1994) que deve-se fazer na ordem ascendente das interfaces segundo a numeração das regiões, pode-se ter variações da forma em como os blocos são organizados como é mostrado em (RIGBY AND ALIABADI, 1995) e (CROTTY, 1982) que apresentam diferenças devido ao *solver* proposto em cada um desses trabalhos. Neste trabalho foi usado o arranjo proposto por Kane (1994) e o mostrado em (ALBUQUERQUE, 2001) que contempla as matrizes adicionais da formulação considerando as forças de corpo.

As equações 4.91 e 4.92 podem ser escritas em um mesmo sistema



$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_1^I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{H}_2^I & \mathbf{H}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_1^I \\ \mathbf{u}_2^I \\ \mathbf{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_1^I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{G}_2^I & \mathbf{G}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_1^I \\ \mathbf{t}_2^I \\ \mathbf{t}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_1^I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_2^I & \mathbf{M}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_1^I \\ \mathbf{p}_2^I \\ \mathbf{p}_2 \end{Bmatrix} \quad (4.93)$$

Aplicando a equação de compatibilidade dos deslocamentos 4.89 e de equilíbrio de forças de superfície 4.90, tem-se o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_2^I & \mathbf{H}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_1^I \\ \mathbf{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_2^I & \mathbf{G}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_1^I \\ \mathbf{t}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_2^I & \mathbf{M}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_1^I \\ \mathbf{p}_2 \end{Bmatrix} \quad (4.94)$$

Sendo os deslocamentos e forças de superfície desconhecidos na interface, o sistema é escrito como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_1^I & \mathbf{G}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_2^I & \mathbf{G}_2^I & \mathbf{H}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_1^I \\ \mathbf{t}_1^I \\ \mathbf{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_2^I & \mathbf{M}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_1^I \\ \mathbf{p}_2 \end{Bmatrix} \quad (4.95)$$

Aplicando as condições de contorno no sistema 4.95, tem-se

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{H}_1^I & \mathbf{G}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_2^I & \mathbf{G}_2^I & \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{u}_1^I \\ \mathbf{t}_1^I \\ \mathbf{x}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_1^I & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_2^I & \mathbf{M}_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_1^I \\ \mathbf{p}_2 \end{Bmatrix} \quad (4.96)$$

## 4.8 Formulação no Domínio do Tempo

O método dos elementos de contorno de reciprocidade dual será aplicado para obter a resposta dos deslocamentos e as forças de superfície no domínio do tempo. A integração no domínio do tempo será realizada usando o esquema proposto por Houbolt (1950), usado em (DOMINGUEZ, 1993). O método de Houbolt é utilizado na integração direta no domínio do tempo junto com o método dos elementos de contorno de reciprocidade dual. Resultados são apresentados na seção posterior comparando com os resultados obtidos em (ALBUQUERQUE, 2001) e (DOMINGUEZ, 1993), com materiais quase-isotrópicos e anisotrópico.

As forças de corpo presentes em um corpo de domínio  $\Omega$  e contorno  $\Gamma$  são devido ao campo de aceleração.

$$p_i = \rho \ddot{u}_i \quad (4.97)$$

A equação matricial 4.72 escrita para um instante de tempo  $\tau + \Delta\tau$  e dada por

$$\rho \mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}_{\tau+\Delta\tau} + \mathbf{H} \mathbf{u}_{\tau+\Delta\tau} = \mathbf{G} \mathbf{t}_{\tau+\Delta\tau} \quad (4.98)$$

O período de tempo  $T$  é dividido em  $N$  intervalos iguais  $\Delta\tau$  ( $T = N\Delta\tau$ ). Assumindo que a solução da equação 4.72 é conhecida para cada passo de tempo, ou seja  $0, \Delta\tau, 2\Delta\tau, \dots, T$  a solução no instante  $\tau + \Delta\tau$  é encontrada de acordo com a aproximação de (HOUBOLT, 1950). A aceleração em  $\tau + \Delta\tau$  é aproximada pela expressão de diferenças finitas

$$\ddot{\mathbf{u}}_{\tau+\Delta\tau} = \frac{1}{\Delta\tau^2} (2\mathbf{u}_{\tau+\Delta\tau} - 5\mathbf{u}_{\tau} + 4\mathbf{u}_{\tau-\Delta\tau} - \mathbf{u}_{\tau-2\Delta\tau}) \quad (4.99)$$

A velocidade é calculada em (CARRER AND MANSUR, 1999) como

$$\dot{\mathbf{u}}_{\tau+\Delta\tau} = \frac{1}{6\Delta\tau} (11\mathbf{u}_{\tau+\Delta\tau} - 18\mathbf{u}_{\tau} + 9\mathbf{u}_{\tau-\Delta\tau} - 2\mathbf{u}_{\tau-2\Delta\tau}) \quad (4.100)$$

O método de Houbolt tem a característica de possuir um alto amortecimento número que torna os resultados obtidos pelo método dos elementos de contorno de reciprocidade dual mais suaves que os obtidos por outras formulações aplicadas a elasto-dinâmica, (CHIRINO ET AL., 1994). Para reduzir o passo de tempo e obter uma maior precisão dos resultados é necessário usar pontos internos, ou melhorar a malha, conforme é mostrado em (ALBUQUERQUE, 2001). Neste trabalho devido à escala e ao grande número de graus de liberdade, não serão incluídos na formulação os pontos internos, a discretização ocorrerá sobre o contorno.

Substituindo a equação 4.100 na equação 4.99, tem-se

$$\left[ \frac{2}{\Delta\tau^2} \rho \mathbf{M} + \mathbf{H} \right] \mathbf{u}_{\tau+\Delta\tau} = \mathbf{G} \mathbf{t}_{\tau+\Delta\tau} + \frac{1}{\Delta\tau^2} \rho \mathbf{M} (5\mathbf{u}_{\tau} - 4\mathbf{u}_{\tau-\Delta\tau} + \mathbf{u}_{\tau-2\Delta\tau}) \quad (4.101)$$

Sendo  $\mathbf{u}_{\tau}$ ,  $\mathbf{u}_{\tau-\Delta\tau}$  e  $\mathbf{u}_{\tau-2\Delta\tau}$  conhecidos, o sistema de equações 4.101 pode ser resolvido usando as condições de contorno em  $\tau + \Delta\tau$ . Passando todas as variáveis desconhecidas para o lado esquerdo, a equação 4.101 pode ser escrita como

$$\mathbf{A} \mathbf{X}_{\tau+\Delta\tau} = \mathbf{F}_{\tau+\Delta\tau} \quad (4.102)$$

onde  $\mathbf{X}_{\tau+\Delta\tau}$  é o vetor de variáveis desconhecidas,  $\mathbf{F}_{\tau+\Delta\tau}$  é o vetor de variáveis conhecidas, calculadas a partir dos valores de  $\mathbf{u}$  dos passos de tempo anteriores e com as condições de contorno no tempo  $\tau + \Delta\tau$ . Sendo o sistema 4.102 resolvido, o vetor  $\mathbf{u}_{\tau+\Delta\tau}$  é conhecido, então a solução pode ser encontrada para o próximo passo de tempo.

## 5 Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas

Neste capítulo é apresentada a abordagem multiescala utilizada para simular a fratura intergranular em materiais policristalinos, a MMZC utilizando elementos de contorno. A análise multiescala é feita com diferentes aproximações incorporando zonas coesivas no problema físico. O estudo dos cristais e estruturas atômicas nas interfaces e as técnicas de homogeneização da macromecânica são aplicadas para produzir a união entre o potencial atômico nas interfaces e o comportamento da mesoescala. O potencial interfacial é deduzido para modelar as propriedades efetivas nas interfaces, a técnica de homogeneização de Hill-Mandel e a regra de Cauchy-Born são empregadas para obter o gradiente de deformação efetivo nas zonas coesivas, (LI ET AL., 2010). O método pode proporcionar um meio eficaz para descrever as propriedades heterogêneas do material em uma escala pequena, tendo em conta o efeito das não homogêneas no contorno dos grãos, interfaces bimateriais e inclusões, (QIAN AND LI, 2011). O esquema do método é ilustrado na Figura 5.1

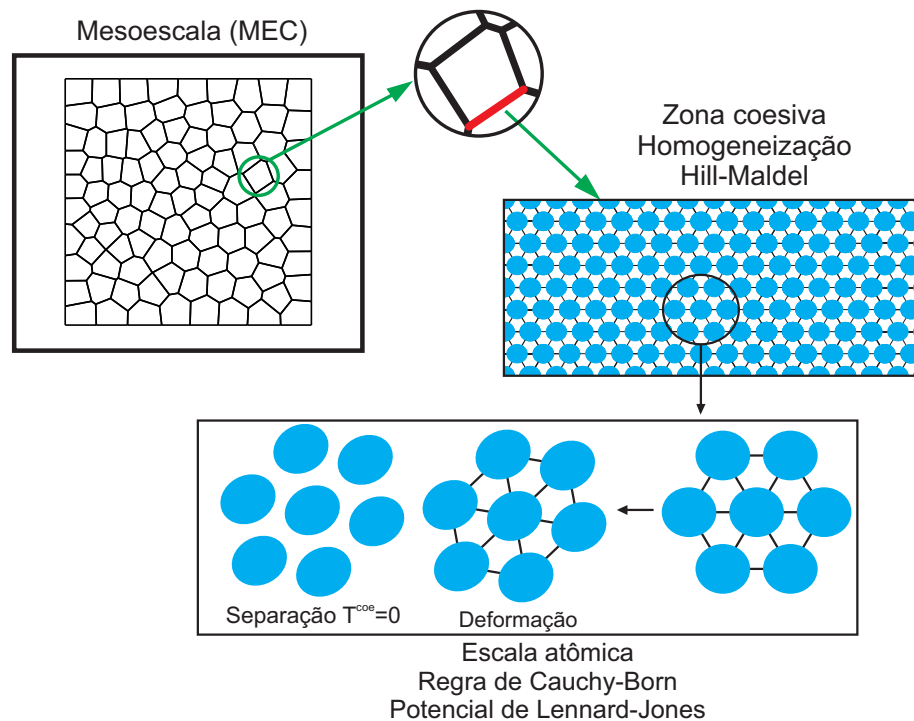


Figura 5.1: Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas.

## 5.1 Aproximação do Potencial nas Interfaces

Considera-se uma zona coesiva compatível nas interfaces, de espessura e volume finito. Além disso é assumido que as altas deformações não uniformes são confinadas na zona coesiva, e que fora da zona coesiva a deformação é linear. Este postulado foi apresentado em (LI ET AL., 2010) na formulação da Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas utilizando o MEF, baseado no amplamente aceitado modelo do Taylor para sólidos policristalinos (TAYLOR, 1938) e modelos similares que foram adotados, (PEIERLS, 1940).

A modelagem do processo de dano do material é proposta em (LI ET AL., 2012) tratando as interfaces como um arranjo de cristais *Colloidal Crystal*. A justificativa é que pode existir a presença de vazios dentro da zona coesiva, e incluir algumas características como os defeitos pela nucleação e as flutuações térmicas.

A modelagem do arranjo de cristais na interface é referido ao seguinte procedimento: as interações interatômicas no interior da zona coesiva podem ser tratadas como forças de Van der Waals, já que são assumidas interações mais fracas nas zonas coesivas do que o meio granular, o potencial interfacial é obtido para o campo de altas deformações não homogêneas na zona coesiva, (ZENG AND LI, 2010).

Neste trabalho o potencial atômico no meio granular é dado pelo potencial de Lennard-Jones (GRIEBEL ET AL., 2010), dado por

$$\phi_g = \alpha \varepsilon^{LJ} \left[ \left( \frac{\sigma^{LJ}}{r} \right)^n - \left( \frac{\sigma^{LJ}}{r} \right)^m \right] \quad (5.1)$$

onde  $\alpha$  é expresso por

$$\alpha = \frac{1}{n - m} \left( \frac{n^n}{m^m} \right)^{\frac{1}{n-m}} \quad (5.2)$$

Sendo  $m < n$ , este potencial é parametrizado por  $\varepsilon^{LJ}$  e  $\sigma^{LJ}$ . O valor de  $\varepsilon^{LJ}$  descreve a

profundidade do potencial e assim a intensidade de força de repulsão e atração. O incremento da profundidade do potencial  $\varepsilon^{LJ}$  leva a materiais com enlaces muito fortes. O valor de  $\sigma$  parametriza o comprimento entre duas partículas no qual o potencial é zero. Para obter um comportamento como as forças de Van der Waals, o potencial adota  $m = 6$  e  $n = 12$ , assim o potencial e a força calculada decrescem rapidamente, finalmente a expressão do potencial do meio granular é dado pela equação 5.3.

$$\phi_g = 4\varepsilon^{LJ} \left[ \left( \frac{\sigma^{LJ}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma^{LJ}}{r} \right)^6 \right] \quad (5.3)$$

A Figura 5.2 mostra o potencial de Lennard-Jones com  $\varepsilon^{LJ} = 1$  e  $\sigma^{LJ} = 1$ , também as zonas de repulsão e atração que dependem do comprimento de equilíbrio  $r_0 = 2^{1/6}\sigma^{LJ}$  são definidas.

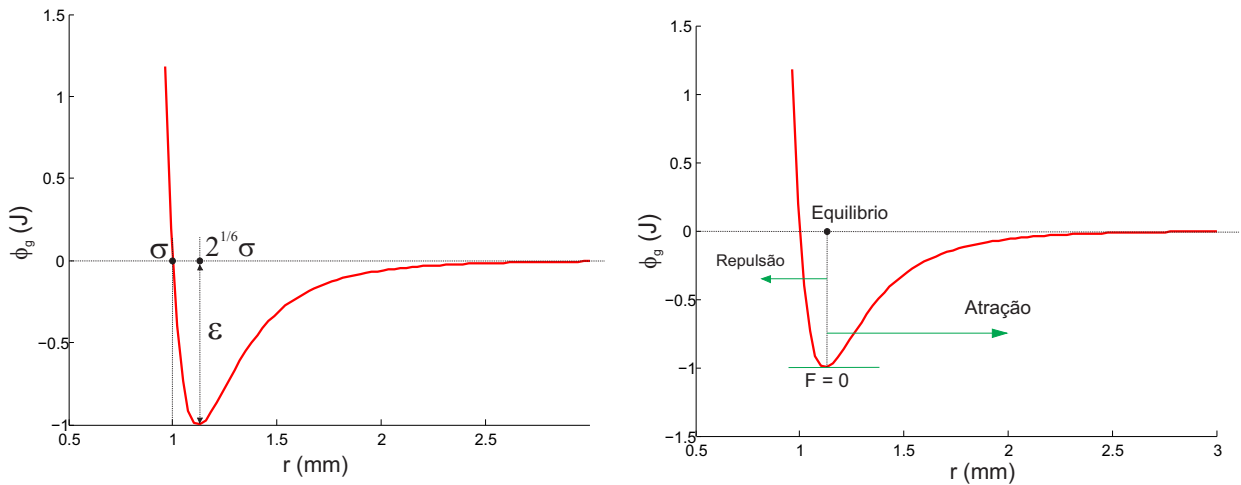


Figura 5.2: Potencial de Lennard-Jones.

Para obter o potencial interfacial, o meio granular tem que ser visto como rígido quase sem deformação, então os dois elementos correspondentes ao meio granular adjacentes à zona coesiva compatível podem ser vistos como dois corpos rígidos do espaço médio, Figura 5.3.

O potencial interfacial  $\phi_{\text{int}}$  é obtido pela integração sobre o espaço médio, Figura 5.3, analisando a interação entre uma molécula e uma superfície plana, (ISRAELACHVILI, 1991). A interação molecular entre um átomo e uma superfície plana de um sólido é mostrada na Figura 5.4.

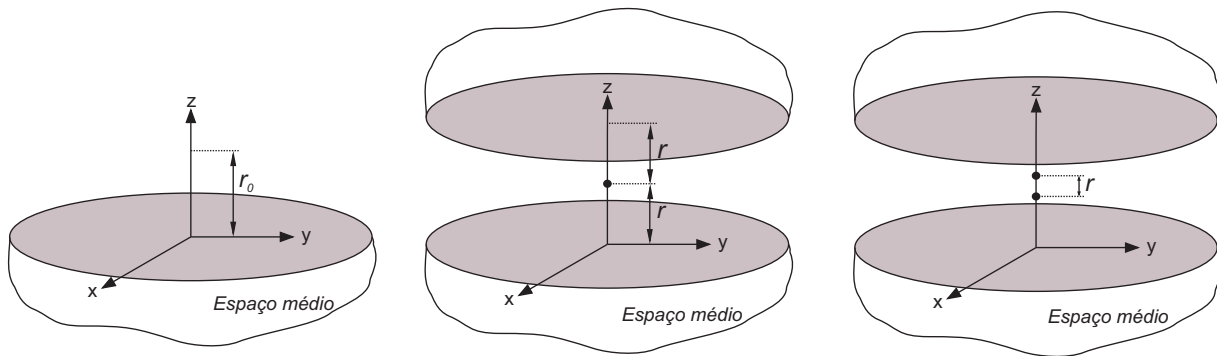


Figura 5.3: Modelagem do potencial interfacial na zona coesiva.

Para moléculas dentro de um anel circular de seção transversal  $dx dy$  e raio  $x$ , o volume do anel é  $2\pi x dx dz$ , e o número de moléculas no anel é  $2\pi\beta x dx dz$ , onde  $\beta$  é a densidade atômica do sólido.

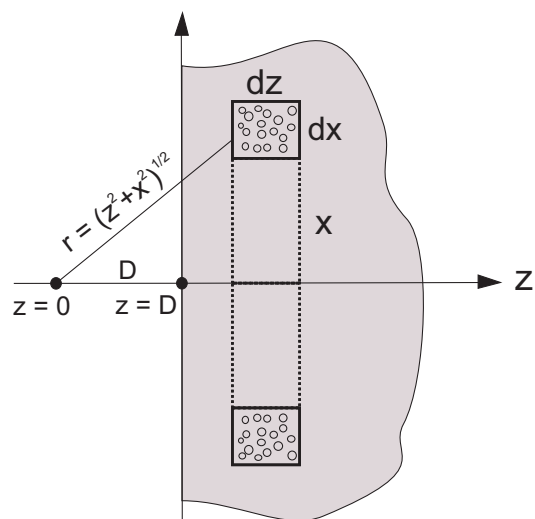


Figura 5.4: Modelo do potencial entre um átomo e uma superfície plana.

A interação de um átomo a uma distância  $r$  da superfície é dada por

$$\phi_{\text{int}} = \pi\beta \int_{z=D}^{z=\infty} dz \int_{x=0}^{x=\infty} \phi_g x dx \quad (5.4)$$

Sendo o comprimento de equilíbrio é  $r_0 = 2^{1/6}\sigma^{LJ}$ , pode-se reescrever a equação 5.3, como,

$$\phi_g = \varepsilon^{LJ} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (5.5)$$

Substituindo a equação 5.5 na equação 5.4, tem-se

$$\phi_{\text{int}} = \pi\beta\varepsilon^{LJ} \int_{z=D}^{z=\infty} dz \int_{x=0}^{x=\infty} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] x dx \quad (5.6)$$

onde segundo a Figura 5.4,  $r = (z^2 + x^2)^{1/2}$ , reescrevendo a equação 5.6

$$\phi_{\text{int}} = \pi\beta\varepsilon^{LJ} \int_{z=D}^{z=\infty} dz \int_{x=0}^{x=\infty} \left[ \left( \frac{r_0}{(z^2 + x^2)^{1/2}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{(z^2 + x^2)^{1/2}} \right)^6 \right] x dx \quad (5.7)$$

Integrando a equação 5.7, obtém-se a expressão para determinar o potencial interfacial apresentado em (SAUER AND LI, 2007).

$$\phi_{\text{int}} = \pi\beta\varepsilon^{LJ} r_0^3 \left[ \frac{1}{45} \left( \frac{r_0}{r} \right)^9 - \frac{1}{3} \left( \frac{r_0}{r} \right)^3 \right] \quad (5.8)$$

O potencial interfacial  $\phi_{\text{int}}$  é apresentado por Zeng and Li (2010), Zeng and Li (2012) e Li et al. (2012) como

$$\phi_{\text{int}} = \frac{\pi\varepsilon^{LJ}}{\sqrt{2}} \left[ \frac{1}{45} \left( \frac{r_0}{r} \right)^9 - \frac{1}{3} \left( \frac{r_0}{r} \right)^3 \right] \quad (5.9)$$

O uso do potencial interfacial para construir o potencial intermolecular dentro das zonas coesivas, é uma aproximação dos métodos de dinâmica molecular. A aproximação do potencial in-



terfacial pode capturar o mecanismo de falha local na escala atômica. Considerando dois elementos de contorno quadráticos descontínuos formando a zona coesiva mostrada na Figura 5.5.

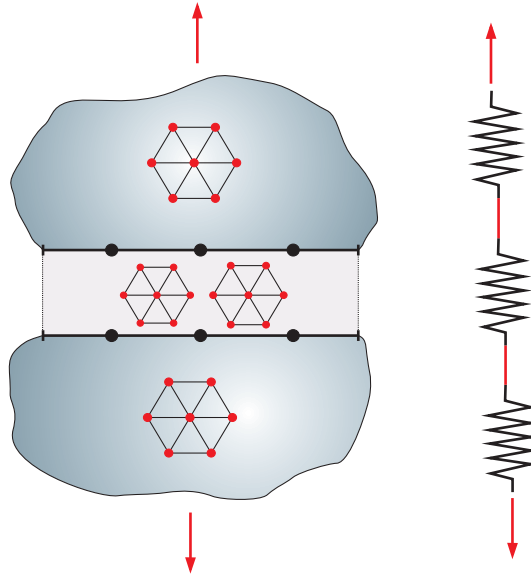


Figura 5.5: Modelo da zona coesiva.

A modelagem da zona coesiva é constitutivamente consistente com o meio granular onde comparações do potencial é a força entre átomos na zona coesiva e no meio granular são feitas e mostradas na Figura 5.6, onde os parâmetros são definidos como  $\varepsilon^{LJ} = 1$  e  $\sigma^{LJ} = 1$ , pode-se concluir que a força de atração entre átomos no interior da zona coesiva ocorre em um comprimento de separação menor do que a separação requerida no meio granular.

Para demonstrar porque a Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas funciona, pode-se modelar o sistema entre a zona coesiva e o meio granular da Figura 5.5, como um sistema unidimensional de três molas conectadas em série; a força de tensão deve ser igual devido à condição de equilíbrio da conexão em série. Portanto, assim como a força de tração aumenta, os deslocamentos no meio granular e na zona coesiva aumentarão também até alcançar o máximo valor da força na zona coesiva. Depois da zona coesiva alcançar o seu máximo valor, A força irá diminuindo ao tempo que os deslocamentos dentro da zona coesiva aumentam, o que eventualmente levará à separação da superfície, (LI ET AL., 2010).

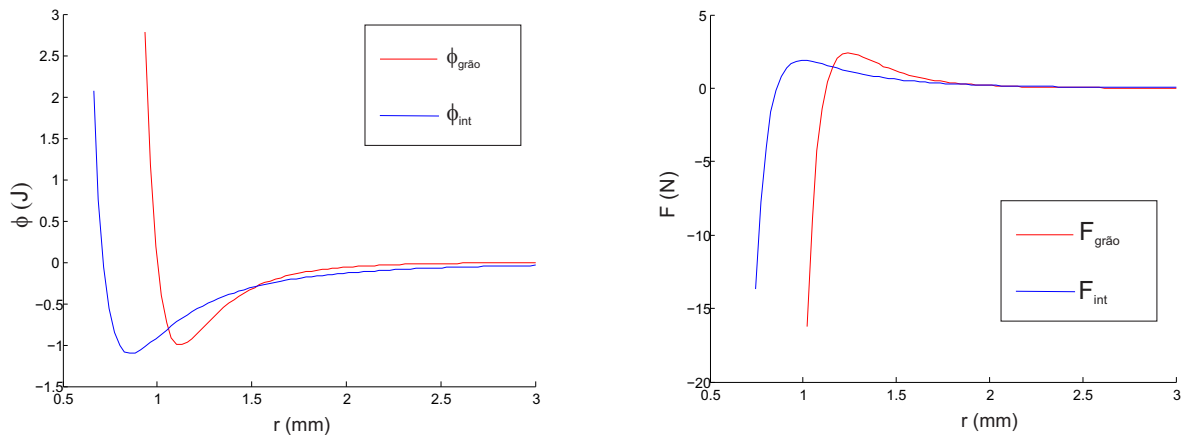


Figura 5.6: Comparação de potencial x deslocamento e força x deslocamento entre a zona coesiva e o meio granular.

## 5.2 Gradiente de Deformação Efetivo na Zona Coesiva

Na representação do campo local de deformação não uniforme causado pela presença de defeitos, o primeiro passo é a modelagem da zona fraca coesiva na interface descrito na seção anterior, mostrado na Figura 5.7. Para quantificar o campo altamente não uniforme de deformação na zona coesiva, assume-se que a deformação não uniforme tem um caráter multiescala, (ZENG AND LI, 2012), ou seja o campo de deslocamento dentro da zona coesiva pode ser escrito como

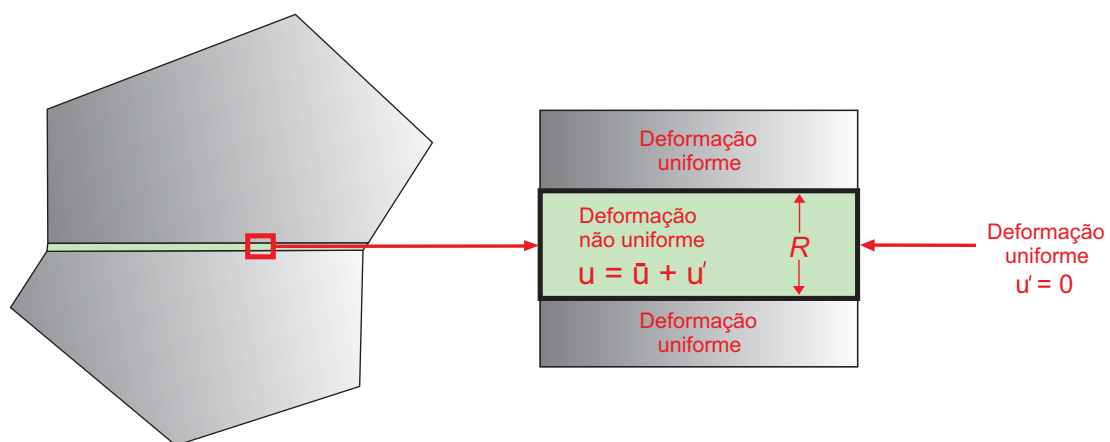


Figura 5.7: Caráter multiescala da deformação não uniforme na zona coesiva.

A representação do caráter multiescala das escala é mostrada na Figura 5.8.

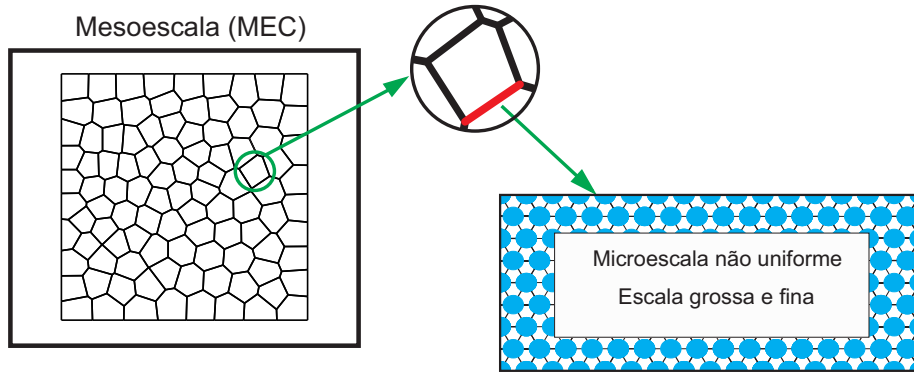


Figura 5.8: Ilustração das multiples escalas do modelo.

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (5.10)$$

onde  $\bar{\mathbf{u}}$  representam o campo de deslocamentos e  $\bar{\mathbf{x}}$  é o vetor das posições na configuração deformada em uma escala grossa; enquanto que  $\mathbf{u}'$  é o campo de deslocamento de flutuação e  $\mathbf{x}'$  é o vetor das posições flutuantes em uma escala fina. Sendo então  $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{X} + \bar{\mathbf{u}}$  e  $\mathbf{x}' = \mathbf{u}'$  onde  $\mathbf{X}$  é o vetor das posições na configuração de referência, pode-se ter

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u} = (\mathbf{X} + \bar{\mathbf{u}}) + \mathbf{u}' = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{u}' = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{x}' \quad (5.11)$$

A espessura da zona coesiva  $R$  depende da malha e será discutida no capítulo 7, a mesoescala é milimétrica e a escala da zona coesiva é considerada micrométrica.

Considerando que no interior da zona coesiva a deformação é não uniforme, é possível separar a deformação total em duas diferentes escalas, o gradiente de deformação na escala grossa mudará lentamente em comparação com o campo de deformação na escala fina o que permite aplicar a regra de Cauchy-Born na escala grossa. No micro domínio a posição deformada dos pontos do material como é mostrado na Figura 5.9 é uma superposição dos campos de deformação na escala grossa e fina é escrita por Yvonnet and He' (2007) como

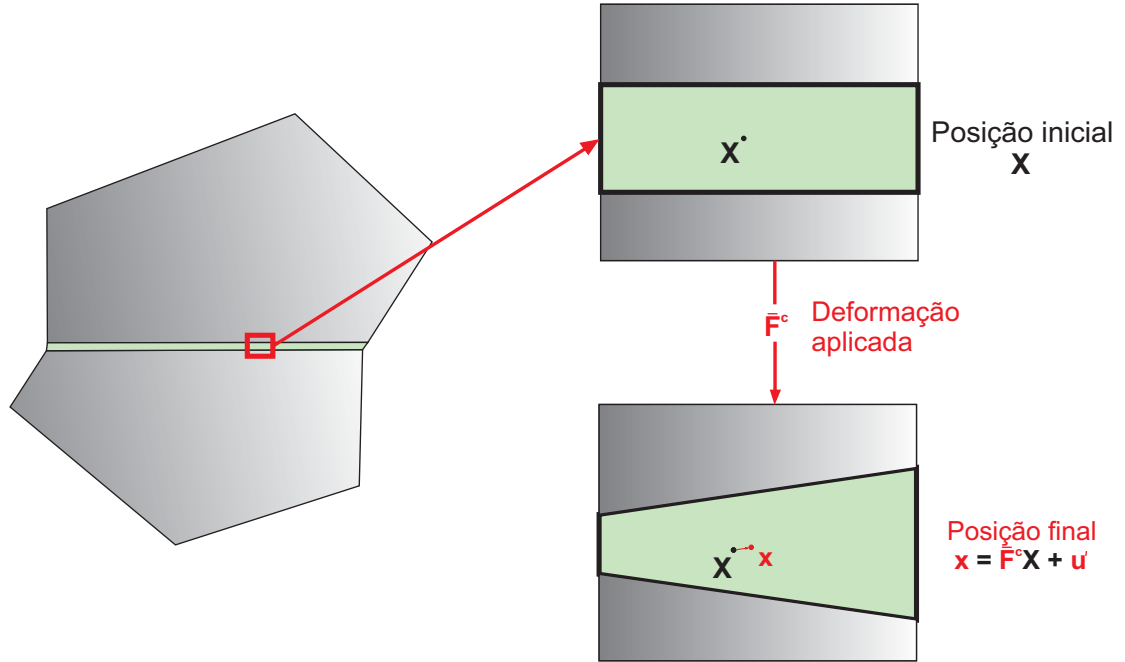


Figura 5.9: Posição deformada de um ponto interior na zona coesiva.

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{F}}^c \mathbf{X} + \mathbf{u}' \quad (5.12)$$

onde  $\bar{\mathbf{F}}^c$  é o tensor constante homogeneizado de deformação que pode ser determinado pelos dados ao longo do contorno das zonas coesivas ou a resposta dos pontos da mesoescala, tem-se que o gradiente é expresso como

$$\bar{\mathbf{F}}^c = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} d\Omega \quad (5.13)$$

A equação 5.13 mostra o gradiente de deformação homogeneizado  $\bar{\mathbf{F}}^c$  a partir da taxa da variação da configuração deformada  $\mathbf{x}$  com a a posição inicial  $\mathbf{X}$ , substituindo a equação 5.11 na equação 5.13, tem-se

$$\bar{\mathbf{F}}^c = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}} \right) d\Omega \quad (5.14)$$

Aplicando o teorema da divergência

$$\bar{\mathbf{F}}^c = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}} \right) d\Omega = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial\Omega_0} \bar{\mathbf{x}} \otimes \mathbf{N} ds + \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial\Omega_0} \mathbf{u}' \otimes \mathbf{N} ds \quad (5.15)$$

onde  $\mathbf{N}$  é o vetor normal do contorno da zona coesiva e o símbolo  $\otimes$  é a representação do produto diade.

Os domínios da integração são mostrados na Figura 5.10, sendo  $\Omega$  o domínio na macroescala,  $\Omega_0$  o domínio na mesoescala e  $\partial\Omega_0$  o contorno na mesoescala, no caso deste trabalho o domínio dessa mesoescala é o mesmo domínio da zona coesiva. Pela condição mostrada na Figura 5.7, o contorno das zonas coesivas é o mesmo que o contorno do meio granular, no contorno de cada zona coesiva o campo de deslocamento de flutuação  $\mathbf{u}'$  desaparece, devido a que no meio granular a deformação foi assumida uniforme, então tem-se que  $\mathbf{u}' = 0, \forall \mathbf{X} \in \Omega_0$ , sendo  $\mathbf{X}$  os pontos da mesoescala, assumido para este trabalho, então a equação 5.16 mostra como o gradiente de deformação pode ser calculado com os dados da escala grossa  $\bar{\mathbf{x}}$  ou seja os valores de deslocamento ao longo do contorno das zonas coesivas  $\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}}, \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_0$ .

$$\bar{\mathbf{F}}^c = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial\Omega_0} \bar{\mathbf{x}} \otimes \mathbf{N} ds \quad (5.16)$$

A condição para o campo de deslocamento da escala fina foi imposta por Yvonnet and He' (2007), Miehe et al. (1999) e Li and Wang (2008), é expressa como

$$\int_{\partial\Omega_0} \mathbf{u}' \otimes \mathbf{N} dS = 0 \quad (5.17)$$

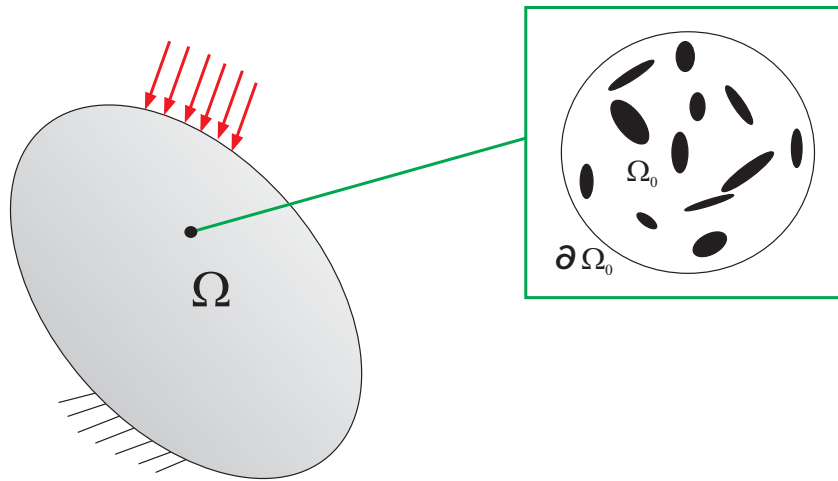


Figura 5.10: Domínios na macroescala e microescala.

Sendo  $\mathbf{N}$  é vetor normal saindo do contorno  $\Omega_0$ . Segundo a equação 5.17, tem-se que  $\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}}, \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_0$ . Com o campo de deslocamento pelo MEC é possível determinar o gradiente de deformação  $\bar{\mathbf{F}}^c$ , no caso de deformação plana tem-se

$$\bar{x}_1 = \bar{F}_{11}^c X_1 + \bar{F}_{12}^c X_2 \quad (5.18)$$

$$\bar{x}_2 = \bar{F}_{21}^c X_1 + \bar{F}_{22}^c X_2 \quad (5.19)$$

$$\bar{x}_3 = X_3 \quad (5.20)$$

onde  $\bar{F}_{ij}^c$  são constantes.

Considerando o caso de deformação plana, a determinação do gradiente de deformação efetivo  $\bar{\mathbf{F}}^c$  é proposta como o cálculo da deformação das duas linhas diagonais da zona coesiva como é mostrado na Figura 5.11.

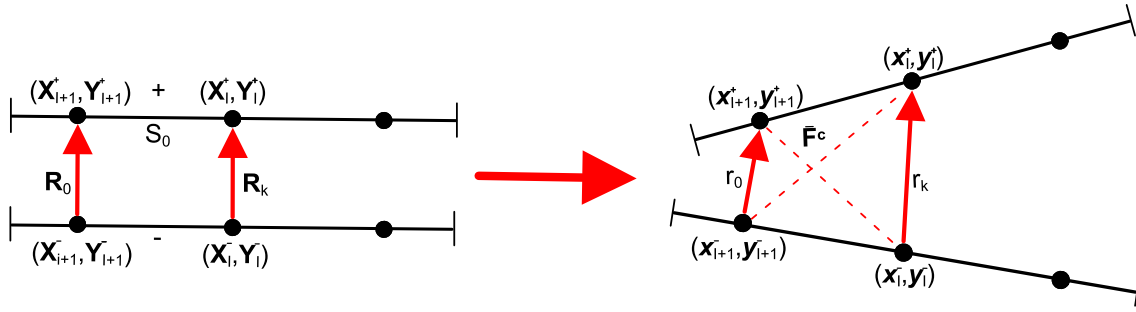


Figura 5.11: Gradiente de deformação efetivo na zona coesiva.

As linhas diagonais são modeladas pelas equações 5.21 e 5.22

$$\mathbf{x}_{I+1}^+ - \mathbf{x}_I^- = \bar{\mathbf{F}}^c \cdot (\mathbf{X}_{I+1}^+ - \mathbf{X}_I^-) \quad (5.21)$$

$$\mathbf{x}_I^+ - \mathbf{x}_{I+1}^- = \bar{\mathbf{F}}^c \cdot (\mathbf{X}_I^+ - \mathbf{X}_{I+1}^-) \quad (5.22)$$

Expandindo e simplificando a equação 5.21, tem-se

$$x_{I+1}^+ - x_I^- = \bar{F}_{11}^c (X_{I+1}^+ - X_I^-) + \bar{F}_{12}^c (Y_{I+1}^+ - Y_I^-) \quad (5.23)$$

$$y_{I+1}^+ - y_I^- = \bar{F}_{21}^c (X_{I+1}^+ - X_I^-) + \bar{F}_{22}^c (Y_{I+1}^+ - Y_I^-) \quad (5.24)$$

Para a equação 5.21,tem-se

$$x_I^+ - x_{I+1}^- = \bar{F}_{11}^c (X_I^+ - X_{I+1}^-) + \bar{F}_{12}^c (Y_I^+ - Y_{I+1}^-) \quad (5.25)$$

$$y_I^+ - y_{I+1}^- = \bar{F}_{21}^c (X_I^+ - X_{I+1}^-) + \bar{F}_{22}^c (Y_I^+ - Y_{I+1}^-) \quad (5.26)$$

Solucionando o sistema entre as equações 5.23 e 5.25 e o segundo sistema as equações 5.24 e 5.26, pode-se finalmente encontrar as componentes do gradiente de deformação efetiva na zona coesiva dado pela equação 5.27.

$$\begin{bmatrix} \bar{F}_{11}^c \\ \bar{F}_{12}^c \\ \bar{F}_{21}^c \\ \bar{F}_{22}^c \end{bmatrix} = \frac{1}{bc - ad} \begin{bmatrix} -d & 0 & b & 0 \\ c & 0 & -a & 0 \\ 0 & -d & 0 & b \\ 0 & c & 0 & -a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{I+1}^+ - x_I^- \\ y_{I+1}^+ - y_I^- \\ x_I^+ - x_{I+1}^- \\ y_I^+ - y_{I+1}^- \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

onde  $a = X_{I+1}^+ - X_I^-$ ,  $b = Y_{I+1}^+ - Y_I^-$ ,  $c = X_I^+ - X_{I+1}^-$  e  $d = Y_I^+ - Y_{I+1}^-$ . O gradiente de deformação efetivo só depende das coordenadas de referência  $\mathbf{X}$  e das coordenadas dos nós deslocados  $\mathbf{x}$ . Este gradiente foi obtido de forma similar ao encontrado em (ZENG AND LI, 2012) e (HE AND LI, 2012).

A técnica de homogeneização de Hill-Mandel, (HILL, 1971) e (LI AND WANG, 2008), é utilizada em uma versão multiescala na equação 5.13 para demonstrar que o gradiente de deformação médio na zona coesiva é exatamente o mesmo  $\bar{\mathbf{F}}^c$ , como é mostrado na equação 5.16, ou seja

$$\langle \mathbf{F} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\mathbf{F}}^c \quad (5.28)$$

onde  $\langle \rangle$  indica que a propriedade é homogeneizada e  $\bar{\mathbf{F}}^c$  pode ser usado como o gradiente de deformação da escala grossa. A modelagem das zonas coesivas foi proposta compatível com o meio granular que contém o campo de deformações uniforme, então o campo de deformação da escala grossa das zonas coesivas pode ser representada como função das coordenadas da configuração de referência e a configuração deformada, assim tem-se

$$\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\mathbf{F}}^c := \left. \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} \right|_{\Omega} \quad (5.29)$$

onde o símbolo  $:=$  expressa que  $\bar{\mathbf{F}}^c$  define-se como outro nome para  $\left. \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} \right|_{\Omega}$ .



### 5.3 Regra de Cauchy-Born no Campo Efetivo

A regra de Cauchy-Born (ERICKSEN, 1983), é aplicada na formulação da MMZC para reduzir o custo e complexidade computacional no cálculo da energia do potencial atômico. A regra assume que se a deformação no meio granular é uniforme, então o gradiente de deformação  $\bar{\mathbf{F}}$  é constante. Se o gradiente de deformação é um tensor constante, então é possível mapear um vetor deformado  $\mathbf{r}_i$  de uma célula unitária ou estrutura atômica de lattice, a qual é descrita na configuração de referência pelo vetor  $\mathbf{R}_i$ , a equação 5.30 descreve este processo.

$$\mathbf{r}_i = \bar{\mathbf{F}}\mathbf{R}_i \quad (5.30)$$

onde  $i = 1, 2, \dots, n_c$  e  $n_c$  é o número de ligações na célula unitária a qual neste trabalho está na escala picométrica utilizando os dados dos raios atômicos segundo o material.

Aplicando a regra de Cauchy-Born pode-se determinar a deformação que terão as ligações atômicas, Figura 5.12.

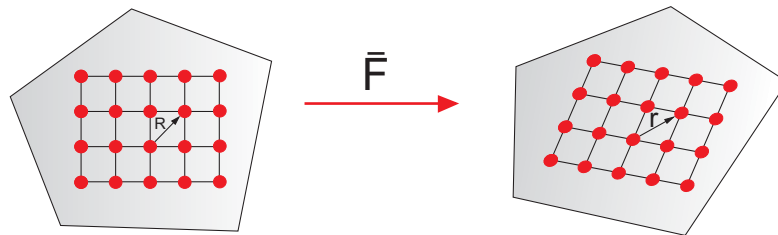


Figura 5.12: Regra de Cauchy-Born.

Os dois tipos de estrutura ou célula atômica usadas são a hc e cfc, Figura 5.13.

O vetor  $\mathbf{r}_i$  é a distância entre o átomo do centro e um dos átomos nos vértices da célula unitária. Considerando só a interação atômica entre os átomos mais próximos e assumindo uma distância atômica de equilíbrio  $a$  na Figura 5.13, os seis vetores que representam as ligações atômicas no caso da estrutura hc são os seguintes

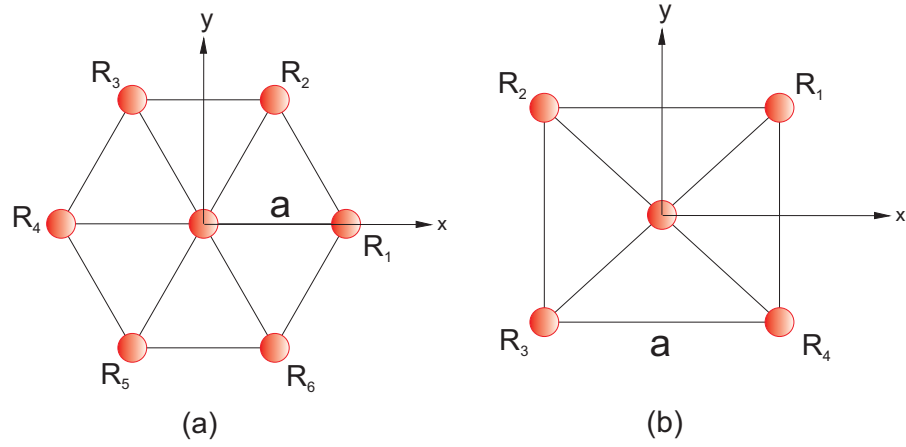


Figura 5.13: Células unitárias: (a) hc e (b) cfc.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_1 &= a(1,0) \\
 \mathbf{R}_2 &= a(\cos(\pi/3), \sin(\pi/3)) \\
 \mathbf{R}_3 &= a(\cos(2\pi/3), \sin(2\pi/3)) \\
 \mathbf{R}_4 &= a(-1,0) \\
 \mathbf{R}_5 &= a(\cos(-2\pi/3), \sin(-2\pi/3)) \\
 \mathbf{R}_6 &= a(\cos(-\pi/3), \sin(-\pi/3))
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

Para uma estrutura cfc, tem-se

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_1 &= a(\cos(\pi/4), \sin(\pi/4)) \\
 \mathbf{R}_2 &= a(\cos(3\pi/4), \sin(3\pi/4)) \\
 \mathbf{R}_3 &= a(\cos(-3\pi/4), \sin(-3\pi/4)) \\
 \mathbf{R}_4 &= a(\cos(-\pi/4), \sin(-\pi/4))
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

O comprimento dos vetores deformados são funções do gradiente de deformação, ou seja,  $r_i = |\mathbf{r}_i| = |\bar{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{R}_i| = r(\bar{\mathbf{F}})$ .

Pelo postulado assumido neste trabalho, a regra de Cauchy-Born não pode ser aplicada para calcular o tensor de tensão no interior da zona coesiva, devido que a deformação é altamente não

uniforme. Considerando um ponto arbitrário no interior da zona coesiva, tem-se que as coordenadas da configuração deformada são representadas pela equação 5.12, então o primeiro tensor de Piola Kirchhoff nesse ponto é avaliado por

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}} = \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c} + \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c \partial \bar{\mathbf{F}}^c} : \left( \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}} \right) + O \left( \left| \frac{\partial^2 \mathbf{u}'}{\partial^2 \mathbf{X}} \right| \right) \quad (5.33)$$

onde o símbolo  $:$  representa o produto escalar entre tensores e  $W$  é a densidade de energia de deformação, o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff médio da zona coesiva pode ser aproximado por

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \mathbf{P} d\Omega \approx \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c} + \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c \partial \bar{\mathbf{F}}^c} \left( \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}} d\Omega \right) = \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c} \quad (5.34)$$

Devido à condição da equação 5.17.

Pela condição de Hill-Mandel tem-se

$$\mathbf{P}^c : \delta \bar{\mathbf{F}}^c = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \delta \bar{\mathbf{F}} d\Omega = \left( \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \mathbf{P} d\Omega \right) : \delta \bar{\mathbf{F}}^c + \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \left( \mathbf{P} : \frac{\partial \delta \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}} \right) d\Omega \quad (5.35)$$

sendo  $\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}_c + \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{X}}$ , assim

$$\mathbf{P}^c : \delta \bar{\mathbf{F}}^c = \bar{\mathbf{P}} : \delta \bar{\mathbf{F}}^c + \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial \Omega_0} (\mathbf{P} \mathbf{N}) \cdot \delta \mathbf{u}' dS - \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} (\nabla_x \mathbf{P}) \cdot \delta \mathbf{u}' d\Omega \quad (5.36)$$

Finalmente na equação 5.36 o termo  $(\nabla_x \cdot \mathbf{P})$  é igual a zero, então tem-se

$$\mathbf{P}^c : \delta \bar{\mathbf{F}}^c = \bar{\mathbf{P}} : \delta \bar{\mathbf{F}}^c + \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial \Omega_0} (\mathbf{P}\mathbf{N}) \cdot \delta \mathbf{u}' dS \quad (5.37)$$

Se  $\mathbf{u}' = 0, \forall \mathbf{X} \in \partial \Omega_0$ , tem-se

$$\mathbf{P}^c : \delta \bar{\mathbf{F}}^c = \bar{\mathbf{P}} : \delta \bar{\mathbf{F}}^c \quad (5.38)$$

$$\bar{\mathbf{P}} = \mathbf{P}^c = \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c} \quad (5.39)$$

Finalmente estão descritas as propriedades efetivas homogeneizadas partindo das propriedades de um ponto no interior das zonas coesivas, Figura 5.14.

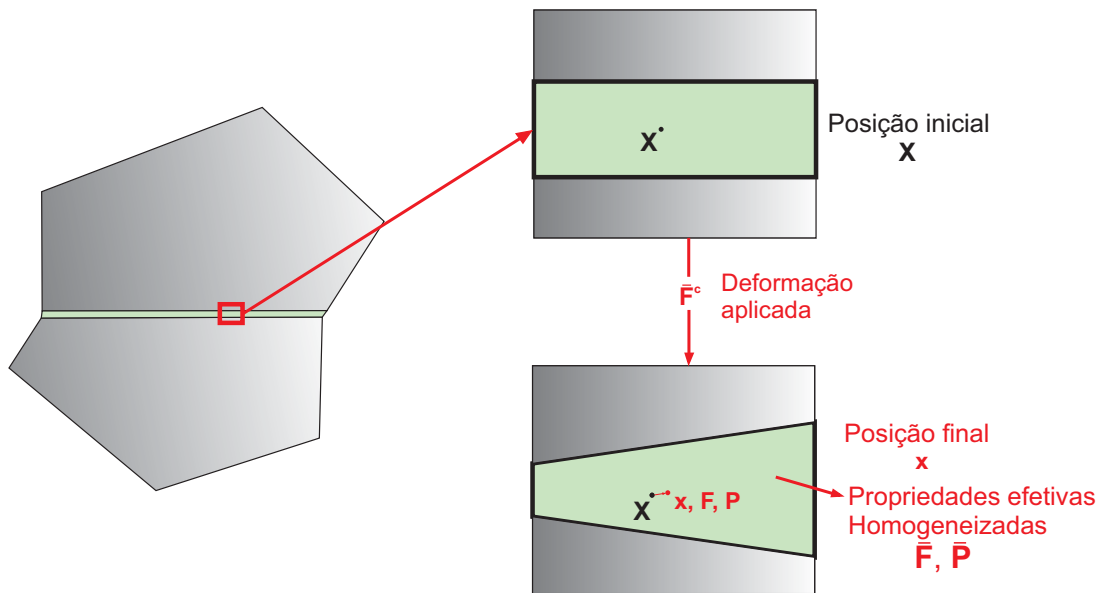


Figura 5.14: Propriedades homogeneizadas na zona coesiva.

Pelo uso das técnicas de homogeneização e o emprego das identidades de Green, pode-se observar que na formulação presente neste trabalho as tensões e deformações presentes na escala fina flutuante não serão utilizadas nesta análise, já que as integrais que contêm os termos  $\mathbf{u}'$  desa-

parecerão, o método é baseado no tensor de Piola-Kirchhoff calculado desde a interação atômica das células unitárias deformadas.

O procedimento anterior foi desenvolvido em (LI AND WANG, 2008), agora é demonstrado que pode-se aplicar a regra de Cauchy-Born para encontrar o tensor de tensão efetivo na zona coesiva, então a deformação média das estruturas atômicas na zona coesiva, Figura 5.13, será calculada com a equação 5.40.

$$\mathbf{r}_i = \bar{\mathbf{F}}^c \cdot \mathbf{R}_i, i = 1, 2, \dots, n_c \quad (5.40)$$

A Figura 5.15 ilustra o processo da deformação homogeneizada na zona coesiva similar à deformação anteriormetne definida no meio granular

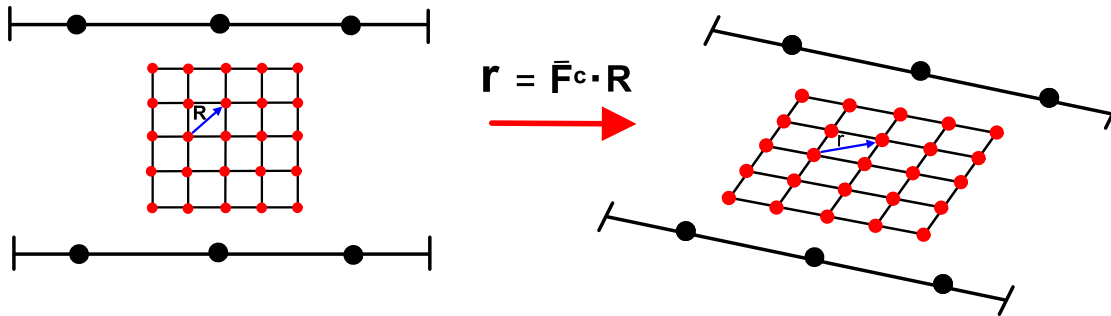


Figura 5.15: Comportamento homogeneizado na zona coesiva.

O primeiro tensor médio de Piola-Kirchhoff em cada zona coesiva é dado em (ZENG AND LI, 2010) e (LI AND WANG, 2008) como

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{\partial W}{\partial \bar{\mathbf{F}}^c} = \frac{1}{\Omega_0^c} \sum_{i=1}^{n_c} \frac{\partial \phi_{\text{int}}}{\partial \bar{\mathbf{r}}_i} \frac{\mathbf{r}_i \otimes \mathbf{R}_i}{\bar{\mathbf{r}}_i} \quad (5.41)$$

sendo  $\Omega_0^c$  o volume da zona coesiva.

## 5.4 Lei Coesiva do Material

Depois do cálculo do tensor de tensão no interior da zona coesiva, as forças de tração coesivas ao longo do contorno da zona coesiva ou ao longo das superfícies de cada um dos grãos são determinadas com os mesmos elementos de contorno adjacentes com os vetores normais opostos, usando o teorema de Cauchy da mesma forma que foi utilizado em (MIEHE, 2003) e (ZENG AND LI, 2012), mostrado na equação 5.42.

$$\mathbf{T}^{coe} = \mathbf{P}^c (\bar{\mathbf{F}}^c) \cdot \mathbf{N} \quad (5.42)$$

onde  $\mathbf{N}$  é o vetor normal dos elementos de contorno adjacentes e opostos. Conhecendo as forças coesivas ao longo da interface facilmente pode-se encontrar uma lei coesiva para o material na mesoescala, na Figura 5.16 mostra-se a variação das forças coesiva normal e tangencial em função do deslocamento de abertura (normal) e do deslocamento horizontal (tangencial) respectivamente.

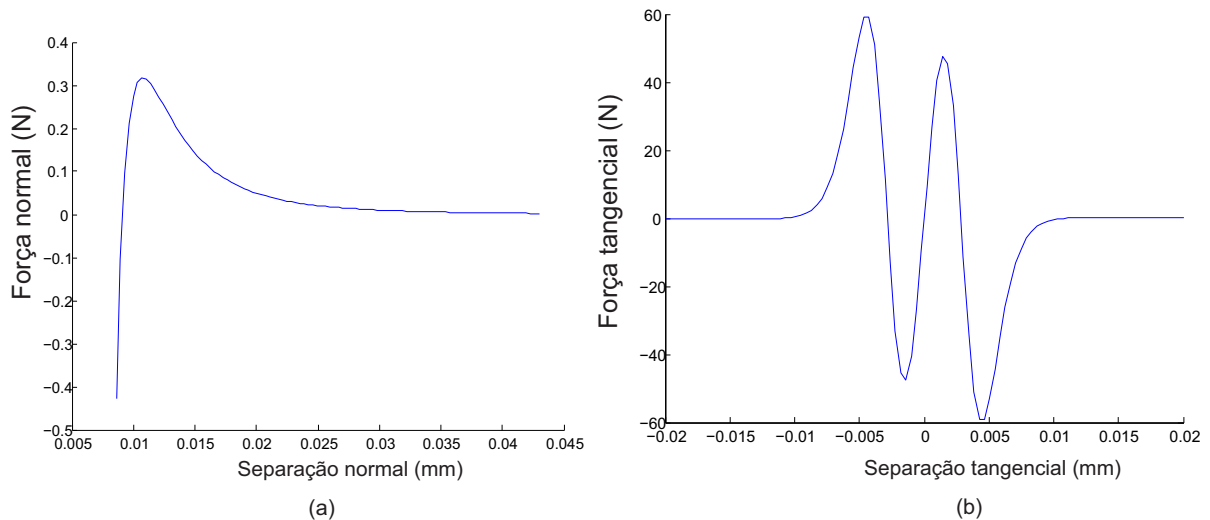


Figura 5.16: Lei coesiva: (a) Força normal x separação normal (Modo I) e (b) Força tangencial x separação tangencial (Modo II).

A vantagem da MMZC é que facilmente são achadas as forças coesivas para a falha em modo I e modo II com a informação da resposta do MEC, as curvas apresentadas na Figura 5.16 devem ser construídas para cada material dependendo dos parâmetros do potencial  $\sigma^{L,J}$  e  $\varepsilon^{L,J}$  e mostram semelhança com as curvas das leis coesivas convencionais utilizadas nos métodos coesivos

convencionais.

O comportamento das forças coesivas mostradas é dependente da resposta na interface onde elas são geradas, no exemplo ilustrativo da Figura 5.16 cada uma das curvas é obtida a partir de uma resposta com deslocamentos totalmente em abertura (Modo I) e com deslocamentos totalmente cisalhantes (Modo II), quer dizer que em uma simulação a forma das curvas vai variar segundo a interface onde ela vai ser gerada, no capítulo 7 são apresentadas leis coesivas para dois materiais onde em cada um deles a força coesiva tangencial resultou ser muito mais elevada do que a normal nessa interface em particular onde foram achadas.

A variação da força tangencial é devido aos deslocamentos aplicados na zona coesiva mostrados na Figura 5.17, onde observa-se que é aplicado desde um valor mínimo negativo no sistema de coordenadas local até o máximo positivo, a variação da força normal é mais simples já que só é aplicado um deslocamento positivo de abertura, Figura 5.17.

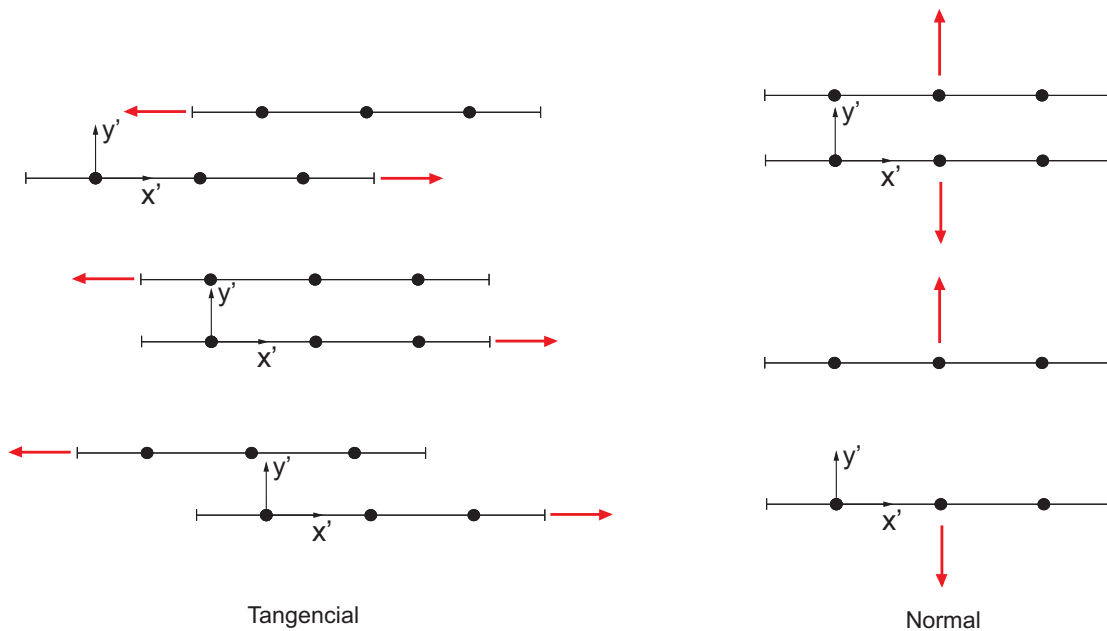


Figura 5.17: Deslocamentos aplicados para ilustrar as leis coesivas, (Modo I) e (Modo II).

## 6 Implementação Computacional

Neste capítulo são apresentadas as implementações desenvolvidas na geração da estrutura policristalina artificial, a malha utilizando elementos de contorno quadráticos descontínuos, a inclusão das zonas coesivas na estrutura e também são mostrados os fluxogramas dos códigos do MECRD e da MMZC.

### 6.1 Gerador da estrutura policristalina artificial

Neste trabalho o gerador da malha é baseado no amplamente usado na literatura na modelagem de materiais policristalinos, o diagrama de Voronoi (OKABE ET AL., 2000), é um conjunto de pontos distribuídos de forma aleatória em um espaço contínuo, todas as possíveis posições do espaço são associadas com membros fechados para cada um dos pontos. O resultado é um espaço particionado em um conjunto de polígonos cada um com forma aleatória. Considerando os pontos no plano  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\} \subset \mathbf{R}^2$  delimitados por um espaço  $\Omega$  determinado e criados por um gerador de pontos aleatórios de uma distribuição uniforme,  $n$  representa um número finito de pontos no espaço, onde  $2 < n < \infty$  e  $\mathbf{x}^i \neq \mathbf{x}^j$  para  $i \neq j$ ,  $i, j \in I_n$  sendo  $I_n = \{1, \dots, n\}$  um conjunto de números inteiros. O diagrama de Voronoi no espaço  $\Omega$  é dado pela seguinte expressão

$$V \cap \Omega = \{V_{(p_1)} \cap \Omega, V_{(p_2)} \cap \Omega, \dots, V_{(p_n)} \cap \Omega\} \quad (6.1)$$

onde  $V_{(p_i)}$  denota cada polígono convexo que representa um grão, Figura 6.1. Cada polígono contém exatamente um ponto gerado  $p_i$ , cada ponto de um determinado polígono está mais próximo do seu ponto de geração do que qualquer outro ponto, portanto

$$V_{(p_i)} = \{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^i\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^j\|\} \quad (6.2)$$

onde  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{x}^i$  são o ponto de geração e o ponto que pertence ao polígono  $p_i$ , respectivamente, e  $\mathbf{x}^j$  é o ponto que pertence a um outro polígono  $p_j$ .



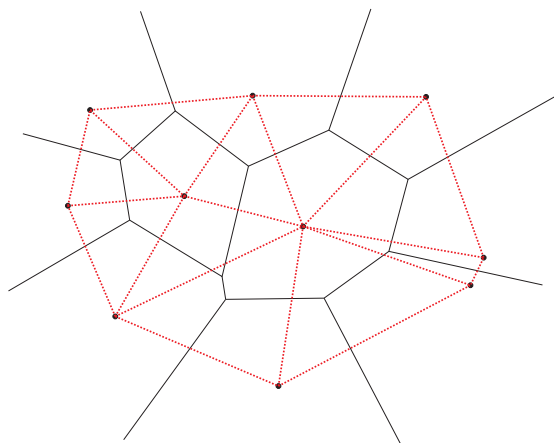


Figura 6.1: Diagrama de Voronoi plano

Tipos diferentes de gerador da estrutura para materiais policristalinos são apresentados em (SFANTOS AND ALIABADI, 2007a), o gerador quasi-random e o gerador pseudo-random, são comparados pelos autores concluindo que o gerador quasi-random proporciona uma melhor morfologia granular do material nas simulações. Na Figura 6.3 mostra-se o gerador da malha similar ao descrito em (SFANTOS AND ALIABADI, 2007a), desenvolvido neste trabalho no software Matlab. A estrutura é gerada tem área de  $1 \text{ mm}^2$ .

O algoritmo gera uma malha de pontos quadriculada como é mostrado na Figura 6.2, em uma iteração o gerador identifica o ponto de Voronoi mais próximo a cada ponto da malha quadriculada, assim como mostrado na Figura 6.2 na zona fechada de contorno verde, para determinar a posição do novo ponto de Voronoi deve-se calcular a média das coordenadas em  $x$  e  $y$  dos pontos da malha quadriculada no interior do contorno verde, o resultado serão as coordenadas do novo ponto de voronoi e fazendo isso para cada um dos grão finalmente o ultimo passo da iteração é gerar de novo o diagrama de Voronoi, mais detalhe na Figura 6.2.

Sendo definido um número de iterações a estrutura é mais uniforme conforme as iterações aumentam, a Figura 6.3 apresenta o caso de uma malha de 121 grãos para 25 iterações, se o número de iterações for muito elevado a estrutura final permanecerá constante após de um número limite de iterações quase como uma malha hexagonal. Em uma análise multiescala considerando a macroescala, em cada ponto do corpo na macroescala a mesoescala geralda a partir do diagrama de Voronoi sera sempre diferente para cada ponto, a geração da estrutura policristalina é aleatória em

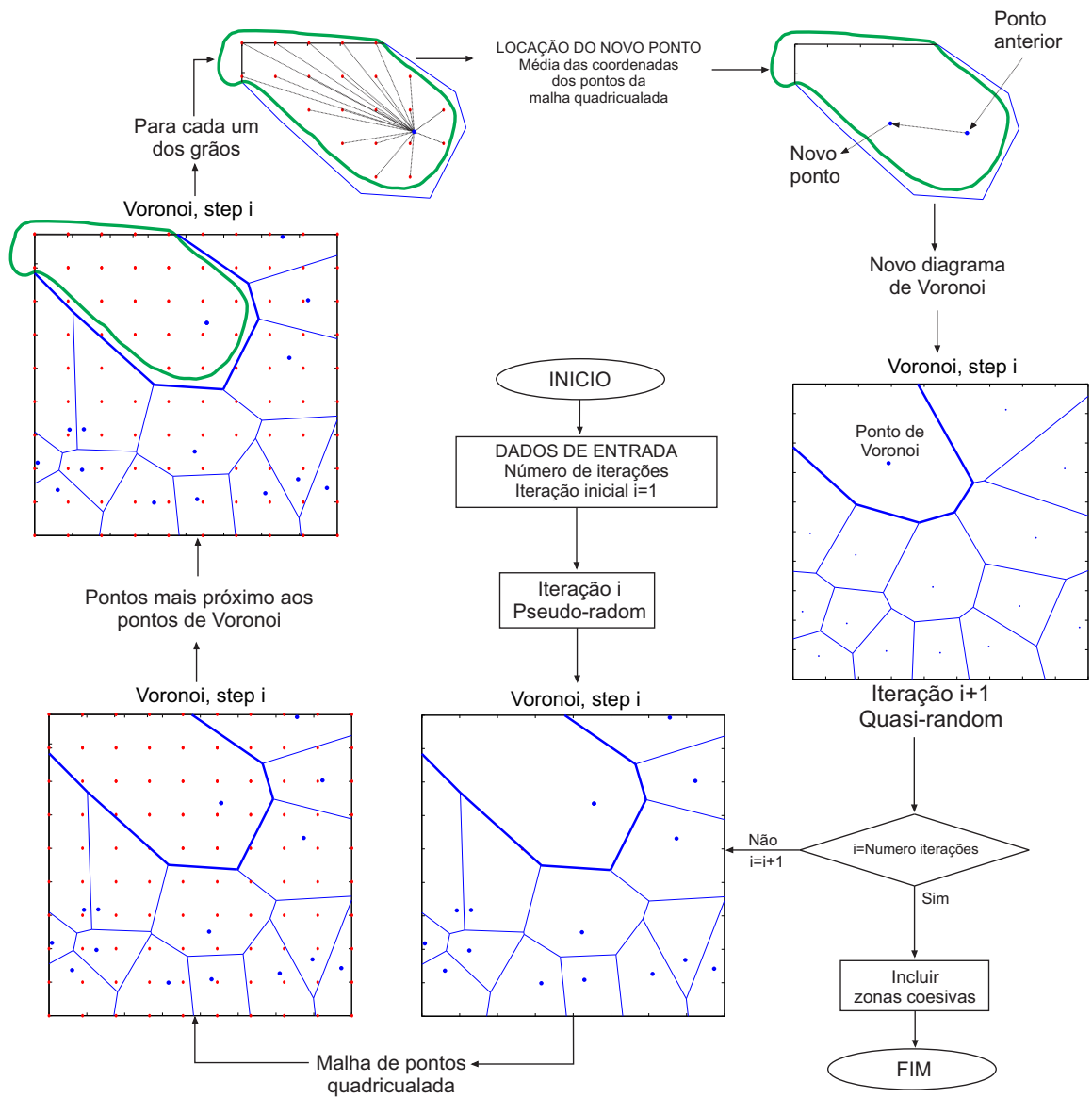


Figura 6.2: Fluxograma do algoritmo do gerador da estrutura policristalina artificial

conclusão neste trabalho a falha não será periódica.

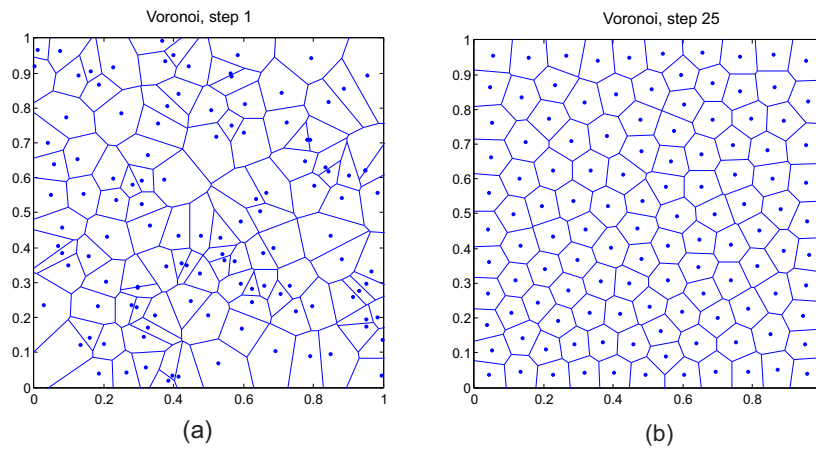


Figura 6.3: Microestrutura artificial: (a) pseudo-random e (b) quasi-random.

## 6.2 Zonas coesivas e modelagem da escala atômica

A análise multiescala exige incluir as zonas coesivas nas interfaces entre os grãos, então as zonas coesivas serão modeladas como regiões adicionais, A Figura 6.4 observa-se as modificações feitas na estrutura para os dois tipos de grãos já definidos, de contorno e interiores. A modificação é feita com o propósito de reproduzir o problema físico tratado em trabalhos anteriores desenvolvidos com elementos finitos.

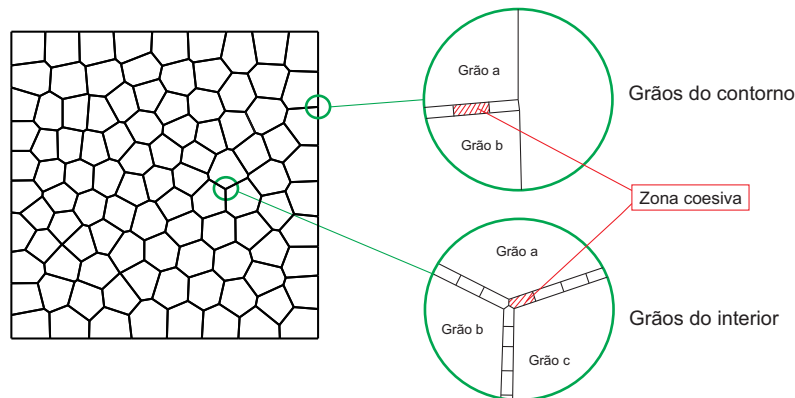


Figura 6.4: Modificação da microestrutura artificial para incluir as zonas coesivas.

As zonas coesivas são construídas como zonas de volume finito de espessura  $R_0$ . Tem-se

que  $S_0^\pm$  no caso de elementos de contorno é a distancia entre dois nós, neste trabalho considera-se  $R_0 \ll S_0$ , Figura 6.5. Quando o valor de  $R_0$  for muito pequeno devido a que os nós da zona coesiva estariam uns acima dos outros gerando singularidades no método numérico e nos cálculos. Neste trabalho segundo os testes realizados define-se que  $R_0 = 10^{-1} |S_0^\pm|$ . Um limite máximo de  $R_0$  definido entre 4 ou 5 vezes o tamanho da estrutura cristalina é definido em (LI AND WANG, 2008).

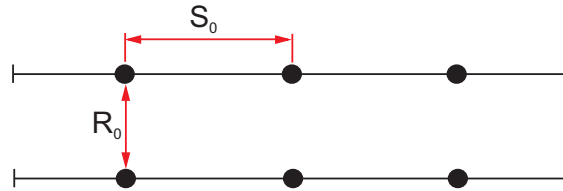


Figura 6.5: Tamanho da zona coesiva.

A malha do problema físico discretizado com elementos de contorno quadráticos descontínuos incluindo as zonas coesivas é mostrado na Figura 6.6, na resposta das simulações não é considerada a deformação no ponto central das intersecções entre interfaces.

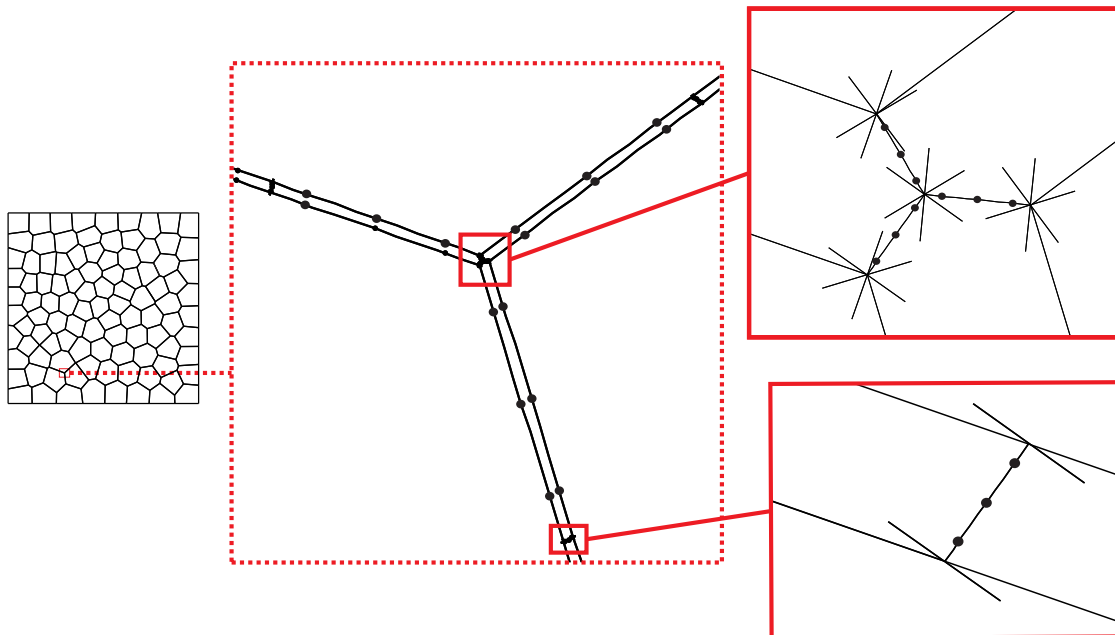


Figura 6.6: Malha do problema.

A lei coesiva desacoplada (Modo I) e (Modo I) é definida para cada material usando o esquema mostrado na Figura 6.7, sendo preciso trabalhar no sistema de coordenadas locais  $(x', y')$

para obter a mesma curva nas configurações presentes na estrutura.

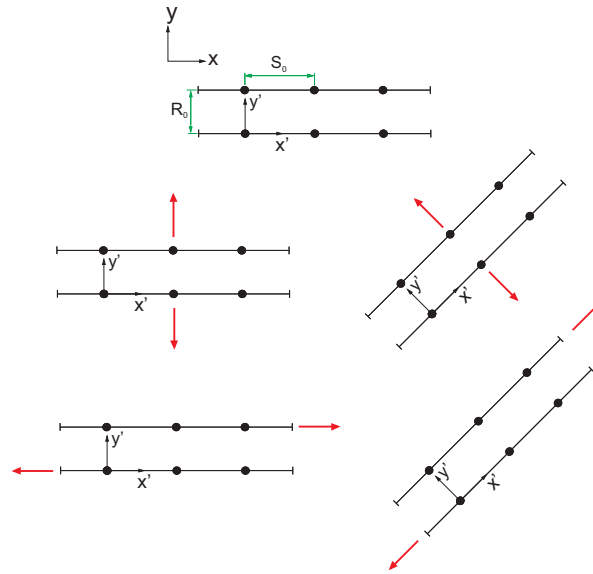


Figura 6.7: Configurações para determinar a lei coesiva do material.

onde  $R_0 = 0.005$ ,  $S_0 = 0.05$  e o ângulo de rotação de  $45^\circ$ , assim de modo ilustrativo é obtida a lei coesiva em cada material.

O número de elementos quadráticos descontínuos para cada segmento dos grãos é proporcional ao comprimento do segmento, assim seguindo o procedimento usado por Sfantos and Aliabadi (2007a), o comprimento de um segmento do grão  $L^f$  é comparado com a média dos comprimentos da estrutura completa  $\bar{L}^f$ , tem-se

$$N^f = \bar{n}^f \frac{L^f}{\bar{L}^f} \quad (6.3)$$

onde  $N^f$  é o número inteiro mais próximo ao número real da parte direita da equação 6.3,  $\bar{n}^f$  é um parâmetro de entrada inteiro. O número de elementos para cada grão dependerá exclusivamente do tamanho da interface ou segmento do grão, neste trabalho definiu-se  $\bar{n}^f = 8$ , gerando uma discretização fina que permite melhorar o modelamento das zonas coesivas com o tamanho especificado na seção 7.2.

A análise da escala atômica é feita após de ser conhecida a deformação das zonas coesivas,

na Figura 6.8 mostra-se como é considerada a deformação da célula unitária no interior da zona coesiva, simplesmente com o valor do gradiente de deformação  $\bar{F}^c$  aplicado à célula unitária de referência até que as forças atômicas sejam zero, trabalhando no sistema de coordenadas local  $(x,y)$  no primeiro nó como é mostrado na Figura 6.8 são utilizadas duas células unitárias para cada zona coesiva.

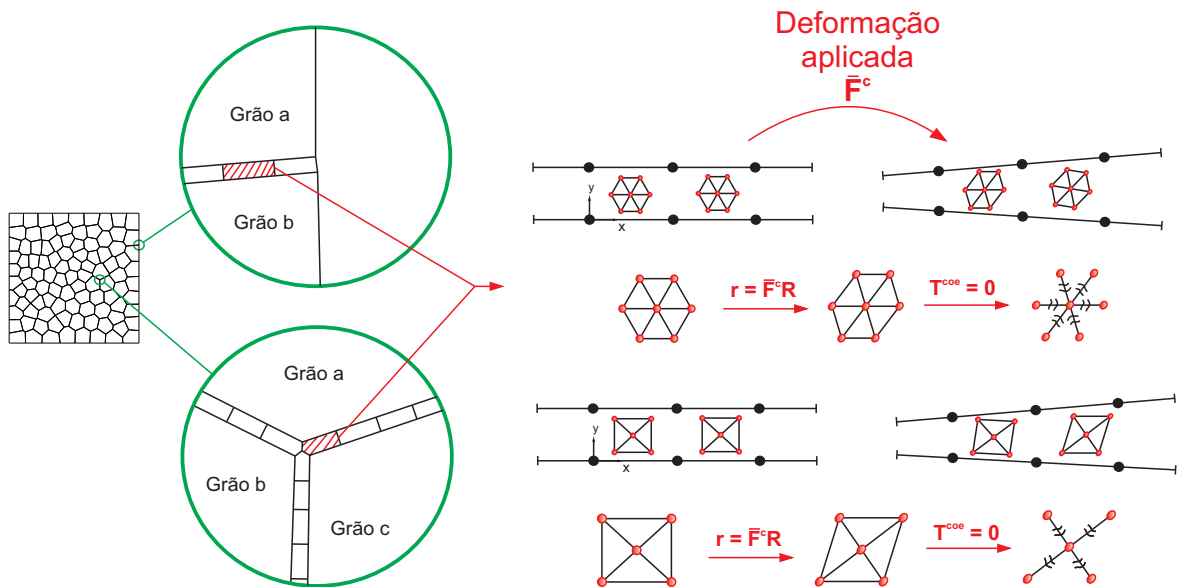


Figura 6.8: Análise da escala atômica.

### 6.3 Código computacional multiescala

O código computacional geral desenvolvido, é ilustrado pelo fluxograma da Figura 6.9, está dividido basicamente em dados de entrada, gerador da malha (pré-processamento), a resposta do campo de deslocamentos na mesoescala pelo MECRD, a análise das zonas coesivas (mesoescala para escala atômica), atualização da malha e as matrizes pertinentes, incrementos no carregamento e no tempo de simulação e finalmente o pós-processamento.

Assim, o programa multiescala começa pela entrada dos dados na mesoescala, parte forte do rendimento do programa encontra-se na aplicação do MECRD pelo tamanho final do sistema matricial após de aplicar a formulação por multi-regiões. Em cada uma das interfaces o programa faz a análise da escala atômica para saber quando a zona coesiva deve ser eliminada da malha e

assim obter a propagação da trinca.

O modelo na mesoescala é considerado linear, o programa encontra a resposta do campo dos deslocamentos a partir da malha de referência, quer dizer que não se atualizam as posições da malha de um passo de tempo para outro sempre será feito a partir da malha inicial, as atualizações da malha que são requeridas são somente quando uma zona coesiva é eliminada.

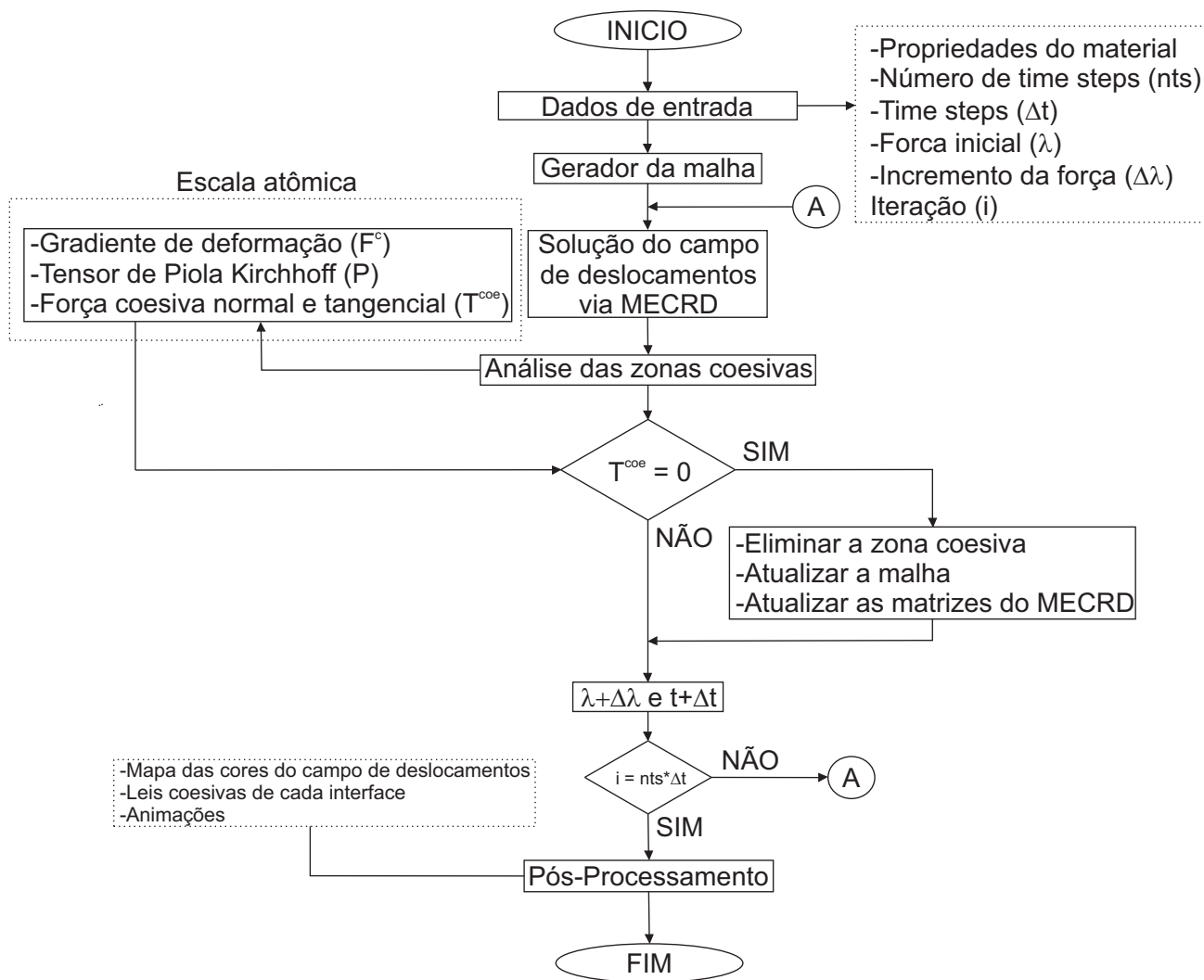


Figura 6.9: Fluxograma do programa computacional.

## 7 Resultados Numéricos

Neste capítulo apresenta-se a validação do MECRD considerando as forças de corpo trabalhando no domínio do tempo, comparando os resultados com um problema clássico da literatura. Este método foi aqui aplicado para a modelagem da falha intergranular em materiais policristalinos. A geração da malha é mostrada junto com as modificações pertinentes feitas para a adaptação da análise multiescala. Duas simulações da fratura dinâmica intergranular são desenvolvidas usando a MMZC, cada simulação com material e estrutura cristalina diferente mostrando o carácter aleatório da propagação para ambos casos de acordo com a lei coesiva para cada material.

### 7.1 Validação do Método dos Elementos de Contorno de Reciprocidade Dual

A validação do MECRD e a formulação por sub-regiões no domínio do tempo é baseada no problema tratado em (ALBUQUERQUE, 2001), que foi também analisado por Dominguez (1993). Usando as mesmas dimensões da geometria mas sem pontos internos, é feita uma adaptação com sub-regiões. Diferentes resultados são mostrados para os casos quase-isotrópico e anisotrópico.

#### 7.1.1 Tira infinita sob tração uniforme

Uma tira de comprimento infinito, Figura 7.1, carregada em um instante  $\tau_0 = 0$  s por uma tensão de tração  $\sigma_0 = 1$  Pa tipo degrau, Figura 7.2. Devido à simetria, pode ser modelada conforme o mostrado na Figura 7.1. Um estado plano de tensão é assumido. As propriedades são as seguintes: O módulo de elasticidade rigidez  $G_{12} = 4 \times 10^4$  Pa, coeficiente de Poisson  $\nu = 0,3333$  e densidade  $\rho = 1 \text{ Kg/m}^3$ , finalmente para os módulos de elasticidade tem-se 3 casos, material quase-isotrópico  $E_1 = 10.68 \times 10^4$  Pa e  $E_2 = 10.69 \times 10^4$  Pa, material anisotrópico  $R = E_2/E_1 = 0,5$  e  $R = E_2/E_1 = 2$ .

Comparações desses 3 casos são feitas com o problema resolvido em (ALBUQUERQUE, 2001), que usa um domínio com 12 elementos de contorno contínuos quadráticos e 24 nós internos com um passo de tempo de  $\Delta\tau = 6,9 \times 10^{-4}$ , na Figura 7.3, mostra-se o modelo de Albuquerque (2001) e a adaptação com sub-regiões deste trabalho.



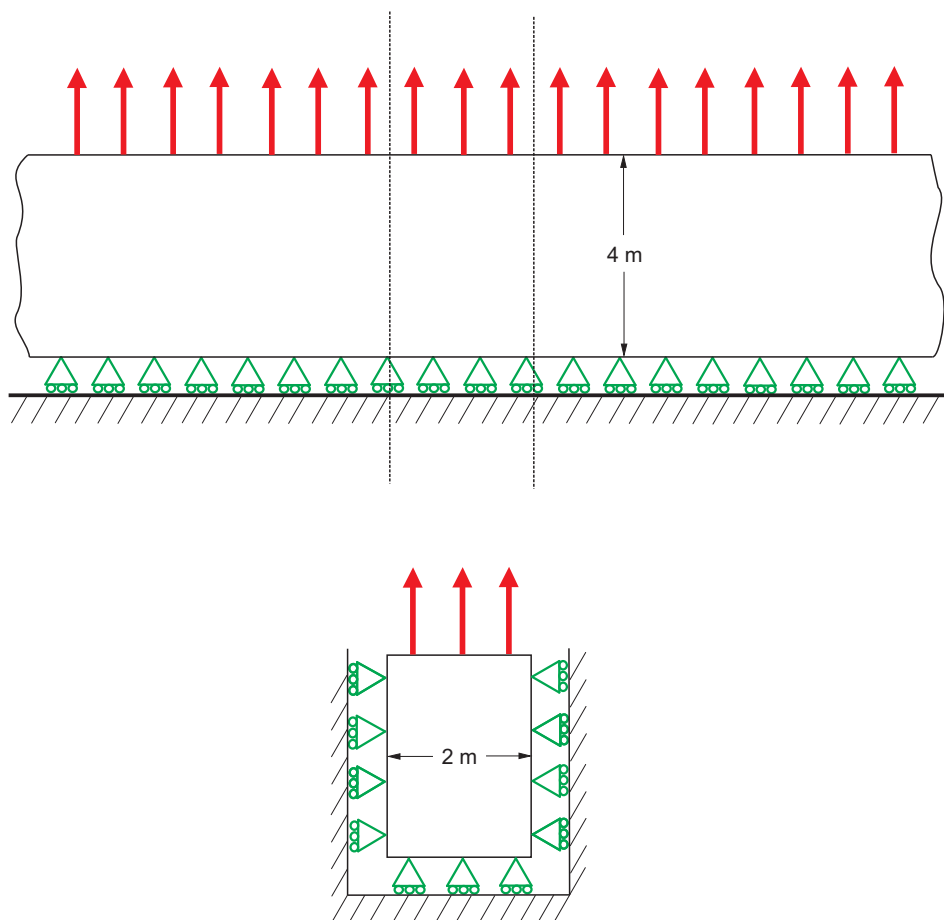


Figura 7.1: Tira infinita sob tração uniforme

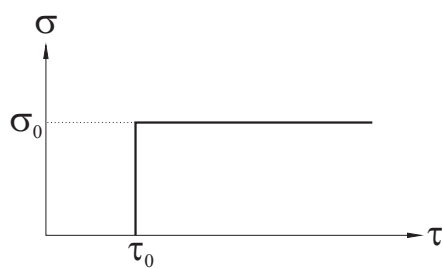


Figura 7.2: Carregamento tipo degrau

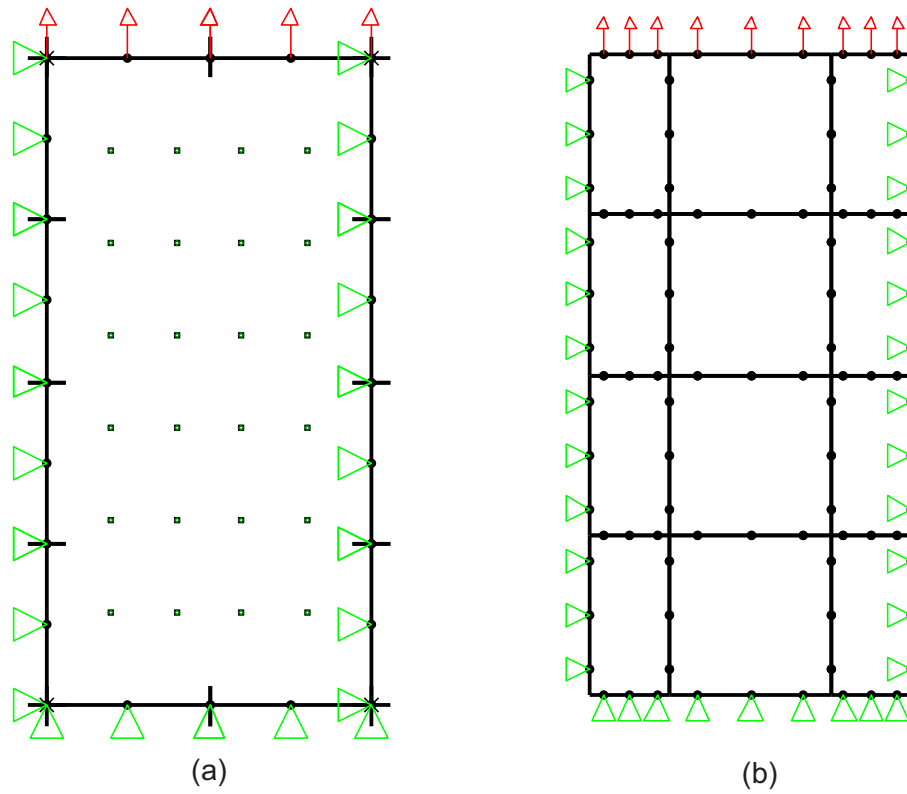


Figura 7.3: Discretização para parte da tira de comprimento infinito: (a) (ALBUQUERQUE, 2001), (b) Sub-regiões

Como proposta para validação do modelo, a Figura 7.4 mostra o resultado para o caso quase-isotrópico e Figura 7.5 para os casos anisotrópicos, onde pode-se observar a precisão dos resultados do deslocamento vertical do nó central da borda livre da tira.

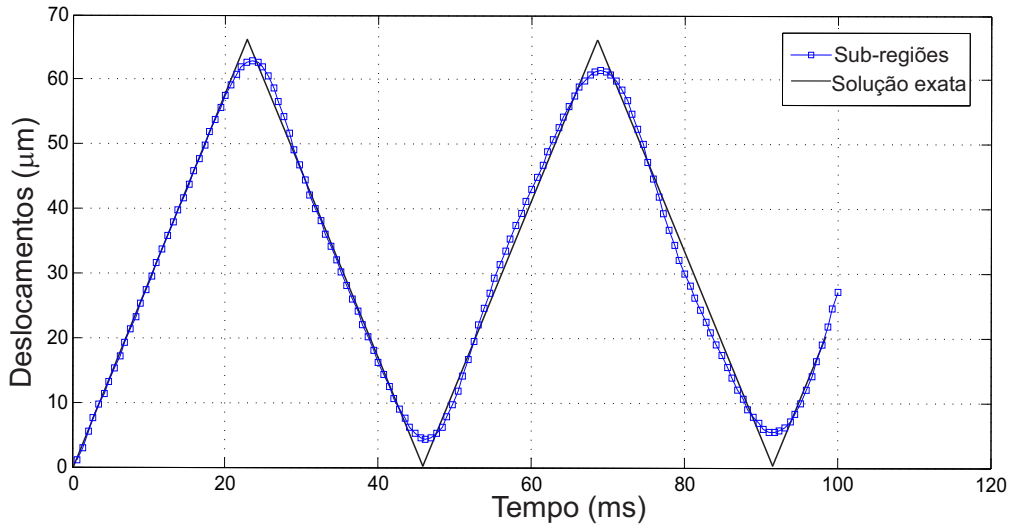


Figura 7.4: Deslocamento vertical no topo da tira do problema quase-isotrópico

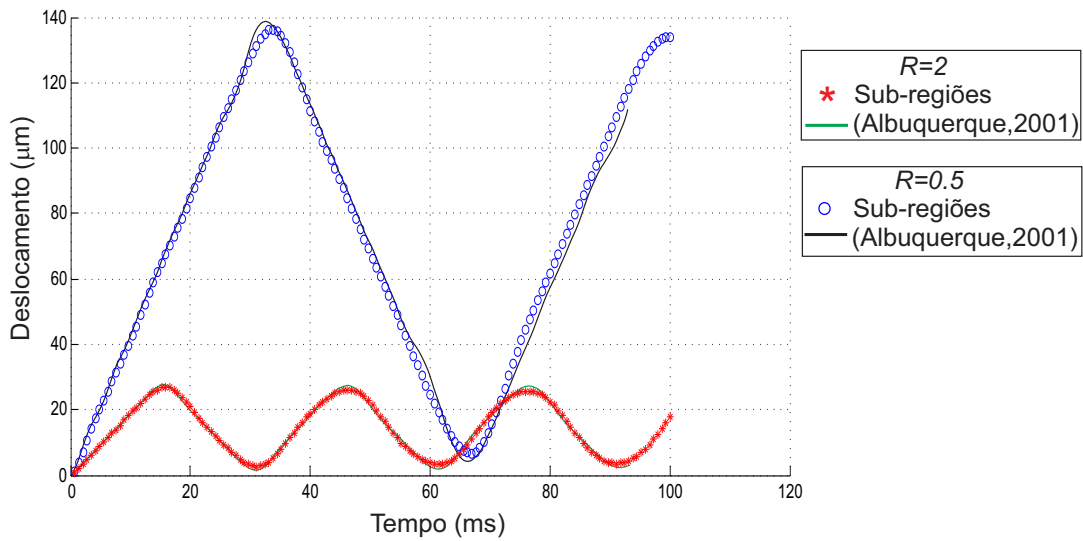


Figura 7.5: Deslocamento vertical no topo da tira para diferentes razões entre os módulos de elasticidade

Nas Figuras 7.4 e 7.5, pode-se concluir que ainda sem utilizar pontos internos na formulação deste trabalho, os nós no interior do domínio, Figura 7.3 (b), devido às regiões melhoram a precisão dos resultados.

## 7.2 Simulações de Fratura Frágil Intergranular

A MMZC será aplicada para simular a propagação de trincas na mesoescala, neste trabalho a análise é feita entre a mesoescala e a escala atômica, a macroescala não será considerada. São apresentadas quatro simulações, a primeira e a segunda para um material hc, o zinco, a terceira e a quarta para um material cfc o cobre, ou seja cada um dos materiais com dois tamanhos de estrutura. Por facilidade nas simulações, o material das zonas coesivas é o mesmo material anisotrópico onde as propriedades do material são definidas pela média do ângulo de rotação entre os dois grãos adjacentes nas interfaces, Figura 7.6.

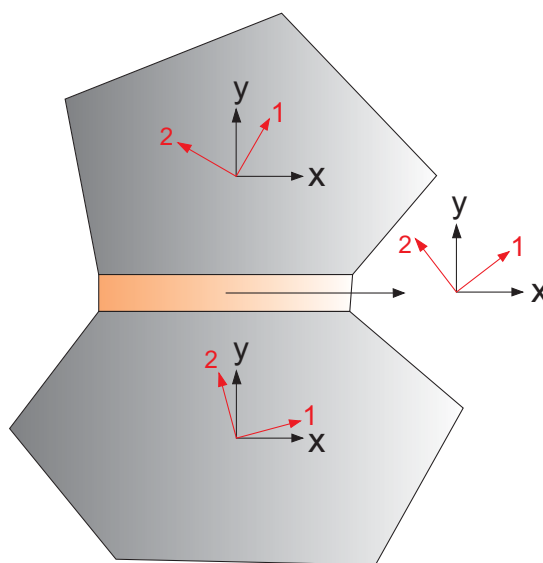


Figura 7.6: Rotação das propriedades do material entre os grãos e a zona coesiva.

Com o propósito de implementar a formulação apresentada, os testes deste trabalho é usada uma estrutura granular de dimensões (1 mm x 1 mm) com uma pré-trinca no lado esquerdo da estrutura suportando um carregamento de tração uniaxial no eixo Y, Figura 7.7.

O passo de tempo escolhido é  $\Delta t = 4\mu s$  e o carregamento imposto é tipo rampa mostrado na Figura 7.8, onde o valor da inclinação é 10 MN, assim para cada passo de tempo  $\Delta t$  corresponde um delta de força de tração  $\Delta F = 40$  N.

São geradas duas estruturas policristalinas uma de 50 grãos e a outra de 75 grãos, cada uma

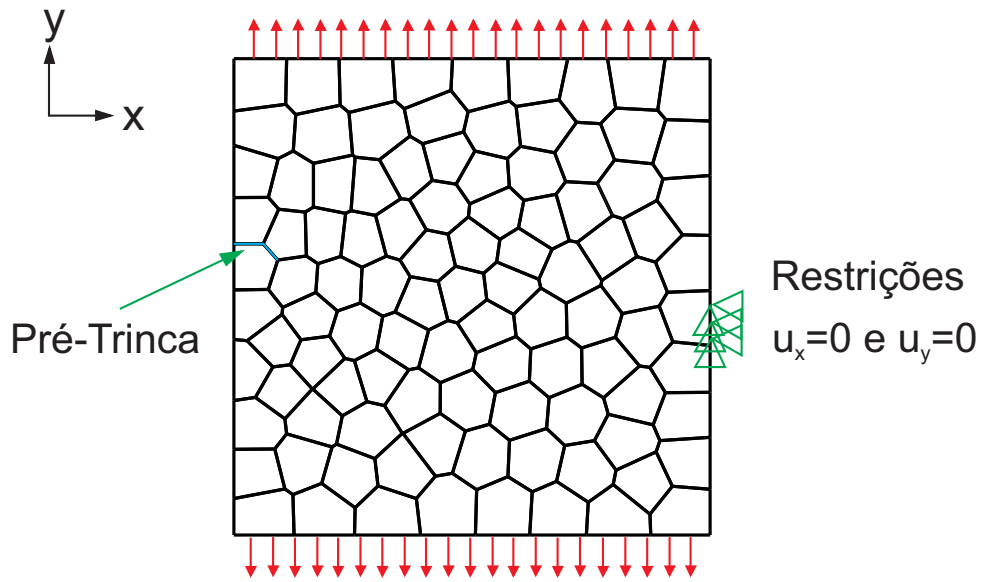


Figura 7.7: Condições de contorno.

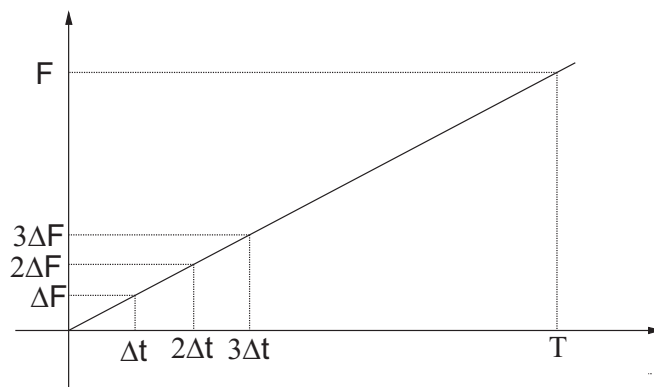


Figura 7.8: Carregamento aplicado na simulação.

com 25 iterações no gerador da malha para melhorar a homogeneidade geométrica da estrutura. A estrutura de 50 grãos possui 372 zonas coesivas, 2011 elementos quadráticos descontínuos, 6033 nós e o tamanho do sistema é de 12066, a segunda de 75 é especificada para cada material.

Nas 4 simulações são mostrados os mapas das cores mostrando o resultado do campo de deslocamento na estrutura, onde onde a maior intensidade é representada pela cor vermelha e a menos pela cor azul.

### 7.2.1 Falha intergranular em zinco

O zinco é um material cristalino hc, pelo fato de ser hexagonal na simulação deve-se ter em conta a variação das orientações cristalinas de grão para grão. Os materiais com estrutura cristalina hc possuem 5 constantes elásticas independentes do tensor de flexibilidade,  $C_{11} = 165$  GPa,  $C_{12} = 31.1$  GPa,  $C_{13} = 50$  GPa,  $C_{33} = 61.8$  GPa e  $C_{44} = 39.6$  GPa, definidas em (TROMANS, 2011) onde são apresentadas as constantes elásticas para 24 metais hc.

Os parâmetros do potencial de Lennard-Jones  $\varepsilon^{LJ}$  e  $\sigma^{LJ}$  são definidos em (FURLAN AND PENNA, 2009).

$$\sigma^{LJ} = 3.296\text{\AA}$$

$$\varepsilon^{LJ} = 0.25104\text{kJ/mol} = 4.1686181289 \times 10^{-22}\text{J}$$

A lei coesiva determinada para o zinco é mostrada na Figura 7.9 e dada separadamente para os modos de fratura I e II. O comportamento das curvas pode ser comparado com as curvas dadas em (LI ET AL., 2012).

Os resultados da propagação da trinca intergranular para o zinco, mostrando o campo de deslocamentos em escala micro em uma estrutura policristalina de 50 grãos são dados da Figura 7.10 até a Figura 7.13. A simulação teve 42 iterações, ou seja um tempo de 0.168 ms.

A estrutura policristalina de 75 grãos, tem 579 zonas coesivas, 3997 elementos quadráticos descontínuos, 11991 nós e o tamanho do sistema é de 23982. A simulação teve 42 iterações, ou

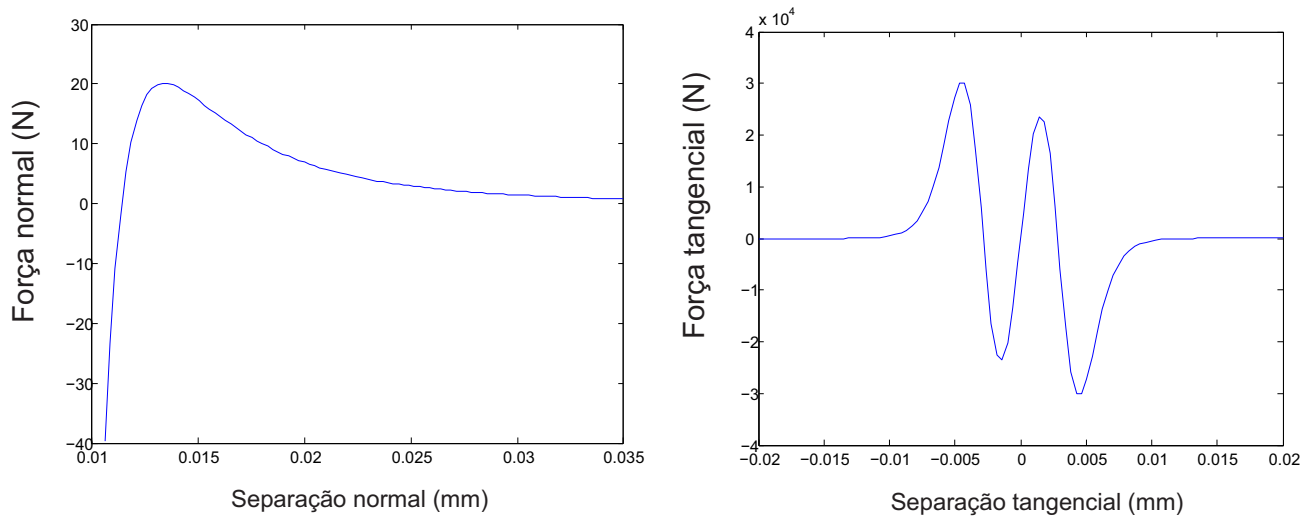


Figura 7.9: Lei coesiva para o zinco.

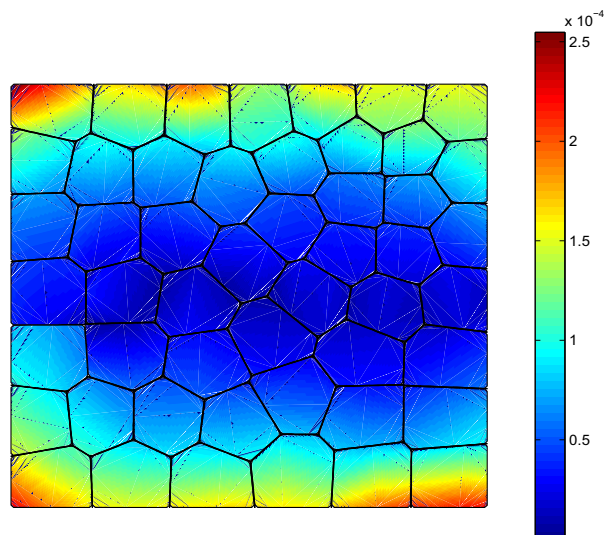


Figura 7.10: Resultado: 50 grãos (zinco), força = 40 N, tempo = 4  $\mu$ s

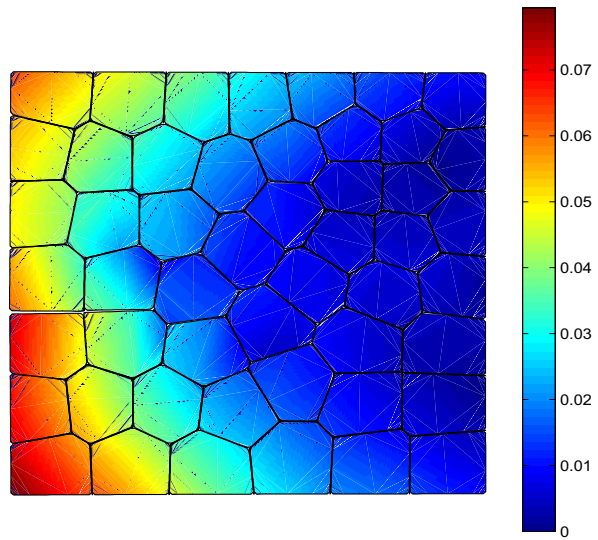


Figura 7.11: Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1040 N e tempo = 0.104 ms.

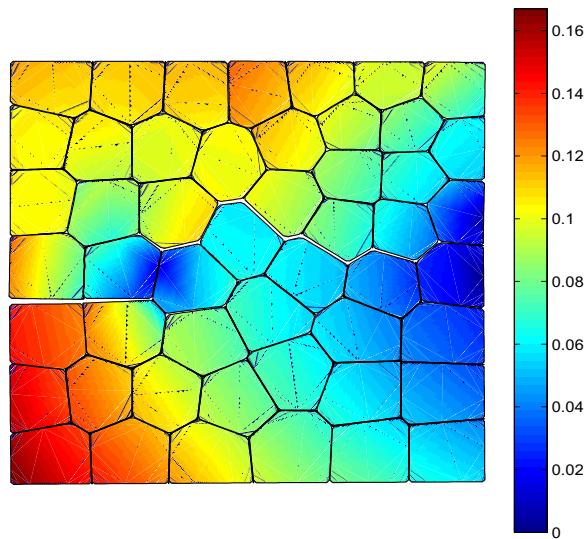


Figura 7.12: Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1440 N e tempo = 0.144 ms.



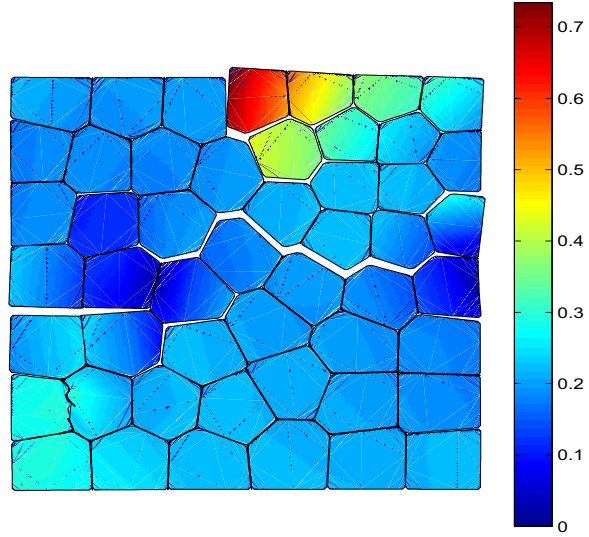


Figura 7.13: Resultado: 50 grãos (zinco), força = 1680 N e tempo = 0.168 ms.

seja um tempo de 0.168 ms, o campo de deslocamento em escala micro é mostrado da Figura 7.14 até a Figura 7.19.

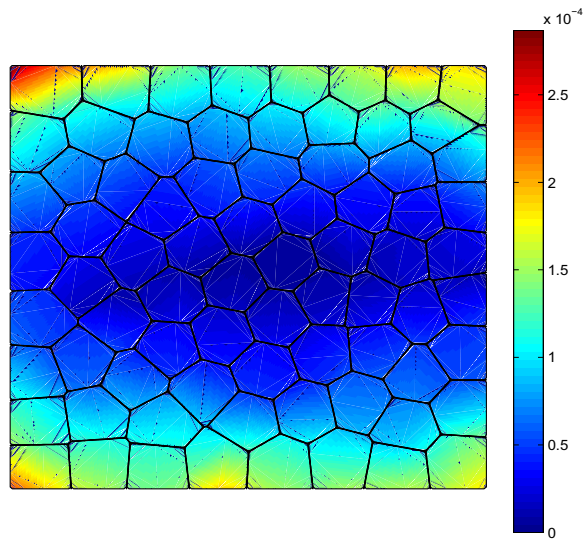


Figura 7.14: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 40 N e tempo = 4  $\mu$ s.

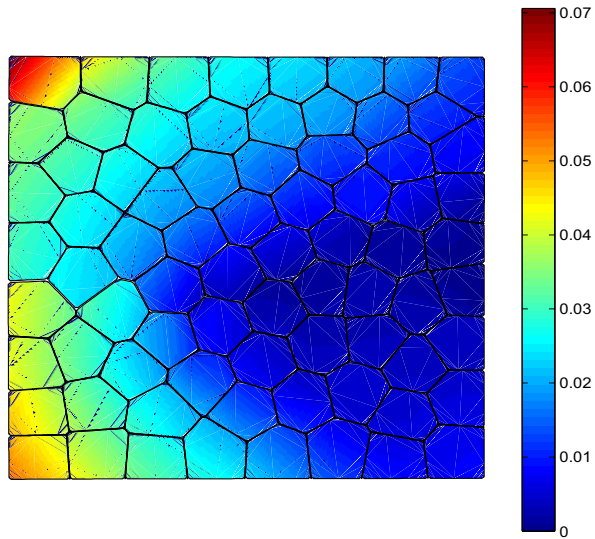


Figura 7.15: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1120 N e tempo = 0.112 ms.

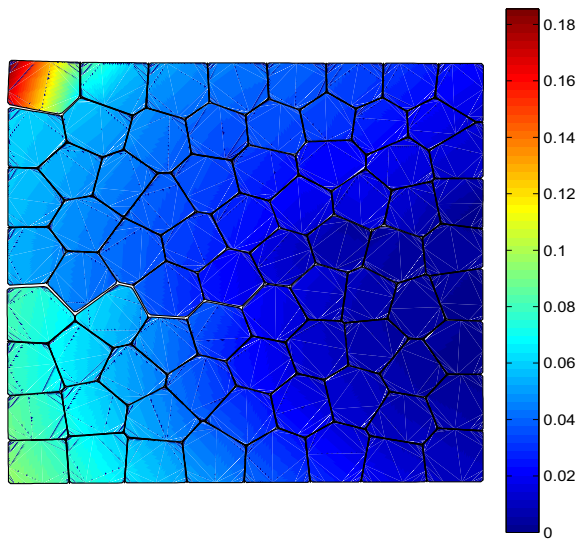


Figura 7.16: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1240 N e tempo = 0.124 ms.

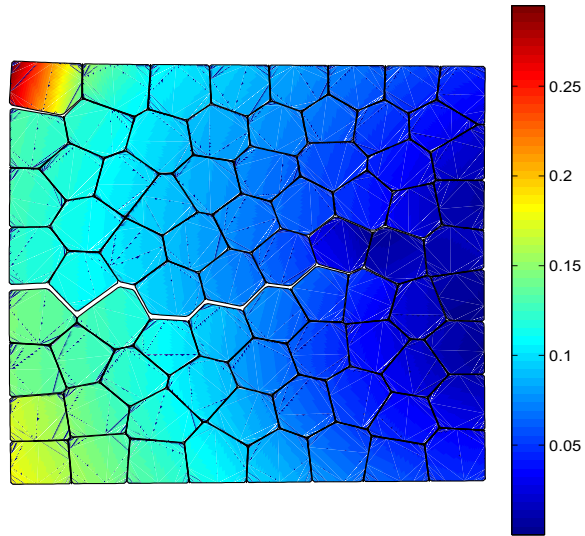


Figura 7.17: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1360 N e tempo = 0.136 ms.

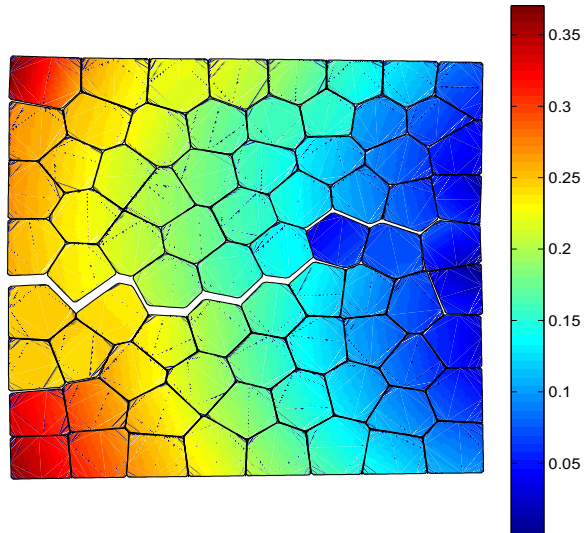


Figura 7.18: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1480 N e força = 1480 N e tempo = 0.148 ms.

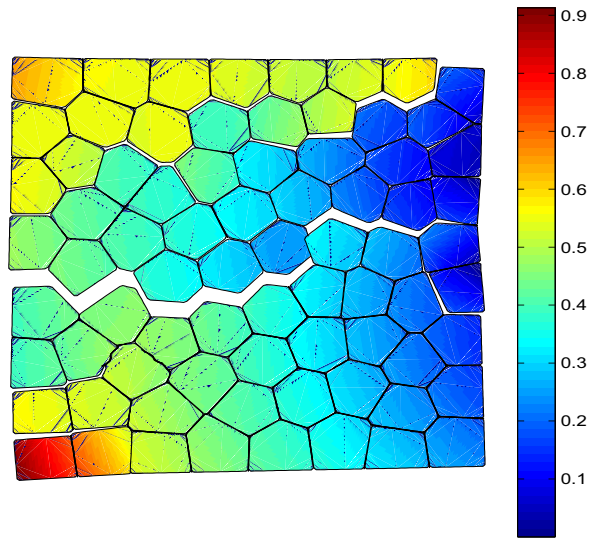


Figura 7.19: Resultado: 75 grãos (zinco), força = 1680 N e tempo = 0.168 ms.

## 7.2.2 Falha intergranular em cobre

O cobre é um material cristalino cfc, neste caso não é preciso ter variação dos planos cristalinos de grão para grão devido à simetria da estrutura. Os materiais com este tipo de estrutura possuem 3 constantes elásticas independentes do tensor de flexibilidade,  $C_{11} = 176.20$ ,  $C_{12} = 125$  e  $C_{44} = 81.71$ , definidas em (AVINC AND DIMITROV, 1999) onde também são apresentadas as constantes de 9 materiais cfc e 8 ccc.

Os parâmetros do potencial de Lennard-Jones  $\varepsilon^{LJ}$  e  $\sigma^{LJ}$  são definidos em (GRIEBEL ET AL., 2010).

$$\sigma^{LJ} = 3.61 \text{ \AA}$$

$$\varepsilon^{LJ} = 1.2382 \times 10^{-2} \text{ eV} = 1.9838150228 \times 10^{-22} \text{ J}$$

A lei coesiva determinada para o cobre é mostrada na Figura 7.20 e dada separadamente para os modos de fratura I e II. O comportamento das curvas pode ser comparado com as curvas dadas em (LI ET AL., 2012).

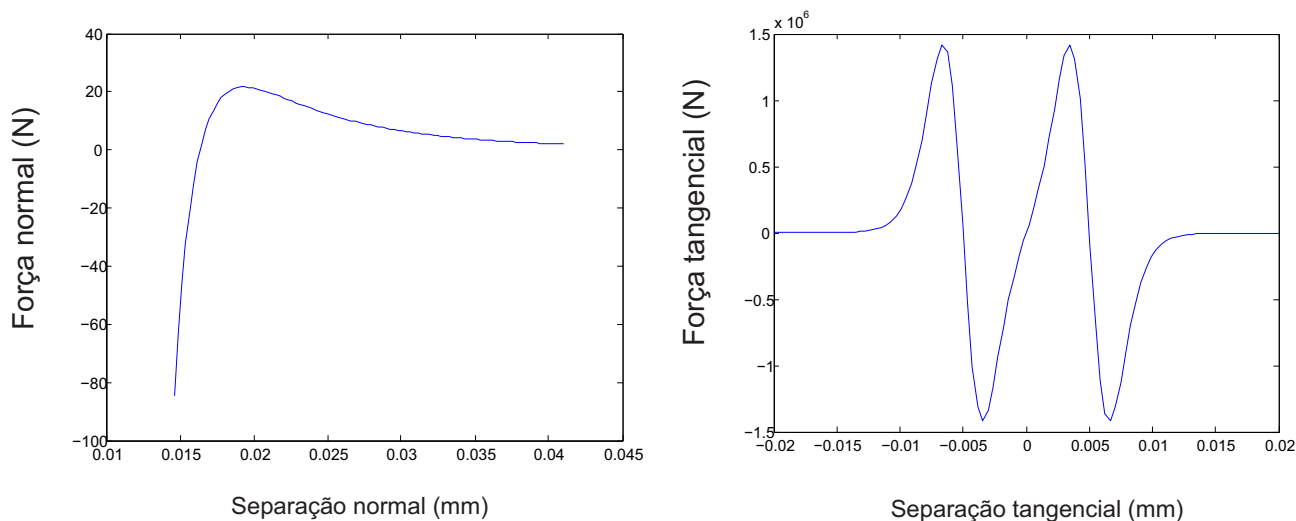


Figura 7.20: Lei coesiva para o cobre.

Os resultados da propagação da trinca intergranular para o cobre, mostrando o campo de deslocamentos em escala micrométrica em uma estrutura policristalina de 50 grãos são dados da Figura 7.21 até a Figura 7.26. A simulação teve 100 iterações, ou seja um tempo de 0.4 ms.

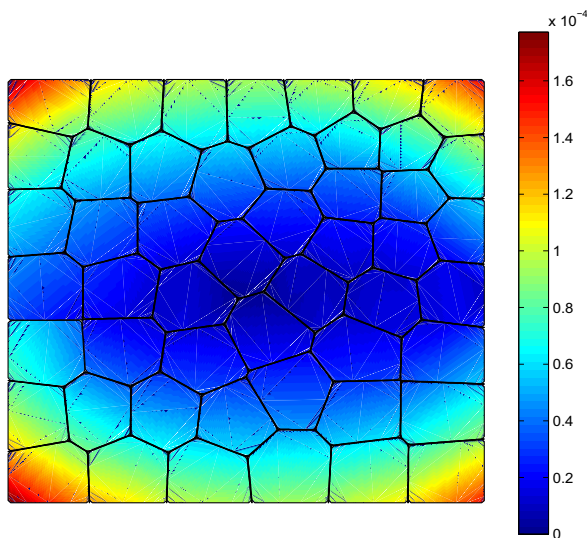


Figura 7.21: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 40 N e tempo = 4  $\mu$ s.

A estrutura policristalina de 75 grãos, tem 591 zonas coesivas, 4067 elementos quadráticos descontínuos, 12201 nós e o tamanho do sistema é de 24402. A simulação teve 73 iterações, ou seja um tempo de 0.292 ms, o campo de deslocamento em escala micrométrica é mostrado

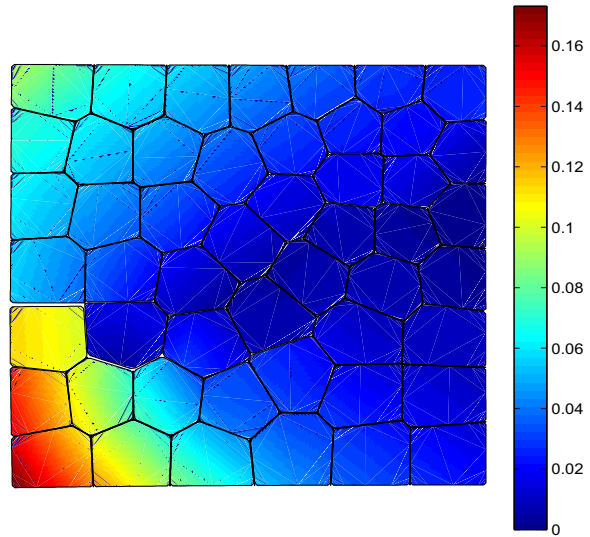


Figura 7.22: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3120 N e tempo = 0.312 ms.

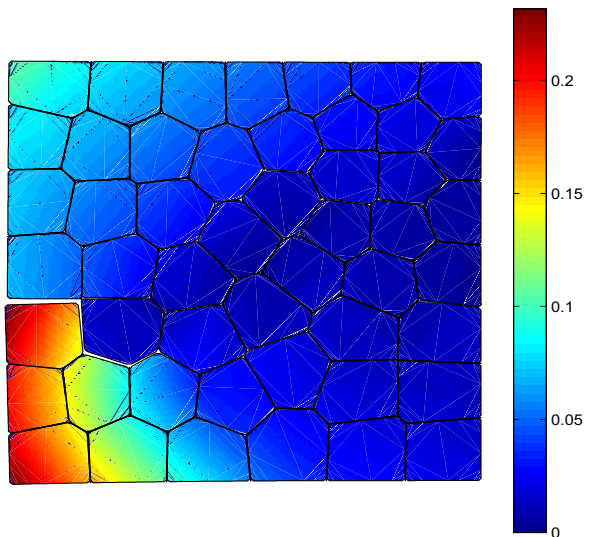


Figura 7.23: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3320 N e tempo = 0.332 ms.

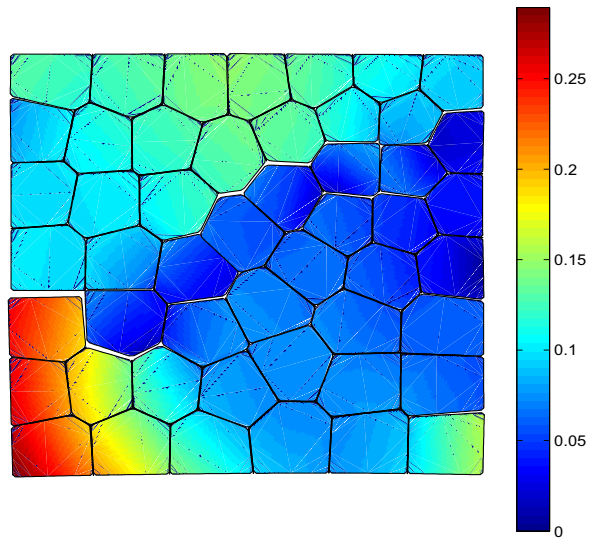


Figura 7.24: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3600 N e tempo = 0.360 ms.

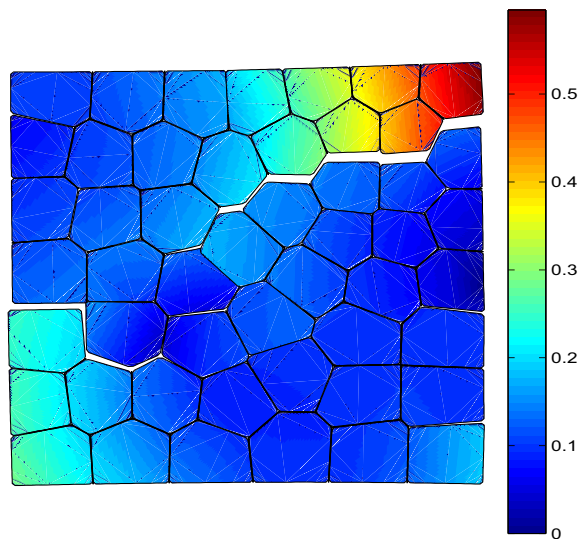


Figura 7.25: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 3760 N e tempo = 0.376 ms.



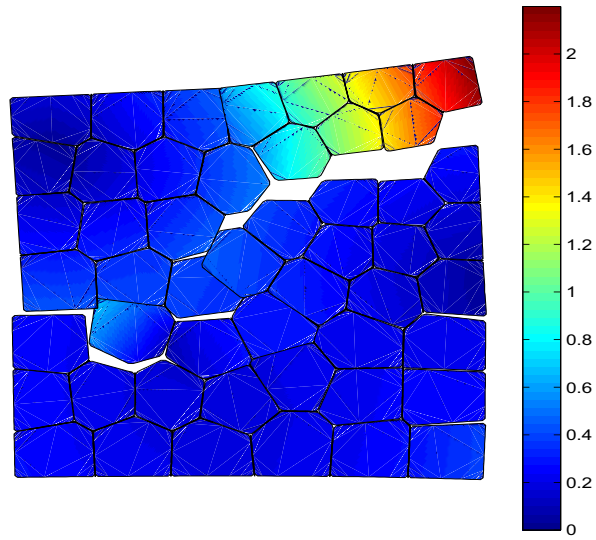


Figura 7.26: Resultado: 50 grãos (cobre), força = 4000 N e tempo = 0.4 ms.

da Figura 7.27 até a Figura 7.31.

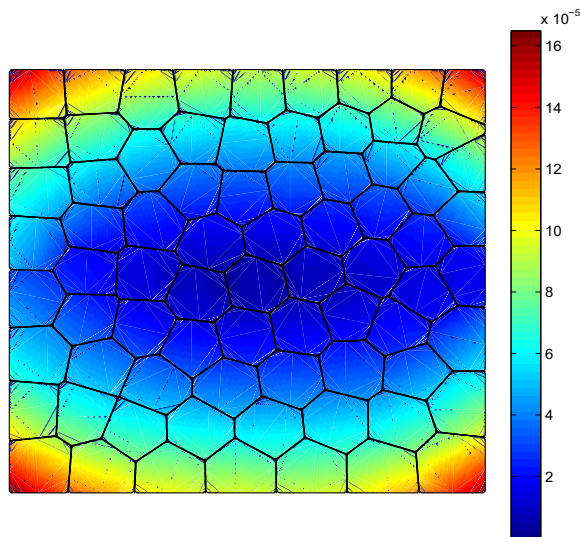


Figura 7.27: Resultado: 75 grãos (cobre), força = 40 N e tempo = 4  $\mu$ s.



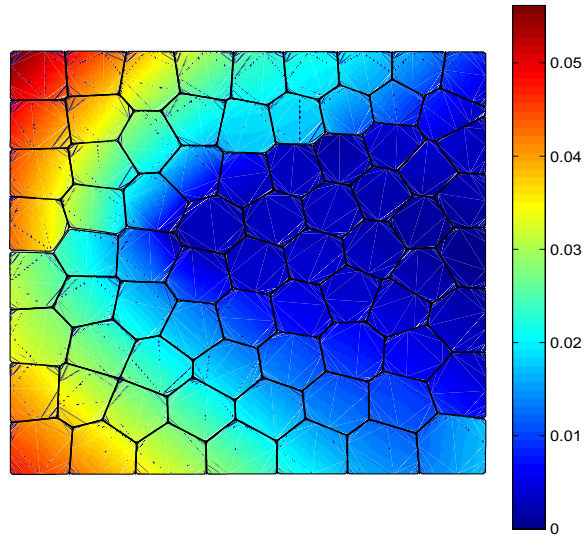


Figura 7.28: Resultado: 75 grãos (cobre), força = 1800 N e tempo = 0.18 ms.

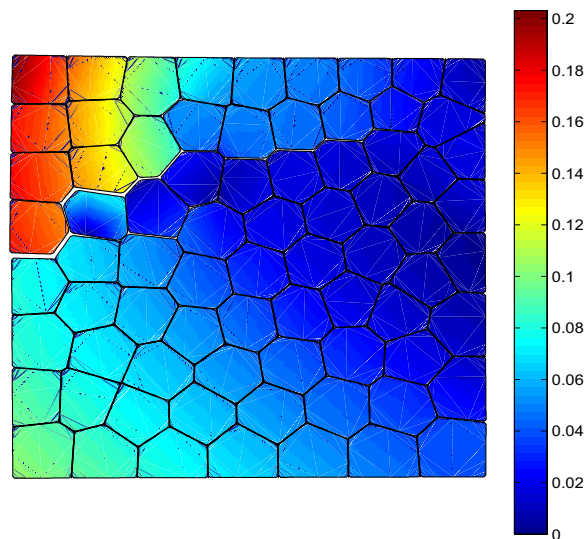


Figura 7.29: Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2480 N e tempo = 0.248 ms.

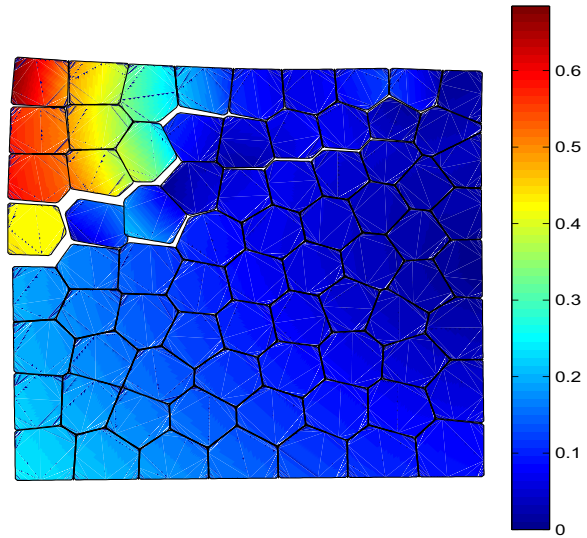


Figura 7.30: Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2680 N e tempo = 0.268 ms.

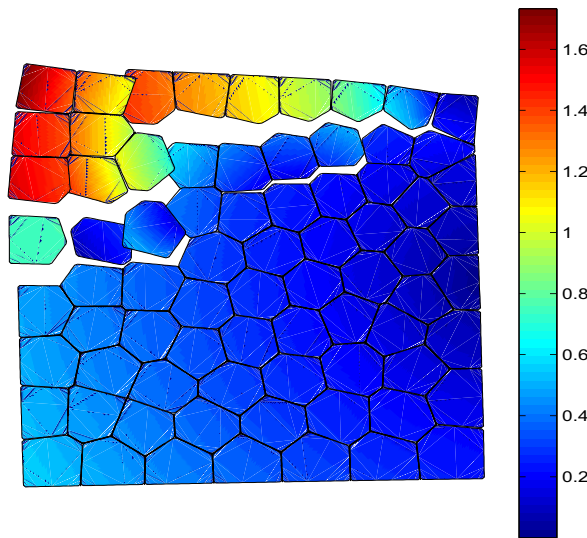


Figura 7.31: Resultado: 75 grãos (cobre), força = 2920 N e tempo = 0.292 ms.

## 8 Disposições Finais

### 8.1 Conclusões

Neste trabalho realizou-se uma análise multiescala em materiais policristalinos, baseado na formulação dinâmica do Método dos Elementos de Contorno para obter a solução do campo de deslocamentos na mesoescala, para depois avaliar o critério de falha na escala atômica que é usado para determinar quando ocorre a separação do material que gera a propagação da trinca intergranular em diferentes pontos das interfaces da estrutura policristalina.

A resposta dos deslocamentos do MEC na mesoescala foi validada com um problema elastodinâmico da literatura. A lei coesiva desacoplada para (Modo I) e (Modo II) de fratura foi terminada em uma zona coesiva específica e as curvas foram comparadas com as curvas apresentadas em trabalhos anteriores.

O programa desenvolvido, parte da solução do problema dinâmico na mesoescala, de acordo com a teoria o campo de deslocamentos na mesoescala é assumido uniforme nos grãos e altamente não uniforme no interior das zonas coesivas colocadas nas interfaces. As propriedades efetivas da zona coesiva, o gradiente de deformação e o tensor de tensão, são determinados a partir da resposta do campo de deslocamento na mesoescala. Estas propriedades efetivas são utilizadas na escala atômica para determinar quando as ligações atômicas estão se separando segundo a lei coesiva do material modelada a partir dos dados da escala atômica. Quando a força coesiva tende a zero, tem-se separação do material e a propagação da trinca, quando este critério é atingido o programa elimina a zona coesiva e a malha é atualizada.

Usando o modelo multiescala apresentado pode-se prever a propagação da trinca intergranular considerando os fenômenos físicos da escala atômica, grande diferença com o método coesivo convencional que precisa das propriedades coesivas do material. As técnicas de homogeneização utilizadas permitiram diminuir o tempo computacional da simulação se for comparada com simulações de dinâmica molecular.

Os resultados obtidos mostram que a propagação da trinca é distribuída na peça devido ao caráter aleatório na modelagem do material o que está de acordo com a teoria sendo que na mesoes-

cala o material é mais heterogêneo. A lei constitutiva da formulação do MEC deve ser modificada para incluir os efeitos progressivos das forças coesivas na resposta do material para cada passo de tempo, ou seja acoplar o método multiescala com o MEC.

## **8.2 Sugestões para Trabalhos Futuros**

- Modelar a estrutura policristalina 3D usando o (MEC) para materiais anisotrópicos.
- Formulação da Modelagem Multiescala de Zonas Coesivas 3D acoplada ao MEC.
- Modelar a falha transgranular e intergranular em materiais policristalinos 3D.
- Incluir a formulação da análise de contato.
- Utilizar a modelagem atômica coloidal para incluir na formulação defeitos e não homogeneidades das estruturas atômicas na zona coesiva.
- Utilizar outros métodos computacionais como dinâmica molecular para validar a formulação 3D.
- Acrescentar a macroescala utilizando algumas técnicas de homogeneização.

## Referências

- Akerfeldt, P., Pederson, R., Antti, M., Yao, Y., and Klement, U. (2013). The effect of crystallographic orientation on solid metal induced embrittlement of ti-8al-1mo-1v in contact with copper. *Materials Science and Engineering*, 48:1–10.
- Albuquerque, E. (2001). *Análise de problemas Dinâmicos em Materiais Anisotrópicos Usando o Método dos Elementos de Contorno*. PhD thesis, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas.
- Albuquerque, E., Sollero, P., and Fedelinski, P. (2003). Dual reciprocity boundary element method in laplace domain applied to anisotropic dynamic crack problems. *Computers and Structures*, 81:1703–1713.
- Aliabadi, M. (2002). *The Boundary Element Method Applications in Solids and Structures*, volume 2. Wiley.
- Avinc, A. and Dimitrov, V. (1999). Effective lennard-jones potential for cubic metals in the frame of embedded atom model. *Computational Materials Science*, 13:211–217.
- Barenblant, G. (1959). The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. general ideas and hypotheses. axially-symmetric cracks. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 23, no 3:622–636.
- Benedetti, I. and Aliabadi, M. (2013). A three-dimensional cohesive-frictional grain-boundary micromechanical model for intergranular degradation and failure in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 265:36–62.

Brebbia, C. and Dominguez, J. (1992). *Boundary Elements An Introductory Course*. WIT Press/Computational Mechanics Publications.

Callister, W. (1997). *Materials Science and Engineering an Introduction*. John Wiley & Sons, Inc.

Camacho, G. and Ortiz, M. (1996). Computing modeling of impact damage in brittle materials. *International Journal in Solids Structures*, 33:2899–2938.

Carrer, J. and Mansur, W. (1999). Stress and velocity in 2d transient elastodynamic analysis by the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 23:233–245.

Chirino, F., Gallego, R., and Dominguez, J. (1994). A comparative study of three boundary element approaches to transient dynamic crack problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 13:11–19.

Crocker, A., Flewitt, P., and Smith, G. (2005). Computational modelling of fracture in polycrystalline materials. *International Materials Reviews*, 50, no 2:99–124.

Crotty, J. (1982). A block equation solver for large unsymmetric matrices arising in the boundary integral equation. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 18:997–1017.

Czyz, T., Dziaekiewicz, G., Fedelinski, P., Gorski, R., and Ptaszny, J. (2013). *Advance Computer Modeling in Micromechanics (Piotr Fedelinski,Ed)*. Wydawnictwo Politechniki Slaskiej Gliwice.

Daniel, I. and Shai, O. (2006). *Engineering Mechanics of Composite Materials*. Oxford University Press.

de Borst, R. (2003). Numerical aspects of cohesive-zone models. *Engineering Fracture Mechanics*, 70:1743–1757.

Dominguez, J. (1993). *boundary Elements in Dynamics*. Computational Mechanics Publications.

Dugdale, D. (1960). Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8:100–104.

Ericksen, J. (1983). The cauchy and born hypotheses for crystals. In *Phase transformations and material instabilities in solids*.

Espinosa, H. and Zavattieri, P. (2003a). A grain level model for the study of failure initiation and evolution in polycrystalline brittle materials. part 1: Theory and numerical implementation. *Mechanics of Materials*, 35:333–364.

Espinosa, H. and Zavattieri, P. (2003b). A grain level model for the study of failure initiation and evolution in polycrystalline brittle materials. part 2: Numerical examples. *Mechanics of Materials*, 35:365–394.

Espinosa, H., Zavattieri, P., and Dwivedi, S. (1998). A finite deformation continuum/discrete model for the description of fragmentation and damage in brittle materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46, no 10:1909–1942.

Furlan, S. and Penna, G. L. (2009). Modeling of the  $zn^{2+}$  binding in the 1-16 region of the amyloid beta peptide involved in alzheimer's disease. *Physical chemistry chemical physics*, 11, no 30:6468–6481.

Galvis, A., Rodriguez, R., Sollero, P., and Albuquerque, E. (2013). Multidomain formulation of bem analysis applied to large-scale polycrystalline materials. *CMES: Computer Modeling in Engineering & Science*, 96, no. 2:113–115.

Griebel, M., Knapek, S., and Zumbush, G. (2010). *Numerical Simulation in Molecular Dynamics*. Springer.

He, M. and Li, S. (2012). An embedded atom hyperelastic constitutive model and multiscale cohesive finite element method. *Computational Mechanics*, 49, no 3:337–355.

Hill, R. (1971). On constitutive macro-variables for heterogeneous at finite strain. In *Proceedings of the Royal Society A*.

Houbolt, J. (1950). A recurrence matrix solution for the dynamic response of elastic aircraft. *Journal of Aeronautical and Science*, 13:169–179.

Huntington, H. (1958). *The Elastic Constants of Crystals*. Academic Press Inc.

Ii, S., Iwamoto, C., Matsunaga, K., Yamamoto, T., and Ikamura, Y. (2005). Tem in situ observation of fracture behavior in ceramic materials. *Applied Surface Science*, 241:68–74.

Israelachvili, J. (1991). *Intermolecular & Surface Forces*. Academic Press Limited.

Kane, J. (1994). *Boundary Element Analysis In Engineering Continuum Mechanics*. Prentice-Hall.

Katsikadelis, J. (2002). *Boundary Elements: Theory and Applications*. ELSEVIER.

Kraft, R. and Molinari, J. (2008). A statistical investigation of the effects of grain boundary properties on transgranular fracture. *Acta Materialia*, 56, no 17:4739–4749.

Lekhnitskii, S. (1968). *Anisotropic Plates*. Gordon and Breach Science Publishers.

Lekhnitskii, S. (1981). *Theory of Elasticity of an Anisotropic Body*. MIR Publishers.

Li, S. and Wang, G. (2008). *Introduction to Micromechanics and Nanomechanics*. World Scientific Publication Inc.

Li, S., Zeng, X., Qian, J., Zhang, J., and jha, A. (2012). An atomistic-based interphase zone model for crystalline solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 223:87–109.

Li, S., Zeng, X., Ren, B., Qian, J., and He, M. (2010). On mechanics of a multiscale cohesive zone



model. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 00:1–35.

Maiti, S. and Geubelle, P. (2004). Mesoscale modeling of dynamic fracture of ceramic materials. *CMES: Computer Modeling in Engineering & Science*, 5, no. 2:91–101.

Miehe, C. (2003). Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192, no 5-6:559–591.

Miehe, C., Schroder, J., and Schotte, J. (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 171:387–418.

Nardini, D. and Brebbia, C. (1983). A new approach to free vibration analysis using boundary elements. *Applied Mathematical Modelling*, 7:157–162.

Okabe, A., Boots, B., Sugihara, K., and Chiu, S. (2000). *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. Jhon Wiley & Sons Ltd, 2 edition.

Peierls, R. (1940). The size of a dislocation. *Proceedings of the Physical Society*, 52:34–37.

Portela, A. (1992). *Dual Boundary Element Incremental Analysis of Crack Growth*. PhD thesis, Wessex Institute of Technology.

Qian, J. and Li, S. (2011). Application of multiscale cohesive zone model to simulate fracture in polycrystalline solids. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 133:1–9.

Rigby, R. and Aliabadi, M. (1995). Out-of-core solver for large, multizone boundary element matrices. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 38:1507–1533.

Rodriguez, R., Galvis, A., Sollero, P., and Albuquerque, E. (2013). Analysis of multiple inclusion

potential problems by the adaptive cross approximation method. *CMES: Computer Modeling in Engineering & Science*, 96, no. 4:259–274.

Sauer, R. and Li, S. (2007). A contact mechanics model for quasi-continua. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 71:931–962.

Schlar, N. (1994). *Anisotropic Analysis using Boundary Elements*. Computational Mechanics Publications.

Sfantos, G. K. and Aliabadi, M. H. (2007a). A boundary cohesive grain element formulation for modelling intergranular microfracture in polycrystalline brittle materials. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 69:1590–1626.

Sfantos, G. K. and Aliabadi, M. H. (2007b). Multi-scale boundary element modelling of material degradation and fracture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:1310–1329.

Taylor, G. (1938). Plastic strain in metals. *Journal of Institute of Metals*, 62:307–324.

Ting, T. (1996). *Anisotropic Elasticity Theory and Applications*. Oxford University Press.

Tromans, D. (2011). Elastic anisotropic of metal crystals and polycrystals. *International Journal of Research & Reviews in Applied Sciences*, 6, Issue 4:462–483.

Tvergaard, V. (1990). Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal. *Materials Science and Engineering: A*, 125:203–213.

Tvergaard, V. and Hutchinson, J. (1992). The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40:1377–1397.

Useche, J., Albuquerque, E., and Sollero, P. (2012). Harmonic analysis of shear deformable orthotropic cracked plates using the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 36:1528–1535.

van den Bosch, M., Schreurs, P., and Geers, M. (2006). An improved description of the exponential xu and needleman cohesive zone law for mixed-mode decohesion. *Engineering Fracture Mechanics*, 73:1220–1234.

Wilsdorf, H. (1975). Void initiation, growth, and coalescence in ductile fracture metals. *Journal of Electronic Materials*, 4, no 5:791–809.

Xu, X. and Needleman, A. (1993). Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1:111–132.

Xu, X. and Needleman, A. (1994). Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42, no 9:1397–1434.

Yvonnet, J. and He', Q. (2007). The reduced model multiscale method (r3m) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *Journal of Computational Physics*, 223:341–368.

Zeng, X. and Li, S. (2010). A multiscale cohesive zone model and simulations of fractures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:547–556.

Zeng, X. and Li, S. (2012). Application of a multiscale cohesive zone method to model composite materials. *Journal for Multiscale Computational Engineering*, 10(5):391–405.