

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

Efeitos viscoplásticos cristalinos na propagação de trincas em monocristais

Eduardo Braun

Porto Alegre
2019

EDUARDO BRAUN

**EFEITOS VISCOPLÁSTICOS CRISTALINOS NA
PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM MONOCRISTAIS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em
Engenharia.

Porto Alegre
2019

EDUARDO BRAUN

**EFEITOS VISCOPLÁSTICOS CRISTALINOS NA
PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM MONOCRISTAIS**

Esta dissertação de mestrado foi julgada adequada para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA, Área de Concentração Estruturas, e aprovada em sua forma final pelo professor orientador e pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Porto Alegre, 06 de dezembro de 2019

Prof. Eduardo Bittencourt
Postdoc pela Brown University
orientador

Prof. Nilo Cesar Consoli
PhD pela Concordia University
Coordenador do PPGEC/UFRGS

BANCA EXAMINADORA

Prof. Rogério José Marczak (GMAp/UFRGS)
Dr. pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Prof. Rodrigo Rossi (UFRGS)
Dr. pela Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Alexandre Luis Braun (UFRGS)
Dr. pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Dedico este trabalho aos meus pais, João e Tita, que sempre me incentivaram a trabalhar pelos meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Eduardo Bittencourt pela amizade e pela atenta orientação dedicada na elaboração do trabalho, que é de suma importância na minha formação.

Agradeço a todos os professores que participaram da minha formação, em todas as fases da minha vida.

Agradeço aos colegas Guilherme Fiorin Fornel e Cássio Dani de Almeida pela amizade e pelo auxílio no desenvolvimento do trabalho.

Agradeço à CAPES pela bolsa de estudos, que possibilitou minha total dedicação aos estudos.

Agradeço à Universidade Federal do Rio Grande do Sul pela excelência de ensino oferecida.

Um espírito nobre engrandece o menor dos homens.

Theodore Roosevelt

RESUMO

BRAUN, E. **Efeitos viscoplásticos cristalinos na propagação de trincas em monocristais.** 2019. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

O presente trabalho trata da atividade plástica em problemas envolvendo fratura. Na ponta de trincas a plasticidade não deve ser tratada considerando as características do material na sua escala normal, mas sim com as características dos cristais que formam o mesmo. Para tanto, são feitas implementações de rotinas de elasto-viscoplasticidade cristalina para cristais cúbicos de face centrada e cúbicos de corpo centrado – que são os cristais formadores de grande parte dos metais. As implementações são realizadas para um modelo em estado plano de deformações e consideram somente pequenas deformações. Malhas de elementos finitos com elementos retangulares bilineares são utilizadas para discretizar as estruturas das simulações realizadas no presente trabalho. São realizados testes para verificar o bom funcionamento das rotinas do modelo elasto-viscoplástico em um problema com uma trinca estacionária e na sequência é feita uma integração do modelo de plasticidade ao modelo coesivo de Needleman (1992) – este modelo coesivo já implementado anteriormente à existência do presente trabalho. Com o modelo coesivo são feitas simulações envolvendo o modo I de fratura, onde é verificado que a atividade plástica e os campos de tensões se desenvolvem conforme o previsto na literatura, afirmando o bom funcionamento do programa e assim atestando que com o presente trabalho surge um programa (uma ferramenta) mais adequado para simular a propagação de estruturas com trincas pré-existentes considerando deformação plástica. O efeito de propriedades viscosas é explorado, visando um entendimento maior do comportamento do material em altas taxas de carregamento. Também o modelo com efeitos viscosos simula a plasticidade cristalina não viscosa através do ajuste dos parâmetros viscosos. Este tipo de simulação é interessante visto que modelos não viscosos requerem a inversão de uma matriz 12x12 (no caso tridimensional) e muitas vezes não é encontrada unicidade de solução. O modelo viscoso aqui implementado não requer a inversão de qualquer matriz e assim sendo o problema de unicidade de solução é resolvido.

Palavras-chave: *Fratura em Cristais; Viscoplasticidade Cristalina; Elementos Finitos; Modelo de Zona Coesiva.*

ABSTRACT

BRAUN, E. **Efeitos viscoplásticos cristalinos na propagação de trincas em monocristais.** 2019. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

The present work deals with the plastic activity in problems involving fracture. At crack tips the plasticity shouldn't be treated considering the material characteristics at its normal scale, but with the characteristics of the crystals that form it. To do so, crystal elastic-viscoplastic routines are implemented for both face centered cubic and body centered cubic crystals – that are the basis to form great part of metals. The implementations are developed for a plane strain model and consider only small strains. Finite element meshes with bilinear rectangular elements are used to discretize the structures simulated at the present work. Tests are made with a steady crack to verify the proper work of the elastic-viscoplastic routines and then an integration of the plasticity model with the cohesive model of Needleman (1992) is made – this cohesive model was implemented previously to the existence of the present work. With the cohesive model, simulations involving mode I of fracture are made, where is verified that the plastic activity and the stress fields develop as predicted in the literature, ensuring that the program is working properly and by doing so with the present work arises a program (a tool) adequate to simulate the propagation of structures with pre-existent cracks considering plastic activity. The effect of viscous properties is explored, seeking a better understanding of the material behaviour in high loading rates. The viscous model can also simulate the non-viscous crystal plasticity, by doing adjustments on the viscous parameters. This kind of simulation is interesting once the non-viscous models require a 12x12 matrix inversion (on the tridimensional case) and in many cases unicity can't be found for the solution. The viscous model implemented doesn't require any kind of matrix inversions and by doing so the issue of solution unicity is resolved.

Key-words: *Fracture in Crystals; Crystal Viscoplasticity; Finite Elements; Cohesive Zone Model.*

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Pá com estrutura monocristalina para turbinas (fonte: Aslan (2010, p. 2))	20
Figura 2.1 – Ilustração de base – célula unitária – de cristal CFC (fonte: adaptado de Wang et al. (2015, p. 736))	25
Figura 2.2 – Ilustração de repetições de bases compondo um monocristal	25
Figura 2.3 – As 14 redes de Bravais (fonte: adaptado de Landau e Lifshitz (1984, p. 406))	27
Figura 2.4 – Redes de Bravais CCC e CFC	28
Figura 2.5 – Célula cúbica (fonte: Khan e Huang (1995, p.313))	29
Figura 2.6 – Índices de Miller para planos (fonte: Khan e Huang (1995, p.314))	30
Figura 2.7 – Índices de Miller para direções (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 315))	30
Figura 2.8 – Representação de um corte na região próxima à superfície de um policristal metálico antes e depois de ocorrer deformação plástica (fonte: adaptado de Ewing e Rosenhain (1900, p. 362))	31
Figura 2.9 – Micrografica óptica de metal policristalino deformado plasticamente (fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362))	32
Figura 2.10 – Características dos planos de átomos (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 318))	34
Figura 2.11 – Esquematização do potencial interatômico em um cristal perfeito (fonte: adaptado de Taylor (1934 p. 371) apud Fornel (2018, p. 18))	35
Figura 2.12 – Esquema do potencial interatômico com existência de uma discordância (fonte: adaptado de Taylor (1934, p. 371), apud Fornel (2018, p. 19))	36
Figura 2.13 – Potencial interatômico com a existência de uma discordância em estrutura sob cisalhamento (fonte: adaptado de Taylor (1934, p. 374) apud Fornel (2018, p. 20))	37
Figura 2.14 – Discordância de aresta (fonte: Khan e Huang (1995, p. 321))	38
Figura 2.15 – Deformação plástica por movimento de discordância (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 321))	39
Figura 2.16 – Visualização de circuito e vetor de Burger: (a) em um cristal real (imperfeito); (b) em um cristal perfeito (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 322))	40

Figura 3.1 – Escalas de comprimento na mecânica da fratura: (a) e (b), zona da escala macroscópica; (c) zona da plasticidade cristalina; (d) zona das discordâncias individuais; e (e) zona plástica de uma discordância (fonte: adaptado de Van der Giessen e Needleman (2002, p. 143))	42
Figura 3.2 – Orientação dos eixos no monocristal metálico	44
Figura 3.3 – Orientação da trinca em relação ao monocristal	44
Figura 3.4 – Planos e direção que formam o sistema de deslizamento 1	45
Figura 3.5 – Planos e direções que compõem os sistemas de deslizamento efetivos 2 e 3	46
Figura 3.6 – Orientação da trinca na configuração em EPD, com direções dos sistemas efetivos em um monocristal CFC (fonte: adaptado de Rice (1987, p. 318))	47
Figura 3.7 – Orientação e numeração dos sistemas de deslizamento efetivos de um cristal CFC	47
Figura 3.8 – Orientação da trinca e sistemas efetivos dos cristais CCC no EPD	50
Figura 3.9 – Numeração dos sistemas efetivos para os cristais CCC	50
Figura 3.10 – Deslizamentos paralelos aos sistemas de deslizamentos efetivos (a); e deslizamentos perpendiculares aos sistemas de deslizamentos (b) (fonte: adaptado de Rice (1990, p. 307))	51
Figura 3.11 – Leis de tensão-separação: (a) Needleman (1987), (b) Needleman (1990), (c) Hillerborg et al. (1976), (d) Geubelle e Baylor (1990), (e) Yuan et al. (1996) e (f) Tvergaard e Hutchinson (1992) (fonte: Liu et al (2013))	56
Figura 3.12 – Leis de tensão-separação: (a) Needleman (1987), (b) Needleman (1990), (c) Hillerborg et al. (1976), (d) Geubelle e Baylor (1990), (e) Yuan et al. (1996) e (f) Tvergaard e Hutchinson (1992) (fonte: adaptado de Liu et al. (2013)) ..	57
Figura 3.13 – Curva da lei coesiva, com T_n em função de Δu_n)	59
Figura 4.1 – Propriedades geométricas do exemplo de tração pura	61
Figura 4.2 – Curvas de tensão deformação em exemplo de tração pura com diferentes valores de da/dt para cristais CFC e CCC ($m=0,02$)	63
Figura 4.3 – Curvas de tensão deformação em exemplo de tração pura com diferentes valores de m para cristais CFC e CCC ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)	64
Figura 4.4 – Peça com trinca em tração – Modo I. u_b denota o campo de deslocamentos no contorno	66
Figura 4.5 – Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema. F_i e U_i são as componentes do vetor de forças e de deslocamentos, respectivamente ...	67

Figura 4.6 – Detalhe da malha na região próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta inferior da janela refinada	67
Figura 4.7 – Caminho percorrido para análise de campos de tensões	68
Figura 4.8 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{11}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$) ...	69
Figura 4.9 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{22}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$) ...	70
Figura 4.10 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{12}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$) ...	70
Figura 4.11 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{11}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)	71
Figura 4.12 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{22}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)	72
Figura 4.13 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{12}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)	72
Figura 4.14 – Dimensões da peça simulada	74
Figura 4.15 – Aplicação do deslocamento prescrito na estrutura	74
Figura 4.16 – Malha de elementos finitos	75
Figura 4.17 – Detalhes do refinamento da malha	76
Figura 4.18 – $\sigma_{max,0}=600$ MPa, variação de m para $3,65 \leq R \leq 4$ ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)	78
Figura 4.19 – $\sigma_{max,0}=600$ MPa, variação de m para $0 \leq R \leq 3,55$ ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)	79
Figura 4.20 – Curvas R de cristais CCC com $m=0,02$ e $da/dt=10^{-3}$	80
Figura 4.21 – Comparação das curvas R entre cristais CFC e CCC, para $m=0,02$ e $da/dt=10^{-3}s^{-1}$	81
Figura 4.22 – Curva R=4 de estruturas CFC e CCC alterando da/dt (m fixo em 0,02) ..	82
Figura 4.23 – Curva R=4 de estruturas CFC e CCC alterando m (da/dt fixo em 10^{-3}) ...	83
Figura 4.24 – Deslizamentos acumulados com variação de da/dt para o tempo de 40 segundos de simulação ($R=4$, $m=0,02$)	85
Figura 4.25 – Deslizamentos acumulados com variação de m para o tempo de 40 segundos de simulação ($R=4$, $da/dt=10^{-3}s^{-1}$)	86

Figura 4.26 – Deslizamentos acumulados com variação de da/dt para o tempo de 95 segundos de simulação ($R=4$, $m=0,02$)	87
Figura 4.27 – Deslizamentos acumulados com variação de m para o tempo de 95 segundos de simulação ($R=4$, $da/dt=10^{-3}s^{-1}$)	88
Figura 4.28 – Consideração de $da^{(a)}/dt$ – quando $da^{(a)}/dt$ não é especificado na legenda os resultados se referem à $da/dt=0,001s^{-1}$ ($R=4$ e $m=0,02$)	90

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Número e parâmetros de redes para cada tipo de sistema cristalino	27
Tabela 2 – Relação entre sistemas (efetivos e do material)	46
Tabela 3 – Cossenos diretores para sistemas cristalinos e sistemas efetivos relacionados a eles	49
Tabela 4 – Tensão de escoamento aparente encontrada em cada curva das Figuras 4.2 e 4.3 e diferença percentual em relação à solução não viscosa	65
Tabela 5 – Deslizamentos acumulados máximos ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$, $R=4$)	86
Tabela 6 – Deslizamentos acumulados máximos para 95 segundos de simulação, alterando m (casos da Figura 4.27)	88

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

CCC	Cúbico de Corpo Centrado
CFC	Cúbico de Face Centrada
CS	Cúbica Simples
EPD	Estado Plano de Deformações
MEF	Método dos Elementos Finitos
HC	Hexagonal Compacta
$\Delta\varepsilon_{kl}$	Componentes de incremento de deformação
$\Delta\varepsilon^d_{ij}$	Componentes de incremento de deformação desviadora
$\Delta\sigma^E_{ij}$	Incremento de tensões do preditor elástico
Δa	Variação do comprimento da trinca
ΔG	Energia aplicada
Δp	Incremento de tensões
Δs^E_{ij}	Incremento das tensões desviadoras
Δu_n	Separação normal da zona coesiva
Γ_0	Energia coesiva
α	sistema de deslizamento efetivo
$\beta^{(\alpha)}$	Fator de correção de tensões decompostas do material (τ_c) para efetivas ($\tau_c^{(\alpha)}$)
δ	Deslocamento
$\delta_{\alpha\beta}$	Delta de Kroenecker
δ_0	Separação característica
δ_c	Separação crítica da zona coesiva
ε_{ij}	Componentes de deformações
φ	Energia potencial
$\Phi_{n,0}$	Energia coesiva superficial normal
γ	componente de deformação transversal

$\gamma^{(\alpha)}$	Deslizamento no sistema α
κ	Constante dependente da distribuição dos centros das discordâncias
λ	Espaçamento interatômico
μm	Micrômetro(s)
ν	Coefficiente de Poisson
$\xi^{(\alpha)}$	Leva da/dt da estrutura tridimensional aos sistemas efetivos
σ_{ij}^0	Estado de tensões de Cauchy inicial
σ_{ij}^1	Estado de tensões de Cauchy atualizado pelo corretor plástico
σ_{ij}^E	Estado de tensões de Cauchy do preditor elástico
σ_{esc}	Tensão de escoamento
$\sigma_{\text{max},0}$	Tensão coesiva inicial máxima
τ	tensão de cisalhamento necessária para manter uma posição relativa entre dois planos de átomos
$\tau^{(\alpha)}$	Tensão projetada no sistema α
τ_c	Tensão projetada (decomposta) crítica dos sistemas do material
$\tau_c^{(\alpha)}$	Tensão crítica projetada (decomposta) no sistema efetivo α
$\tau_{c0}^{(\alpha)}$	Valor inicial de $\tau_c^{(\alpha)}$
τ_m	Amplitude de τ
A	Constante nas deduções de Taylor
A_r	Relação de Zener
C_{ijkl}	Tensor constitutivo do preditor elástico
E	Módulo de Young
G	Módulo de elasticidade transversal do material
H	Função de auto-endurecimento do material
J/m^2	Joules por metro quadrado (medida de energia)
K	Módulo de incompressibilidade do material
L	dimensão do cristal na direção do movimento das discordâncias

$\mathbf{M}^{(\alpha)}$	Vetor unitário ortonormal a um plano de deslizamento efetivo
MPa	Megapascal
N	Número de átomos nas esquematizações de Taylor
O	Centro de uma discordância
$P_{ij}^{(\alpha)}$	Componente ij do tensor de orientação de Schmid para o sistema α
$\mathbf{S}^{(\alpha)}$	Vetor unitário que indica direção de deslizamento
$\mathbf{S}^{(\alpha)}$	Vetor unitário que indica direção de deslizamento
S	Tensão de cisalhamento nas esquematizações de Taylor
S_T	Tensão para mover somente uma discordância (esquematização de Taylor)
T_0	Tensão coesiva
T_n	Tensão coesiva normal
$(u \ v \ w)$	Índices de Miller para orientação de um plano
$[u \ v \ w]$	Índices de Miller para uma direção cristalográfica
$\{u \ v \ w\}$	Índices de Miller para planos cristalográficos equivalentes
$\langle u \ v \ w \rangle$	Índices de Miller para direções cristalográficamente equivalentes
\mathbf{b}	Vetor de Burgers
$d\varepsilon_{ij}^p/dt$	Fluxo de deformação plástica
$d\gamma^{(\alpha)}/dt$	Taxa de deslizamentos no sistema efetivo α
$d\tau_c^{(\alpha)}/dt$	Taxa de variação da tensão crítica decomposta do sistema efetivo α
da/dt	Taxa de deslizamentos de referência
$da^{(\alpha)}/dt$	Taxa de deslizamentos de referência no sistema efetivo α
h	Dimensão desde a ponta da trinca até o extremo superior da estrutura
$h_{\alpha\beta}$	Parcela que contabiliza endurecimento latente ou auto-endurecimento
h_1	Barreira de potencial nas esquematizações de Taylor
h_2	Barreira de potencial nas esquematizações de Taylor
l	medida de comprimento (m)
$l, m \ e \ n$	Utilizados para calcular os índices de Miller de um plano

m	Taxa de sensibilidade do material
$\mathbf{m}^{(\alpha)}$	Vetor unitário ortonormal a um plano de deslizamento
$\mathbf{m}^{(\alpha a)}$	Vetor de um plano cristalino relacionado a um vetor de um plano efetivo $\mathbf{M}^{(\alpha)}$
$\mathbf{m}^{(\alpha b)}$	Vetor de um plano cristalino relacionado a um vetor de um plano efetivo $\mathbf{M}^{(\alpha)}$
q	Endurecimento latente
s	Deformação de cisalhamento
$\mathbf{s}^{(\alpha)}$	Vetor unitário que indica direção de deslizamento
t	Tempo

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	19
1.1 OBJETIVOS	23
1.1.1 Principal	23
1.1.2 Específicos.....	23
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	24
2.1 A MICROESTRUTURA DOS METAIS	24
2.1.1 Estruturas cristalinas	24
2.1.2 Estrutura cúbicas	28
2.1.3 Orientações em cristais – índices de Miller	28
2.2 PLASTICIDADE CRISTALINA EM METAIS	31
2.2.1 Conceitos iniciais	31
2.2.2 Endurecimento por deformação plástica	33
2.2.3 Limite elástico, discordâncias e deslizamentos	33
2.2.3.1 Limite elástico de um cristal perfeito	33
2.2.3.2 Discordâncias e limite elástico prático	34
3 METODOLOGIA	41
3.1 A MICROMECAÂNICA E AS ESCALAS DE COMPRIMENTO DA FRATURA	41
3.2 MODELO DE ESTADO PLANO DE DEFORMAÇÕES	43
3.2.1 Tensões decompostas nos sistemas efetivos – CFC	44
3.2.2 Tensões decompostas nos sistemas efetivos – CCC	49
3.2.3 Deslizamentos paralelos ou perpendiculares aos sistemas efetivos	50
3.3 O MODELO ELASTO-VISCOPLÁSTICO CRISTALINO	51
3.3.1 Endurecimento	55
3.4 MODELO COESIVO	55

3.4.1 Modelos coesivos	56
3.4.2 Modelo utilizado	58
4 EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA	60
4.1 VERIFICAÇÃO DA IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO ELASTO-VISCOPLÁSTICO	60
4.1.1 Primeiro exemplo: tração pura	61
4.1.2 Segundo exemplo: peça com trinca pré-existente	65
4.1.2.1 Análise de da/dt constante com variação de m	68
4.1.2.2 Análise de m constante com variação de da/dt	71
4.1.2.3 Análise dos resultados	73
4.2 SIMULAÇÕES DE PROPAGAÇÃO DE TRINCAS CONSIDERANDO PLASTICIDADE CRISTALINA	73
4.2.1 Definição do problema: propriedades geométricas e malha de elementos finitos	73
4.2.2 Propriedades da simulação e dos materiais	76
4.2.3 Simulações de cristais CFC	77
4.2.3.1 Variação do expoente m	77
4.2.4 Simulações de cristais CCC	79
4.2.5 Parâmetros viscosos nos cristais CFC E CCC	81
4.2.6 Deformações plásticas	83
4.2.6.1 Deformações plásticas antes da propagação	84
4.2.6.2 Deformações plásticas durante a propagação	86
4.2.7 Distintas taxas de deslizamentos de referência (da/dt) para cada sistema efetivo	88
5 CONCLUSÕES	91
REFERÊNCIAS	93

1 INTRODUÇÃO

O constante desenvolvimento de tecnologias e de estruturas com tamanho físico reduzido, como por exemplo, nano chips e nano robôs, trouxe uma situação onde as teorias isotrópicas que descrevem o comportamento elasto-plástico (ou elasto-viscoplástico) dos materiais já não têm tanta acurácia. Para descrever o fluxo plástico de metais em pequenas escalas faz-se necessário tratar o mesmo de acordo com sua estrutura cristalina. Existem distintos modelos, considerando mono ou policristais, plasticidade dependente ou independente do tempo e é nesse âmbito que se insere o presente trabalho. Salienta-se que existem também estruturas como a pá de turbina aeronáutica mostrada na Figura 1.1, que não são pequenas em tamanho, mas são fabricadas como monocristais, necessitando do mesmo tratamento diferenciado na plasticidade. Sobre a pá de turbina apresentada, conforme Aslan (2010) a inexistência de contornos de cristais em superligas metálicas monocristalinas baseadas em níquel é traduzida em melhores propriedades para este tipo de estrutura como, por exemplo, maior resistência à corrosão e fluência. Também a flexibilidade do material submetido à altas temperaturas é mais regular/previsível em relação a materiais policristalinos. Conseqüentemente, pás de turbina monocristalinas são a microestrutura mais adequada para aviões à jato e turbinas de gás.



Figura 1.1 – Pá com estrutura monocristalina para turbinas (fonte: Aslan (2010, p. 2))

Entendendo a importância que estruturas monocristalinas vêm adquirindo e visando a possibilidade de analisar computacionalmente estas estruturas sendo solicitadas, no presente trabalho foi feita a implementação de um modelo elasto-viscoplástico cristalino. É feito também uso de um modelo elasto-plástico cristalino – implementado por Fornel (2018) – para comparar os resultados obtidos com estas duas distintas formulações. O modelo que não considera os efeitos viscosos pode apresentar problemas de unicidade de solução para determinadas condições e propriedades dos materiais: ver, por exemplo, Peirce et al. (1983). O modelo que considera as propriedades viscosas tende a minimizar estes problemas de unicidade de solução, principalmente em simulações tridimensionais, onde o modelo não viscoso requer a inversão de uma matriz 12x12 enquanto o modelo viscoso não requer qualquer tipo de inversão de matriz. A relação constitutiva viscosa pode também ser utilizada para simular a plasticidade cristalina não viscosa através do ajuste dos parâmetros viscosos, sendo eles a taxa de deslizamentos de referência (da/dt) e a taxa de sensibilidade do material (m). É interessante realizar este tipo de simulação por se extinguir o problema de unicidade de solução, visto que o modelo viscoso não requer inversão de qualquer tipo de matriz. Embora não abordado no presente trabalho o caso tridimensional (mais problemático em relação a

inversões de matrizes) será objeto de estudo de trabalhos futuros e um modelo que abranja esta situação se faz necessário.

A deformação de ligas metálicas em altas taxas de carregamento também tem sido foco de estudo nas últimas décadas, especialmente na indústria automotiva, aeroespacial e de defesa. Um entendimento do comportamento do material em diferentes taxas de carregamento ou como as propriedades viscosas (m , da/dt) alteram o comportamento do material nestes casos é de extrema importância. Portanto, além de simular o caso não viscoso, eliminando a falta de unicidade de solução, as rotinas viscosas podem também trabalhar com distintas taxas de carregamento.

Estes modelos de plasticidade são utilizados para uma gama de tipos de simulações, sendo que, como exemplo, têm-se as pás de turbina já apresentadas e também problemas envolvendo fadiga e fratura. O presente trabalho utiliza os modelos para simular situações que envolvem a mecânica da fratura, para assim verificar o bom funcionamento da implementação, bem como analisar características da fratura com os modelos de plasticidade propostos. Não obstante, fica elucidado o potencial de utilização dos modelos em pesquisas futuras, sendo o presente trabalho um passo no desenvolvimento deste tema dentro do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil (PPGEC).

Conforme descrito por Van der Giessen e Needleman (2002), a fratura é a ação na qual um objeto sólido é separado em dois ou mais pedaços e é estudada em duas frentes: nos projetos de estruturas resistentes à fratura, onde parâmetros fenomenológicos mensuráveis experimentalmente são determinados para a caracterização da iniciação e do crescimento de uma trinca; e no desenvolvimento de materiais resistentes à fratura, onde os processos físicos da separação do material são o foco principal dos estudos. Normalmente o processo de fratura envolve a nucleação e a propagação de trincas. Em geral o crescimento é muito mais entendido que a nucleação, sendo que o foco dos estudos tem se desenvolvido na iniciação do crescimento e na propagação de trincas pré-existentes.

A fratura é dependente do material e, em geral, envolve uma variação de escalas de comprimento, desde a atômica até a macroscópica, sendo que conexões quantitativas entre modelos dos processos físicos da fratura e as medidas de resistência à fratura na macroescala ainda não estão muito bem desenvolvidas. O presente trabalho se encontra no âmbito da micromecânica. É buscada a representação da atividade plástica que ocorre na concentração de tensões em estruturas com uma trinca pré-existente. Essa concentração de tensões acaba sendo restrita a uma pequena área próxima à ponta da trinca, onde a plasticidade cristalina é a que melhor representa o fluxo plástico que ali se encontra.

A apreciação de aspectos da mecânica da fratura fazendo uso da plasticidade cristalina está presente em estudos como, por exemplo, o de Rice (1987), que trata do assunto sem que ocorra endurecimento, e em Saeedvafa e Rice (1989), que abordam o tema com endurecimento em lei de potência. Já exemplos de estudos da mecânica da fratura onde os efeitos viscosos são considerados na plasticidade cristalina são os de Rice (1990), Columbus e Grujicic (2002), de Nielsen et al. (2012), de Martínez-Pañeda e Niordson (2016) e de Juul et al. (2017). No presente trabalho primeiramente serão analisados os campos de tensões e de deformações na região próxima à ponta de uma trinca (sem que a mesma propague) e os resultados comparados entre as duas implementações, a viscosa e a não viscosa. Posteriormente é permitido que a trinca propague com o uso de um modelo coesivo. Uma análise dos campos de deformações plásticas é feita (comparando os do presente trabalho com os encontrados na literatura) com o objetivo de verificar o modelo. Conforme será discorrido ao longo do texto uma ferramenta mais adequada para simular problemas de fratura é o que se alcança com o presente trabalho.

Os tipos de estrutura cristalina abordados são a cúbica de face centrada (CFC) e a cúbica de corpo centrado (CCC). Estes tipos de estrutura cristalina compõem vários metais. Exemplos de metais com microestrutura CFC são: alumínio, cobre, níquel, ouro e prata; enquanto exemplos de metais com microestrutura CCC são: cromo, ferro e nióbio.

Para um melhor entendimento das propriedades viscosas, não será considerado o endurecimento. Sabe-se que o mesmo tem fundamental importância no comportamento das diferentes estruturas cristalinas em altas taxas de carregamento. Porém, como este é um trabalho introdutório ao tema, decidiu-se investigar somente o efeito das propriedades viscosas para ter um melhor entendimento das mesmas no comportamento cristalino.

No presente capítulo se encontram os objetivos e a organização do trabalho, no capítulo 2 é apresentada uma fundamentação teórica, necessária para o entendimento de características dos tipos de estrutura abordados no presente trabalho e da plasticidade cristalina, assim facilitando o entendimento dos modelos de EPD e de plasticidade cristalina. No capítulo 3 se encontra a metodologia utilizada, sendo que são explicados alguns tópicos da micromecânica e suas escalas de comprimento, bem como o modelo de elasto-viscoplasticidade, o modelo de estado plano de deformações e o modelo coesivo utilizados. No capítulo 4 são apresentados os resultados que são compostos de 3 distintos exemplos: um considerando somente tração pura, um segundo considerando uma trinca estacionária submetida à modo I de fratura, comparando os campos de tensões obtidos entre dois distintos modelos de plasticidade cristalina, bem como a solução analítica de Rice (1987) e um terceiro com a plasticidade cristalina atuando

em problemas envolvendo a propagação de trincas em modo I de fratura. Por fim, no capítulo 5 conclusões a partir dos resultados obtidos são elencadas.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Principal

O objetivo principal é estudar os efeitos descritos pelos modelos de plasticidade cristalina, bem como das propriedades viscosas dos mesmos (taxa de sensibilidade e taxa de deslizamentos de referência) na mecânica da fratura.

1.1.2 Específicos

- Implementar um modelo elasto-viscoplástico cristalino nas rotinas do METAFOR β (PONTHOT, 1995);
- Verificar o bom funcionamento do modelo comparando campos de tensões com um modelo elasto-plástico já existente, implementado por Fornel (2018);
- Integrar o modelo elasto-viscoplástico proposto com um modelo coesivo, também pré-existente, e verificar seu bom funcionamento;
- Analisar a fratura em diferentes tipos de estruturas cristalinas (CFC e CCC);
- Simular a propagação de trincas e verificar se campos de tensões e de deformações plásticas são coerentes com os obtidos na literatura, assim verificando as implementações;
- Explorar o efeito de propriedades viscosas (m , da/dt) no comportamento em fratura.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 A MICROESTRUTURA DOS METAIS

Metais se organizam em pequenas estruturas (cristais) sobrepostas que, quando analisadas individualmente, têm comportamento distinto da resposta macroscópica. A isotropia macroscópica dos metais inexistente quando se trata o material em pequenas escalas de comprimento. Esta subseção visa explicar o comportamento geral de cristais para possibilitar um posterior entendimento do comportamento cristalino metálico (na subseção 2.2). No final da presente seção é apresentada uma técnica utilizada na literatura para orientar direções e planos em cristais.

2.1.1 Estruturas cristalinas

É válido salientar que existem estruturas metálicas – como as pás de turbina apresentadas na Figura 1.1 – que são monocristalinas na escala macroscópica. Porém, em geral, macroscopicamente os metais são estruturas policristalinas. No presente trabalho se trata o material na microescala, sendo que são simuladas trincas em estruturas policristalinas, porém se propõe que a ponta da trinca esteja inserida em um monocristal – e nesta ponta é que se desenvolvem os campos de tensões e de deformações que realmente interferem na resolução do problema.

Para definir monocristais ideais têm-se algumas observações de Kubbinga (2012), que diz que um cristal é um arranjo periódico de átomos (ou conjuntos de átomos) formado em ambiente estável a partir de uma solução. Estruturas cristalinas contêm falhas – vazios, contaminantes – enquanto um cristal ideal seria uma repetição de objetos idênticos sem tais falhas.

A menor parcela (célula unitária) de um cristal ideal é chamada de base, sendo que ela pode ser formada por um ou mais átomos – uma ilustração de uma base de um cristal CFC é mostrada na Figura 2.1. Os cristais ideais são compostos por repetições de bases idênticas (conforme mostrado na Figura 2.2), sendo que a cada base pode ser associado um ponto no espaço e o conjunto destes pontos forma uma rede cristalina. A rede cristalina pode ser descrita, portanto, como uma sobreposição de células unitárias idênticas (com mesmo número e disposição de átomos). Nos vértices das células unitárias existem átomos iguais, de maneira

que estes pontos são equivalentes por operações translacionais. A totalidade destes pontos equivalentes por translação de uma rede cristalina é chamada de rede de *Bravais* do cristal.

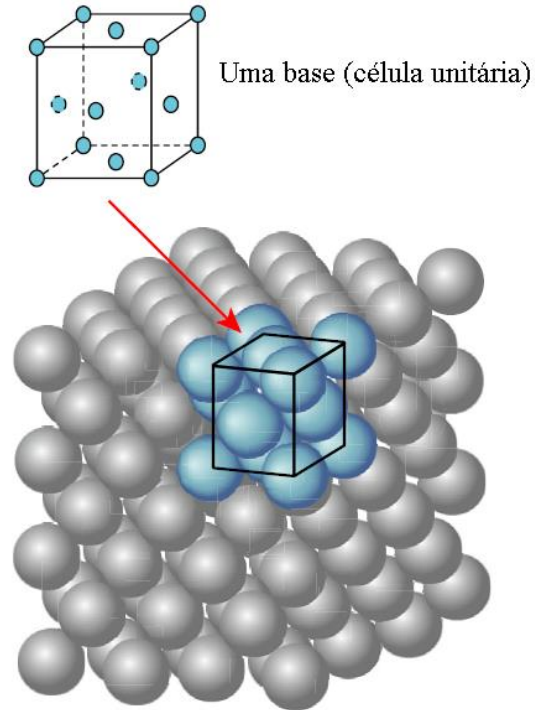


Figura 2.1 – Ilustração de base – célula unitária – de cristal CFC (fonte: adaptado de Wang et al. (2015, p. 736))

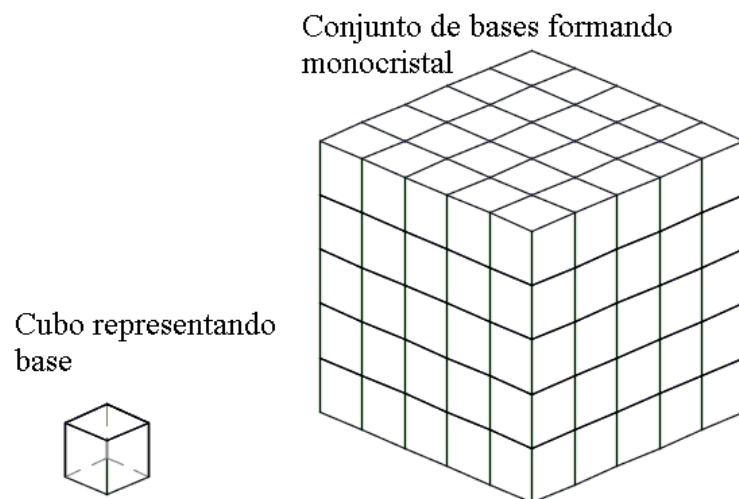


Figura 2.2 – Ilustração de repetições de bases compondo um monocristal

A partir das redes de Bravais podem ser definidos os sistemas cristalinos. Existem sete sistemas, sendo que eles englobam todas as 14 possíveis redes de Bravais. Os sistemas cristalinos são simetrias por reflexões e rotações possíveis em uma rede de Bravais. Os sete sistemas cristalinos são: triclínico, monoclínico, ortorrômbico, tetragonal, trigonal, hexagonal e cúbico. As 14 redes de Bravais são apresentadas na Figura 2.3 e a Tabela 1 apresenta o número de redes existentes para cada tipo de sistema cristalino. Por fim, para relacionar as redes de Bravais e os sistemas cristalinos são utilizados dois parâmetros de rede: os módulos das dimensões das bases, a , b e c e os ângulos formados entre a , b e c (α , β e γ). A Tabela 1 também apresenta os parâmetros de rede para cada tipo de sistema cristalino e nela se observa que o sistema cúbico tem a (módulo da dimensão das arestas da célula) e $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$. Considerando estes parâmetros de rede, pode-se associar um sistema cristalino a uma rede de Bravais.

Associar um cristal à uma rede de Bravais é importante, visto que o comportamento de estruturas cristalinas fisicamente solicitadas, em geral, está associado a planos e direções que ocorrem onde há máxima densidade planar e linear de átomos. E esses planos e direções são facilmente identificados através das redes de Bravais, conforme será elucidado ao se entender a plasticidade cristalina, na subseção 2.2.

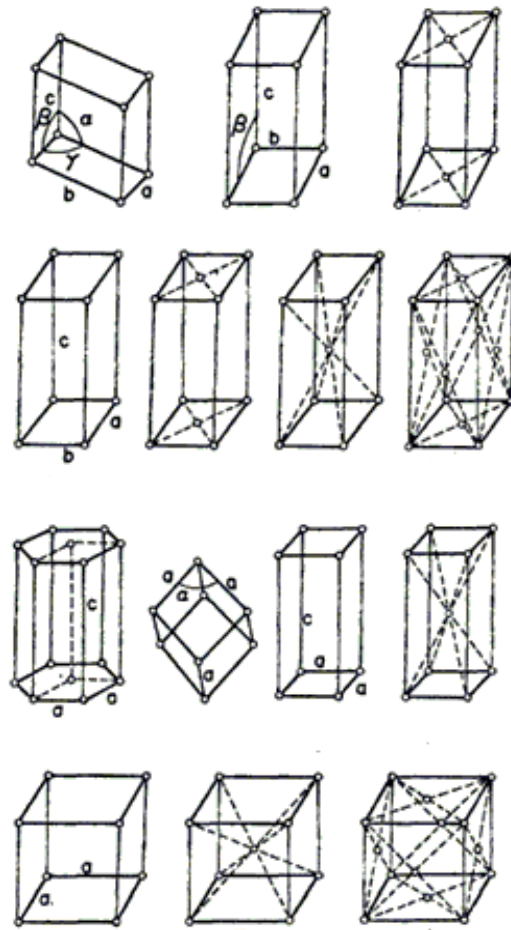


Figura 2.3– As 14 redes de Bravais (fonte: adaptado de Landau e Lifshitz (1984, p. 406))

Tabela 1 – Número e parâmetros de redes para cada tipo de sistema cristalino

Sistema	Número de redes	Parâmetros de rede
Triclínico	1	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclínico	2	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ortorrômbico	4	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$a \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cúbico	3	$a; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$a; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Hexagonal	1	$a \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

(fonte: adaptado de Kittel (2006, p. 9))

2.1.2 Estruturas cúbicas

Como já exemplificado, muitos metais puros cristalizam nos formatos cúbico de face centrada (CFC) ou cúbico de corpo centrado (CCC) – as estruturas são ilustradas na Figura 2.4. O presente trabalho analisa estes sistemas no Estado Plano de Deformações (EPD).

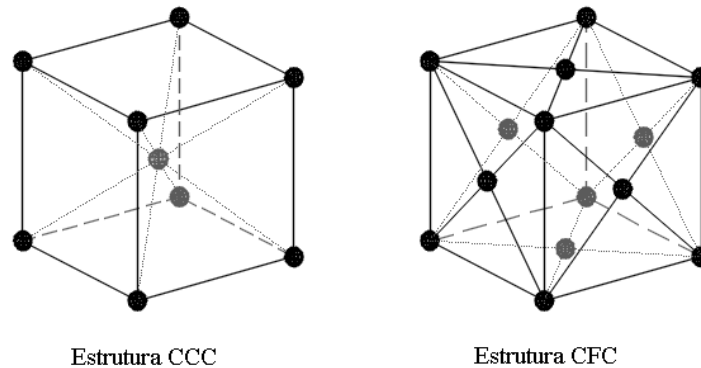


Figura 2.4 – Redes de Bravais CCC e CFC

2.1.3 Orientações em cristais – índices de Miller

Uma vez que vários fenômenos físicos dependem das direções consideradas no cristal, se faz necessário utilizar planos e direções que passam pelos pontos da rede. Os índices de Miller são a ferramenta adequada para orientar estes planos e direções cristalográficas. Estes índices ocorrem em trios, denominados u , v e w . Por convenção, a orientação de um plano é representada entre parênteses $(u \ v \ w)$, enquanto para uma direção cristalográfica os índices de Miller são dados entre colchetes $[u \ v \ w]$.

Conforme explicam Khan e Huang (1995), um plano no espaço pode ser descrito pela Equação 1.

$$\frac{x}{c_1} + \frac{y}{c_2} + \frac{z}{c_3} = 1 \quad (1)$$

onde c_1 , c_2 e c_3 são as interseções deste plano nos eixos x , y e z , respectivamente. Como neste trabalho serão abordadas somente células cúbicas, pode-se considerar os eixos x , y e z como vetores ortonormais que definem o espaço tridimensional – para o caso geral os vetores deveriam ser os eixos das células cristalinas. A Figura 2.5 mostra os eixos considerando o tamanho da aresta como unitário.

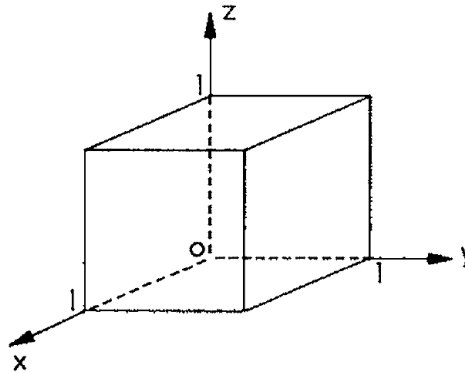


Figura 2.5 – Célula cúbica (fonte: Khan e Huang (1995, p.313))

A Figura 2.6 ilustra os índices de Miller de 3 planos distintos, sendo que uma barra acima de um inteiro representa um número negativo e que, para a obtenção do plano $(0 \bar{1} 0)$ a origem do eixo y é trasladada para outro vértice da célula, assim determinando as recíprocas das interseções do plano oposto como sendo 0, -1 e 0. Para encontrar os índices de Miller de um plano devem ser realizados três passos:

- a. Achar as interseções existentes nos eixos x , y e z (estas interseções são c_1 , c_2 e c_3 , respectivamente);
- b. Calcular as suas inversas ($l=1/c_1$; $m=1/c_2$; e $n=1/c_3$) – caso não haja interseção em um ou dois eixos, considerar os respectivos l , m ou n iguais a zero;
- c. Reduzir as inversas nos três menores números inteiros u , v e w , tal que as proporções $u:v:w$ e $l:m:n$ sejam iguais.

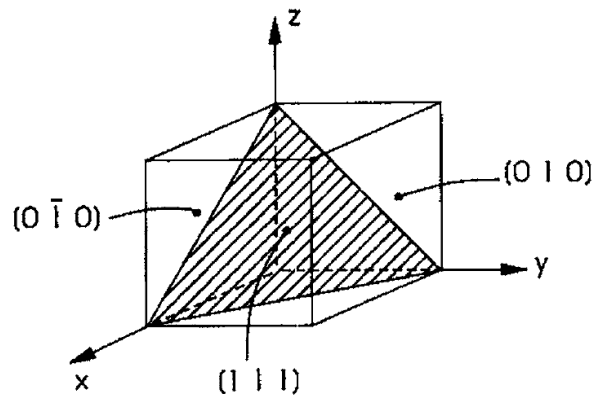


Figura 2.6 – Índices de Miller para planos (fonte: Khan e Huang (1995, p.314))

Já os índices de uma direção são as componentes do vetor da direção, determinados ao longo de cada um dos eixos de coordenadas e reduzidos para os menores inteiros possíveis. Alguns exemplos são mostrados na Figura 2.7. Novamente uma barra acima de um inteiro representa um número negativo.

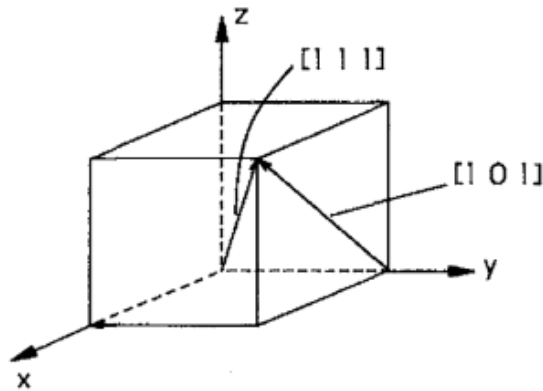


Figura 2.7 – Índices de Miller para direções (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 315))

Em vista da simetria da estrutura do cristal, vários planos têm as mesmas distribuições atômicas, como os planos $(\bar{1} 0 0)$, $(1 0 0)$, $(0 \bar{1} 0)$, $(0 1 0)$, $(0 0 1)$, e $(0 0 \bar{1})$. Estes planos são chamados de cristalográfico equivalentes e são representados pelos índices de um dos planos, apresentados entre chaves $\{1 0 0\}$. Outro exemplo de planos cristalográfico equivalentes é $\{1 1 1\}$, representando oito planos: $(\bar{1} \bar{1} \bar{1})$, $(1 1 1)$, $(1 1 \bar{1})$, $(1 \bar{1} 1)$, $(\bar{1} 1 1)$, $(1 \bar{1} \bar{1})$, $(\bar{1} \bar{1} 1)$, $(\bar{1} 1 \bar{1})$;

sendo que esta é uma família de planos encontrada nos cristais CFC. Já as direções com as mesmas distribuições atômicas são chamadas cristalograficamente equivalentes e são apresentadas entre chevrons $\langle U V W \rangle$. Por exemplo, $\langle 1 1 0 \rangle$ inclui $[1 1 0]$, $[1 0 1]$, e $[0 1 1]$.

2.2 PLASTICIDADE CRISTALINA EM METAIS

2.2.1 Conceitos iniciais

O entendimento da plasticidade cristalina começou com os estudos de Ewing e Rosenhain (1899 e 1900), onde policristais metálicos foram deformados além do seu limite elástico. Nestes estudos foram observados degraus de deslizamento na superfície dos corpos deformados plasticamente e estes degraus surgiram devido a bandas de deslizamento que ocorreram dentro do material, nas quais uma parte do material cisalha em relação à outra adjacente. A Figura 2.8 ilustra o descrito acima, um policristal metálico antes e depois de uma deformação plástica.

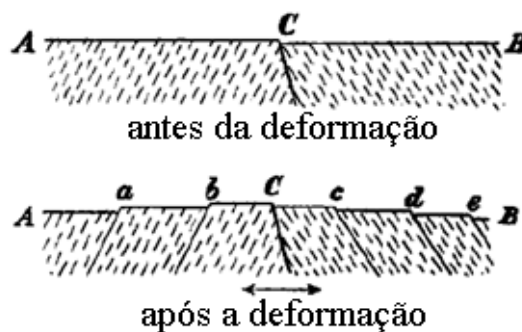


Figura 2.8 – Representação de um corte na região próxima à superfície de um policristal metálico antes e depois de ocorrer deformação plástica (fonte: adaptado de Ewing e Rosenhain (1900, p. 362))

Na parte superior da Figura 2.8 são apresentados dois monocristais, com seus limites estabelecidos com linha indicada pela letra C (monocristal AC à esquerda e CB à direita). Observa-se que cada monocristal tem uma orientação cristalográfica relativamente homogênea (as linhas tracejadas indicam a orientação cristalográfica). Na parte inferior da Figura 2.8 o metal se encontra deformado plasticamente e as linhas representadas pelas letras *a*, *b*, *c*, *d* e *e* no corte ilustram regiões onde ocorreu deslizamento devido à deformação plástica, ocasionando o surgimento de degraus de deslizamento na superfície. Na Figura 2.9 (uma micrografia óptica de um metal policristalino deformado plasticamente) é possível

visualizar os degraus descritos e apresentados na representação da Figura 2.8 – os contornos mais escuros representam limites entre monocristais e as estrias os degraus decorrentes da deformação plástica.



Figura 2.9 – Micrografia óptica de metal policristalino deformado plasticamente (fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362))

Ewing e Rosenhain (1899 e 1900) concluíram que metais e ligas metálicas são monocristais ou agregados monocristalinos (policristais) e que a deformação plástica se dá pelo cisalhamento em determinados planos e direções – dependendo da estrutura cristalina do metal. Os planos em que deformações plásticas ocorrem são chamados de planos de deslizamento, e as direções, direções de deslizamento. Associando um plano de deslizamento à uma direção tem-se o que é chamado de sistema de deslizamento. Os sistemas de deslizamento de cristais metálicos começaram a ser identificados na década de 1920.

Schmid (1924, apud Asaro, 1983, p.8) propôs que o início do fluxo plástico em um sistema cristalográfico se dá quando a tensão existente neste sistema chega a um valor crítico. Também propôs que as tensões existentes em um sistema não influenciam no início do fluxo plástico de outros. Estas observações são nomeadas de lei de Schmid. Cabe salientar que estas observações da lei de Schmid são bem específicas para as condições de contorno de tração simples e tipos de estruturas cristalinas (CFC e HC) por ele estudados.

Através de observações experimentais se concluiu que em grande parte dos metais os planos de deslizamento coincidem com planos onde ocorre a máxima densidade planar de átomos (que resultam na maior separação entre planos encontrada na estrutura cristalina) e as direções

de deslizamento se encontram onde está a maior densidade linear de átomos. Em cristais CFC o deslizamento incide na família de planos $\{111\}$ e na família de direções $\langle 110 \rangle$. Salienta-se que a lei de Schmid não descreve perfeitamente o comportamento plástico cristalino (que depende também de condições de contorno e direções de carregamento), contudo é uma lei amplamente aceita e utilizada, sendo que as peculiaridades de possíveis defeitos desta lei não são objeto de estudo do presente trabalho.

2.2.2 Endurecimento por deformação plástica

Com base em resultados experimentais, Taylor e Elam (1923 e 1925) concluíram que monocristais de alumínio endurecem com o deslizamento de sistemas (um ou mais) e que o deslizamento em um sistema gera endurecimento nos outros também, mesmo que estes outros não tenham sofrido deslizamento. Um sistema que desliza tem seu endurecimento chamado de auto-endurecimento e um que não desliza e endurece em função de outro sistema ter deslizado tem o chamado de endurecimento latente. Este endurecimento latente é normalmente, em magnitude, igual ou maior que o auto-endurecimento que o gera, sendo que para cristais CFC usualmente a razão entre o endurecimento latente e o auto-endurecimento está entre 1,0 e 1,4, conforme constatado por Kocks (1970).

2.2.3 Limite elástico, discordâncias e deslizamentos

Na presente subseção se faz um apanhado histórico com as primeiras observações e tentativas de descrição do limite elástico e então é apresentada uma formulação matemática que representa o comportamento do material.

2.2.3.1 Limite elástico de um cristal perfeito

Frenkel (1926) considerou um cristal perfeito para calcular a tensão de cisalhamento que resultaria no movimento de um plano de átomos sobre outro. O modelo é apresentado na Figura 2.10 com dois planos de átomos representados por linhas horizontais, separados por uma distância a , sendo que a distância entre os átomos de cada plano é denotada por b e o deslizamento (movimento) entre duas fileiras ocorre na mesma direção de b e é representado por x . A tensão de cisalhamento existente no cristal é denotada por τ . Neste modelo se supõe que os planos se movem rigidamente.

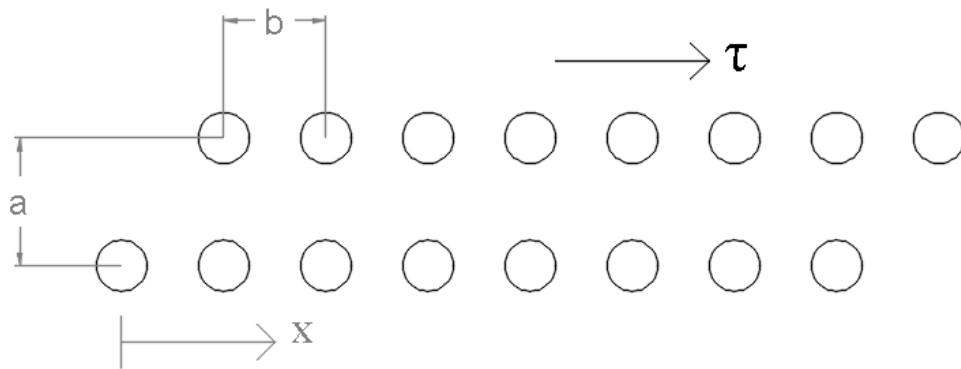


Figura 2.10 – Características dos planos de átomos (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 318))

Quando os átomos se encontram alinhados um exatamente acima (ou abaixo) do outro, têm-se posições de equilíbrio. Nestas posições pode-se imaginar $x=0$ ou $x=b$. Com um destes respectivos valores atribuídos a x não é necessária nenhuma tensão de cisalhamento para manter o equilíbrio. Quando um átomo não está perfeitamente alinhado com o logo acima (ou abaixo) dele, um potencial interatômico faz com que o mesmo seja atraído na direção do átomo mais próximo da fileira de cima (ou de baixo). Frenkel (1926) observou os seguintes aspectos: τ é menor quanto maior o espaçamento a entre os planos; e também é menor quanto menor o espaçamento b entre os átomos em um mesmo plano. Em cristais CFC tem-se que $b/a=(3/2)^{0,5}$. Para estas características a tensão de cisalhamento encontrada por Frenkel (1926) para um cristal CFC seria de aproximadamente $\tau=G/10$ – sendo que G é o módulo de Elasticidade transversal do material. Contudo, divergindo deste resultado teórico, os ensaios em monocristais apontavam para resistências próximas à $10^{-6}G \sim 10^{-4}G$. Esta diferença gigantesca entre os resultados foi explicada mais tarde, quando defeitos nos cristais foram considerados nos cálculos, conforme é elucidado na próxima subseção.

2.2.3.2 Discordâncias e limite elástico prático

A um tipo de defeito existente nos cristais foi dado o nome de discordância. As discordâncias foram propostas/ apresentadas por três diferentes autores no mesmo ano – Orowan (1934), Polanyi (1934) e Taylor (1934) – e justificam a diferença dos resultados experimentais em relação aos teóricos da proposta de Frenkel (1926). Tópicos da análise feita por Taylor (1934) são mostrados abaixo e na conclusão desta subseção são apresentadas visualizações

tridimensionais das discordâncias e o chamado vetor de Burgers, que define de forma mais precisa as direções de um deslizamento.

Taylor (1934) explicou, também através de um modelo atômico, como uma discordância diminui a resistência de um monocristal. Primeiramente, simulando um cristal perfeito – com distribuição atômica mostrada na Figura 2.11 – estimou o potencial interatômico ao qual a linha de átomos identificada por C-D estaria sujeita devido à sua interação com as linhas superior e inferior. O autor assumiu que o potencial em C-D devido à cada linha poderia ser representado por $-A\cos(2x\pi/\lambda)$, sendo que λ é o espaçamento interatômico (A_0 até A_1 , por exemplo) e x a distância horizontal à partir de C_0 . O potencial total devido às duas linhas (superior e inferior) é apresentado na Equação 2 – a curva é mostrada na parte inferior da Figura 2.11. Nota-se que a linha C-D está em uma posição onde a energia potencial é mínima, isto porque a mesma se encontra em equilíbrio. Para deslocar esta linha C-D para a direita, por exemplo, resultando em C_0 alinhado verticalmente com A_1 e B_1 (uma nova uma posição de equilíbrio), seria necessário fornecer energia de forma a superar uma espécie de barreira de potencial $4A$, que pode ser identificada na Figura 2.11 – é duas vezes a amplitude $2A$ da senoide (A é uma constante).

$$\phi = 2A\cos\left(\frac{2x\pi}{\lambda}\right) \quad (2)$$

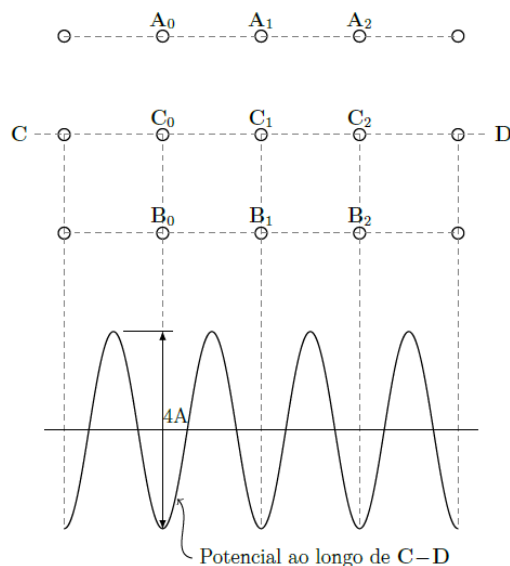


Figura 2.11 – Esquemática do potencial interatômico em um cristal perfeito (fonte: adaptado de Taylor (1934, p. 371) apud Fornel (2018, p. 18))

Taylor (1934) então simulou um cristal considerando a existência de uma discordância. O centro da discordância – a posição O na Figura 2.12 – rearranja os átomos em uma região próxima a ele, sendo que os acima são comprimidos e os abaixo tracionados. Propondo a disposição mais simples para demonstrar o efeito gerado por uma discordância o autor confinou o efeito à uma distância horizontal de $(N+1/2)\lambda$, com $N+2$ átomos na linha superior e $N+1$ átomos na linha inferior. Fora desta largura de $(N+1/2)\lambda$ considera-se o efeito da discordância inexistente e um espaçamento regular entre os átomos de λ . A Figura 2.12 apresenta a disposição dos átomos e a curva de potencial para $N=3$. Para gerar esta curva o autor fez o mesmo tipo de aproximação do cristal perfeito e chegou à Equação 3. Percebe-se uma redução impactante na barreira de potencial na região próxima ao centro da discordância (na curva da Figura 2.12).

$$\varphi = -A \cos\left(\frac{2x\pi}{\lambda}\right) \left(\frac{N+1}{N+\frac{1}{2}} \right) - A \cos\left(\frac{2x\pi}{\lambda}\right) \left(\frac{N}{N+\frac{1}{2}} \right) \quad (3)$$

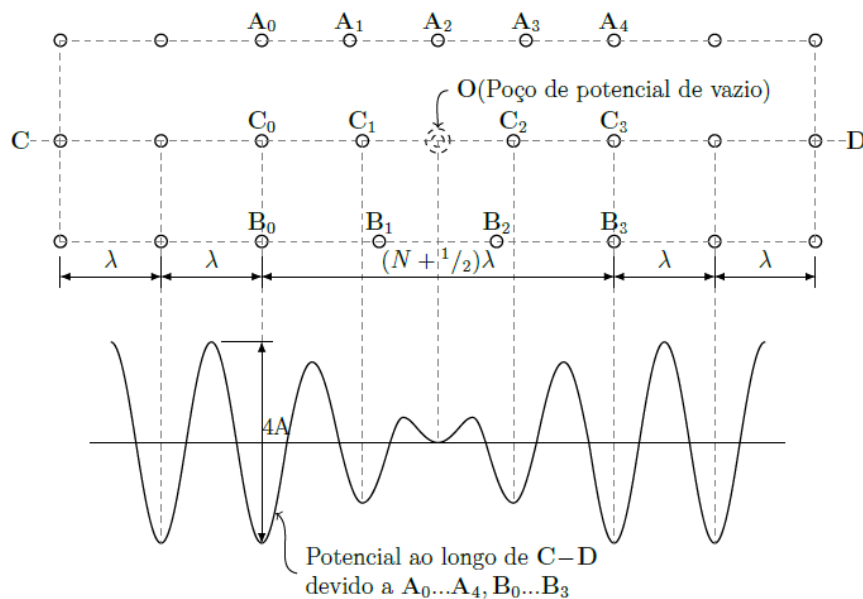


Figura 2.12 – Esquema do potencial interatômico com existência de uma discordância (fonte: adaptado de Taylor (1934, p. 371), apud Fornel (2018, p. 19))

Taylor (1934) então simulou a última estrutura submetida à uma tensão de cisalhamento, assim deslocando levemente as linhas de átomos e gerando uma variação na curva de

potencial interatômico ao longo de C–D, conforme mostrado na Figura 2.13. Considerando o deslocamento como sendo δ , é possível definir a curva de potencial com a Equação 4.

$$\varphi = -A \cos\left(2\pi\left(\frac{x - \delta}{\lambda}\right)\right) \left(\frac{N+1}{N + \frac{1}{2}}\right) - A \cos\left(\frac{2x\pi}{\lambda}\right) \left(\frac{N}{N + \frac{1}{2}}\right) \quad (4)$$

Nota-se que nesta última configuração diminuiu ainda mais a barreira de potencial para que a linha de átomos posicionada em C_2 (barreira identificada por h_2 na Figura 2.13) passe a ocupar a posição do poço de ausência de potencial O , sendo que com esta configuração uma diferença de energia térmica pode bastar para deslocar a linha de átomos de C_2 para O . Caso ocorra essa movimentação de C_2 , a discordância é deslocada para a direita. A existência da discordância associada com a tensão cisalhante explica o mecanismo básico que coordena a resistência real dos monocristais.

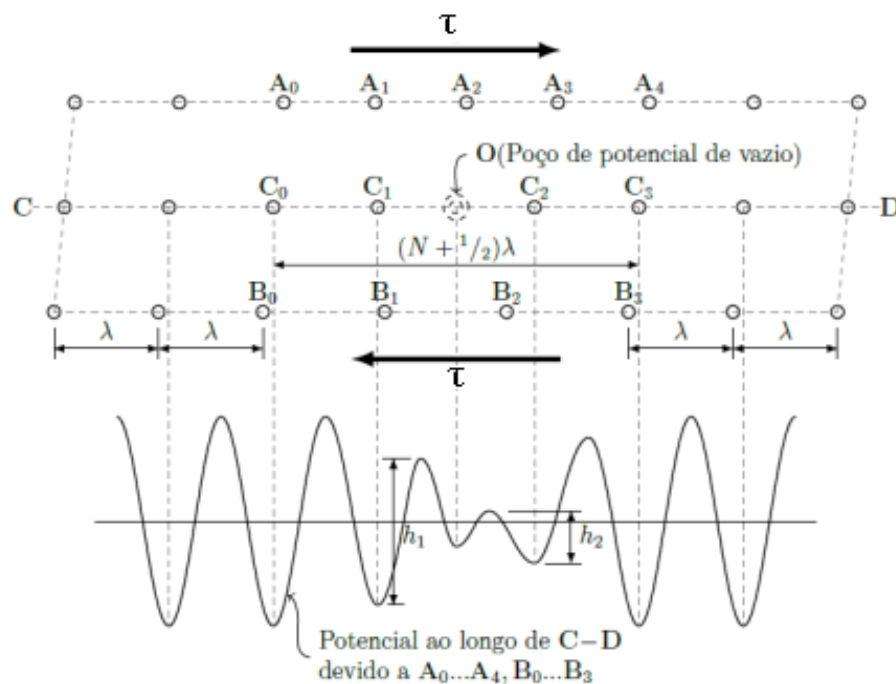


Figura 2.13 – Potencial interatômico com a existência de uma discordância em estrutura sob cisalhamento (fonte: adaptado de Taylor (1934, p. 374) apud Fornel (2018, p. 20))

Com esta última configuração e fazendo mais algumas considerações Taylor (1934) chegou em uma relação de tensão-deformação – dada na Equação 5 – que consegue reproduzir os

resultados experimentais, assim evidenciando a relação das discordâncias com a plastificação do material.

$$\tau = \tau_T + \kappa G \sqrt{\frac{\lambda \gamma}{L}} \quad (5)$$

sendo que τ é a tensão de cisalhamento necessária para o movimento de discordâncias dentro da subestrutura, τ_T a tensão para mover somente uma discordância, κ uma constante que depende da distribuição dos centros das discordâncias, G o módulo de elasticidade transversal do material, γ a deformação de cisalhamento e L a dimensão do cristal na direção do movimento das discordâncias.

Uma demonstração tridimensional de uma discordância do tipo de aresta é apresentada na Figura 2.14, onde as esferas representam átomos e pode ser visualizado que todos os átomos estão regularmente arranjados, exceto aqueles do meio plano ABCD. A discordância de aresta é, em resumo, o meio plano extra inserido dentro do cristal perfeito (o deixando com imperfeições) e o nome aresta vem do fato que a linha AB, chamada de linha de discordância, ser a aresta do meio plano extra ABCD.

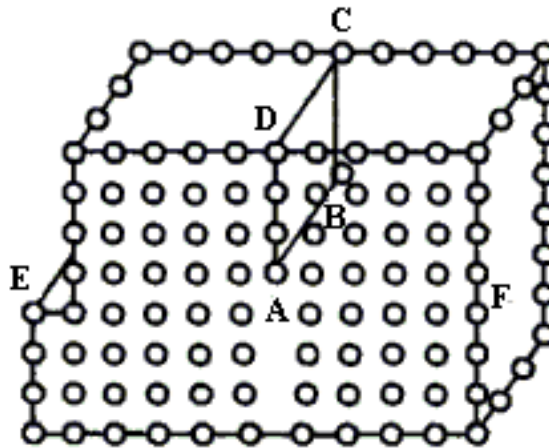


Figura 2.14 – Discordância de aresta (fonte: Khan e Huang (1995, p. 321))

Na Figura 2.15 uma discordância se move da superfície esquerda ao longo de AB para a direita. Na medida que ela se move, faz os átomos acima de AB deslizarem sobre os átomos abaixo de AB pela distância de um espaço atômico. Este deslizamento acontece gradualmente sobre todo o plano AB enquanto a discordância passa pelo plano. A tensão necessária para mover uma linha de discordância através de um espaço atômico é muito menor do que aquela

requerida para mover o bloco inteiro ao mesmo tempo, o que, portanto, explica a menor resistência de cristais reais (KHAN E HUANG, 1995).

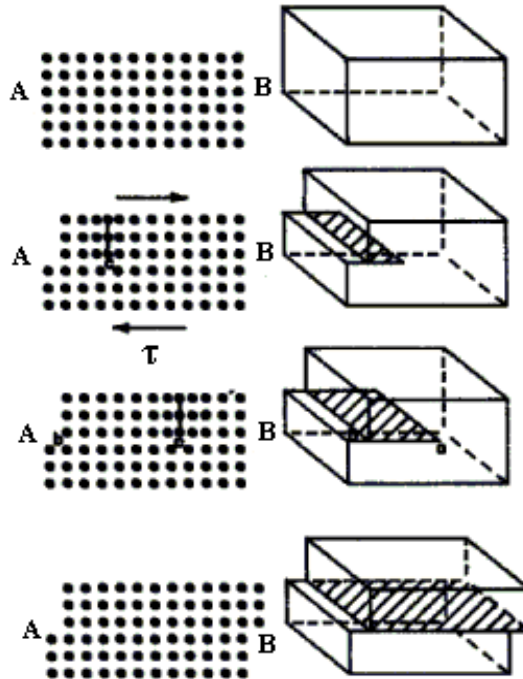


Figura 2.15 – Deformação plástica por movimento de discordância (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 321))

Khan e Huang(1995) também sugerem que para definir as discordâncias de aresta mais precisamente, o vetor de Burgers \mathbf{b} deve ser utilizado. O vetor de Burgers \mathbf{b} é introduzido para descrever a direção de deslizamento de uma discordância, e ele é determinado pelo circuito de Burgers, um caminho fechado envolvendo duas direções da estrutura e em volta da linha de discordância. Um circuito de Burgers é mostrado na Figura 2.16: nota-se que o ponto A representa uma discordância de aresta perpendicular ao papel. Pode ser imaginado um caminho atômico começando a partir do ponto S e indo quatro átomos à direita, então quatro átomos para baixo, então quatro átomos à esquerda, e finalmente quatro átomos para cima até o ponto F. Devido à presença da discordância de aresta, este caminho não pode ser fechado, e o ponto F está espaçado a um átomo de distância do ponto S. O vetor requerido para fechar o circuito de F até S define o vetor de Burgers \mathbf{b} . A Figura 2.16(a) mostra o descrito. Já para um cristal perfeito, os pontos S e F se encontrariam, como mostrado na Figura 2.16(b). A direção do vetor de Burgers define a direção de deslizamento da discordância e a magnitude dele é

igual a um espaço atômico ao longo de uma direção de deslizamento. Com o vetor de Burgers o plano de deslizamento pode ser definido mais precisamente. Um plano de deslizamento de uma discordância é aquele que contém o vetor de Burgers e a linha de discordância. Um exemplo seria o plano AB na Figura 2.15, que tem as linhas de discordâncias mostradas nas figuras, sendo que a direção de deslizamento poderia ser descrita pelo vetor de Burgers e as quatro etapas resumidas somente em uma figura com a linha de discordância e o vetor de Burgers (que indicaria a direção do deslizamento).

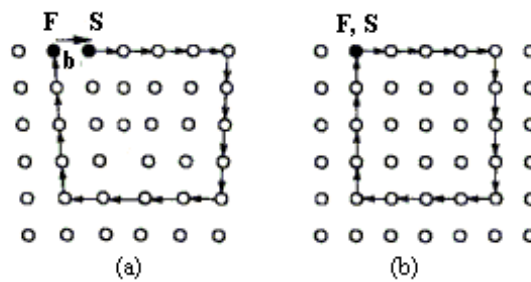


Figura 2.16 – Visualização de circuito e vetor de Burger: (a) em um cristal real (imperfeito); (b) em um cristal perfeito (fonte: adaptado de Khan e Huang (1995, p. 322))

3 METODOLOGIA

As simulações de peças submetidas a situações de fratura que serão apresentadas são discretizadas numericamente através do método dos elementos finitos (MEF) utilizando elementos quadriláteros bilineares. Em relação às rotinas pré-existentes, três modelos são adicionados a elas para a realização do presente trabalho: um deles é o que traz a configuração dos cristais para o estado plano de deformações (subseção 3.2), outro é o das relações constitutivas elasto-viscoplásticas (subseção 3.3), e o terceiro é o coesivo (subseção 3.4). O modelo das relações constitutivas do material elasto-viscoplástico é baseado nos modelos de Peirce et al. (1983) e Asaro (1983), considerando somente pequenas deformações. Já o modelo que traduz o problema para o estado plano de deformações é o de Rice (1987), enquanto o modelo coesivo é baseado no de Needleman (1992), este último tendo suas últimas atualizações implementadas por Moresco (2018). Na subseção 3.1 a escala de comprimento utilizada no presente trabalho, bem como o tipo de fratura buscado nas simulações são apresentados.

3.1 A MICROMECAÂNICA E AS ESCALAS DE COMPRIMENTO DA FRATURA

A micromecânica da fratura envolve uma ampla gama de escalas de comprimento. Existem dois tipos de comportamentos, um deles com poucas discordâncias, no qual ocorre uma ruptura por clivagem e outro com muita atividade plástica devida às discordâncias precedendo a fratura, sendo que ocorre um intenso relaxamento do campo de tensões próximo à ponta da trinca, resultando no arredondamento da mesma e assim obstruindo a ruptura por clivagem. No presente trabalho são testados diferentes níveis de plastificação através de modificações que alteram o ponto de início da atividade plástica, sendo que assim uma situação intermediária pode ser alcançada, onde ocorre uma fratura por clivagem com presença de determinado nível de fluxo plástico. No presente trabalho se considera que a atividade plástica emana da ponta da trinca.

Uma breve descrição de escalas de comprimento que são importantes na ruptura por clivagem em um metal policristalino relativamente dúctil é apresentada na Figura 3.1, onde se observa 4 escalas, sendo que na escala identificada pelas letras *a* e *b* os campos de tensões e de

deformações são descritos em termos macroscópicos e, frequentemente, da mecânica do contínuo isotrópica. Na escala identificada pela letra *c* se encontram as teorias mono ou policristalinas, sendo a monocristalina a do presente trabalho. Nesta escala a anisotropia dos cristais é considerada, o que gera variações nas tensões e deformações dentro dos mesmos. Estas flutuações são descritas utilizando-se um modelo elasto-viscoplástico cristalino, que é um modelo constitutivo contínuo, porém contabiliza a natureza distinta dos sistemas de deslizamento onde o fluxo plástico ocorre. Como consequência, o campo de deformações é bem diferente do campo de deformações de um sólido isotrópico. A escala identificada pela letra *d* contém discordâncias individuais distribuídas nas proximidades da ponta da trinca, sendo que são as mesmas responsáveis por dissipação plástica ou concentração de tensões, de acordo com sua distribuição. Nesta última escala o fluxo plástico emana não só da ponta da trinca, mas também das discordâncias próximas à ponta da trinca. Na escala *e* é onde o processo de separação ocorre – é uma região contida na zona plástica de uma discordância.

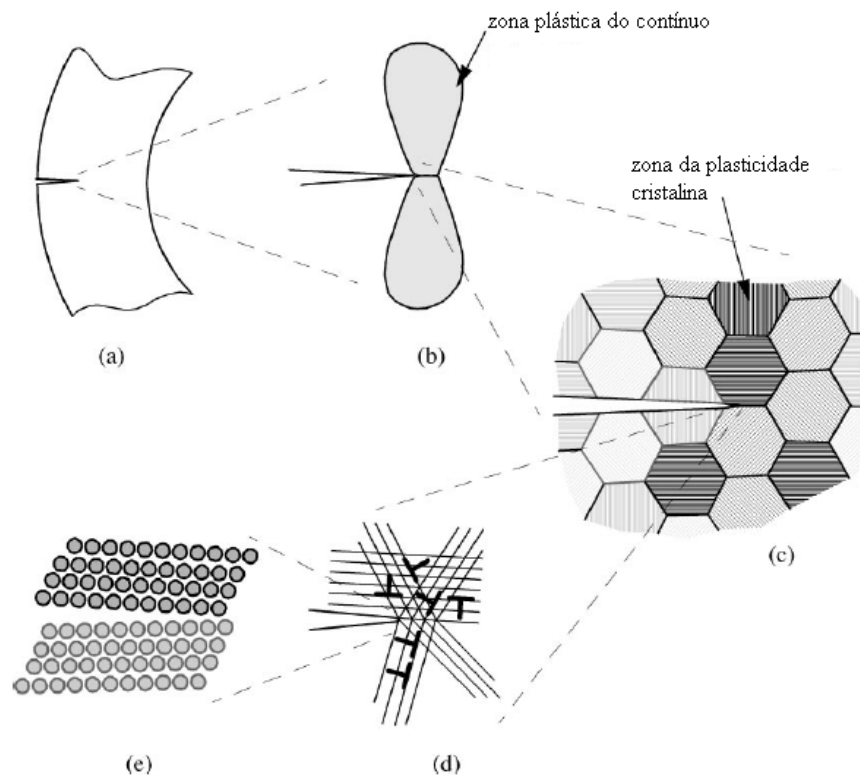


Figura 3.1 – Escalas de comprimento na mecânica da fratura: (a) e (b), zona da escala macroscópica; (c) zona da plasticidade cristalina; (d) zona das discordâncias individuais; e (e) zona plástica de uma discordância (fonte: adaptado de Van der Giessen e Needleman (2002, p. 143))

3.2 MODELO DE ESTADO PLANO DE DEFORMAÇÕES

No presente trabalho as estruturas são simuladas no Estado Plano de Deformações (EPD). Visto que este é um trabalho introdutório à plasticidade cristalina, o EPD é interessante pois somente 3 sistemas de deslizamento são considerados (para as estruturas CCC e CFC), enquanto simular uma destas estruturas tridimensionalmente acarretaria em considerar 12 sistemas de deslizamento. Embora exista o intuito de simular estruturas considerando plasticidade cristalina tridimensionalmente em trabalhos futuros, o número reduzido de sistemas a serem simulados no EPD simplifica as implementações e a verificação da validade e qualidade dos resultados obtidos em simulações. E, apesar de o EPD trazer algumas limitações, com seu uso algumas características importantes da fratura podem ser analisadas para estruturas com trincas pré-existentes, fato que fica dificultado no modelo tridimensional. Aliado a este fato salienta-se que no PPGEC existem rotinas que simulam fratura no EPD que já foram amplamente utilizadas (testadas e validadas) em trabalhos anteriores e a implementação da plasticidade cristalina no EPD possibilita, portanto, a análise de problemas envolvendo fratura considerando a plasticidade cristalina – encorajando o uso do modelo constitutivo cristalino no EPD.

As simulações realizadas no presente trabalho consideram uma trinca pré-existente em uma peça, sendo que a sua ponta se encontra inserida em um monocristal. Rice (1987), considerando a simetria dos cristais CFC e CCC, elaborou um modelo no estado plano de deformações (EPD) para estas configurações. O autor orienta uma trinca em uma direção específica dentro do monocristal e resolve analiticamente os campos de tensões e de deformações na região próxima à ponta. Conforme já explanado, os deslizamentos (que são a atividade plástica cristalina) ocorrem nos planos onde existe maior densidade planar de átomos e nas direções onde existe maior densidade linear de átomos. Rice (1987) simplifica os sistemas de deslizamento do cristal de forma que possa ser considerado o fluxo plástico em EPD, onde somente 3 sistemas são considerados e nomeia estes 3 como sistemas de deslizamento efetivos.

O modelo considera o monocristal orientado com índices de Miller conforme ilustrado na Figura 3.2 (sistema x, y, z), sendo que a trinca se encontra no plano $(0\ 0\ 1)$, conforme mostrado na Figura 3.3. Este plano é definido pelos eixos cartesianos x_1 e x_3 , a abertura da trinca se dá na direção x_2 (somente modo I é considerado).

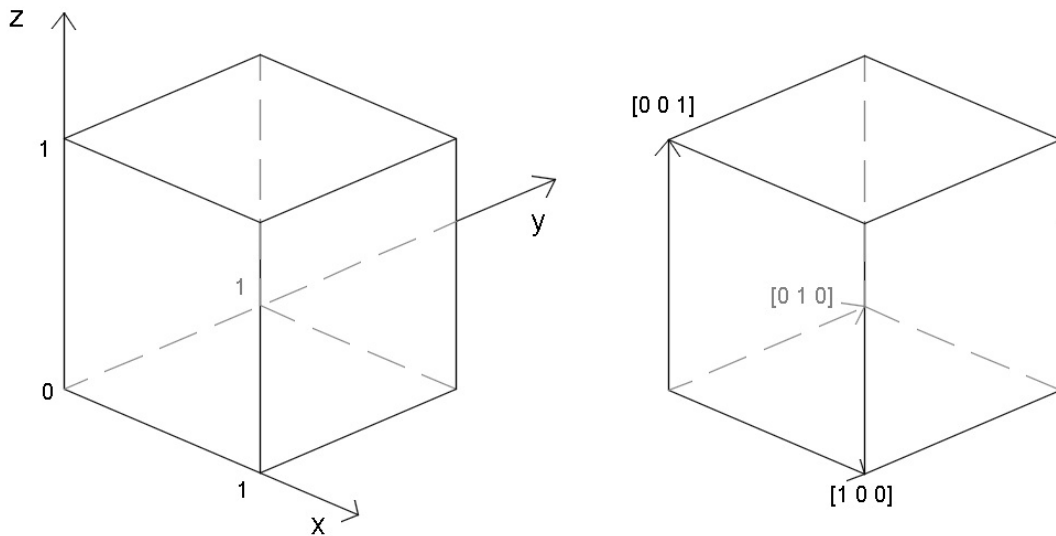


Figura 3.2 – Orientação dos eixos no monocristal metálico

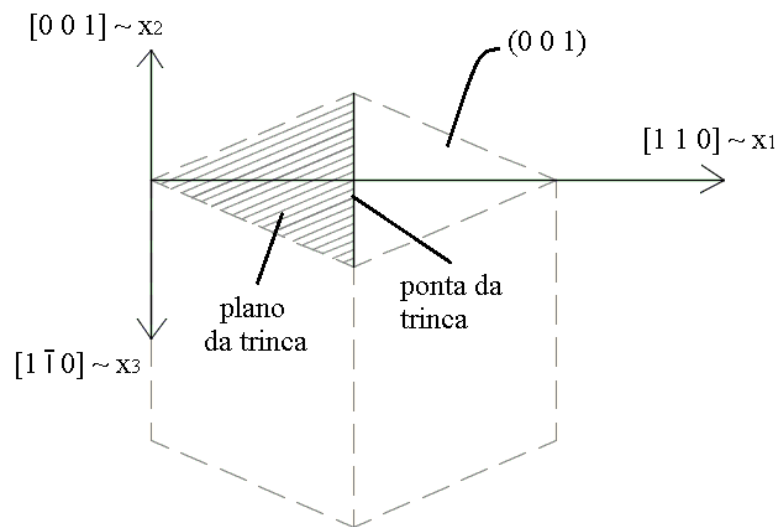


Figura 3.3 – Orientação da trinca em relação ao monocristal

3.2.1 Tensões decompostas nos sistemas efetivos – CFC

Para considerar o EPD com a orientação de trinca proposta, todas as deformações na direção x_3 são consideradas nulas. As simplificações consideradas no caso CFC para se chegar ao EPD são explanadas nesta subseção. Como é possível observar na Figura 3.4 os planos $(\bar{1} 1 \bar{1})$

e $(1 \bar{1} \bar{1})$ são simétricos em relação a x_1 e os deslizamentos, exceto na direção $[1 1 0]$, são considerados como de mesma magnitude e sentidos opostos, assim tendo mesma magnitude e sentidos opostos na direção x_3 e podendo ser simplificados ao plano x_1 - x_2 . Os sistemas destes planos que são associados a um sistema efetivo (que será o sistema efetivo 1 no presente trabalho) são os mostrados na Figura 3.4.

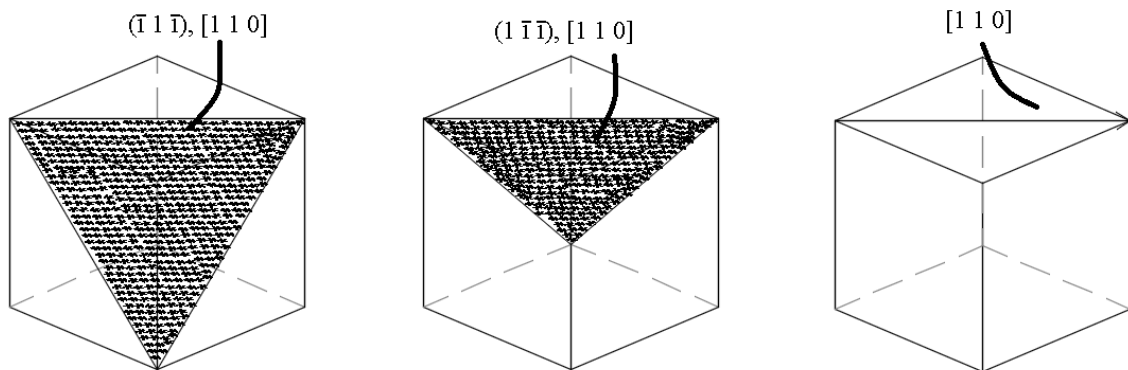


Figura 3.4 – Planos e direção que formam o sistema de deslizamento 1

Os outros planos de deslizamento que são simplificados para o EPD são os mostrados na parte esquerda da Figura 3.5, sendo que novamente existe simetria em relação ao eixo x_3 e os deslizamentos relacionados a esta direção são considerados nulos. A esses planos as direções associadas para formar os dois sistemas efetivos que faltam são as indicadas na parte direita da Figura 3.5. A Figura 3.6 apresenta a configuração em duas dimensões (o plano x_1 e x_2 apresentado na Figura 3.3), contendo a abertura da trinca e as direções de deslizamento efetivas do EPD. A Figura 3.7 apresenta de forma simplificada as direções dos três sistemas de deslizamento efetivos propostos por Rice (1987), contendo também a numeração adotada no presente trabalho para cada um dos três sistemas. Vale salientar que um fator de correção ainda será aplicado, visto que apesar de haver simetria em relação ao eixo x_3 , quando se simplificam dois sistemas a somente um deve se considerar que cada um deles vai acomodar parte das tensões naquela direção.

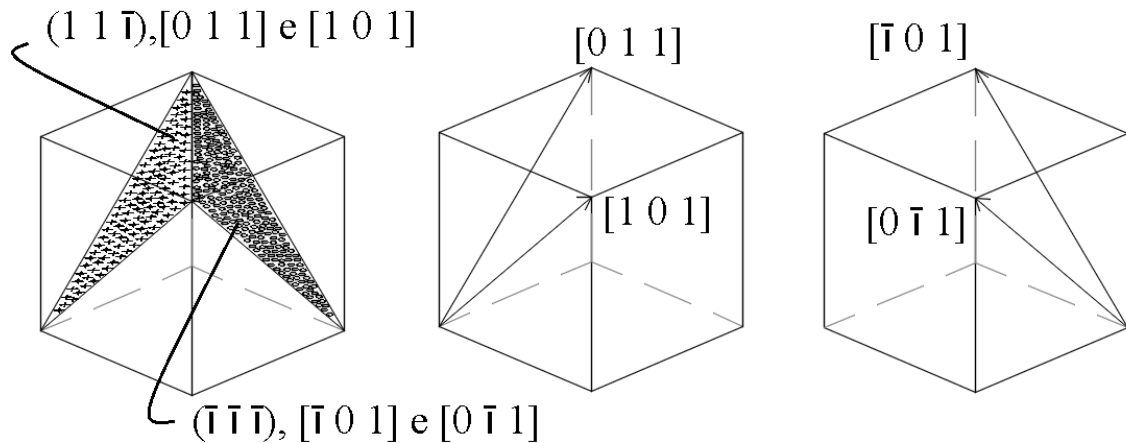


Figura 3.5 – Planos e direções que compõem os sistemas de deslizamento efetivos 2 e 3

Para situar quais planos e direções da configuração tridimensional são simplificados ao EPD, utilizando-se os índices de Miller, a relação que pode ser feita é a mostrada na Tabela 2. Para cada dois sistemas cristalinos tem-se um efetivo associado.

Tabela 2 – Relação entre sistemas (efetivos e do material)

SISTEMA	(1)	(2)	(3)
Efetivo	$(0\ 1\ 1), [1\ 1\ 0]$	$(1\ 1\ \bar{1}), [1\ 1\ 2]$	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}), [\bar{1}\ \bar{1}\ 2]$
Cristalino (a)	$(\bar{1}\ 1\ \bar{1}), [1\ 1\ 0]$	$(1\ 1\ \bar{1}), [1\ 0\ 1]$	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}), [0\ \bar{1}\ 1]$
Cristalino (b)	$(1\ \bar{1}\ \bar{1}), [1\ 1\ 0]$	$(1\ 1\ \bar{1}), [0\ 1\ 1]$	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}), [\bar{1}\ 0\ 1]$

Os índices de Miller são muito práticos para descrever planos e direções e poder visualizar os mesmos, porém em uma linguagem de programação e visando a aplicação da lei de Schmid, vetores com cossenos diretores são mais apropriados. Para tanto a descrição dos sistemas cristalinos é feita através de uma dupla de vetores unitários $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ e $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ – o vetor $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ é ortonormal a um plano de deslizamento e o vetor $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ é a direção de deslizamento neste plano. A dupla $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ e $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ portanto, contém um plano com uma direção de deslizamento associada a ele, compondo assim um sistema de deslizamento α . Para os sistemas da rede de um cristal tridimensional são utilizadas letras minúsculas no presente trabalho, enquanto que para os sistemas de deslizamento efetivos (do EPD) a indicação é feita por letras maiúsculas. Por

exemplo, o sistema de deslizamento efetivo 2 do presente trabalho tem os vetores $\mathbf{M}^{(2)}$ e $\mathbf{S}^{(2)}$ associados a ele indicados na Figura 3.6.

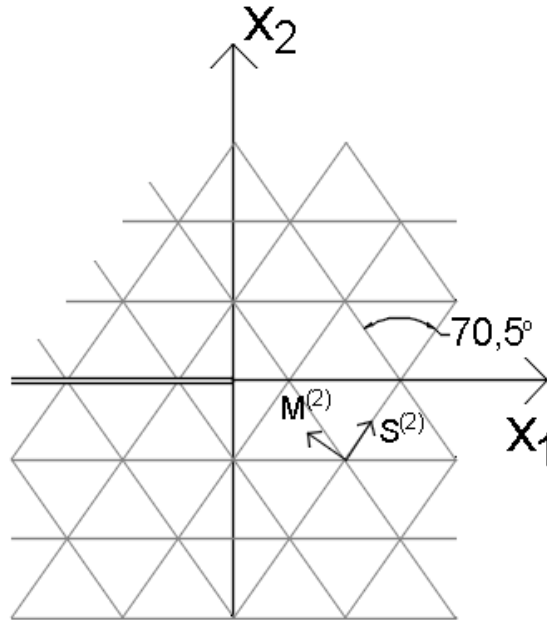


Figura 3.6 – Orientação da trinca na configuração em EPD, com direções dos sistemas efetivos em um monocristal CFC (fonte: adaptado de Rice (1987, p. 318))

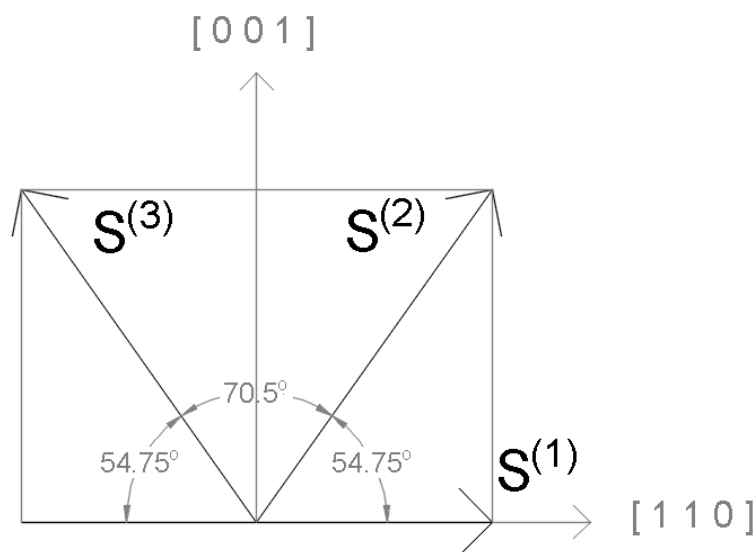


Figura 3.7 – Orientação e numeração dos sistemas de deslizamento efetivos de um cristal CFC

A Equação 6 define como as componentes de tensão do tensor de Cauchy são levadas aos sistemas efetivos através da lei de Schmid (a mesma relação também é válida para o sistema cristalino αb). Esta lei considera que τ_c seja a tensão crítica dos sistemas cristalinos αa (ou αb). Segundo esta lei, quando essa tensão crítica é ultrapassada ocorre escoamento. Salienta-se que a lei de Schmid não é utilizada na sua integridade pelo fato do presente trabalho ter uma lei constitutiva viscosa, assim ocorre escoamento mesmo não sendo ultrapassada essa tensão crítica, porém as relações dadas por seus cossenos diretores continuam válidas.

$$m_{\mu}^{(\alpha a)} \sigma_{\mu\nu} s_{\nu}^{(\alpha a)} = \pm \tau_c \quad (6)$$

com μ e ν variando entre 1 e 2. Rice (1987) relacionou esta condição de escoamento cristalina com os seus respectivos sistemas efetivos (α) fazendo uso da Equação 7.

$$M_{\mu}^{(\alpha)} \sigma_{\mu\nu} S_{\nu}^{(\alpha)} = \pm \tau_c^{(\alpha)} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_c \quad (7)$$

onde $\beta^{(\alpha)}$ é um fator de correção e é isolado para melhor visualização na Equação 8.

$$\beta^{(\alpha)} = \frac{2M_{\mu}^{(\alpha)} S_{\nu}^{(\alpha)}}{m_{\mu}^{(\alpha a)} s_{\nu}^{(\alpha a)} + m_{\mu}^{(\alpha b)} s_{\nu}^{(\alpha b)}} \quad (8)$$

A Tabela 3 apresenta valores dos cossenos diretores para os sistemas de deslizamento em um cristal CFC, sendo que os valores para os sistemas efetivos relacionados a eles também são apresentados. Aplicando estes valores na Equação 8, Rice (1987) chegou a: $\beta^{(1)}=(3)^{0,5}$ e $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=2/(3)^{0,5}$ para cristais CFC.

Tabela 3 – Cossenos diretores para sistemas cristalinos e sistemas efetivos relacionados a eles

Sistema 1	$\mathbf{m}^{(1a)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}\right)$	$\mathbf{s}^{(1a)} = (1, 0, 0)$
	$\mathbf{m}^{(1b)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{-2}{\sqrt{6}}\right)$	$\mathbf{s}^{(1b)} = (1, 0, 0)$
	$\mathbf{M}^{(1)} = (0, 1, 0)$	$\mathbf{S}^{(1)} = (1, 0, 0)$
Sistema 2	$\mathbf{m}^{(2a)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$	$\mathbf{s}^{(2a)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2}\right)$
	$\mathbf{m}^{(2b)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$	$\mathbf{s}^{(2b)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{-1}{2}\right)$
	$\mathbf{M}^{(2)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$	$\mathbf{S}^{(2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, 0\right)$
O sistema 3 é análogo ao 2		

3.2.2 Tensões decompostas nos sistemas efetivos – CCC

As simplificações para os cristais CCC quando considerando o EPD são similares às dos CFC (todas as deformações na direção x_3 são consideradas nulas com a orientação de trinca proposta) contudo os planos e as direções dos cristais CCC são distintos. A simplificação ao EPD leva a $(1\ 1\ 0)$, $[1\ \bar{1}\ 1]$ e $[\bar{1}\ 1\ 1]$ compondo o sistema efetivo 1, $(1\ 1\ 2)$, $[1\ 1\ 1]$ sendo o sistema efetivo 3 e $(\bar{1}\ \bar{1}\ 2)$, $[\bar{1}\ \bar{1}\ 1]$ representando o sistema efetivo 2. Encontrando o fator de correção $\beta^{(a)}$ de forma análoga à descrita nos cristais CFC, para o cristal CCC têm-se os seguintes valores: $\beta^{(1)}=(3)^{0,5}$; e $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=1$. A numeração atribuída a cada um dos sistemas efetivos no presente trabalho é a apresentada na Figura 3.9 – salienta-se que é feita uma rotação de 90 graus nos sistemas efetivos CFC para simular os cristais CCC.

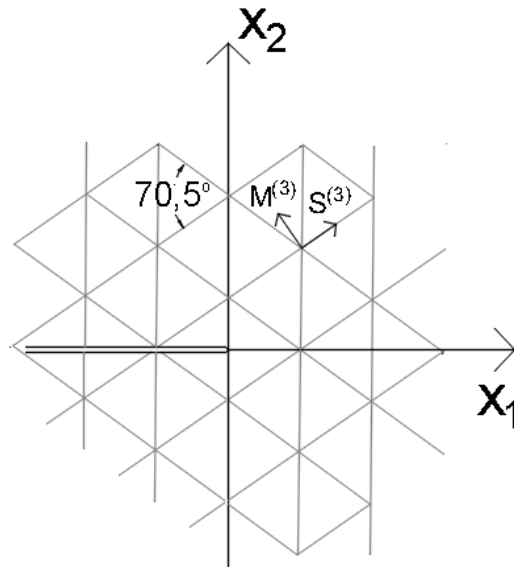


Figura 3.8 – Orientação da trinca e sistemas efetivos dos cristais CCC no EPD

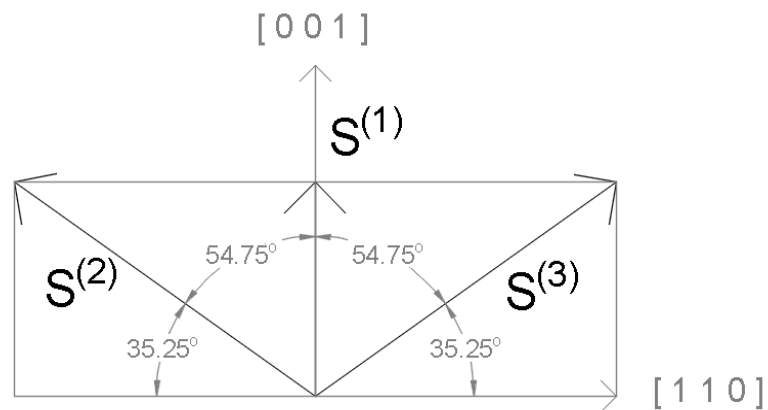


Figura 3.9 – Numeração dos sistemas efetivos para os cristais CCC

3.2.3 Deslizamentos paralelos ou perpendiculares aos sistemas efetivos

Rice (1990) mostra que os deslizamentos podem ocorrer de duas distintas maneiras nos sistemas de deslizamento efetivos: paralela ou perpendicularmente aos mesmos, sendo que os deslizamentos perpendiculares aos sistemas são chamados de “kink shear”, enquanto os paralelos aos sistemas de deslizamento não recebem nenhuma nomenclatura distinta. A Figura 3.10 mostra como cada tipo de deslizamento ocorre.

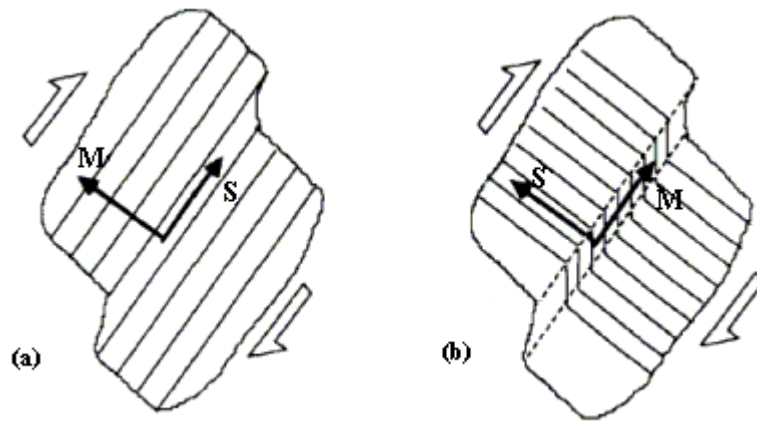


Figura 3.10 – Deslizamentos paralelos aos sistemas de deslizamentos efetivos (a); e deslizamentos perpendiculares aos sistemas de deslizamentos (b) (fonte: adaptado de Rice (1990, p. 307))

3.3 O MODELO ELASTO-VISCOPLÁSTICO CRISTALINO

O material tem seu fluxo plástico ocorrendo nos sistemas de deslizamento através das discordâncias, conforme já explanado, e para computar a anisotropia plástica cristalina é feito uso do presente modelo constitutivo. Ele se baseia nos modelos de Peirce et al. (1983) e Asaro (1983) e considera aqui somente pequenas deformações. As tensões do tensor de Cauchy são levadas para os sistemas de deslizamento efetivos das estruturas para considerar a atividade plástica ocorrendo nos mesmos e, após consideradas as deformações plásticas o estado de tensões é levado novamente ao tensor de Cauchy, conforme será elucidado na presente subseção. A forma como o fluxo de deformação plástica está relacionado com a taxa de deslizamentos nos sistemas efetivos é mostrada na Equação 9.

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} = \sum_{\alpha} P_{ij}^{(\alpha)} \frac{d\gamma^{(\alpha)}}{dt} \quad (9)$$

sendo que $P_{ij}^{(\alpha)}$ é dado pela Equação 10.

$$P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(M_i^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)} + M_j^{(\alpha)} S_i^{(\alpha)} \right) \quad (10)$$

onde $P_{ij}^{(\alpha)}$ representa a componente ij do tensor de orientação de Schmid para o sistema α . Para a configuração cristalográfica proposta por Rice (1987), os vetores para os três sistemas de deslizamento efetivos para o cristal CFC são: $\mathbf{M}^{(1)}=(0;1)$, $\mathbf{S}^{(1)}=(1;0)$, $\mathbf{M}^{(2)}=(-0,816;0,577)$, $\mathbf{S}^{(2)}=(0,577;0,816)$, $\mathbf{M}^{(3)}=(0,816;0,577)$, $\mathbf{S}^{(3)}=(-0,577;0,816)$. A taxa de deslizamentos no

sistema efetivo α ($d\gamma^{(\alpha)}/dt$) depende da tensão decomposta no sistema de deslizamento efetivo ($\tau^{(\alpha)}$), conforme discutido mais abaixo.

Para resolver o problema elasto-viscoplástico faz-se uso de uma abordagem incremental preditor-corretor de deformações, onde para cada incremento de deformação $\Delta\varepsilon_{kl}$ se calcula o incremento de tensões de Cauchy através da relação que obedece a Lei de Hooke dada na Equação 11:

$$\Delta\sigma_{ij}^E = C_{ijkl} \Delta\varepsilon_{kl} \quad (11)$$

sendo que para evitar problemas de integração a Equação 11 é resolvida com integração seletiva. A integração seletiva é realizada com os passos das Equações 11b e 11c, sendo que a Equação 11b é integrada em 4 pontos de Gauss e a Equação 11c é integrada em um ponto de Gauss central.

$$\Delta s_{ij}^E = 2G\Delta\varepsilon_{ij}^d \quad (11b)$$

onde Δs_{ij}^E é o incremento das tensões desviadoras e G representa o módulo de elasticidade transversal do material.

$$\Delta p = K\Delta\varepsilon_{ii} \quad (11c)$$

sendo que Δp representa o incremento de tensões e K o módulo de incompressibilidade do material. Salienta-se que a anisotropia elástica cristalina não é considerada no presente trabalho e desta maneira o tensor elástico de quarta ordem C_{ijkl} presente na Equação 11 é uma matriz simétrica e as componentes que têm papel considerando-se materiais isotrópicos são as dadas na Equação 12. Se considera as simetrias $C_{ijkl}=C_{jikl}=C_{ijlk}=C_{klij}$, sendo que assim os pares 32, 13 e 21 têm os mesmos índices que 23, 31 e 12, respectivamente. Nesta matriz para materiais isotrópicos considera-se o fato que $C_{1111}=C_{2222}=C_{3333}$, também que $C_{1122}=C_{1133}=C_{2233}$ e que $C_{2323}=C_{1313}=C_{1212}=(C_{1111}-C_{1122})/2$. A anisotropia elástica cristalina não é considerada no presente trabalho visto que a intensa atividade plástica faz sua atuação ser muito reduzida nos problemas aqui abordados.

$$C = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ - & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ - & - & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & C_{2323} & 0 & 0 \\ - & - & - & - & C_{2323} & 0 \\ - & - & - & - & - & C_{2323} \end{bmatrix} \quad (12)$$

Como o presente trabalho trata as simulações no EPD, a matriz da Equação 12 é simplificada à mostrada na Equação 12b:

$$C = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & 0 \\ - & C_{1111} & 0 \\ - & - & C_{2323} \end{bmatrix} \quad (12b)$$

Porém, caso a anisotropia cristalina fosse levada em consideração as posições C_{2323} das matrizes das Equações 12 e 12b seriam alteradas conforme a relação de Zener (A_r), apresentada na Equação 13, sendo que esta equação faz a relação entre materiais cúbicos e materiais isotrópicos e a igualdade $A_r=1$ representaria os materiais isotrópicos. Com estas considerações nota-se que para materiais isotrópicos existem duas constantes elásticas independentes (C_{1111} e C_{1122}), enquanto se a anisotropia cristalina fosse considerada existiriam 3 (C_{1111} , C_{1122} e C_{2323}). Uma maior discussão sobre a anisotropia elástica cristalina pode ser encontrada em Chadwick et al. (2001).

$$A_r = \frac{2C_{2323}}{C_{1111} - C_{1122}} \quad (13)$$

O estado de tensões do preditor elástico (σ_{ij}^E) é então atualizado a partir do estado de tensões da última iteração – ou do estado de tensões inicial, na primeira iteração – (σ_{ij}^0) somado ao incremento calculado na Equação 11 conforme mostrado na Equação 14.

$$\sigma_{ij}^E = \sigma_{ij}^0 + \Delta\sigma_{ij}^E \quad (14)$$

Uma vez calculado o estado de tensões do preditor elástico, o mesmo é levado a tensões decompostas, como indicado na Equação 15:

$$\tau^{(\alpha)} = P_{ij}^{(\alpha)} \sigma_{ij}^E \quad (15)$$

A equação que calcula a taxa de deslizamentos de cada sistema é da forma da lei de potência utilizada por Peirce et al. (1983).

$$\frac{d\gamma^{(\alpha)}}{dt} = \frac{da}{dt} \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_c^{(\alpha)}} \right] \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_c^{(\alpha)}} \right]^{(1/m)-1} \quad (16)$$

Na Equação 16, $d\gamma^{(\alpha)}/dt$ é a taxa de deslizamentos no sistema α . No expoente tem-se m , que caracteriza a taxa de sensibilidade do material e logo após a igualdade tem-se da/dt , que é a taxa de deslizamentos de referência (um valor de referência, atrelado a propriedades do material e a velocidades de carregamento). Para entender melhor o efeito de da/dt e m , considere a forma inversa da Equação 16, abaixo (na Equação 17), onde o módulo de $\gamma^{(\alpha)}$ e $\tau^{(\alpha)}$ são considerados.

$$|\tau^{(\alpha)}| = \tau_c^{(\alpha)} \left[\frac{d|\gamma^{(\alpha)}|/dt}{da/dt} \right]^m \quad (17)$$

Se $m=0$, $|\tau^{(\alpha)}| = |\tau_c^{(\alpha)}|$, que corresponde à condição de plastificação dos casos elasto-plásticos, sem efeitos viscosos. Assim, quanto mais próximo de zero, mais próxima é a solução ao problema elasto-plástico puro e, por conseguinte, quanto mais afastado de zero, mais distante a solução da elasto-plástica pura. Na literatura, muitas vezes simulações são feitas com valores de m próximos a zero justamente para se obter resultados que não considerem os efeitos viscosos e tal procedimento é adotado para driblar a falta de unicidade de solução existente devida à inversão de matriz imposta pela teoria elasto-plástica cristalina não viscosa. Na hipótese de $da/dt = d|\gamma^{(\alpha)}|/dt$ teria-se o mesmo efeito de $m=0$. Já considerar $da/dt < d|\gamma^{(\alpha)}|/dt$ é equivalente a uma majoração das tensões e neste caso se o valor de m for aumentado as propriedades viscosas atuarão de forma a endurecer o material de forma antecipada, sendo este um efeito viscoso não desejável. Diminuir o valor de da/dt , de uma forma geral, também é equivalente a considerar uma taxa de carregamento maior, pois amplifica o efeito de $d|\gamma^{(\alpha)}|/dt$ na Equação 17. Nos exemplos envolvendo fratura serão feitas variações nos valores de da/dt , porém somente valores maiores que $d|\gamma^{(\alpha)}|/dt$ serão utilizados, buscando assim analisar os efeitos viscosos desejáveis (de amolecimento do material).

O procedimento para se obter $\tau_c^{(\alpha)}$ é explicado na próxima subseção, juntamente com o endurecimento do material. A taxa de deformação plástica do material ($d\varepsilon_{ij}^P/dt$) é obtida com a Equação 9. Com esta taxa são atualizadas as tensões no ponto descontando a parcela que deformou plasticamente, com a Equação 18 (onde σ_{ij}^1 representa as tensões atualizadas e G é o módulo de elasticidade transversal do material) e se prossegue ao próximo incremento de deslocamento prescrito.

$$\sigma_{ij}^1 = \sigma_{ij}^E - 2G \frac{d\varepsilon_{ij}^P}{dt} \quad (18)$$

O uso da Equação 16 constitui a grande vantagem da presente metodologia viscoplástica. Em casos sem viscosidade, os deslizamentos $\gamma^{(\alpha)}$ devem ser obtidos através da solução de um sistema 3x3 para os casos planos aqui empregados – ver Fornel (2018), ou, por exemplo, um sistema 12x12 em casos CFC tridimensionais. A solução destes sistemas pode muitas vezes sofrer de problemas de unicidade devido à falta de condicionamento do sistema de equações. Tais problemas inexistem no presente modelo.

3.3.1 Endurecimento

O endurecimento do cristal por deformação plástica é descrito pelo aumento na tensão decomposta crítica efetiva $\tau_c^{(\alpha)}$ em função da taxa de deslizamentos efetivos ($d\gamma^{(\alpha)}/dt$). É definida uma função $\tau_c^{(\alpha)}$, tomada com um valor inicial $\tau_{c0}^{(\alpha)}$, e atualizada dependendo da soma das magnitudes dos deslizamentos, conforme ilustram as Equações 19 e 20.

$$\tau_c^{(\alpha)} = \tau_{c0}^{(\alpha)} + \frac{d\tau_c^{(\alpha)}}{dt} \quad (19)$$

Para um endurecimento linear, ou para um caso sem endurecimento, Asaro (1983) propôs a Equação 20 para descrever $d\tau_c^{(\alpha)}/dt$.

$$\frac{d\tau_c^{(\alpha)}}{dt} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left| \frac{d\gamma^{(\beta)}}{dt} \right|, \text{ onde: } h_{\alpha\beta} = qH + (1-q)H\delta_{\alpha\beta} \quad (20)$$

Sendo que $\delta_{\alpha\beta}$ é o delta de Kroenecker, $h_{\alpha\beta}$ é a função de endurecimento e H a função de auto-endurecimento do material. Para o caso sem endurecimento tem-se $H=0$, o que faz com que $d\tau_c^{(\alpha)}/dt=0$, e portanto $\tau_c^{(\alpha)}$ permanece inalterado ao longo do problema analisado. Já um endurecimento linear tem H com valor constante. Para o caso de endurecimento em lei de potência, ou da forma hiperbólica, ou de alguma outra hipótese de endurecimento que não o linear, H é uma função que varia ao longo da resolução do problema – é atualizado a cada passo de deslocamento prescrito imposto à estrutura. Na Equação 20, q representa o endurecimento latente, que conforme resultados experimentais usualmente varia entre 1 e 1,4, conforme já explicado. Quando $q=1$ todos os sistemas endurecem em igual magnitude ao longo de cada passo de tempo, enquanto para $q=0$ não existe endurecimento latente.

Visto que o presente trabalho trata somente casos sem endurecimento, tem-se $\tau_c^{(\alpha)}=\tau_{c0}^{(\alpha)}$ ao longo das simulações. É calculado um valor da tensão crítica decomposta efetiva inicial ($\tau_{c0}^{(\alpha)}$) com a correção de $\beta^{(\alpha)}$ aplicada à tensão crítica decomposta do material (τ_c) conforme explicado anteriormente, sendo que $\tau_{c0}^{(1)}=(3)^{0,5}\tau_c$, $\tau_{c0}^{(2)}=\tau_{c0}^{(3)}=2\tau_c/(3)^{0,5}$ para cristais CFC e $\beta^{(1)}=(3)^{0,5}$; e $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=1$ para cristais CCC.

3.4 MODELO COESIVO

Para simular a propagação de trincas é introduzido na ponta das mesmas uma região denominada zona coesiva. Se uma força externa tende a abrir a zona coesiva, tensões de coesão se desenvolvem para restringir a abertura. Esta subseção contém alguns conceitos iniciais e atuais de modelos coesivos e apresenta o modelo utilizado no presente trabalho.

3.4.1 Modelos coesivos

A origem da ideia de zona coesiva se dá com estudos como os de Dugdale (1960) e Barrenblat (1962). Dugdale (1960) propôs para o estado plano de tensões uma trinca em um material elasto-plástico (de tamanho a) tendo seu comportamento representado pelo de um material elástico com uma trinca de tamanho $a + c$, conforme mostrado na Figura 3.11(a), sendo que ao longo do comprimento c existiriam tensões de magnitude da tensão de escoamento (σ_{esc}) do material comprimindo o mesmo e assim o mantendo unido. Já Barrenblat (1962), com um conceito semelhante, propôs alterações nas tensões do trecho c , sendo que as mesmas teriam uma variação de acordo com a separação (abertura) desta zona tensionada. Estas propostas iniciais deram origem a outros estudos que resultaram em modelos de zona coesiva.

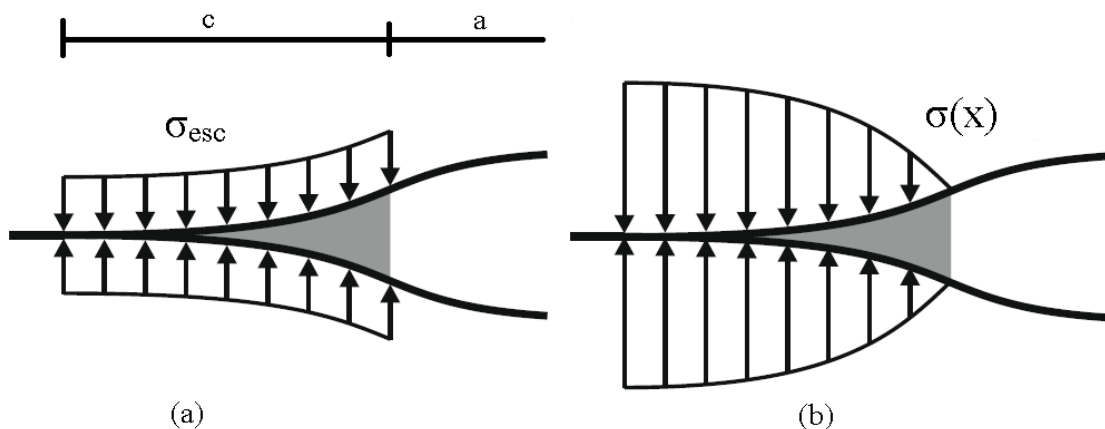


Figura 3.11 – Conceitos de zona coesiva (a) Dugdale (1960) e (b) Barrenblat (1962) (fonte: adaptado de Geißler e Kaliske (2010))

Estas tensões que mantêm as faces superior e inferior unidas são as tensões coesivas. Existe uma lei de tensão-separação (também chamada de lei coesiva) que relaciona a separação das faces da zona coesiva com a tensão coesiva. Não existe uma lei absoluta, mas sim várias propostas que variam de acordo com propriedades do material e de carregamento. Na Figura 3.12 são apresentados exemplos de leis de tensão-separação, sendo que na parte (a) pode ser vista a proposta polinomial de Needleman (1987) onde a tensão aumenta até um valor máximo depois decrescendo até zero, ocorrendo então a fratura. Outras leis apresentadas na figura são a exponencial de Needleman (1990), a linearmente decrescente de Hillerborg et al. (1976), a bilinear de Geubelle e Baylor (1990), a constante de Yuan et al. (1996) e a trilinear de Tvergaard e Hutchinson (1992). Os parâmetros coesivos são determinados em ensaios

laboratoriais: normalmente são utilizados a tensão coesiva (T_0) juntamente com a energia coesiva (Γ_0), que é a área abaixo da curva da lei de tensão-deformação – energia dissipada para que ocorra a propagação. Então estes dados são levados à alguma lei de tensão-separação. Dois parâmetros também utilizados são a separação característica (δ_0) e a separação crítica (δ_c). Ambos se encontram no eixo das abscissas da Figura 3.12, sendo que δ_0 está vinculada à T_0 nos casos em que existe mudança de tensões crescentes para decrescentes – casos (a), (b) e (d) da Figura 3.12. Por fim, quando a separação das interfaces chega em δ_c ocorre a fratura. Estes parâmetros e estas relações funcionam bem para tanto para materiais dúcteis quanto frágeis.

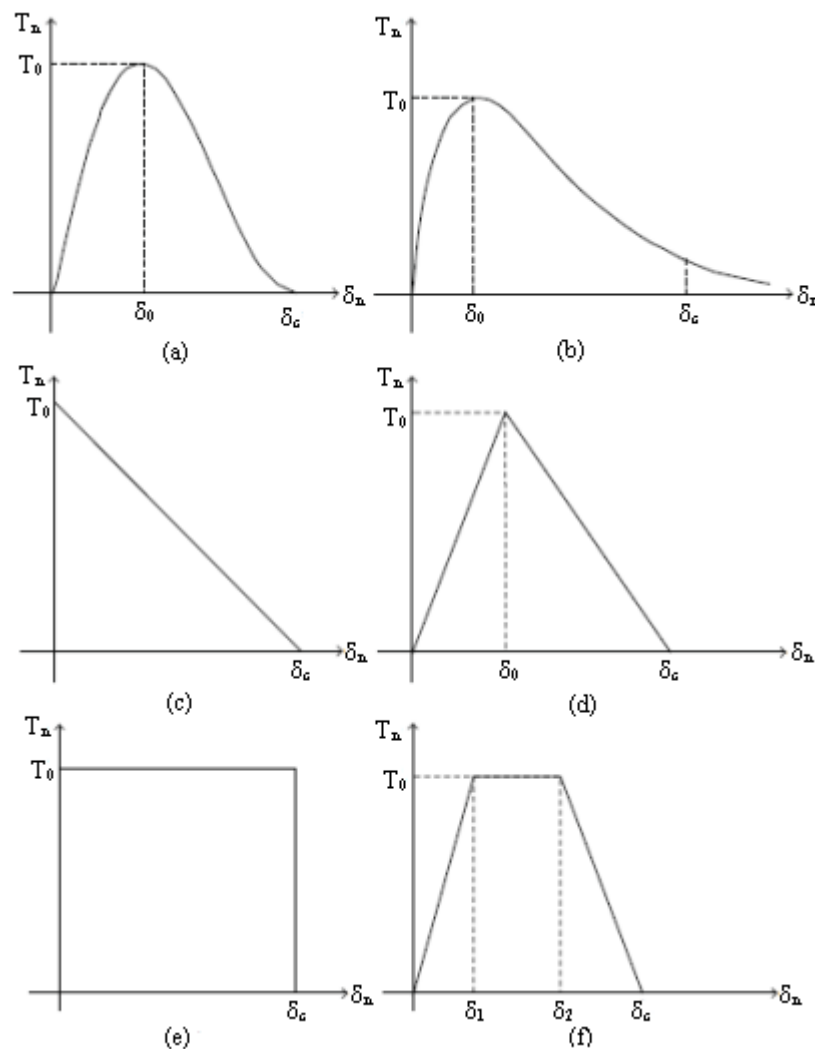


Figura 3.12 – Leis de tensão-separação: (a) Needleman (1987), (b) Needleman (1990), (c) Hillerborg et al. (1976), (d) Geubelle e Baylor (1990), (e) Yuan et al. (1996) e (f) Tvergaard e Hutchinson (1992) (fonte: adaptado de Liu et al. (2013))

O modelo de zona coesiva foi integrado ao método dos elementos finitos utilizado no presente trabalho, sendo que o mesmo é inserido em elementos finitos coesivos. Estes elementos são superfícies que ligam faces de trinca, sendo que a separação das faces se dá obedecendo a lei coesiva.

3.4.2 Modelo utilizado

O modelo coesivo utilizado é baseado no proposto por Needleman (1992), sendo que o mesmo foi implementado inicialmente por Fedrigo (2001), melhorado por Machado (2007) e teve suas últimas alterações efetuadas por Moresco (2018). Visto que o presente trabalho trata somente o modo I de fratura, somente as componentes de separação normal (Δu_n) e de tensão coesiva normal (T_n) serão consideradas. A tensão coesiva normal é obtida através da Equação 21.

$$T_n = \sigma_{\max,0} \exp(1) \exp\left(-\frac{\Delta u_n}{\delta_0}\right) \frac{\Delta u_n}{\delta_0} \quad (21)$$

sendo que $\exp(1)=e^1$, com e representando o número de Euler. Os parâmetros do material presentes na Equação 21 são a tensão coesiva inicial máxima ($\sigma_{\max,0}$) e a separação característica (δ_0). A energia coesiva superficial normal ($\Phi_{n,0}$), que é a separação por unidade de área é apresentada na Equação 22. Os elementos coesivos são rompidos quando aproximadamente 97,3% da energia coesiva é consumida, isto é, quando $\Delta u_n=5\delta_0$.

$$\Phi_{n,0} = \sigma_{\max,0} \delta_0 \exp(1) \quad (22)$$

Para uma melhor visualização do formato da curva gerada pela Equação 21 a mesma é apresentada na Figura 3.13, sendo que T_n está normalizada por $\sigma_{\max,0}$ e Δu_n está normalizada por δ_0 .

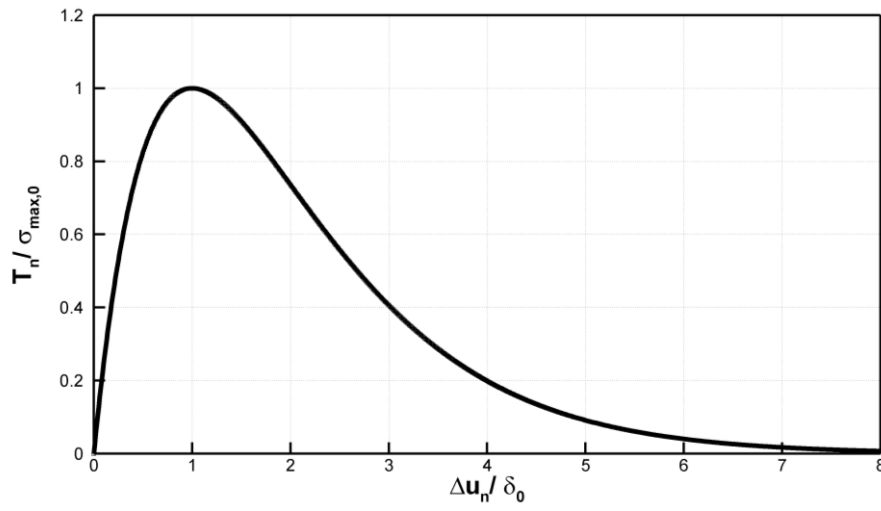


Figura 3.13 – Curva da lei coesiva, com T_n em função de Δu_n

4 EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

Primeiramente são resolvidos problemas sem a consideração de um modelo coesivo, em que existe tração pura ou uma trinca que não propaga, para comparar tensões com duas distintas formulações. São comparados os resultados encontrados no modelo elasto-plástico cristalino, implementado por Fornel (2018) – baseado em Asaro e Rice (1977) – com o presente modelo (elasto-viscoplástico), baseado em Asaro (1983) e Peirce et al. (1983). Com esse problema pode se verificar que com dois modelos distintos chega-se a resultados idênticos (através do ajuste dos parâmetros viscosos) se assim for desejado. Com a análise destes resultados são eliminados possíveis erros nas implementações, assim possibilitando um progresso à solução de problemas envolvendo fratura.

Em um segundo momento, então, foram simuladas estruturas com uma trinca pré-existente e considerando o modelo coesivo, assim tendo a propagação computada no problema. Foram feitos testes com variações em algumas das propriedades constitutivas do material e também de alguns dos parâmetros da fratura, para verificar se os resultados estariam de acordo com o que era teoricamente esperado. Os campos de deformações plásticas destes problemas envolvendo fratura foram comparados aos encontrados na literatura para verificar o funcionamento dos três modelos (das relações constitutivas cristalinas, do modelo de estado plano e do modelo coesivo) atuando em conjunto. É válido observar que os testes foram realizados sem considerar endurecimento dos materiais simulados – as rotinas estão prontas para simular o endurecimento, porém o mesmo foi deixado de fora, para que se pudesse analisar unicamente o efeito das propriedades viscosas na fratura.

4.1 VERIFICAÇÃO DA IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO ELASTO-VISCOPLÁSTICO

Para verificar o bom funcionamento do modelo elasto-viscoplástico proposto no presente trabalho foram realizados dois tipos de simulações: um tratando de tração pura e outro de uma peça com uma trinca estacionária submetida a deslocamentos prescritos verticais, sendo que os dois modelos de plasticidade – o do presente trabalho e o que não considera efeitos viscosos (FORNEL (2018)) – foram utilizados em todos os tipos de simulações. As soluções não viscosas são identificadas nas figuras com a legenda “EP”. Alterando as variáveis de

efeitos viscosos têm-se expectativas sobre o que deve ocorrer nos campos de tensões e de deformações ao longo das simulações. Atender a estas expectativas é o objetivo deste capítulo, para possibilitar a incorporação do modelo coesivo e assim simular peças com trincas que possam propagar. Salienta-se que a anisotropia elástica não é considerada no presente trabalho.

4.1.1 Primeiro exemplo: tração pura

Neste exemplo inicial uma estrutura discretizada em um único elemento quadrilátero bilinear foi submetida à situação de tração pura. As características do material simulado são módulo de elasticidade (E) de 70GPa, coeficiente de Poisson (ν) de 0,33, tensão crítica decomposta do material (τ_c) de 150 MPa e as taxas de deslizamentos de referência (da/dt) e de sensibilidade do material (m) foram alteradas para se verificar o comportamento das propriedades viscosas. Foram realizados testes para cristais CFC e CCC. As características geométricas do problema são apresentadas na Figura 4.1, onde u_n é um deslocamento vertical de 0,05 mm, aplicado ao longo de 10000 passos de tempo de 0,01 segundo cada, totalizando 100 segundos de simulação.

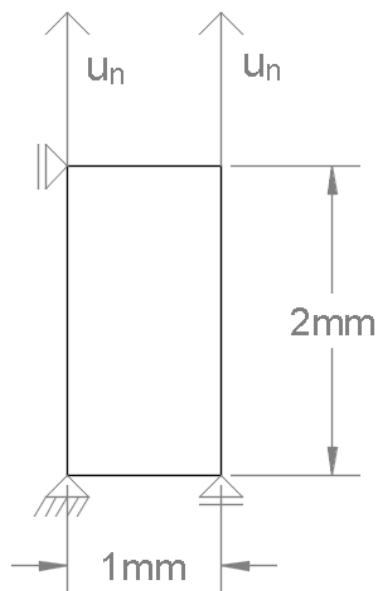


Figura 4.1 – Propriedades geométricas do exemplo de tração pura

A Figura 4.2 apresenta curvas de tensão deformação para as simulações. Nota-se que os cristais CCC têm uma plastificação em momento anterior aos cristais CFC. Isso ocorre visto

que as características físicas dos cristais CCC levam a $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=1$, enquanto para cristais CFC os valores são maiores: $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=2/(3)^{0,5}$. Também se nota que ao se diminuir da/dt a plastificação ocorre para níveis maiores de tensão, fato que é coerente pois um valor de da/dt menor é equivalente a uma maior velocidade de carregamento – Tvergaard e Needleman (1986) analisam problemas de fratura e concluem que altas velocidades de carregamento resultam em fratura por clivagem e baixas velocidades em fratura dútil. No presente trabalho alterando da/dt tem-se o efeito de se obter fratura frágil ao minorar da/dt ou fratura dútil ao aumentar seu valor (conforme será mostrado posteriormente nos exemplos de fratura), podendo assim se relacionar as taxas. Nas Figuras 4.2 e 4.3 são apresentadas curvas de tensão deformação e o que se nota é uma escalada linear (o comportamento elástico do material) e um patamar horizontal atingido, sendo que este patamar recebe o nome de tensão de escoamento aparente – é a força/ área inicial. O patamar não é precisamente horizontal, tem uma pequena inclinação, porque as coordenadas dos nós são atualizadas no programa e visto que é um exemplo de tração a seção transversal diminui. Como a tensão é uniforme no corpo, as forças nodais caem. Logo, existe uma queda na tensão aparente, mas não na tensão real do corpo. Captura-se com o modelo viscoso o esperado aumento da tensão de escoamento aparente com o aumento da velocidade de carregamento – na Figura 4.2 se nota que quando da/dt tem valores menores, a tensão de escoamento aparente é majorada, conforme elucidado no item 3.3, na Equação 17. Outro fato que chama atenção na Figura 4.2 é o de que para da/dt= 10^{-3}s^{-1} a tensão de escoamento aparente se encontra abaixo da solução elasto-plástica, enquanto para da/dt= 10^{-4} e da/dt= 10^{-5} ela se encontra acima. A explicação novamente remete à Equação 17, sendo que fica evidenciado que $d\gamma^{(a)}/dt$ é menor que 10^{-3} e maior que 10^{-4} no presente caso analisado. Os casos de fratura que serão analisados sempre terão da/dt > $d\gamma^{(a)}/dt$, visto que é do interesse do presente trabalho analisar as vantagens que podem ser obtidas com o modelo viscoso (amolecimento do material). A Figura 4.3 apresenta variações em m e, considerando que quando m tende a zero a solução se aproxima da solução não viscosa, os resultados se encontram de acordo com o esperado. Também se observa que quanto maior o valor de m , maior o grau de plastificação, o que é esperado, conforme Tvergaard e Needleman (1991). Caso a anisotropia elástica fosse considerada a tensão de escoamento aparente seria a mesma, contudo uma mudança na inclinação da reta que representa o regime elástico (anterior à tensão de escoamento aparente) ocorreria.

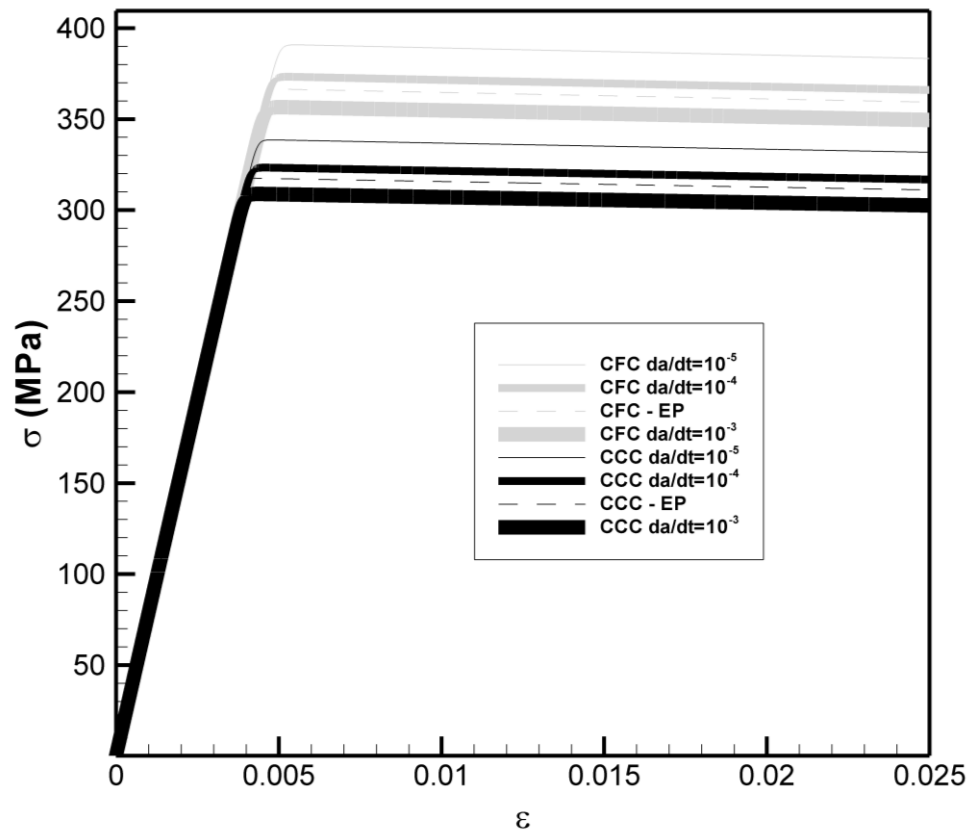


Figura 4.2 – Curvas de tensão deformação em exemplo de tração pura com diferentes valores de da/dt para cristais CFC e CCC ($m=0,02$)

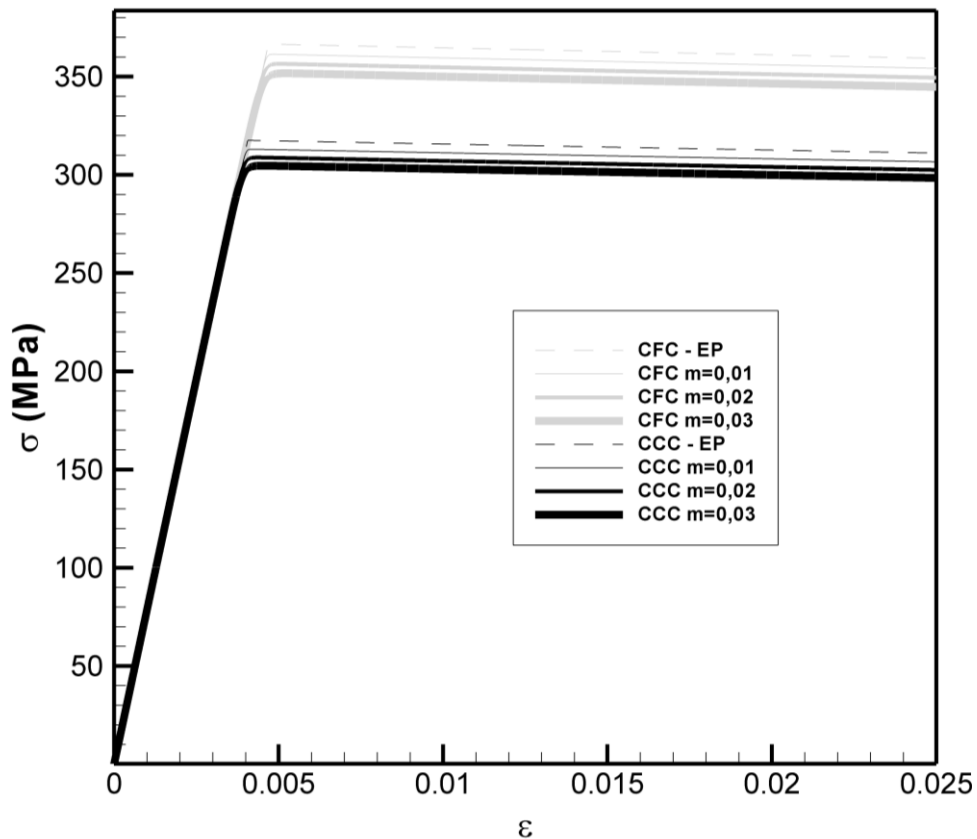


Figura 4.3 – Curvas de tensão deformação em exemplo de tração pura com diferentes valores de m para cristais CFC e CCC ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)

A Tabela 4 apresenta as maiores tensões encontradas nas curvas das Figuras 4.2 e 4.3. O que se nota é um aumento percentual das tensões muito similar tanto para as curvas CCC, quanto para as CFC, quando comparadas as variações devido à diminuição de valores em m ou em da/dt , separadamente e em relação às rotinas EP. Para o presente caso fica demonstrado, portanto, que a sensibilidade dos cristais CFC é muito similar à sensibilidade dos cristais CCC, visto que as diferenças percentuais são muito similares para mesmas alterações de parâmetros viscosos nos dois tipos de estruturas cristalinas.

Abaixo a tensão de escoamento aparente é resolvida analiticamente para o caso EP de um cristal CFC, buscando exemplificar (esclarecer) o processo de cálculo. Com os valores de $\mathbf{M}^{(\alpha)}$ e $\mathbf{S}^{(\alpha)}$ apresentados na subseção 3.3 e as relações das Equações 15 e 10 se chega ao conjunto de igualdades apresentadas na Equação 23. Considerando os valores de $\beta^{(1)}=(3)^{0,5}$ e $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=2/(3)^{0,5}$ para cristais CFC tem-se $\tau_{c0}^{(1)}=259,8$ MPa e $\tau_{c0}^{(2)}=\tau_{c0}^{(3)}=173,2$ MPa. Visto que o exemplo é de tração pura vertical, é possível notar que $\sigma_{11}=0$ e $\sigma_{12}=0$. Substituindo os valores de $\tau_{c0}^{(2)}$ ou $\tau_{c0}^{(3)}$ nas relações da Equação 23 ($\tau^{(\alpha)}=\tau_{c0}^{(\alpha)}$ significa início de atividade

plástica na teoria EP) se chega, por fim, a $\sigma_{22}=367,73$ MPa. Como se observa na Tabela 4, o valor encontrado pelas rotinas é de 366,58 MPa. A diferença nos resultados é muito pequena e se deve ao menor número de casas decimais utilizadas ao se resolver analiticamente.

$$\begin{aligned}\tau^{(1)} &= \sigma_{12}/2 \\ \tau^{(2)} &= -0,471\sigma_{11} + 0,471\sigma_{22} - 0,333\sigma_{12} \\ \tau^{(3)} &= -0,471\sigma_{11} + 0,471\sigma_{22} + 0,333\sigma_{12}\end{aligned}\quad (23)$$

Tabela 4 – Tensão de escoamento aparente encontrada em cada curva das Figuras 4.2 e 4.3 e diferença percentual em relação à solução não viscosa

CCC	Tensão de escoamento aparente	diferença %	CFC	Tensão de escoamento aparente	diferença %
da/dt=10-3	308.8178	-2.754	da/dt=10-3	356.4972	-2.750
da/dt=10-4	323.3468	1.821	da/dt=10-4	373.261	1.823
da/dt=10-5	338.557	6.611	da/dt=10-5	390.8102	6.611
EP	317.5634		EP	366.5774	
m=0,03	304.661	-4.063	m=0,03	351.6868	-4.062
m=0,02	308.8178	-2.754	m=0,02	356.4972	-2.750
m=0,01	313.0328	-1.427	m=0,01	361.375	-1.419

4.1.2 Segundo exemplo: peça com trinca pré-existente

Foi simulada uma peça, de dimensões $1000\mu\text{m} \times 1000\mu\text{m}$, com uma trinca pré-existente sob tração (modo I), sendo que o comprimento da trinca é de $500\mu\text{m}$, estando a ponta da trinca situada no centro do domínio, conforme ilustrado na Figura 4.4. Considera-se que a ponta da trinca esteja inserida em um monocristal CFC sob EPD, conforme previa o modelo de Rice (1987). São aplicados deslocamentos prescritos verticais de $0,625\mu\text{m}$ ao longo dos contornos superior e inferior. O material tem módulo de elasticidade de 60840MPa , $\tau_c=60,84\text{MPa}$ e um coeficiente de Poisson $\nu=0,3$.

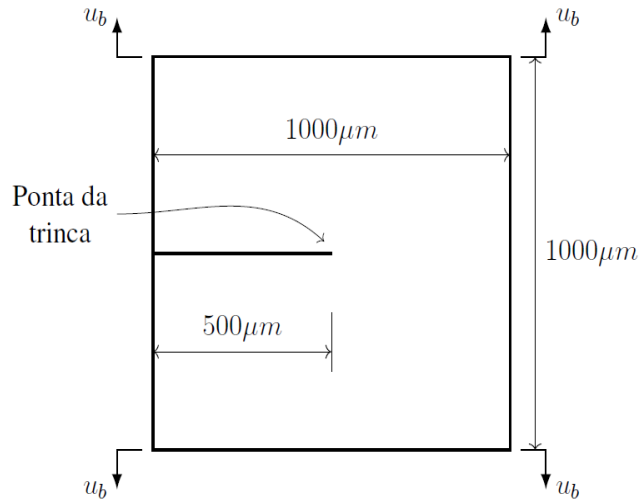


Figura 4.4 – Peça com trinca em tração – Modo I. u_b denota o campo de deslocamentos no contorno

O problema é resolvido considerando a decorrência de um tempo total de 1000 segundos, divididos em 1000 passos de 1 segundo cada. Assim, $0,000625\mu\text{m}$ de deslocamento é imposto em cada passo de tempo.

O domínio físico é discretizado considerando a simetria vertical do problema, de maneira que somente a parte superior da peça é simulada, conforme demonstrado na Figura 4.5. Adotou-se uma malha de $1000\mu\text{m} \times 500\mu\text{m}$ discretizada em 4476 elementos finitos quadriláteros bilineares, com um refinamento maior na região da ponta da trinca, conforme apresentado na Figura 4.5. O deslocamento prescrito é aplicado em cada nó da face superior. O formato da malha é similar ao utilizado por Columbus e Grujicic (2002). Na Figura 4.6 é apresentado um detalhe da malha na região próxima à ponta da trinca, sendo que ela está inserida em uma região aqui denominada janela refinada, de dimensões $10\mu\text{m} \times 8,6\mu\text{m}$, discretizada em 50×50 elementos.

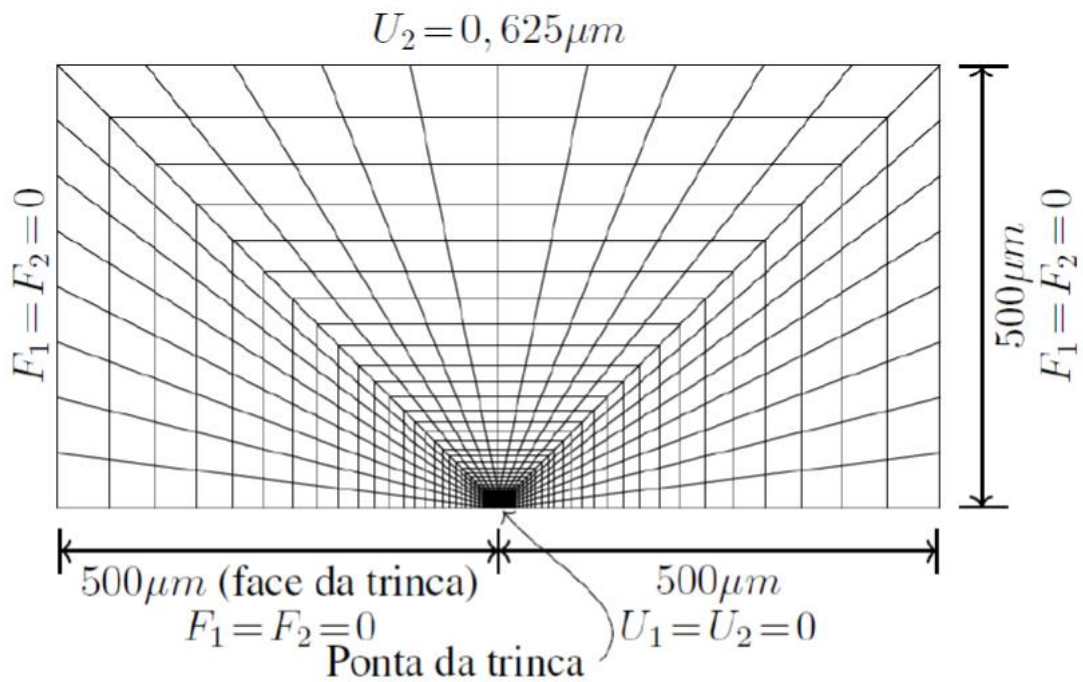


Figura 4.5 – Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema. F_i e U_i são as componentes do vetor de forças e de deslocamentos, respectivamente

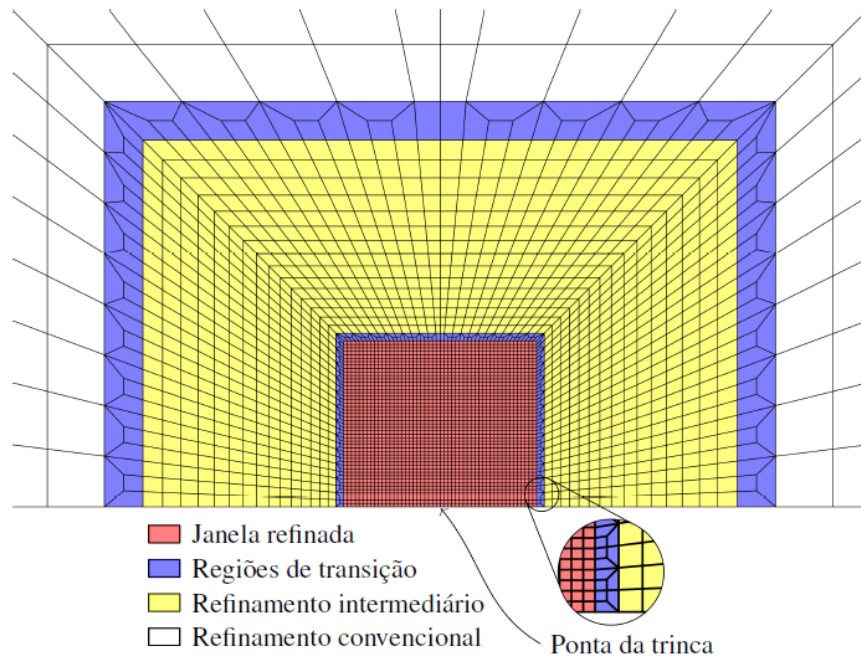


Figura 4.6 – Detalhe da malha na região próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta inferior da janela refinada

Os resultados apresentados a seguir estão organizados da seguinte forma: são plotados no eixo das abscissas um ângulo θ , que inicia à direita da ponta da trinca e percorre a peça até atingir a face superior da trinca (desde 0° até 180°) em um raio de $2,8\mu\text{m}$ a partir da ponta da trinca, conforme mostrado na Figura 4.7, e no eixo das ordenadas uma componente de tensão normalizada pela tensão crítica decomposta no material (τ_c). Os resultados do presente trabalho são comparados aos encontrados em Fornel et al. (2018), cujos resultados são a resposta ao problema conforme a teoria elasto-plástica e foram verificados com a solução analítica de Rice (1987), que também é mostrada nos resultados. Uma discussão da aproximação dos resultados numéricos com a solução analítica de Rice pode ser encontrada em Fornel (2018).

Duas diferentes análises são feitas, uma quanto à variação da taxa de deslizamentos de referência (da/dt), mantendo a taxa de sensibilidade do material (m) constante e a outra variando a taxa de sensibilidade do material (m), mantendo constante a taxa de deslizamentos de referência (da/dt).

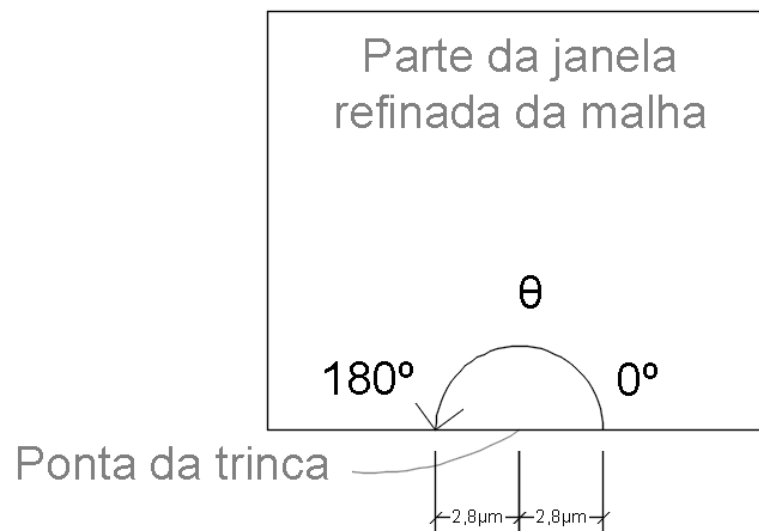


Figura 4.7 – Caminho percorrido para análise de campos de tensões

4.1.2.1 Análise de da/dt constante com variação de m

Mantendo-se a taxa de deslizamentos de referência constante em $da/dt=0,001$ – este valor foi utilizado em vários trabalhos, como Peirce et al. (1983), Steinmann e Stein (1996), Columbus e Grujicic (2002) e Groh et al. (2009) – foi feita uma variação nos valores da taxa de

sensibilidade do material (m), abrangendo $0,002 \leq m \leq 0,25$. O esperado é que com a diminuição de m os resultados se aproximem da solução elasto-plástica. Nas Figuras 4.8, 4.9 e 4.10 pode se verificar que isto ocorre: à medida que m diminui, a solução se aproxima da elasto-plástica (para as 3 componentes de tensão), sendo que para m foram adotados valores como $m=0,005$ – utilizado por Steinmann e Stein (1996) e Peirce et al. (1983), $m=0,01$, utilizado por Columbus e Grujicic (2002), $m=0,25$ – usado nos estudos de Groh et al. (2009) e $m=0,02$ – limite máximo admitido em Peirce et al. (1983). O valor de $m=0,25$ não produziu resultados satisfatórios, ficando os mesmos consideravelmente distantes da solução elasto-plástica. Valores muito baixos de m (como $m=0,002$) acabaram produzindo resultados instáveis numericamente (não mostrados nas figuras).

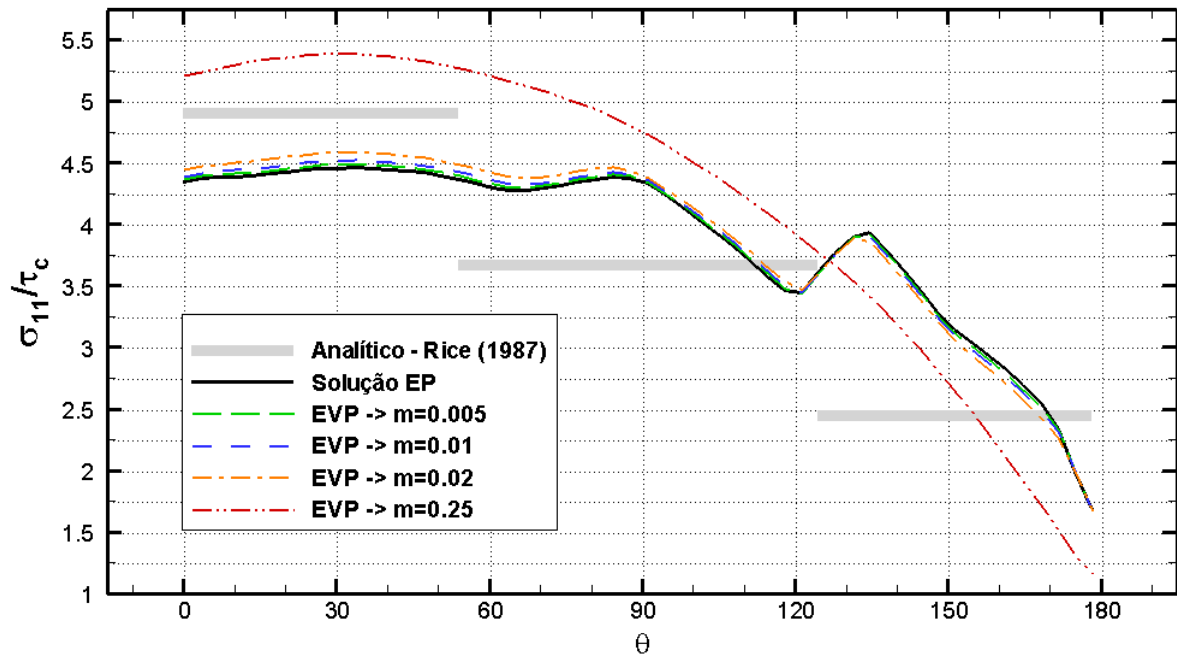


Figura 4.8 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{11}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$)

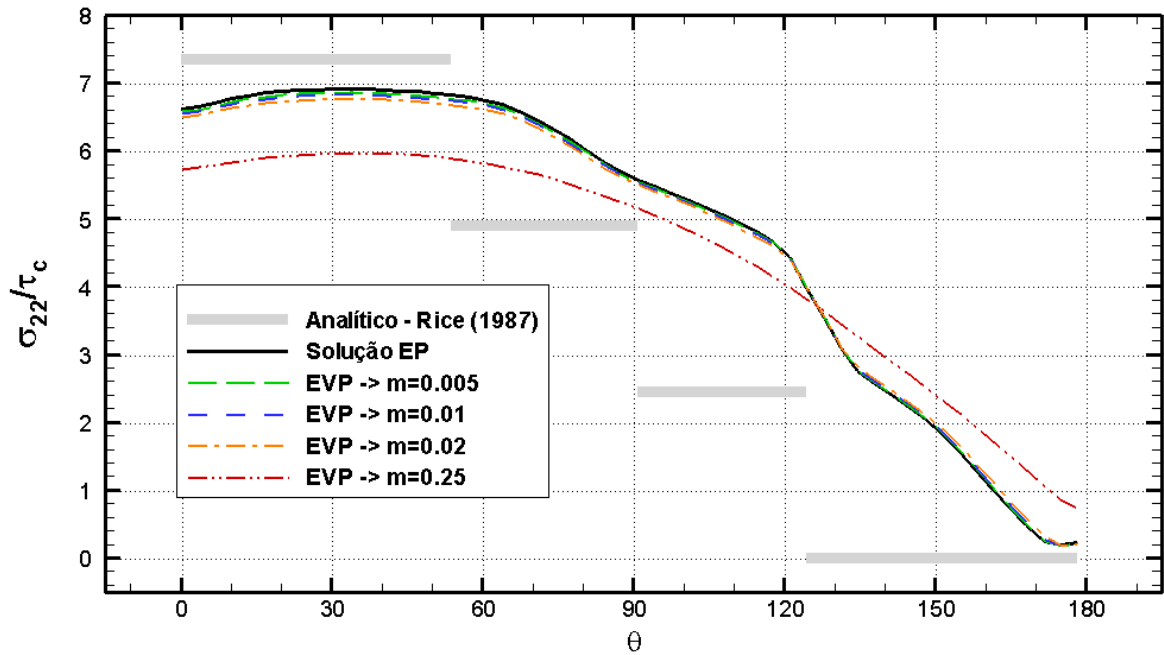


Figura 4.9 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{22}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$)

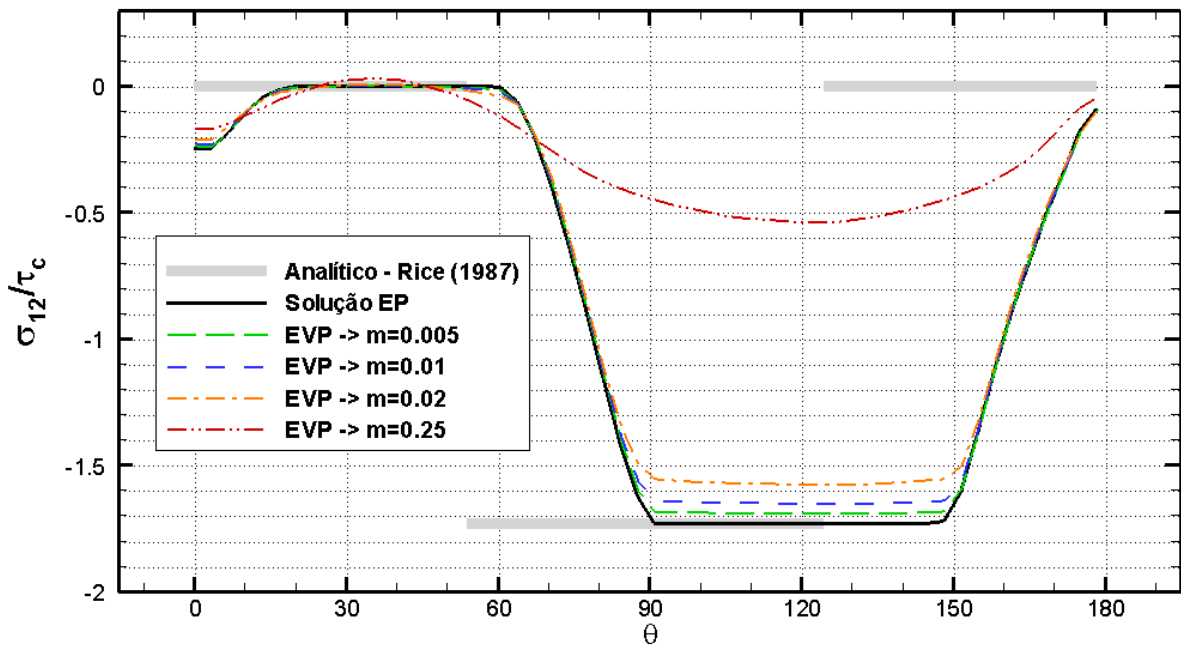


Figura 4.10 – Análise da influência de m , observando o quociente σ_{12}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($da/dt=0,001$)

4.1.2.2 Análise de m constante com variação de da/dt

Nos presentes casos manteve-se a taxa de sensibilidade do material constante a um valor de $m=0,01$. Dois valores das taxas de deslizamentos de referência foram utilizados: $da/dt=0,001s^{-1}$, representada aqui na cor azul nas figuras a seguir; e $da/dt=0,000003s^{-1}$ foi uma estimativa do valor da taxa com as rotinas que não consideram a influência do tempo na análise (sem efeitos viscosos), fazendo uso da implementação de Fornel (2018) da seguinte maneira: se encontrou o somatório dos deslizamentos acumulados de todos os nós da estrutura e então se estimou o deslizamento médio de cada nó que deslizou. Este valor foi então dividido pelo tempo total da simulação, fornecendo o valor acima. Nas Figuras 4.11, 4.12 e 4.13 nota-se que os resultados obtidos com essa taxa de deslizamentos de referência retirada da solução elasto-plástica praticamente se sobrepõem à própria solução elasto-plástica para as três componentes de tensão. Porém, também com a taxa de deslizamentos de referência $da/dt=0,001$ obtém-se resultados similares aos elasto-plásticos para as três componentes de tensão analisadas.

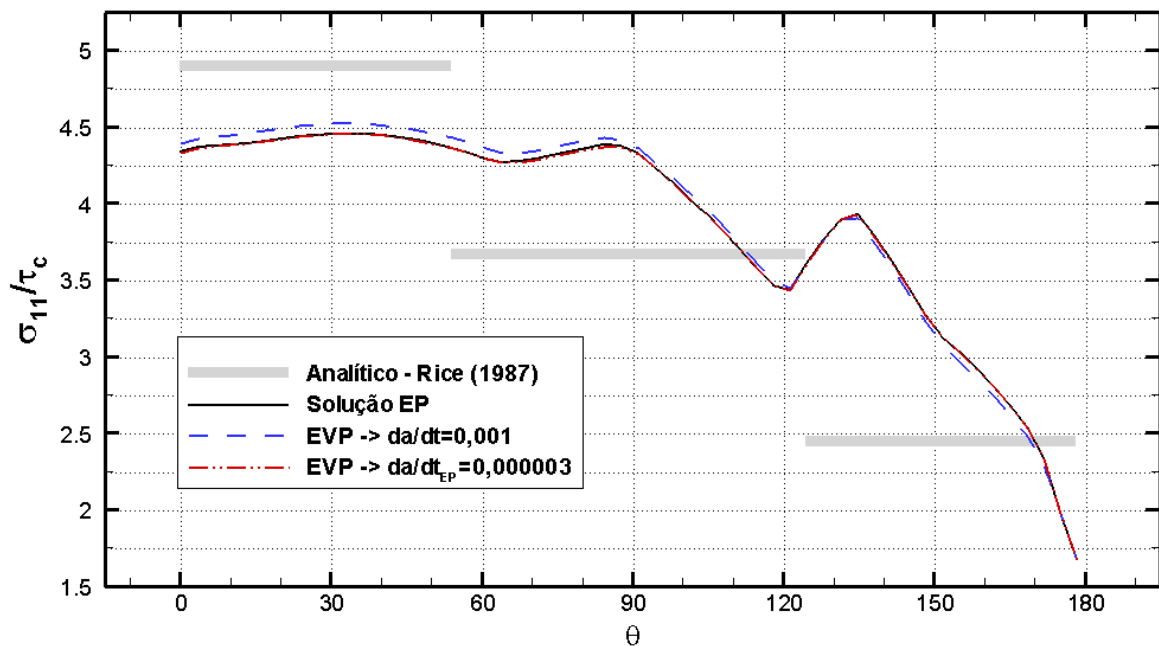


Figura 4.11 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{11}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)

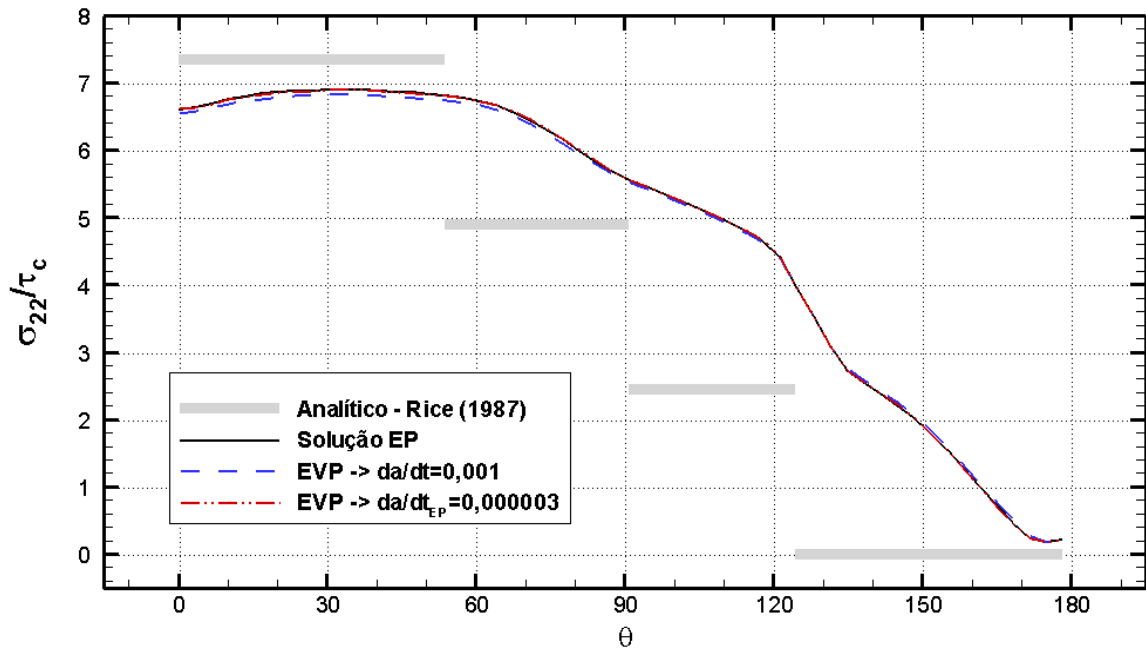


Figura 4.12 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{22}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)

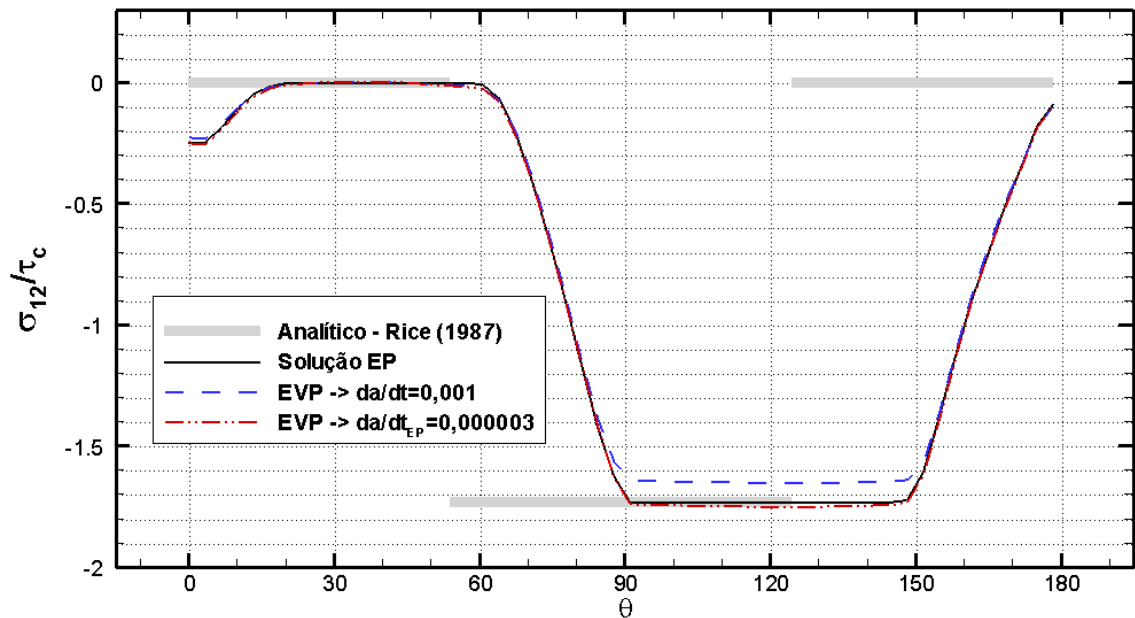


Figura 4.13 – Análise da influência de da/dt , observando o quociente σ_{12}/τ_c . A abreviação EP se refere à solução elasto-plástica e EVP à elasto-viscoplástica ($m=0,01$)

4.1.2.3 – Análise dos resultados

Com os resultados obtidos é possível concluir (ao variar m) que quando se tem $m \leq 0,02$ os resultados obtidos com as rotinas que consideram os efeitos viscosos convergem para os resultados da solução elasto-plástica, sendo que quanto menor o valor de m maior a convergência (conforme esperado), até um limite de aproximadamente $m=0,002$. Para valores próximos ou inferiores à 0,002 ocorre instabilidade numérica. As expectativas ao se variar da/dt também são atendidas quando é buscada uma aproximação da solução elasto-plástica. Isto é feito atribuindo a da/dt um valor médio dos deslizamentos obtidos nela por nó e por passo de tempo. Neste caso os resultados também se aproximam da solução plástica para todas as componentes de tensão. Não foram encontradas limitações numéricas de qualquer tipo com valores usualmente adotados na bibliografia para da/dt .

4.2 SIMULAÇÕES DE PROPAGAÇÃO DE TRINCAS CONSIDERANDO PLASTICIDADE CRISTALINA

A simulação numérica de uma peça submetida à tração foi realizada, sendo que as dimensões da estrutura, a malha de elementos finitos e a forma como o deslocamento prescrito é aplicado foram mantidos constantes e as alterações se deram nas propriedades dos materiais: foram alteradas características que ditam o momento de início da plastificação, as propriedades que regulam o comportamento viscoso e também os parâmetros que comandam a fratura do material.

4.2.1 Definição do problema: propriedades geométricas e malha de elementos finitos

As dimensões da peça simulada são mostradas na Figura 4.14, sendo que a mesma é submetida a um deslocamento prescrito dividido em 10000 passos de 0,01 segundo cada, totalizando 100 segundos de experimento. A forma como o deslocamento é aplicado é mostrada na Figura 4.15.

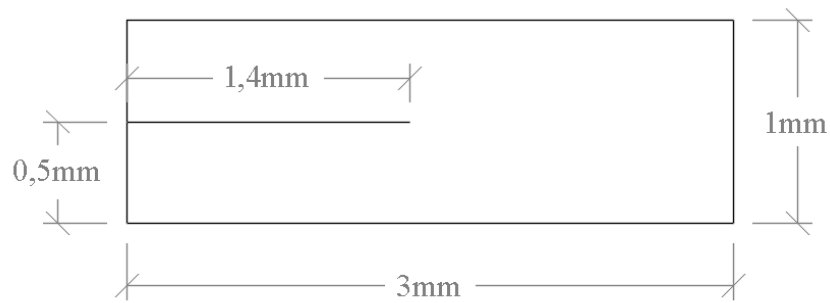


Figura 4.14 – Dimensões da peça simulada

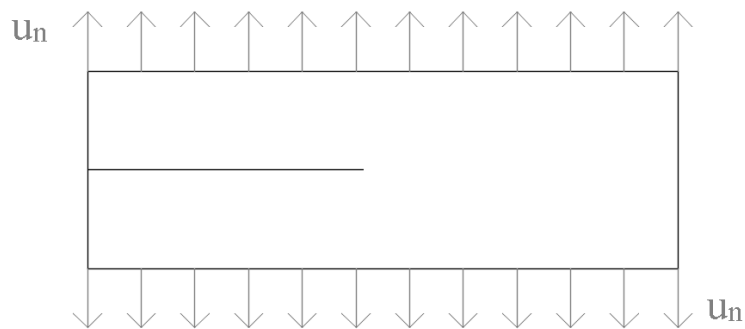


Figura 4.15 – Aplicação do deslocamento prescrito na estrutura

Detalhes da malha de elementos finitos utilizada são mostrados a seguir: na Figura 4.16 a malha completa é mostrada. Na Figura 4.17(a) é feita uma ampliação da região central da peça, onde se encontra a ponta da trinca e há maior refinamento da malha. Na Figura 4.17(b) é feita uma ampliação ainda maior do centro da malha, mostrando em detalhes a parte mais refinada da mesma (com quadrados de $2\mu\text{m}$ de lado). A medida destes elementos de maior refinamento é a mesma encontrada em Aslan (2010) – que afirma ser uma medida considerada adequada quando considerando o crescimento de trincas em monocristais. Bouvard et al. (2009) fizeram um estudo da influência da malha e concluem que há convergência nos resultados para elementos menores que $4\mu\text{m}$ de lado na região mais refinada da mesma – ambos estudos se deram no âmbito da fadiga e consideraram a influência da evolução do crescimento da trinca. Para a evolução do comprimento da trinca Bouvard et al. (2009) destacam que não encontraram uma convergência perfeita. Para se chegar a um tamanho de malha ideal, portanto, seria adequado utilizar-se de resultados experimentais, bem como de um estudo de diferentes tamanhos de malha. Porém, julga-se que este ajuste refinado

do refinamento da malha é objetivo para trabalhos futuros, visto que $2\mu\text{m}$ é uma medida considerada adequada nos trabalhos citados e a recomendação para o modelo coesivo utilizado é que a relação do lado do elemento da região mais refinada da malha dividido pela separação característica esteja com valores próximos a 5. Conforme será mostrado mais adiante, a separação característica utilizada nas simulações é de $0,613\mu\text{m}$ e, portanto, este quociente será de 3,26 (valor considerado adequado). A malha é composta de 5730 elementos quadriláteros bilineares sendo que, ao longo do centro da peça (na direção da projeção da trinca), 130 destes elementos são coesivos. Somente os elementos coesivos dentro da região central da malha – onde há maior refinamento da mesma – são considerados nos resultados aqui apresentados, visto que quando se chega ao rompimento dos elementos finais os gradientes de tensões ficam muito irregulares devido à falta de refinamento da malha. A disposição horizontal dos elementos coesivos simula a propagação da trinca ocorrendo de forma horizontal, conforme é esperado para modo I de fratura. Por fim, para os casos abordados nesta pesquisa a presente malha se mostrou adequada, visto que as regiões que concentram os gradientes de tensões ficam confinadas à região central da mesma (próxima à ponta da trinca) e a gama de resultados válidos é adequada para se obter as conclusões almejadas.

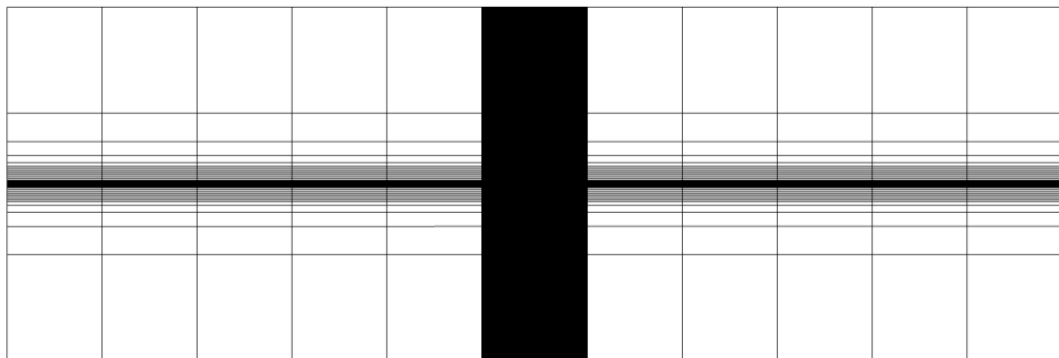


Figura 4.16 – Malha de elementos finitos

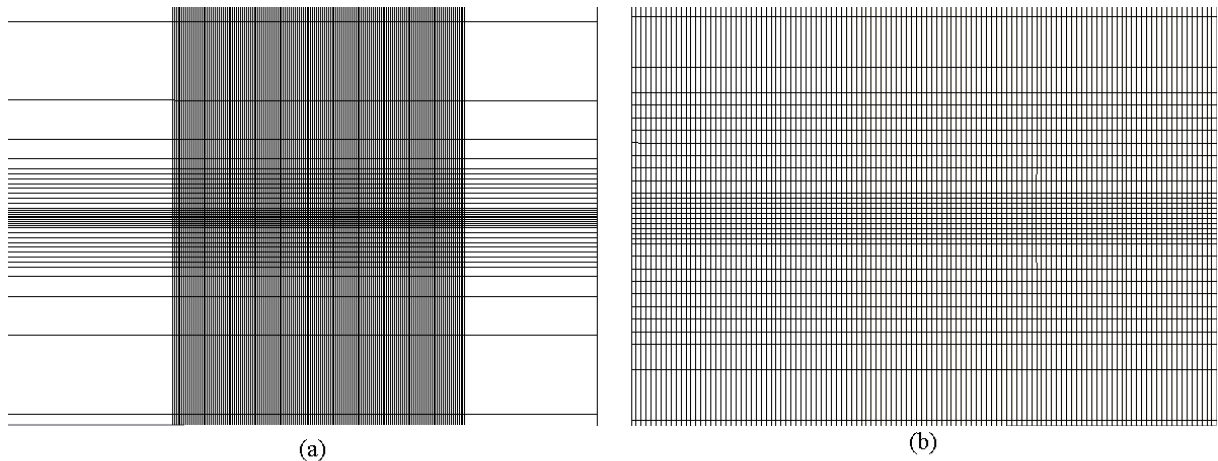


Figura 4.17 – Detalhes do refinamento da malha

4.2.2 Propriedades da simulação e dos materiais

Nas simulações se considerou um módulo de elasticidade (E) de 70GPa e um coeficiente de Poisson (ν) de 0,33. Se manteve a energia coesiva em 1 kJ/m². Por exemplo, Bouvard et al. (2009) utilizaram 4 kJ/m², já Van der Giessen e Needleman (2002) usaram 1 J/m², porém em uma escala muito menor. Ao final da simulação se chega à um deslocamento prescrito normal à estrutura de 3,11μm, tanto na superfície superior quanto na inferior (aplicado conforme ilustrado na Figura 4.15). Com o deslocamento totalmente aplicado ao final dos 100 segundos de simulação se chega à uma energia de 2 kJ/m² (energia estimada através da integral J – que para as características do problema aqui estudado é dada pela Equação 24), assim a energia aplicada deve produzir propagação. Estes parâmetros e características foram mantidos constantes em todas as simulações. Não é pretensão do presente trabalho simular algum material em específico.

$$J = \left[\frac{(1-\nu)}{(1-2\nu)(1+\nu)} \right] E \frac{u_n}{h} \quad (24)$$

sendo que h é a metade da altura da estrutura simulada. As alterações se deram em duas frentes: uma delas foi em relação às propriedades viscosas (da/dt e m) para verificar o bom funcionamento do modelo de plasticidade implementado e também o papel delas em problemas envolvendo a fratura. E a outra frente foi com uma alternância na tensão crítica decomposta do material (τ_c), para analisar os efeitos de diferentes níveis de plasticidade atuando em problemas envolvendo fratura.

Os resultados são apresentados através das chamadas curvas R (no eixo das abscissas se tem a relação entre a variação no comprimento da trinca (Δa) – normalizado pela separação característica (δ_0) – e no eixo das ordenadas a energia aplicada (ΔG), normalizada pela energia coesiva do presente problema ($\Phi_{n,0}$ – Equação 22)). Os resultados obtidos com as rotinas que não consideram efeitos viscosos também são apresentados, com indicação da relação mais “eplcr” nas legendas das figuras. Diferentes relações $R = \sigma_{\max,0}/\tau_c$ são consideradas.

4.2.3 Simulações de cristais CFC

O primeiro problema apresentado é para um cristal CFC e tem como características do material: $\sigma_{\max,0} = 600$ MPa, com o qual se obtém $\delta_0 = 0,613 \mu\text{m}$ para que a energia coesiva superficial normal ($\Phi_{n,0}$ – energia coesiva para o presente problema), obtida através da Equação 22, seja de 1 kJ/m^2 . Variando as características viscosas e a tensão crítica decomposta do material (τ_c) têm-se os resultados apresentados a seguir.

4.2.3.1 Variação do expoente m

Para a obtenção de resultados alterando a taxa de sensibilidade do material (m) a taxa de deslizamentos de referência foi mantida em $da/dt = 0,001 \text{ s}^{-1}$. São apresentadas duas figuras à seguir, para $3,65 \leq R \leq 4$ (Figura 4.18) e $3,3 \leq R \leq 3,55$ (Figura 4.19). O que se observa, de forma geral, é que com o aumento do valor de m existe uma maior plastificação, assim retardando o início da propagação da trinca, conforme também observado por Tvergaard e Needleman (1991). Resultados das rotinas de Fornel (2018), que não consideram efeitos viscosos são os que apresentam menor grau de plastificação e acabam se aproximando dos resultados com menor valor de m , conforme esperado quando o material é menos viscoso.

Como se pode observar na Figura 4.18 e na Figura 4.19, quanto maior R maior tenacidade é observada. A propagação inicia para energias de fratura maiores e a propagação ocorre para energias maiores. Este é um resultado esperado e é observado por exemplo em materiais elasto-plástico isotrópicos em Tvergaard e Hutchinson (1992). Observa-se que m tem o mesmo efeito de R ou seja, quanto maior, maior a tenacidade geral.

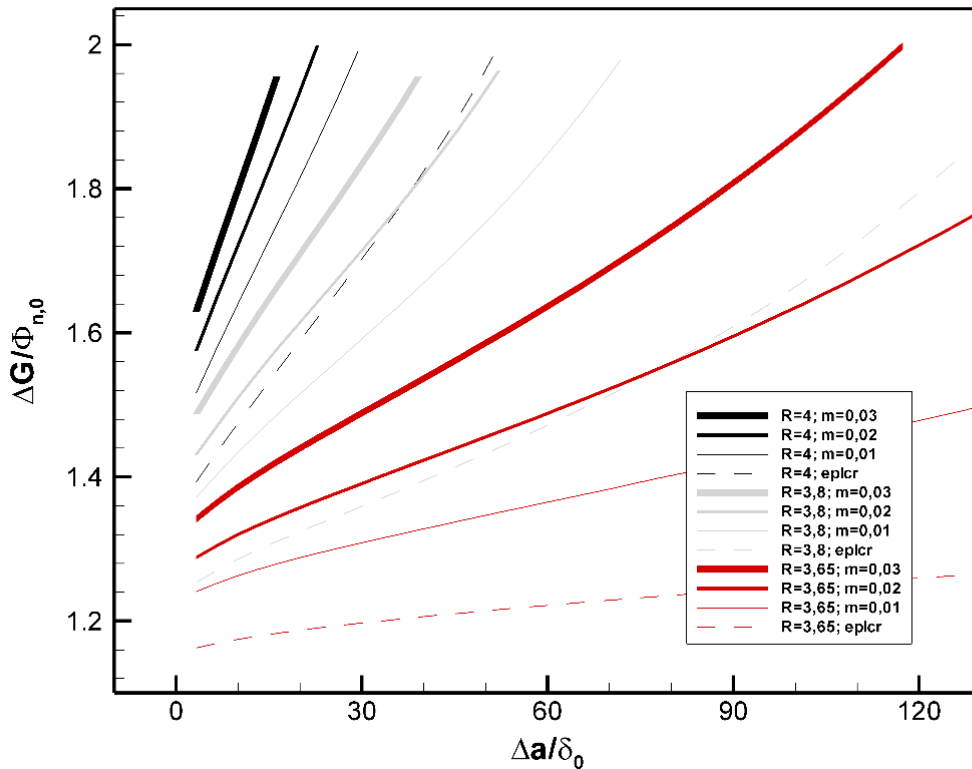


Figura 4.18 – $\sigma_{\max,0}=600$ MPa, variação de m para $3,65 \leq R \leq 4$ ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)

Para valores de R a partir de 3,65 (aproximadamente) a tenacidade aumenta inicialmente e depois tende a estabilizar. Este efeito é também esperado e o patamar atingido caracteriza a tenacidade final do material. Por isto, quanto maiores m e R o patamar se torna maior. Fisicamente o patamar é caracterizado pela situação na qual a energia de fratura se torna maior que a dissipação plástica na ponta da trinca, tornando a propagação frágil e instável. Neste momento também existe a possibilidade de instabilidades numéricas, como se pode ver no caso $R=3,55$ da Figura 4.19 para valores menores de m . Em todos os casos houve uma tendência à instabilidade para valores menores de m , conforme já observado no item 4.1.2.1 e também presente na pesquisa de Juul et al. (2017). Para $R=0$ não há plastificação ($\tau_c \sim \infty$), neste caso a propagação inicia para $\Delta G/\phi_{n,0} \sim 1,01$, muito próximo da unidade, como esperado (não mostrado).

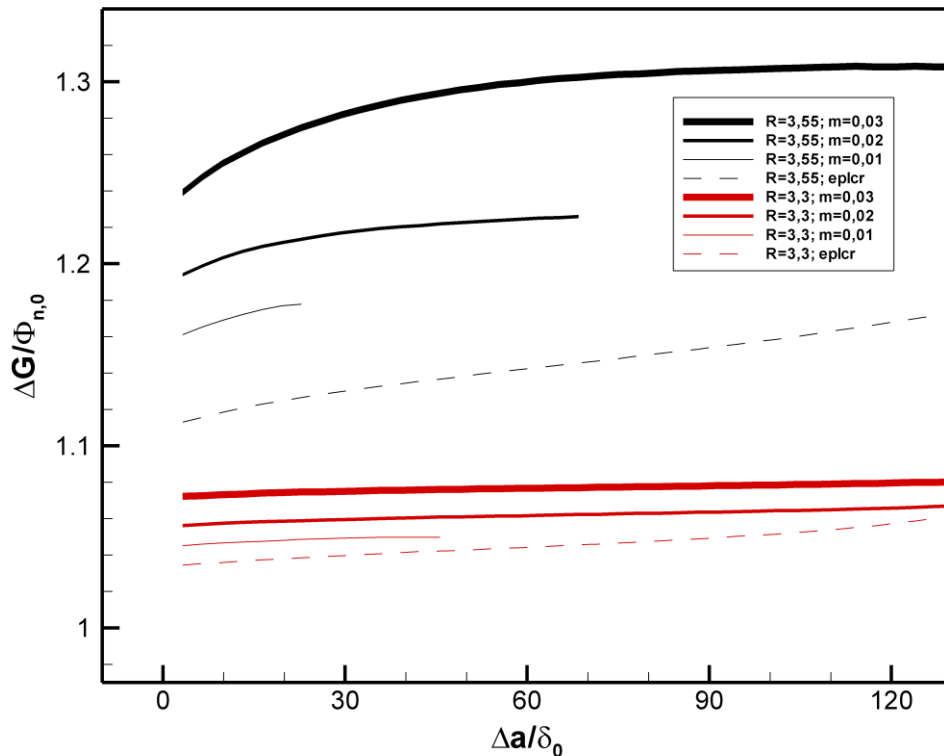


Figura 4.19 – $\sigma_{\max,0}=600$ MPa, variação de m para $0 \leq R \leq 3,55$ ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$)

4.2.4 Simulações de cristais CCC

Resolvendo o mesmo problema, porém para cristais CCC, chega-se às curvas R apresentadas na Figura 4.20, onde se percebe que para $R \leq 2,8$ os resultados se sobrepõem aos de $R=0$. Novamente, quanto maior o valor de R, maior a tenacidade do material. Na Figura 4.21 é feita uma comparação entre os resultados dos cristais CCC e CFC para alguns valores de R. Para $R=0$ não importa se o cristal é CCC ou CFC, sendo que ao não ocorrer plastificação os resultados são idênticos, conforme esperado (a anisotropia elástica não é considerada no presente trabalho). Quando se comparam resultados com mesmas propriedades viscosas, porém de estruturas cristalinas distintas, nota-se que tanto o início da propagação, quanto o crescimento da trinca são retardados nos casos de cristais CCC. Isto ocorre porque existe uma atividade plástica mais intensa nos casos em que é utilizado o cristal CCC e tal justificativa se deve ao fato de que os sistemas efetivos 2 e 3 têm $\beta^{(2)}=\beta^{(3)}=1$, isto é, a tensão crítica do material não é majorada quando levada a estes dois sistemas efetivos, resultando na necessidade de uma tensão menor para que ocorra plastificação, quando comparado com um

cristal CFC. É possível que para outras orientações cristalinas o resultado seja diferente. O efeito é substancial para $R=3,3$ onde para CCC o material apresenta um início de propagação quase 50% maior que o elástico ($R=0$) e com grande dissipação plástica durante a propagação. Já o CFC para o mesmo R tem um comportamento praticamente igual ao elástico.

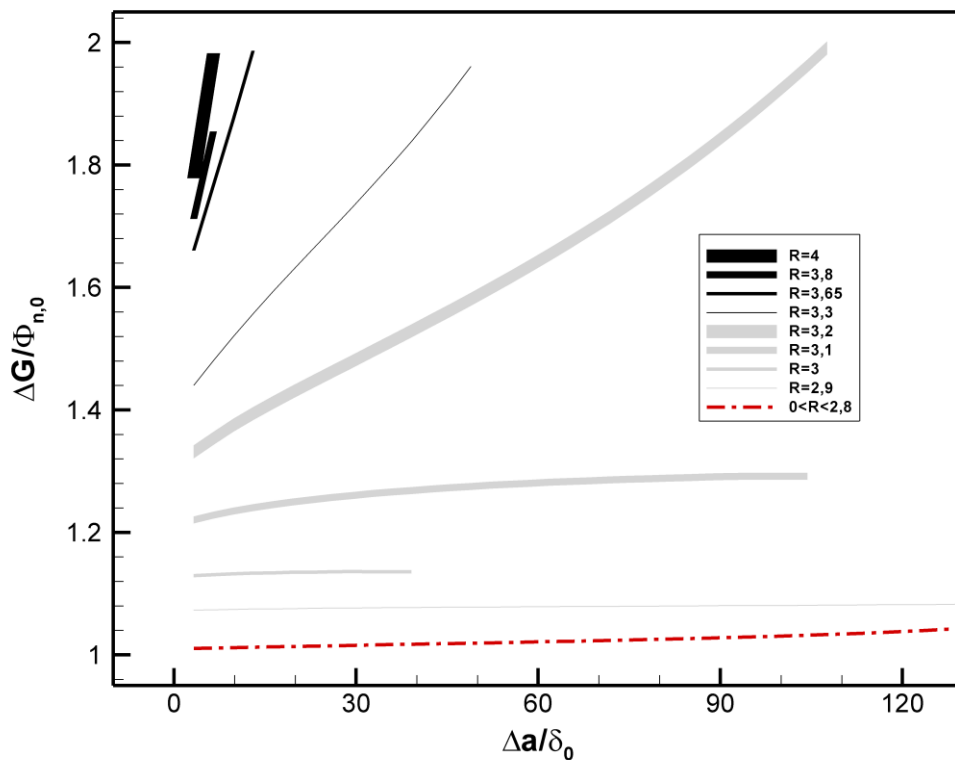


Figura 4.20 – Curvas R de cristais CCC com $m=0,02$ e $da/dt=10^{-3}$

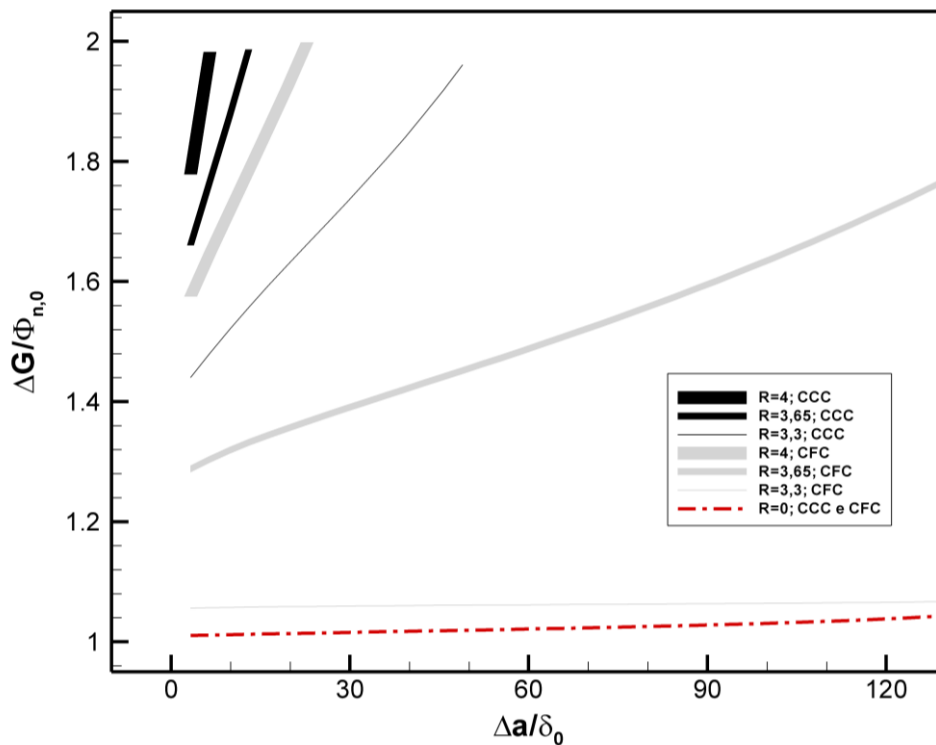


Figura 4.21 – Comparação das curvas R entre cristais CFC e CCC, para $m=0,02$ e $da/dt=10^{-3}s^{-1}$

4.2.5 Parâmetros viscosos nos cristais CFC e CCC

Fixando as atenções a uma única relação R das apresentadas anteriormente ($R=4$), se procedeu com uma alteração nos parâmetros viscosos, a fim de verificar diferenças e/ ou semelhanças no comportamento das distintas estruturas cristalinas. A Figura 4.22 apresenta curvas R com variações nos valores de da/dt , mantendo-se fixo o valor de m em 0,02. Se percebe que o aumento de da/dt implica retardar o início da propagação da trinca e a evolução da propagação. A explicação pode ser obtida da análise em tração pura (item 4.1) onde para valores menores de da/dt tem-se maiores tensões de escoamento aparente. Nota-se que os cristais CFC têm uma sensibilidade substancialmente maior à alterações no valor de da/dt quando comparados aos cristais CCC. A diferença se dá tanto no momento de início de propagação quanto na evolução da propagação (inclinação das curvas), como se observa na Figura 4.22.

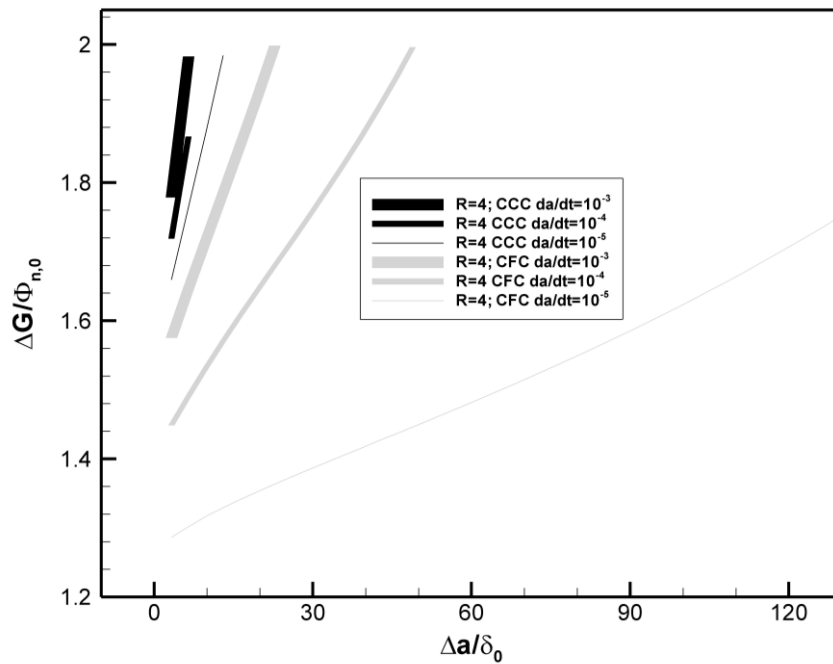


Figura 4.22 – Curva R=4 de estruturas CFC e CCC alterando da/dt (m fixo em 0,02)

A Figura 4.23 apresenta as mesmas curvas R=4, porém com alterações no valor de m e da/dt fixo em $10^{-3}s^{-1}$: se observa que os cristais CCC, assim como os CFC, apresentam uma tenacidade maior quanto maior o valor de m , observada no momento de início de propagação e na alteração da inclinação das curvas. Novamente os cristais CCC apresentam maior tenacidade. Observa-se uma sensibilidade maior à alteração do expoente m nos cristais CFC. Ou seja, no CFC há uma redução maior de tenacidade com a diminuição de m , notada principalmente na alteração da inclinação das curvas dos resultados dos cristais CFC.

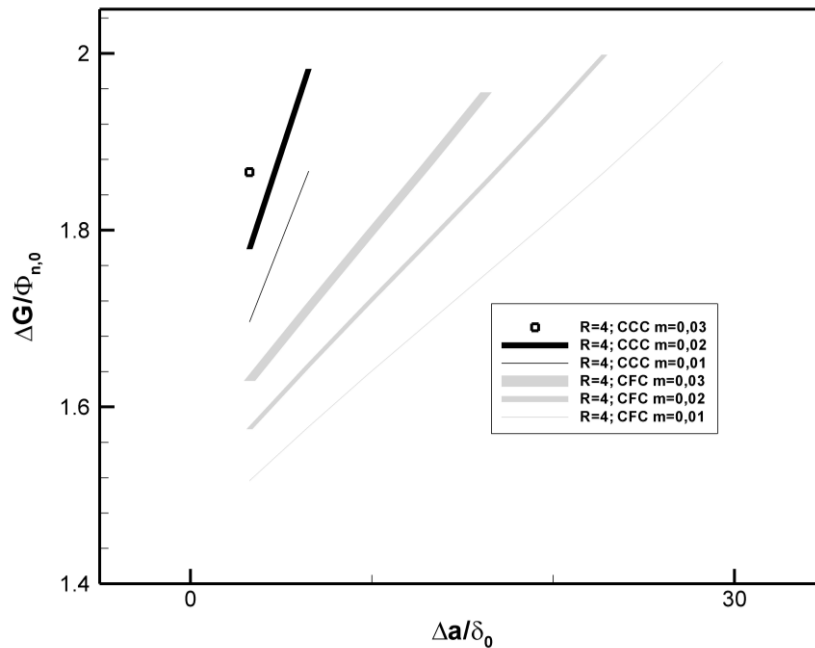


Figura 4.23 – Curva R=4 de estruturas CFC e CCC alterando m (da/dt fixo em 10^{-3})

Esta maior sensibilidade dos cristais CFC notada nos resultados do presente trabalho foi observada em trabalhos experimentais em Wei et al. (2004), muito embora o modelo usado aqui ainda seja uma aproximação muito grosseira do comportamento experimental real.

4.2.6 Deformações plásticas

Uma análise da atividade plástica existente nas curvas R mostradas nas Figuras 4.22 e 4.23 é apresentada nas figuras a seguir, visando justificar o que ocorre nas curvas R ao se variar parâmetros viscosos, tanto para cristais CFC quanto CCC. Dois tipos de análises dos campos de deformações plásticas foram realizados: um em 40 segundos de simulação, momento em que a separação normal do primeiro elemento coesivo (ponta da trinca) de todos os casos apresentados não ultrapassou o valor da separação característica (pré-pico da relação coesiva); e outro em 95 segundos de simulação, momento em que há ocorrência de propagação da trinca: o único caso em que não ocorre propagação em 95 segundos é para $m=0,03$, cristal CCC, porém vários elementos estão próximos da ruptura. As figuras têm as dimensões da peça (l) normalizadas por δ_0 , sendo que a ponta da trinca no início das simulações se encontra em $l/\delta_0=500$ (aproximadamente).

4.2.6.1 Deformações plásticas antes da propagação

A Figura 4.24 apresenta os deslizamentos acumulados ($\gamma^{(T)}$, mostrado na Equação 25) de acordo com as variações de da/dt (mantidas todas as outras características do problema constantes). A figura corresponde à atividade registrada no tempo de 40 segundos de simulação. O que se percebe é que de uma maneira geral existe maior atividade plástica nos cristais CCC. Também fica evidente que ao se aumentar os valores de da/dt , maior atividade plástica existe para o mesmo tempo de simulação em ambos os casos. A maior atividade plástica, portanto, justifica as diferenças apresentadas nas curvas R da Figura 4.22, onde CCC apresenta maior tenacidade.

$$\gamma^{(T)} = \int_0^t \sum_{\alpha=1}^3 |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (25)$$

Salienta-se que os deslizamentos acumulados dos cristais CFC e CCC são muito similares, como poderá ser visto em toda a subseção 4.2.6 – tal fato também é observado por Juul et al. (2017). O que acontece nas simulações realizadas são deslizamentos paralelos à direção dos sistemas 2 e 3 para cristais CFC e perpendiculares à direção dos sistemas (kink shear, explicado no item 3.2.3) para cristais CCC. Deslizamentos no sistema 1 são perpendiculares ao mesmo nos cristais CFC e paralelos ao sistema nos cristais CCC, porém são muito pequenos em relação aos ocorridos nos sistemas 2 e 3 e por tal razão não são notados nas figuras abaixo mostradas.

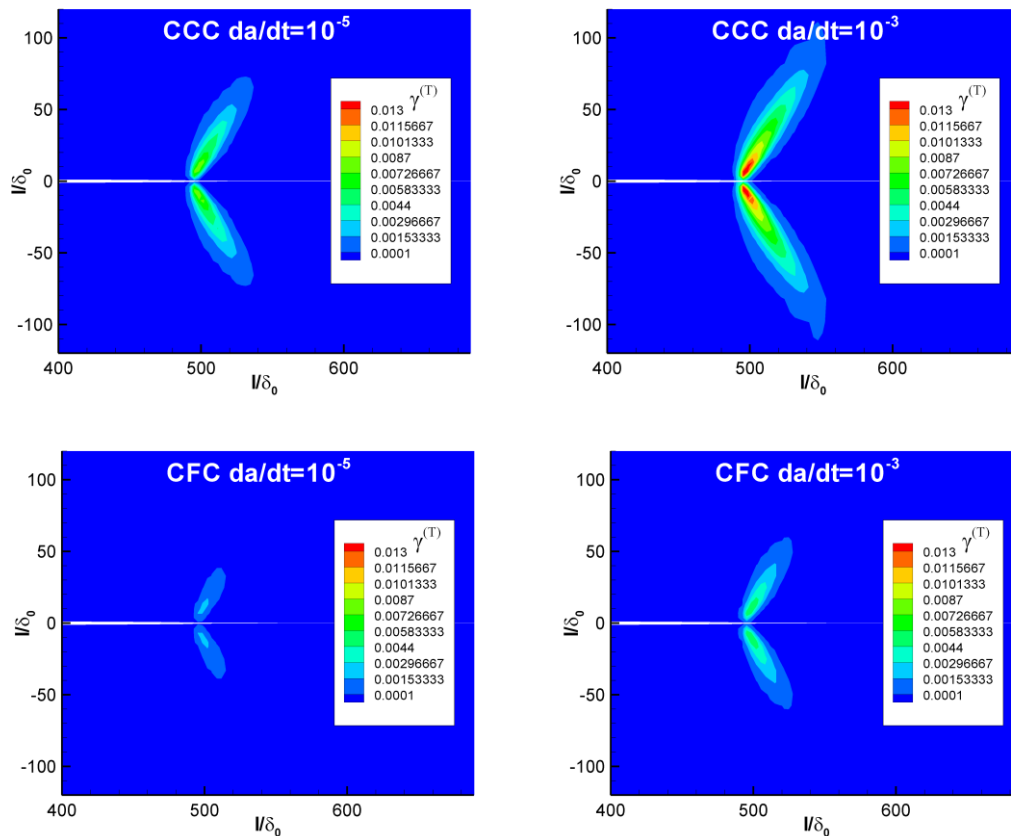


Figura 4.24 – Deslizamentos acumulados com variação de da/dt para o tempo de 40 segundos de simulação ($R=4$, $m=0,02$)

Já a Figura 4.25 apresenta variações de m aos 40 segundos de simulação para os dois tipos de cristal, CFC e CCC. Conforme pode ser visto na Tabela 5, nem sempre um aumento de m representa maior atividade plástica máxima, porém, conforme visto no item 4.1.1, ao se aumentar m existe uma antecipação do momento de início da atividade plástica. Assim sendo, os deslizamentos na região mais intensa podem não ser os maiores com o aumento de m para este momento da análise (40 segundos de simulação), porém a região plastificada é maior para ambos os casos, CFC e CCC (ocorre uma região maior de atividade plástica ao se aumentar m). Este efeito também é observado em Juul et al. (2017).

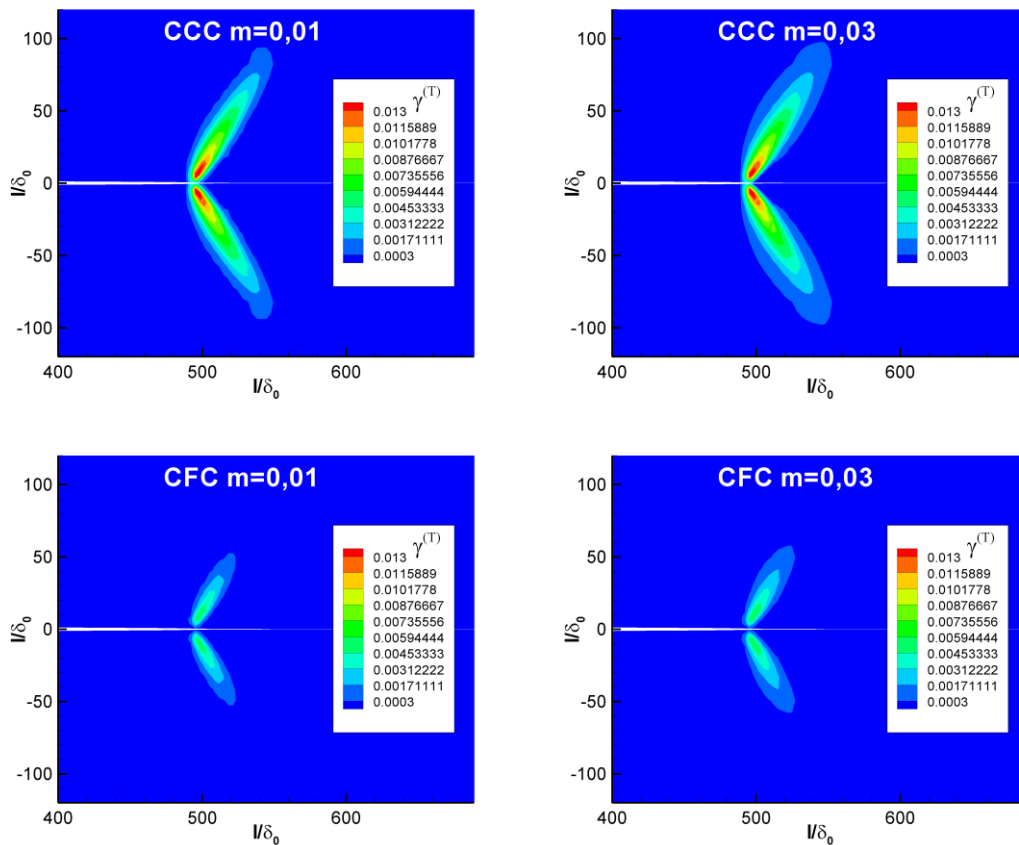


Figura 4.25 – Deslizamentos acumulados com variação de m para o tempo de 40 segundos de simulação ($R=4$, $da/dt=10^{-3}s^{-1}$)

Tabela 5 – Deslizamentos acumulados máximos ($da/dt=10^{-3}s^{-1}$, $R=4$)

Deslizamentos acumulados máximos alterando m (40s)		
	CCC	CFC
$m=0,03$	0,0138024	0,00608255
$m=0,01$	0,0139921	0,0058161

4.2.6.2 Deformações plásticas durante a propagação

Na Figura 4.26 são apresentados os deslizamentos acumulados para cristais CFC e CCC, com dois valores de da/dt , para o tempo de 95 segundos de simulação da relação $R=4$, sendo $m=0,02$ em todos os casos. Novamente se percebe um aumento na atividade plástica máxima ao se aumentar da/dt , porém não existe mais uma ampliação considerável da zona plástica de

uma forma geral. Nota-se uma atividade plástica distinta na parte inferior da figura, a mesma se deve ao fato de haver uma propagação maior para o caso $da/dt=10^{-5}s^{-1}$.

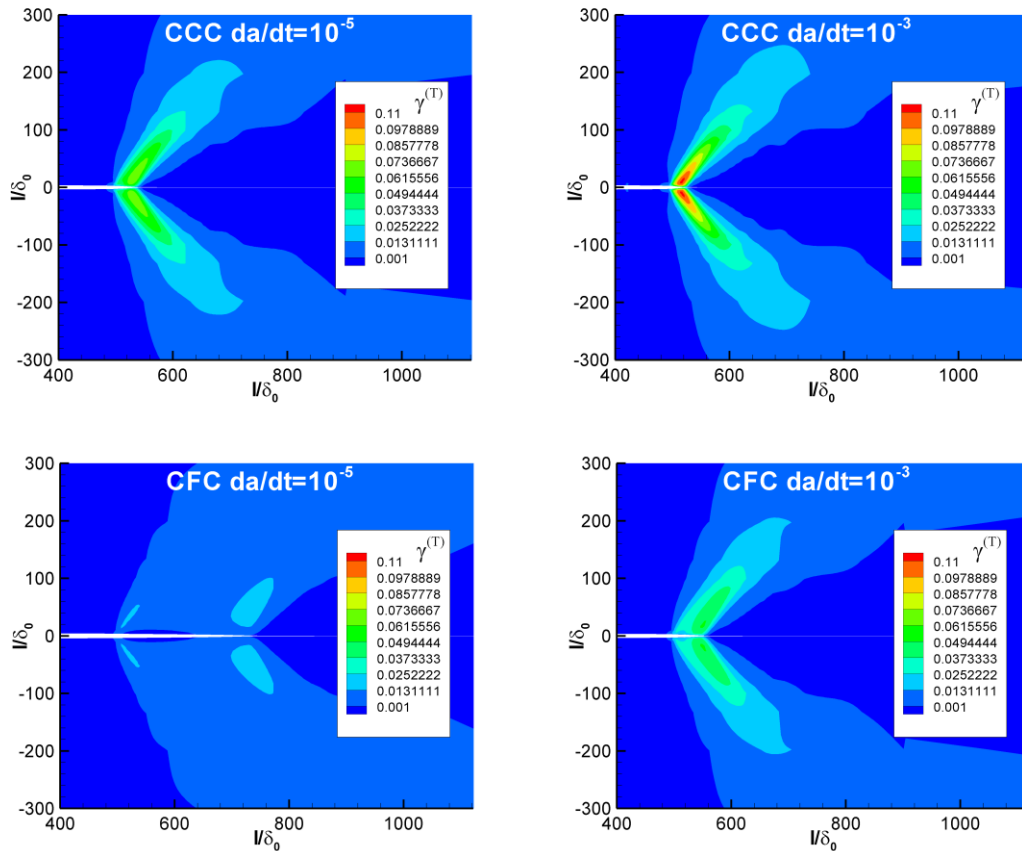


Figura 4.26 – Deslizamentos acumulados com variação de da/dt para o tempo de 95 segundos de simulação ($R=4$, $m=0,02$)

A Figura 4.27 apresenta variações de m para a mesma situação apresentada na Figura 4.26, mantendo-se da/dt constante em $10^{-3}s^{-1}$. O que se percebe é que com o aumento de m existe uma maior atividade plástica, conforme pode ser verificado na Tabela 6. Existe também uma tendência, em geral, de maior deformação plástica nos casos CCC, que também foi observada em Juul et al. (2017)

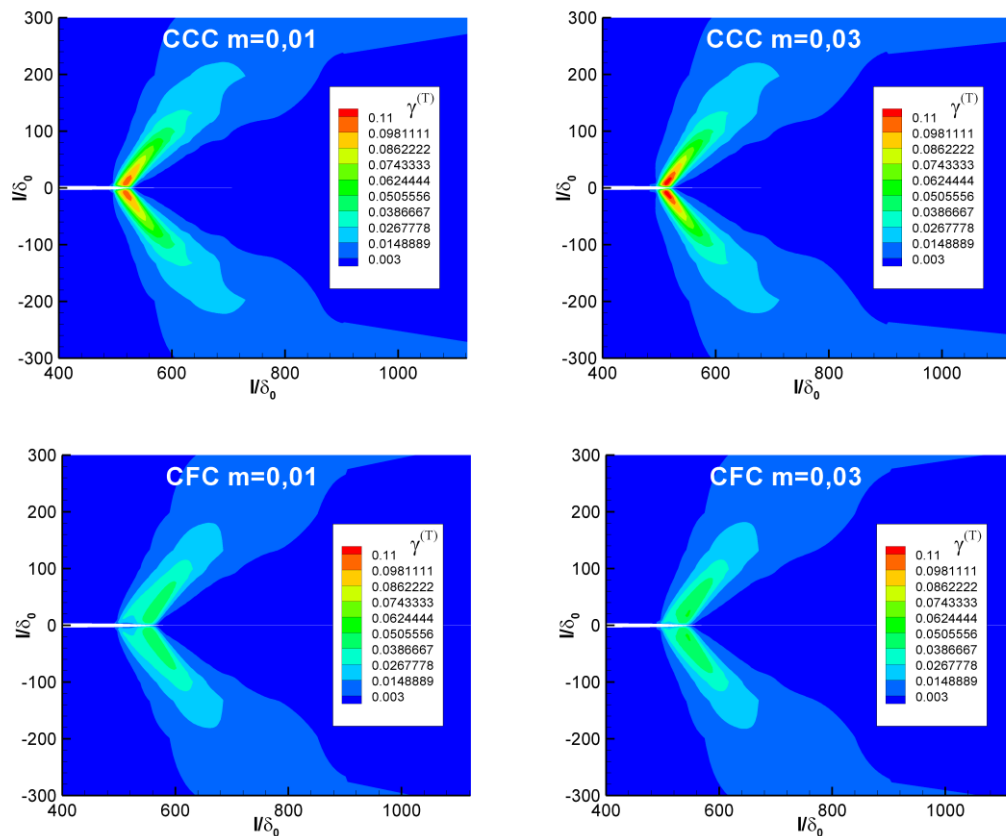


Figura 4.27 – Deslizamentos acumulados com variação de m para o tempo de 95 segundos de simulação ($R=4$, $da/dt=10^{-3}s^{-1}$)

Tabela 6 – Deslizamentos acumulados máximos para 95 segundos de simulação, alterando m (casos da Figura 4.27)

Deslizamentos acumulados máximos alterando m (95s)			
	CCC		CFC
$m=0,03$	0,116553		0,0515229
$m=0,01$	0,104757		0,0486354

4.2.7 Distintas taxas de deslizamentos de referência (da/dt) para cada sistema efetivo

Assim como existe o fator $\beta^{(\alpha)}$ para levar as tensões decompostas do material aos sistemas efetivos, alguns autores utilizam um fator de correção para a taxa de deslizamentos de referência (este fator é $\xi^{(\alpha)}$ no presente trabalho). O fator transforma a taxa de deslizamentos

de referência do material (da/dt) em taxas de deslizamentos de referência nos sistemas efetivos ($da^{(a)}/dt$). Juul et al. (2017) mostram que para a orientação dos cristais CFC o fator de correção tem as seguintes componentes: $\xi^{(1)}=2/(3)^{0,5}$ e $\xi^{(2)}=\xi^{(3)}=(3)^{0,5}$, enquanto para a orientação dos cristais CCC $\xi^{(1)}=2/(3)^{0,5}$ e $\xi^{(2)}=\xi^{(3)}=1$.

Nesta subseção este fator de correção é aplicado em alguns exemplos mostrados anteriormente (na Figura 4.21) e as diferenças são apresentadas na Figura 4.28. Para o cristal CCC os resultados não são mostrados visto que se sobrepuseram: somente o sistema 1 tem o valor de da/dt majorado e devido à pouca atividade plástica gerada por ele a consideração de $\xi^{(a)}$ não surtiu efeitos nas curvas R. Para os cristais CFC os sistemas 2 e 3 também têm a atividade plástica majorada por $\xi^{(a)}$ (além do sistema 1) e, portanto, a consideração do fator de correção $\xi^{(a)}$ resulta em um maior nível de atividade plástica, que pode ser visualizado na Figura 4.28 no aumento da tenacidade do material. Os efeitos encontrados com as simulações da Figura 4.28 são, de uma maneira geral, os mesmos já apresentados ao longo do presente trabalho, ou seja: aumentando-se o valor de da/dt em algum sistema é aumentada a atividade plástica e, por consequência, a tenacidade do material. Contudo, a alteração das curvas R foi pequena, de modo que as conclusões (tendências) encontradas anteriormente permanecem as mesmas com ou sem a consideração de $\xi^{(a)}$.

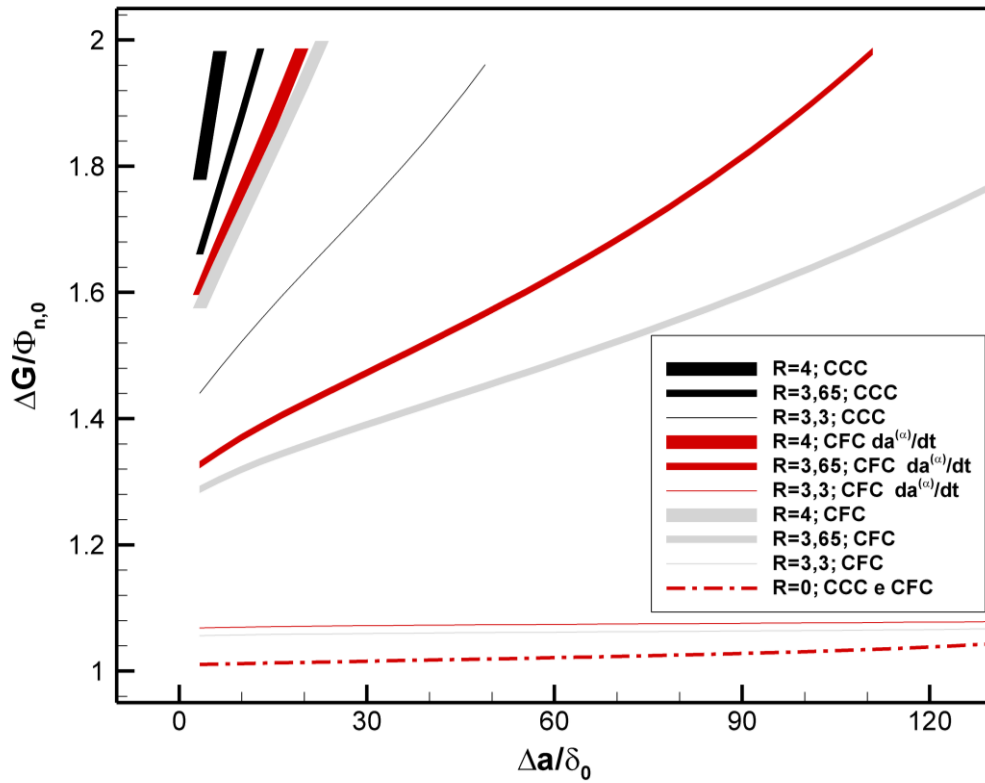


Figura 4.28 – Consideração de $da^{(a)}/dt$ – quando $da^{(a)}/dt$ não é especificado na legenda os resultados se referem à $da/dt=0,001s^{-1}$ (R=4 e $m=0,02$)

5 CONCLUSÕES

Este trabalho consiste numa pesquisa introdutória aos efeitos viscosos em plasticidade cristalina. Foi explorado o efeito de propriedades viscosas (m e da/dt) em diferentes situações, sendo a influência das mesmas na propagação de trincas em monocristais o foco principal deste trabalho. Estruturas CFC e CCC foram exploradas.

As seguintes conclusões puderam ser obtidas com relação a m :

- Para maiores valores de m maior a deformação plástica de origem viscosa. Para m tendendo a zero, as mesmas desaparecem e o resultado tende à solução elasto-plástica (itens 4.1.1, 4.1.2.1, 4.1.2.3 e 4.2.3);
- Maior m também faz as deformações plásticas iniciarem antes, sendo uma das razões do aumento destas deformações nos casos de fratura (item 4.2);
- Valores maiores de m levam a uma maior tenacidade (início de propagação com mais energia e maior dissipação durante a propagação) em ambos cristais, devido aos efeitos descritos acima;
- A sensibilidade é maior nos cristais CFC, principalmente na propagação (item 4.2);

As seguintes conclusões podem ser relacionadas a da/dt :

- Menor da/dt (equivalente a uma taxa de carregamento maior) leva a um aumento da tensão de escoamento aparente (item 4.1.1). E por consequência uma redução do deslizamento plástico;
- Menor da/dt também leva a uma menor tenacidade, tanto no CCC como no CFC. O efeito, porém, é bem mais sentido no CFC (itens 4.2.5 e 4.2.6).

A relativa maior sensibilidade do CFC a efeitos viscosos que o CCC foi reportada em experimentos, por exemplo, Wei et al. (2004). Apesar disso, o modelo usado nesse trabalho é ainda muito simplificado para comparações com experimentos.

Um maior nível de deslizamento plástico com m maiores foi observado em Tvergaard e Needleman (1986), Juul et al. (2017), entre outros.

Finalmente, é importante ressaltar que a sensibilidade aos parâmetros m e da/dt é muito maior nos problemas de propagação de fratura (item 4.2) que nos problemas de trinca estática (item 4.1.2).

São sugestões para trabalhos futuros:

- Considerar os efeitos do regime elástico das estruturas cristalinas;
- Considerar o endurecimento dos materiais;
- Considerar efeitos relacionados à temperatura;
- Considerar a plasticidade cristalina em estudos que considerem estruturas tridimensionais.

REFERÊNCIAS

- ASARO, R. J. Micromechanics of crystals and polycrystals. **Advances in applied mechanics**, v. 23, p. 1-115, 1983.
- ASARO, R. J.; RICE, J. R. Strain localization in ductile single crystals. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 25, n. 5, p. 309–338, 1977.
- ASLAN, O. **Numerical modelling of fatigue crack growth in single crystal nickel based superalloys**. 2010. 159 f. Thesis (Doctorate in Materials Engineering Sciences) – École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Evry.
- BARRENBLET, G. S. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. **Advances in applied mechanics**, v. 7, p. 55-129, 1962.
- BOUVARD, J.L.; CHABOCHE, J.L.; FEYEL, F.; GALLERNEAU, F. A cohesive zone model for fatigue and creep–fatigue crack growth in single crystal superalloys. **International Journal of Fatigue**, v.31, n.5, p.868-879, 2009.
- CHADWICK, P.; VIANELLO, M.; COWIN, S. C. A new proof that the number of linear elastic symmetries is eight. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**. v. 49, p. 2471-2492, 2001.
- COLUMBUS, D.; GRUJICIC, M. A comparative discrete-dislocation/nonlocal crystal-plasticity analysis of plane-strain mode I fracture. **Materials Science and Engineering**. A, v. 323, n. 1, p. 386–402, 2002.
- DUGDALE, D. S. Yielding of steel sheets containing slits. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**. v. 8, n. 2, p. 100-104, 1960.
- EWING, J. A.; ROSENHAIN, W. Experiments in micro-metallurgy: effects of strain. preliminary notice. **Proceedings of the Royal Society of London**. The Royal Society, v. 65, n. 413-422, p. 85–90, 1899.
- EWING, J. A.; ROSENHAIN, W. The crystalline structure of metals. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**., A, The Royal Society, v. 193, p. 353–375, 1900.
- FEDRIGO, F., 2001. **Aplicação de interfaces coesivas na mecânica da fratura via método dos elementos finitos**. 2001, 93p. Dissertação de Mestrado em Engenharia – Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2001.
- FORNEL, G. F., BITTENCOURT, E. e BRAUN, E. Simulação numérica dos campos de tensão na ponta de trincas sob Modo I em monocristais. In: MECOM, ISSN 2591-3522

(eletrónico) ISSN 1666-6070 (impreso), 2018, San Miguel de Tucumán – Argentina.
MECÁNICA COMPUTACIONAL Vol. XXXVI.S/L: Asociación Argentina de Mecánica Computacional, 2018. p. 1537-1546.

FORNEL, G. F. **Implantação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para o estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal**. 2018. 103p. Dissertação de Mestrado em Engenharia – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre. 2018.

FRENKEL, J. Zur theorie der elastizitätsgrenze und der festigkeit kristallinischer körper. **Zeitschrift für Physik**. v. 37, n. 7-8, p. 572–609, 1926.

GEIßLER, G.; KALISKE, M. Time-dependent cohesive zone modelling for discrete fracture simulation. **Engineering Fracture Mechanics**. v.77, p.153-169, 2010.

GEUBELLE, P. H.; BAYLOR, J. S. Impact-induced delamination of composites: a 2D simulation. **Composites B**. v. 29, p. 589-602, 1990.

GROH, S.; MARIN, E. B.; HORSTEMEYER, M. F.; ZBIB, H. M. Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal. **International Journal of Plasticity**. v. 25, p.1456-1473, 2009.

HILLERBORG, A.; MODÉER, M.; PETERSSON, P.-E. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. **Cement and Concrete Research**. v. 6, p. 773-781, 1976.

JUUL, K.J.; NIELSEN, K.L.; NIORDSON, C.F. Steady-state crack growth in single crystals under mode I loading. **Journal of Mechanics and Physics of Solids**, v.101, p.209-222, 2017.

KHAN, A. S.; HUANG, S. **Continuum theory of plasticity**. New York : John Wiley & Sons, Inc, 1995.

KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**. [S.l.]: LTC, 2006.

KOCKS, U. The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. **Metallurgical and Materials Transactions B**. v. 1, n. 5, p. 1121–1143, 1970.

KUBBINGA, H. Crystallography from haüy to laue: controversies on the molecular and atomistic nature of solids. **Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography**. International Union of Crystallography, v. 68, n. 1, p. 3–29, 2012.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Course of Theoretical Physics. Vol.5: Statistical Physics, Part 1**. [S.l.]: Pergamon Press, 1984.

LIU, J.; LI, J.; WU, B. The cohesive zone model for fatigue crack growth. **Advances in Mechanical Engineering**. v. 5, p. 737392, 2013.

MACHADO, A. **Uso do método das interfaces coesivas na simulação do processo de propagação de trincas por fadiga**. 2007. 83p. Dissertação de Mestrado em Engenharia - Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre. 2007.

MARTÍNEZ-PAÑEDA, E.; NIORDSON, C.F., On fracture in finite strain gradient plasticity. **International Journal of Plasticity**. 80:154-167, 2016.

MORESCO, R. **Um modelo computacional para o estudo da fadiga**. 2018. 94p. Dissertação de Mestrado em Engenharia - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre. 2018.

NEEDLEMAN, A. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. **Journal of Applied Mechanics**. v. 54, p. 525-531, 1987.

NEEDLEMAN, A. An analysis of decohesion along an imperfect interface. **International Journal of Fracture**. v.42, n.1, p.21-40, 1990.

NEEDLEMAN, A. Micromechanical modeling of interfacial decohesion. **Ultramicroscopy**. v. 40, p. 203-214, 1992.

NIELSEN, K.L.; NIORDSON, C.F.; HUTCHINSON, J.W. Strain gradient effects on steady state crack growth in rate-sensitive materials. **Engineering Fracture Mechanics**. 96:61-71, 2012.

OROWAN, E. Zur kristallplastizität. i. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**. v. 89, n. 9, p. 605–613, 1934.

PEIRCE, D.; ASARO, R. J.; NEEDLEMAN, A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. **Acta metall**. v. 31, n. 12, 1951–1976, 1983.

PONTHOT, J. P. **Traitement unifié de la mécanique des milieux continus solides en grandes transformations par la méthode des éléments finis**. 1995.

POLANYI, M. Über eine art gitterstörung, die einen kristall plastisch machen könnte. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**. v. 89, n. 9, p. 660–664, 1934.

RICE, J. R.; HAWK, D.; ASARO, R. Crack tip fields in ductile crystals. **International journal of fracture**. v. 42, p. 301–321, 1990.

RICE, J. R. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. **Mechanics of Materials**. v. 6, n. 4, p. 317-335, 1987.

SAEEDVAFA, M.; RICE, J. R., Crack tip singular fields in ductile crystals with Taylor power-law hardening. II: plane strain. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**. v.37, n. 6673-691, 1989.

STEINMANN, P.; STEIN, E. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. v. 129, n. 3, p. 235-254, 1996.

TAYLOR, G. I.; ELAM, C. F. Bakerian lecture. the distortion of an aluminium crystal during a tensile test. In: THE ROYAL SOCIETY. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**. v. 102, n. 719, p. 643–667, 1923.

TAYLOR, G. I.; ELAM, C. F. The plastic extension and fracture of aluminium crystals. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**. The Royal Society, v. 108, n. 745, p. 28–51, 1925. ISSN 0950-1207. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/108/745/28>>.

TAYLOR, G. I. The mechanism of plastic deformation of crystals. part I. – Theoretical. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**. v. 145, n. 855, p. 362–387, 1934.

TVERGAARD, V.; HUTCHINSON, J. W. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 40, p. 1377-1397, 1992.

TVERGAARD, V.; NEEDLEMAN, A. Effect of material rate sensitivity on failure modes in the charpy v-notch test. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 34, p. 213-241, 1986.

TVERGAARD, V.; NEEDLEMAN, A. Elastic-Viscoplastic Analysis of Ductile Fracture. In: IUTAM SYMPOSIUM HANNOVER/ GERMANY, 1991. **Finite Inelastic Deformations – Theory and Applications**.S/L: Springer-Verlag, 1991. p. 3-14.

VAN DER GIESSEN, E.; NEEDLEMAN, A. Micromechanics simulations of fracture. **Annual Review of Materials Research**. 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 32, n. 1, p. 141-162, 2002.

WANG, S.; ZHUANG, W.; CAO, J.; LIN, J. **Micromanufacturing Engineering and Technology (Second Edition): Chapter 32 – Micro-mechanics Modeling for Micro-forming Processes**. [S.l.]: Elsevier, p. 733-748, 2015.

WEI, Q.; CHENG, S.; RAMESH, K. T; MA, E. Effect of nanocrystalline and ultrafine grain sizes on the strain rate sensitivity and activation volume: fcc versus bcc metals. **Mater Sci Eng**, v. 381, p. 71-79, 2004.

YUAN, H.; LIN, G.; CORNEC, A. Verification of a cohesive zone model for ductile fracture. **Journal of Engineering Materials and Technology**, v.118, p.192-200, 1996.