

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Implementação Numérica de Problemas de Viscoelasticidade Finita utilizando
Métodos de Runge-Kutta de Altas Ordens e Interpolação Consistente entre as
Discretizações Temporal e Espacial**

por

Felipe Tempel Stumpf

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Abril de 2013

**Implementação Numérica de Problemas de Viscoelasticidade Finita utilizando
Métodos de Runge-Kutta de Altas Ordens e Interpolação Consistente entre as
Discretizações Temporal e Espacial**

por

Felipe Tempel Stumpf

Mestre em Engenharia

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos

Orientador: Prof. Dr. Rogério José Marczak

Aprovada por:

Dr. Bernhard Eidel (Universidade Duisburg-Essen / Essen - Alemanha)

Prof. Dr. Eduardo Alberto Fancello (POSMEC - UFSC / Florianópolis - Brasil)

Prof. Dr. Eduardo Bittencourt (PPGEC - UFRGS / Porto Alegre - Brasil)

Prof. Dr. Rodrigo Rossi (PROMEC - UFRGS / Porto Alegre - Brasil)

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, Abril de 2013

Para Ana Rita.

AGRADECIMENTOS

A Ana Rita, minha esposa, companheira, melhor amiga e com quem ainda hei de alcançar e construir muita coisa na vida. Pessoa que me faz mais feliz a cada dia que passa. Te amo mais que tudo!

A Marcelo, Elisabeth e Waldyr Stumpf: muito obrigado por tudo. Amo vocês! Em breve, 4 doutores na mesma família: 100% de aproveitamento.

A João Batista, Marília, Mineia e Emmanuel, minha segunda família.

Agradeço ao professor Rogério Marczak, exemplo de pesquisador e professor, pelo incentivo às ciências. Maior mestre ao longo da minha vida acadêmica.

A todo o pessoal que passou pelo Núcleo Orientado para Tecnologias Aquaviárias - NOTAq, pelas amizades e pelo ano de extremo aprendizado a respeito do mundo naval. Dali sairão muitos engenheiros altamente competentes.

Ao Eng. André Casagrande pela amizade, conselhos, ensinamentos e oportunidades tanto profissionais como acadêmicas. O cara em quem eu me espelho toda vez que lembro que sou um Engenheiro Mecânico.

A todo o pessoal do Grupo de Mecânica Aplicada - GMAp, desde professores a alunos, pelos quase 9 anos de aprendizado, amizades, churrascos e futebol. Rato, Ignacio, Jun, Maestro Luisito, Tales, Monalise, Daniel, Eduardo, Otávio, Vicente, Toso, Adelano e mais tantos que por ali passaram.

Ao pessoal do Instituto de Mecânica da Universidade de Duisburg-Essen, em especial ao Prof. Jorg Schröder pela incrível oportunidade de estágio de doutorado em seu departamento e ao Dr. Bernhard Eidel, pela dedicação e paciência durante este tempo de cooperação.

Ao CNPq, pelos mais de 9 anos de bolsas de estudos, desde Iniciação Científica, Mestrado, Doutorado e Doutorado Sanduíche.

Agradeço à Universidade Federal do Rio Grande do Sul, minha segunda casa há 11 anos.

Obrigado por tudo.

RESUMO

Em problemas de viscoelasticidade computacional, a discretização espacial para a solução global das equações de equilíbrio é *acoplada* à discretização temporal para a solução de um problema de valor inicial local do fluxo viscoelástico. É demonstrado que este acoplamento espacial-temporal (ou global-local) é *consistente* se o tensor de deformação total, agindo como elemento acoplador, tem uma aproximação de ordem p ao longo do tempo igual à ordem de convergência do método de integração de Runge-Kutta (RK). Para a interpolação da deformação foram utilizados polinômios baseados em soluções obtidas nos tempos t_{n+1} , t_n, \dots, t_{n+2-p} , $p \geq 2$, fornecendo dados consistentes de deformação nos estágios do RK. Em uma situação onde tal regra para a interpolação da deformação não é satisfeita, a integração no tempo apresentará, conseqüentemente, redução de ordem, baixa precisão e, por conseguinte, eficiência inferior. Em termos gerais, o propósito é generalizar esta condição de consistência proposta pela literatura, formalizando-a matematicamente e o demonstrando através da utilização de métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos (DIRK) até ordem $p = 4$, aplicados a modelos viscoelásticos não-lineares sujeitos a deformações finitas. Através de exemplos numéricos, os algoritmos de integração temporal adaptados apresentaram ordem de convergência nominal e, portanto, comprovam a validade da formalização do conceito de interpolação consistente da deformação. Comparado com o método de integração de Euler implícito, é demonstrado que os métodos DIRK aqui aplicados apresentam um ganho considerável em eficiência, comprovado através dos fatores de aceleração atingidos.

Palavras-chave: viscoelasticidade, integração temporal, método dos elementos finitos, métodos de Runge-Kutta, redução de ordem, acoplamento espaço-tempo.

ABSTRACT

Numerical Implementation of Finite Viscoelasticity via Higher Order Runge-Kutta Integrators and Consistent Interpolation between Temporal and Spatial Discretizations

In computational viscoelasticity, spatial discretization for the solution of the weak form of the balance of linear momentum is *coupled* to the temporal discretization for solving a local initial value problem (IVP) of the viscoelastic flow. It is shown that this spatial-temporal (or global-local) coupling is *consistent* if the total strain tensor, acting as the coupling agent, exhibits the same approximation of order p in time as the convergence order of the Runge-Kutta (RK) integration algorithm. To this end we construct interpolation polynomials based on data at $t_{n+1}, t_n, \dots, t_{n+2-p}$, $p \geq 2$, which provide consistent strain data at the RK stages. If this novel rule for strain interpolation is not satisfied, time integration shows order reduction, poor accuracy and therefore less efficiency. Generally, the objective is to propose a generalization of this consistency idea proposed in the literature, formalizing it mathematically and testing it using diagonally implicit Runge-Kutta methods (DIRK) up to order $p = 4$ applied to a nonlinear viscoelasticity model subjected to finite strain. In a set of numerical examples, the adapted time integrators obtain full convergence order and thus approve the novel concept of consistency. Substantially high speed-up factors confirm the improvement in the efficiency compared with Backward Euler algorithm.

Keywords: viscoelasticity, time integration, space-time coupling, finite element method, Runge-Kutta methods.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Ideia geral do trabalho	4
1.2	Objetivos	8
2	FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA	10
2.1	Decomposição da Deformação	10
2.2	Modelo viscoelástico para deformações finitas	13
3	DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO UTILIZANDO MÉTODOS DE EULER E RUNGE-KUTTA	17
3.1	Equações básicas	17
3.2	Esquemas DIRK	20
3.3	Aplicação dos esquemas DIRK à viscoelasticidade finita	21
4	ACOPLAMENTO ESPAÇO-TEMPO	24
4.1	Ideia geral.....	24
4.2	Consistência	26
4.3	Construção de polinômios interpoladores para \mathbf{C}^v na busca de um acoplamento consistente	28
4.3.1	Caso $p = 1$: valores nos estágios para deformação total constante	28
4.3.2	Caso $p = 2$: valores nos estágios via interpolação linear	29
4.3.3	Caso $p = 3$: valores nos estágios via interpolação quadrática.....	29
4.3.4	Caso $p = 4$: valores nos estágios via interpolação cúbica	30
4.4	Comparação conceitual com métodos de elementos finitos existentes aplicados à inelasticidade	32

5	RESULTADOS NUMÉRICOS	33
5.1	Implementação numérica	33
5.2	Resultados	34
5.2.1	Deformação homogênea	37
5.2.2	Contração radial de um flange	40
5.2.3	Placa quadrada com furo	45
5.2.4	Ovalização de um cilindro	58
5.2.5	Investigação dos casos DIRK4c	63
6	CONCLUSÕES	66
6.1	Sugestões para trabalhos futuros	69
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70
Apêndice A	Matrizes de Butcher para métodos DIRK	77

Lista de Figuras

1.1	Esquemática do acoplamento entre as discretizações espacial e temporal em simulações de elementos finitos aplicados à viscoelasticidade utilizando método de Euler implícito. FONTE: [Eidel et al., 2013].	6
2.1	Modelo generalizado de Maxwell. FONTE: [Bonet, 2001]	10
2.2	Decomposição multiplicativa do gradiente de deformação. FONTE: [Bonet, 2001].	12
4.1	Comportamento exato (porém ainda incógnito) da deformação ao longo do tempo (linha preta cheia) e suas aproximações através de deformação constante (linha vermelha pontilhada), linear (linha azul tracejada) e quadrática (linha verde traço-ponto.)	25
4.2	Esquemática generalizada do acoplamento consistente de discretizações espaço-temporais aplicadas à simulação de viscoelasticidade finita para métodos de alta ordem $p \geq 2$. FONTE: [Eidel et al., 2013]	27
5.1	Esquema de cálculo simplificado da subrotina do material.	34
5.2	Tira retangular submetida a tração pura.	38
5.3	CASO I: erro <i>versus</i> Δt analisado em $t = 1$ s para diferentes integradores. $\max \Delta t = 0,1$ s, $\min \Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.	39
5.4	Contração radial de um flange através de deslocamentos prescritos em sua circunferência interna.	40
5.5	CASO II: erro <i>versus</i> Δt analisado em $t = 1,5$ s para diferentes integradores. $\max \Delta t = 0,25$ s, $\min \Delta t = 0,025$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.	41
5.6	CASO II. Coluna esquerda: tensão viscoelástica S_{xy}^{ov} (N/mm ²). Coluna direita: tensão total S_{xy} (N/mm ²) em $t = \{0,05; 0,1; 0,5; 1,5\}$ s de cima para baixo.	42

5.7	CASO II: eficiência para carregamento linearmente crescente em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo de computação (s) para resultados em $t = 1,5$ s.	44
5.8	Modelo de elementos finitos para a placa com furo. Geometria, condições de contorno e discretização de um oitavo da estrutura.	45
5.9	CASO III: erro versus Δt em $t = 1,5$ s para diferentes integradores. Máximo $\Delta t = 0,25$ s. Mínimo $\Delta t = 0,025$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$	47
5.10	CASO III. Coluna esquerda: tensão viscoelástica S_{xy}^{ov} (N/mm ²). Coluna direita: tensão total S_{xy} (N/mm ²) em $t = \{0,05; 0,1; 0,5; 1,5\}$ s de cima para baixo.	48
5.11	CASO III: eficiência para carregamento linearmente crescente em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo de computação (s) para resultados a $t = 1,5$ s.	49
5.12	Carga senoidal aplicada à placa com furo.	50
5.13	CASO IV.1: erro versus Δt analisado em $t = 17,25$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$	51
5.14	CASO IV.1: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ em relação ao tempo total de computação (s) no tempo $t = 17,25$ s.	52
5.15	CASO IV.2. Evolução da deformação C_{xy} ao longo do tempo para os pontos de Gauss localizados na borda superior do furo central para esquerda : material viscoelástico incompressível ($\nu = 0,499$) e direita : material viscoelástico compressível ($\nu = 0,3$).	54
5.16	CASO IV.2: erro versus Δt analisado em $t = 17,25$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$	55
5.17	CASO IV.2: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo total de computação (s) no tempo $t = 17,25$ s.	56
5.18	Superposição de carregamento linear com senoidal.	57
5.19	CASO V: erro versus Δt em $t = 9,0$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$	57
5.20	CASO V: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo total de computação (s). Resultados em $t = 9,0$ s.	59

5.21	Geometria do cilindro submetido à carga de amassamento.	60
5.22	Cilindro deformado submetido a carga de amassamento.	61
5.23	CASO VI: erro <i>versus</i> Δt em $t = 1,0$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,067$ s. Mínimo $\Delta t = 0,005$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$	61
5.24	CASO VI: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ <i>versus</i> tempo total de computação (s). Resultados em $t = 1,0$ s.	62
5.25	Comportamento genérico da deformação total ao longo do tempo em um caso de viscoelasticidade. Esquerda: visão geral. Direita: ampliação em um intervalo de integração e diferentes aproximações.	64
5.26	Curva tensão <i>versus</i> alongamento para o material analisado.	65

Lista de Tabelas

1.1	Matriz de Butcher para o método implícito de Euler.....	5
2.1	Modelo constitutivo para viscoelasticidade em deformações finitas.	14
3.1	Solução de uma EDO usando métodos IRK.....	19
3.2	Matrizes de Butcher para métodos de RK implícitos (IRK, esquerda), diagonalmente implícitos (DIRK, centro) e diagonalmente implícitos com $c_s = 1$ (direita).....	19
5.1	Diferentes métodos DIRK, suas abreviações, número de estágios s , ordem esperada para integração no tempo $\min\{p, q\}$ comparada com ordem nominal p e ordem de aproximação da deformação total q	35
5.2	Contração radial de um flange: parâmetros viscoelásticos do material.	38
5.3	CASO II: ordem de convergência para diferentes métodos DIRK.....	43
5.4	CASO II: fatores de aceleração dos métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculo do erro para $e(\mathbf{S}^{ov})$ em $t = 1, 5$ s.	44
5.5	CASO III: ordem de convergência de diferentes grandezas para diferentes métodos DIRK. Resultados de aproximações consistentes da deformação estão destacados.	46
5.6	CASO III: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 1, 5$ s para $e(\mathbf{S})$	49
5.7	CASO IV.1: ordem de convergência para diferentes métodos.	52
5.8	CASO IV.1: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 17, 25$ s.	53
5.9	CASO IV.2: ordem de convergência para diferentes métodos DIRK.	54

5.10	CASO IV.2: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 17,25$ s.	56
5.11	CASO V: ordem de convergência para diferentes métodos.	58
5.12	CASO V: fatores de aceleração para diferentes métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Resultados em $t = 9,0$ s.	59
5.13	CASO VI: ordem de convergência para diferentes métodos de integração.	62
5.14	CASO VI: fatores de aceleração para diferentes métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Resultados em $t = 1,0$ s.	63
A.1	Matrizes de Butcher para diferentes métodos DIRK. s : Número de estágios, p : Ordem de convergência.	78

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

Abreviaturas

BE	Método de Integração de Euler Implícito
DAE/MLNA	Differential Algebraic Equation/Multi-Level Newton Approach
EDO	Equação Diferencial Ordinária
DIRK	Método de Runge-Kutta Diagonalmente Implícito
DIRK2l	DIRK de 2ª Ordem com Interpolação Linear da Deformação
DIRK2q	DIRK de 2ª Ordem com Interpolação Quadrática da Deformação
DIRK3cons	DIRK de 3ª Ordem com Interpolação Constante da Deformação
DIRK3l	DIRK de 3ª Ordem com Interpolação Linear da Deformação
DIRK3q	DIRK de 3ª Ordem com Interpolação Quadrática da Deformação
DIRK4c	DIRK de 4ª Ordem com Interpolação Cúbica da Deformação
DIRK4q	DIRK de 4ª Ordem com Interpolação Quadrática da Deformação
IRK	Método Implícito de Runge-Kutta
MEF	Método dos Elementos Finitos
PVC	Problema de Valor de Contorno
PVI	Problema de Valor Inicial
RK	Runge-Kutta

LISTA DE SÍMBOLOS

Geral

A	grandeza física qualquer
$\dot{A} = dA/dt$	primeira derivada em relação ao tempo de uma grandeza A
$\ddot{A} = d^2A/dt^2$	derivada segunda em relação ao tempo de uma grandeza A
b_i	parâmetros das matrizes de Butcher dos métodos de Runge-Kutta
$g, \xi, x_1, x_2 \dots$	
$\dots \Phi_1, \Phi_2, \hat{k}$	variáveis criadas para aplicação dos métodos DIRK
c_i	parâmetros das matrizes de Butcher dos métodos de Runge-Kutta
I	matriz identidade
$i, j, k, l \dots$	
$\dots m, n, s$	índices diversos
p	ordem de convergência do método de integração
$p_i, i = 0, 1, 2, 3$	polinômios interpoladores de grau i
q	grau do polinômio interpolador da deformação ao longo do intervalo de integração
t	tempo
t_0, t_f	instantes de tempo distintos
x, y, z	direções do sistema de coordenadas global
Δt	intervalo de tempo
$\varphi(A)$	função genérica dependente da grandeza A
$\partial_A \varphi(A)$	gradiente da função $\varphi(A)$ em relação à grandeza A
$\det(A)$	operador determinante da grandeza A
$A : B$	dupla contração entre grandezas A e B
$\mathcal{O}(A^x)$	ordem do erro
$\ A\ $	módulo da grandeza A
a_{ij}	componentes das matrizes de Butcher dos métodos de Runge-Kutta

Grandezas Físicas

C_{n+1}^{ve}	tangente algoritmicamente consistente do problema viscoelástico
-----------------------	---

\mathbf{C}	tensor deformação de Cauchy-Green à direita
$\bar{\mathbf{C}}$	parcela isocórica de \mathbf{C}
\mathbf{C}^v	deformação viscoelástica
$\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}$	primeiro invariante de $\bar{\mathbf{C}}$
$\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}$	segundo invariante de $\bar{\mathbf{C}}$
$\mathbf{III}_{\bar{\mathbf{C}}}$	terceiro invariante de $\bar{\mathbf{C}}$
\mathbf{F}	tensor gradiente de deformação
\mathbf{F}^e	parcela elástica de \mathbf{F}
\mathbf{F}^v	parcela viscosa de \mathbf{F}
$\hat{\mathbf{F}}$	parcela volumétrica de \mathbf{F}
$\bar{\mathbf{F}}$	parcela isocórica de \mathbf{F}
J	Jacobiano da deformação
\mathbf{P}	primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff
\mathbf{S}	segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff
\mathbf{z}	tensor de variáveis internas da viscoelasticidade
\mathbf{X}	vetor de localização de qualquer ponto do corpo na configuração indeformada
Ψ	função energia de deformação de um material
Ψ_{eq}	parcela de equilíbrio de Ψ
Ψ_α	parcela viscosa de Ψ
Ψ_∞	parcela isocórica de equilíbrio de Ψ
eq	subíndice indicativo de parcela de equilíbrio
iso	índice indicativo de parcela isocórica
ov	subíndice indicativo de parcela viscosa
vol	índice indicativo de parcela volumétrica
$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, w_1, w_2$	variáveis ligadas ao modelo do material
$c_{10}, c_{01}, c_{30} \dots$	
\dots, μ, η, K	constantes do material
ν	coeficiente de Poisson

1. INTRODUÇÃO

Se, por um lado, o início dos estudos do comportamento mecânico de materiais lineares elásticos data de meados do Século XVII, cujo personagem principal foi o físico inglês Robert Hooke, foi somente dois séculos depois que os cientistas começaram a apresentar teorias mais completas sobre a mecânica dos materiais elásticos. O matemático francês Augustin-Louis Cauchy propôs a ideia de um material elástico simples cujo campo de tensões atuantes depende somente do campo de deformações atuantes, negligenciando o histórico das mesmas ao longo do processo de deformação. Este tipo de material ficou conhecido como *material elástico de Cauchy*, ou simplesmente *material elástico simples*. Ainda no início do século XIX, o físico-matemático britânico George Green apresentou um caso especial de material de Cauchy, cuja relação tensão-deformação deriva de uma função densidade de energia de deformação. Estes materiais ficaram conhecidos como *materiais elásticos de Green*, ou *materiais hiperelásticos*. Isto marcou o início da caracterização matemática de materiais elásticos não-lineares, mas até então ainda não era levado em conta o seu comportamento dissipativo de energia, ou histerético. Foi em 1867 que James Clerk Maxwell descreveu de maneira muito simples e intuitiva o comportamento mecânico de materiais que apresentavam estas características dissipativas, que mais tarde ficaram conhecidos como *materiais de Maxwell* ou *materiais viscoelásticos*, aqueles que combinam propriedades tanto de materiais elásticos como de materiais viscosos. Além de capacidades de dissipação de energia, estes materiais são conhecidos por apresentarem certas particularidades quando submetidos a carregamentos cíclicos, como o *efeito Mullins*, que será mais bem descrito na sequência.

Muitas vezes, apesar de um material viscoelástico ser utilizado em determinada aplicação de engenharia, seu regime de trabalho e/ou condições de contorno possibilitam a simplificação de sua modelagem como material simplesmente hiperelástico. No entanto, estes são casos de exceção, pois na maioria das vezes estes materiais são aplicados justamente para se poder beneficiar das suas características de absorção e dissipação de energia, e este

tipo de simplificação pode levar a uma interpretação equivocada dos resultados da análise do engenheiro.

A maioria dos materiais de engenharia que apresentam comportamento viscoelástico são materiais poliméricos (em especial os elastômeros), e seu uso na indústria é cada vez mais presente, indo desde componentes de vestuário, como calçados, até automotivos e aeroespaciais. Um esforço crescente vem sendo aplicado à modelagem mecânica e matemática de materiais biológicos, como tendões, músculos, vasos e tecidos [Vaziri e Gopinath, 2008] e, estes, por terem um comportamento mecânico com características muito semelhantes aos polímeros, acabam por serem modelados como materiais viscoelásticos com algumas características adicionais, como ortotropia ou anisotropia. É, portanto, de interesse tanto da sociedade, como da comunidade científica, o aprofundamento do estudo de assuntos relacionados à modelagem matemática e computacional de materiais viscoelásticos.

Como foi comentado, dentre os efeitos que são negligenciados quando se modela um material viscoelástico como puramente hiperelástico estão os comportamentos inelásticos de histerese de equilíbrio e dependência não-linear da taxa de deformação e, mais particularmente, o efeito Mullins [Mullins, 1969]. Este último é conhecido por ser uma particularidade do comportamento histerético deste tipo de material, quando as curvas tensão-deformação dos primeiros ciclos de carga diferem significativamente daquelas referentes aos ciclos subsequentes, representando um fenômeno de amolecimento do material. Todos estes efeitos inelásticos são fortemente influenciados pela quantidade de aditivos na composição química do material [Payne, 1962], [So e Chen, 1991] e [Meinecke e Taftaf, 2005].

Coleman e Noll [1960] foram os primeiros a modelar matematicamente o comportamento da relaxação de tensões em polímeros ao aplicarem o conceito de *memória curta*. Para Haupt [1984], os efeitos de natureza viscoelástica que estes materiais apresentam são dependentes tanto da taxa de deformação como também desta propriedade de memória curta.

Um ano mais tarde, Coleman e Noll [1961] generalizaram a teoria da viscoelasticidade linear para o caso de grandes deformações, o que ficou conhecida como Teoria da Viscoelasticidade Linear Finita. A partir de então, teorias para modelagem de viscoelasticidade finita vêm sendo propostas baseadas em modelos reológicos generalizados, como pode ser visto em Lubliner [1985], Haupt [1993], Lion [1997b], Lion [1997a], Lion [1998], Reese

e Govindjee [1998b], Reese e Govindjee [1998a], Huber e Tsakmakis [2000] e Miehe e Keck [2000]. Lion [1997b] foi em frente e aplicou o trabalho de Haupt [1993] na construção de um modelo constitutivo para materiais viscoelásticos submetidos a deformações finitas que se adequasse a dados experimentais.

Um dos pioneiros na aplicação da teoria da viscoelasticidade sob forma de um código de elementos finitos foi Simo [1987], cujo trabalho foi mais tarde seguido por Govindjee e Simo [1992], Govindjee e Simo [1993], Holzapfel [1996] e Kaliske e Rothert [1997].

Como trabalhos distintos e mais recentes referentes à aplicação ou proposição de modelos viscoelásticos, podemos citar Miehe e Keck [2000], Bonet [2001], Holzapfel e Gasser [2001], Haupt e Lion [2002], Fancello et al. [2006], Ehret e Itskov [2009] entre outros.

Do ponto de vista da formulação constitutiva, os materiais viscoelásticos, ao contrário dos hiperelásticos, por exemplo, apresentam um comportamento mecânico dependente do tempo. Este comportamento pode ser visto através dos efeitos de relaxação e fluência, por exemplo, ou ainda pela dependência da resposta tensão-deformação em relação à taxa com que os carregamentos são aplicados a estes materiais. Matematicamente, isto é explicado através de um conjunto de equações adicionais que rege tais comportamentos, conhecida como *equação evolutiva do fluxo viscoelástico*, expressa em termos de um componente de deformação (em geral deformação viscosa). Esta caracterização matemática adicional, bem como métodos de solução para a mesma serão mais bem explicados nos Capítulos 2, 3 e 4. Em um primeiro momento, no entanto, para entendimento do texto, pode-se antecipar que estas equações evolutivas se tratam de equações diferenciais ordinárias para determinadas medidas de deformação em função do tempo. Em outras palavras, o comportamento futuro do material é dependente do seu histórico passado de deformações. Isto levará à necessidade da escolha de um método numérico para a integração no tempo destas equações diferenciais.

Em problemas de inelasticidade computacional, apesar de a discretização espacial ser um dos principais focos de atenção durante a modelagem, grande parte do esforço computacional está concentrada na solução do algoritmo de integração no tempo da equação evolutiva, uma vez que ele é fator determinante tanto na precisão da solução como na sua eficiência [Eidel et al., 2013]. Pode-se dizer que o método de integração numérica mais aplicado em casos de lei constitutiva viscoelástica é o método de Euler implícito (BE), principalmente por apresentar boas propriedades de estabilidade e ter o atrativo de ser um código

de relativamente fácil implementação, embora seja de ordem de convergência unitária [Simo, 1998].

Como já foi mencionado, solução de problemas reais através do método dos elementos finitos (MEF) de materiais viscoelásticos já são amplamente aplicadas em áreas emergentes de pesquisa. Aqui, e em diversas outras aplicações semelhantes, grande parte do tempo investido computacionalmente é na solução do problema viscoelástico de grandes deformações, e a busca por metodologias estáveis, rápidas e precisas é de extrema importância.

Este texto é uma versão estendida de [Eidel et al., 2013], que é um dos resultados do presente trabalho.

1.1 Ideia geral do trabalho

A utilização de métodos de altas ordens para integração no tempo da equação evolutiva é promissora, uma vez que estes são mais precisos e mais eficientes do que o método BE. Apesar de ser o mais utilizado em códigos de elementos finitos, pode-se dizer que BE é o método mais simples para solução de problemas de valor inicial (PVI). Por ser o mais simples, é compreensível que sua implementação seja de simples execução, no entanto, por outro lado, é um método de ordem de convergência p unitária ($p = 1$), significando uma necessidade de utilização de passos de tempo pequenos para a obtenção de precisão aceitável (mesmo apresentando melhor estabilidade do que métodos explícitos quanto ao tamanho do passo de tempo).

Seja um PVI dado por uma equação diferencial ordinária (EDO) e uma condição inicial tal que

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad (1.1)$$

o método implícito de Euler diz que, a partir de um valor para o passo de integração h (que neste caso é chamado de *passo de tempo* pois a integração ocorre ao longo do tempo), a solução aproximada y_{n+1} em t_{n+1} é calculada utilizando-se a solução y_n do passo anterior t_n e o próprio valor da solução $f(t_{n+1}, y_{n+1})$ em t_{n+1} , tratando-se, portanto, de um método implícito.

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + h\dot{y}(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (1.2)$$

Como será visto em mais detalhes no Capítulo 3, o método BE pode ser considerado como um caso especial de método de Runge-Kutta (RK), com a matriz de Butcher tal qual a Tabela 1.1.

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Tabela 1.1 – Matriz de Butcher para o método implícito de Euler.

Quando se aplica esta metodologia a um PVI, o valor de solução y_n do passo anterior t_n é utilizado como argumento de entrada para o cálculo da derivada \dot{y}_{n+1} no passo de tempo atual t_{n+1} . Isto quer dizer que, independentemente da complexidade (ou nível de não-linearidade) da solução, pelo fato de, ao longo do intervalo de integração entre t_n e t_{n+1} a mesma ser considerada constante, haverá a necessidade de utilização de passos de integração muito pequenos quando se tem uma solução com comportamento conhecidamente com alto grau de não-linearidade. E este é exatamente o caso de soluções do fluxo viscoelástico abordados neste trabalho.

Tendo em vista que o método BE, apesar de apresentar ordem de convergência unitária, é o mais utilizado em códigos de elementos finitos para a integração de equações evolutivas, será avaliado qual a abordagem mais adequada para implementar métodos que atinjam maiores ordens de convergência na integração destas equações, tendo como ponto de partida o algoritmo do método BE.

A escolha pelo método BE como ponto de partida se justifica por ele ser o método padrão em códigos de elementos finitos e, ainda, por ter a mesma estrutura dos métodos diagonalmente implícitos de Runge-Kutta (DIRK) que serão utilizados neste trabalho, facilitando a adaptação do código BE para métodos DIRK.

Antes de partir para a implementação dos métodos de altas ordens, é preciso entender a estrutura dos algoritmos de solução de problemas de inelasticidade na grande maioria dos códigos de programas de elementos finitos. A forma variacional das equações de equilíbrio discretizadas no *espaço* resulta em um sistema de equações algébricas não-lineares que são solucionadas em *nível global* para os deslocamentos via método de Newton-Raphson. Com estes deslocamentos, as deformações totais são calculadas e então utilizadas como dados de entrada para a solução do PVI do fluxo viscoelástico discretizado no *tempo* no nível do

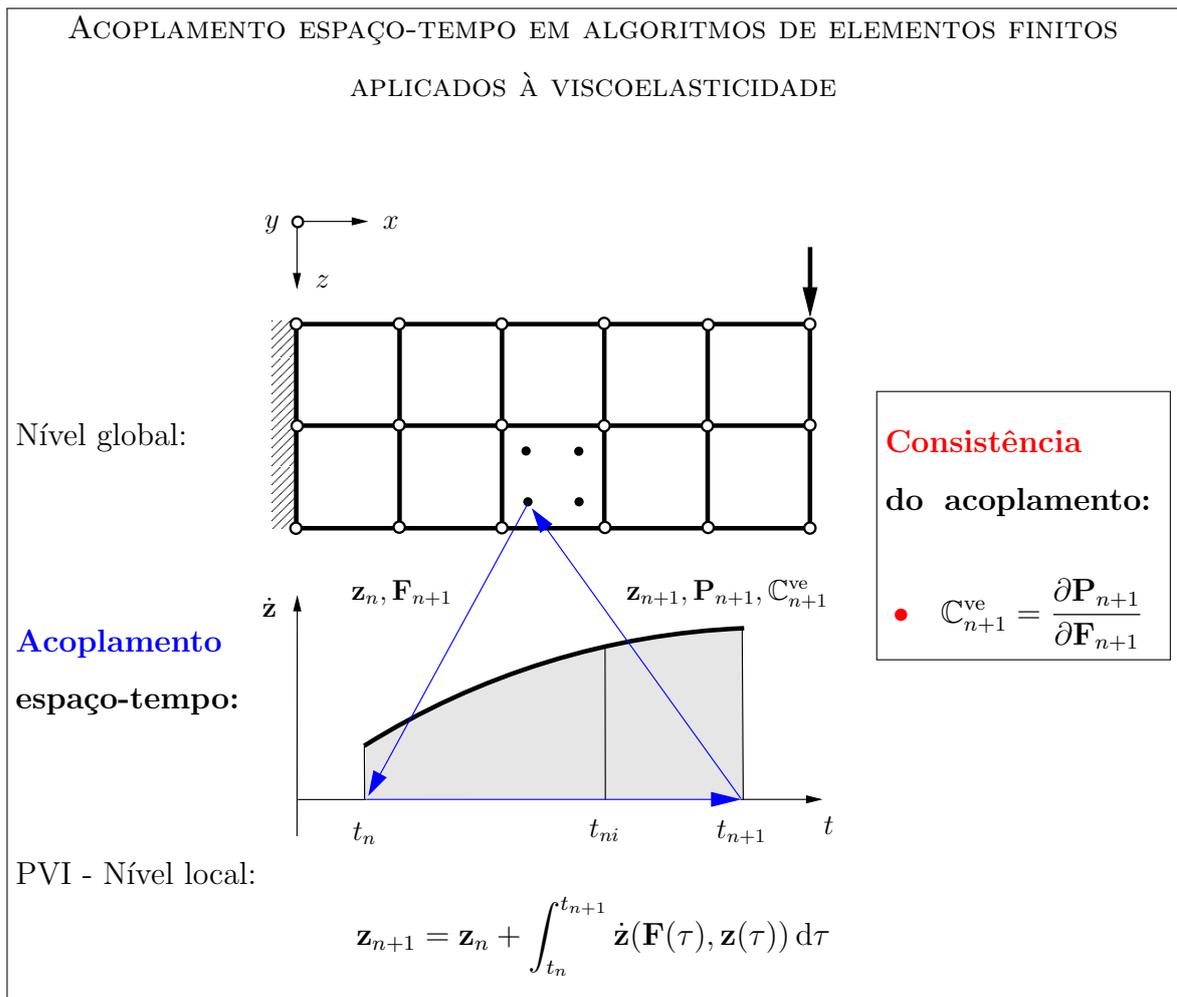


Figura 1.1 – Esquematização do acoplamento entre as discretizações espacial e temporal em simulações de elementos finitos aplicados à viscoelasticidade utilizando método de Euler implícito. FONTE: [Eidel et al., 2013].

ponto de integração (tipicamente pontos de Gauss) (que neste contexto será denominado *nível local*). Este esquema pode ser visualizado na Figura 1.1, na qual \mathbf{F} é o gradiente de deformações, \mathbf{z} denota as variáveis internas da viscoelasticidade, \mathbf{P} é o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e \mathbb{C}_{n+1}^{ve} representa a tangente algoritmicamente consistente.

A integração das equações evolutivas resulta em deformações viscoelásticas atualizadas e tensões totais para o passo de tempo seguinte. Como tipicamente o método de Newton-Raphson é utilizado para a solução do sistema de equações algébricas não-lineares no nível global, é necessária a aplicação de técnicas de linearização para a obtenção de convergência quadrática, característica inerente ao Newton-Raphson. O módulo tangente, as

tensões atualizadas e as variáveis internas são passadas adiante e utilizadas como dados de entrada para as novas iterações de solução das equações de equilíbrio, até que a convergência seja alcançada no nível global.

Existem duas variantes do ponto de vista do algoritmo para a solução do problema. A primeira abordagem é aquela clássica utilizada em solução de problemas de inelasticidade computacional, quando o equilíbrio global é resolvido para t_n e t_{n+1} , mas não exatamente no interior do intervalo de tempo quando utilizados métodos multi-estágios, como por exemplo *midpoint* ou Runge-Kutta [Eidel et al., 2013].

Sob outra ótica, Ellsiepen e Hartmann [2001] e Hartmann [2002] introduziram um novo conceito para a aplicação de métodos de alta ordem chamado DAE/MLNA (*Differential Algebraic Equation/Multi-Level Newton Approach*). Nesta situação, o *equilíbrio global* do problema é resolvido não somente nos instantes de tempo t_n e t_{n+1} , mas também em cada um dos múltiplos estágios do intervalo de integração do método de Runge-Kutta. Há, é claro, nesta metodologia, um considerável aumento em termos de custo computacional quando comparada com métodos tradicionais. No entanto, resultados de fatores de aceleração (*speed-up*) em comparação com o método BE demonstram os benefícios de se alcançar maiores ordens de convergência na integração das equações evolutivas da viscoelasticidade.

Conforme será mostrado mais adiante, o esquema da Figura 1.1, particularizado para o método BE, pode também ser utilizado com métodos de Runge-Kutta de altas ordens. Sendo assim, será possível uma combinação dos benefícios de precisão de um método de alta ordem juntamente com a simplicidade algorítmica do Euler implícito. Um ganho considerável em complexidade algorítmica em comparação com a abordagem DAE/MLNA será demonstrado, pois o equilíbrio global continua sendo calculado somente para os instantes t_n e t_{n+1} , já que o algoritmo de integração de alta ordem atua apenas no nível do ponto de Gauss do elemento. No entanto, algumas modificações no esquema do método BE da Figura 1.1 deverão ser feitas.

Para que seja obtida a ordem de convergência nominal do método de integração, Eidel e Kuhn [2011] demonstraram que é necessária uma aplicação *consistente* ao esquema geral da Figura 1.1. Em outras palavras, foi concluído que a ordem de convergência obtida na integração no tempo depende crucialmente da *ordem de aproximação da deformação total no intervalo de integração*. Métodos de RK de ordem $p = 3$, por exemplo, para que atinjam

sua ordem nominal de convergência, requerem uma aproximação via polinômio de ordem 3 para a deformação total no intervalo de integração. Consequentemente, uma aproximação linear da deformação (portanto introduzindo uma aproximação de ordem 2), levará a uma redução na ordem de convergência da integração de ordem 3 para 2, mesmo que se esteja utilizando um método de integração de terceira ordem.

Um dos objetivos do presente trabalho é apresentar uma generalização matemática das ideias apresentadas em Eidel e Kuhn [2011] visando à obtenção de convergência total dos métodos de integração no tempo para modelos viscoelásticos sujeitos a deformações finitas. Como foco, foram escolhidos métodos DIRK de ordem até 4, por serem particularmente eficientes e estáveis.

Se for obtida a ordem de convergência nominal teórica, os métodos de RK permitem a utilização de passos de tempo consideravelmente maiores que o método BE para obtenção de ordens de erro equivalentes. No entanto, apesar de os métodos RK serem conhecidos por alta precisão através de suas altas ordens de convergência, a recomendação da sua utilização somente poderá ser feita após uma minuciosa análise do ganho em tempo de computação quando comparado com o método de Euler implícito.

1.2 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é apresentar uma generalização do conceito proposto por Eidel e Kuhn [2011] de *consistência* entre ordem de aproximação da deformação total ao longo do intervalo de integração de equações evolutivas para fluxo viscoelástico e ordem de convergência nominal do método de integração utilizado. Esta generalização será feita através de uma proposição de formalização matemática do conceito, que posteriormente será verificada por meio de exemplos numéricos que a sustentem. A aplicação deste conceito utilizando-se métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos aplicados a problemas de viscoelasticidade não-linear finita é, até então, inédita na literatura.

O objetivo principal do trabalho será alcançado através do cumprimento de objetivos secundários, que são:

- (i) Apresentação de uma estrutura de algoritmo aplicado ao MEF para a solução computacional de problemas de inelasticidade. O foco será no acoplamento da solução

das equações de equilíbrio global com os PVI's locais de solução da EDO do fluxo viscoelástico. O agente acoplador entre estes dois problemas são as deformações totais. O aspecto da *consistência* deste acoplamento é crucial e decidirá a maneira com a qual as deformações serão aproximadas em métodos de alta ordem multi-estágios. A generalização do que está mostrado na Figura 1.1 é o conteúdo do Capítulo 4;

- (ii) Descrição da implementação de um modelo viscoelástico de grandes deformações, detalhado na Seção 2.2, usando métodos DIRK de até 4^a ordem baseados em aproximações consistentes da deformação;
- (iii) Validação/verificação: Avaliação numérica para a verificação de precisão, ordem de convergência e eficiência. Isto é feito no Capítulo 5.

2. FORMULAÇÃO CONSTITUTIVA

Seja um corpo sólido definido pelo domínio tridimensional $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ submetido a uma deformação $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ com um gradiente de deformação $\mathbf{F} = \partial_{\mathbf{X}}\varphi(\mathbf{X})$ e Jacobiano $J = \det\mathbf{F} > 0$, onde \mathbf{X} define o vetor de localização de um ponto qualquer do corpo na configuração de referência.

2.1 Decomposição da Deformação

O comportamento mecânico de um sólido viscoelástico pode ser representado pelo modelo reológico conhecido como *modelo generalizado de Maxwell*, o qual se baseia em um elemento puramente elástico de rigidez K_∞ conectado em paralelo a uma sequência de elementos elásticos de rigidezes $K_i, i = 1 \dots \alpha$ conectados em série com elementos viscosos, conforme Figura 2.1. Este modelo pode ser utilizado tanto para viscoelasticidade linear (pequenas deformações) como para viscoelasticidade não-linear (grandes deformações).

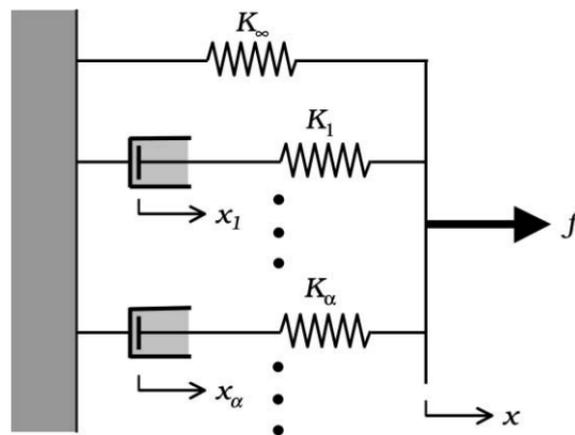


Figura 2.1 – Modelo generalizado de Maxwell. FONTE: [Bonet, 2001]

Uma vez que este trabalho é focado em casos de grandes deformações, será definida uma abordagem de decomposição multiplicativa dos diferentes efeitos físicos que envolvem o processo de deformação de sólidos viscoelásticos.

Define-se dois tipos distintos de efeitos agindo sob o corpo em deformação: de *longo prazo* e de *curto prazo*. Os primeiros são aqueles que estão sempre atuantes no corpo em deformação enquanto houver cargas externas, e podem também ser chamados de efeitos de equilíbrio ou de regime permanente. De maneira geral, serão os únicos efeitos atuantes em um corpo após um tempo suficiente grande depois da aplicação das cargas. No caso da viscoelasticidade, são os chamados *efeitos elásticos*. Os efeitos de curto prazo são aqueles que só estão presentes em pequenos espaços de tempo, geralmente logo após a aplicação de cargas. São transientes e, no caso da viscoelasticidade, também podem ser chamados de *efeitos viscosos*.

Sob o ponto de vista matemático, as afirmações anteriores se traduzem no desacoplamento entre os efeitos de equilíbrio $\Psi_{eq}(x)$ e viscosos $\Psi_\alpha(x, x_\alpha)$ da função energia de deformação:

$$\Psi(x) = \Psi_{eq}(x) + \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(x, x_{\alpha}) \quad (2.1)$$

onde a parcela de equilíbrio é análoga direta à mola da Figura 2.1 e os termos transientes são referentes aos conjuntos mola-amortecedor do mesmo modelo.

A Figura 2.2 ilustra a abordagem multiplicativa da decomposição da deformação para o conceito reológico da Figura 2.1. Este conceito é baseado em uma configuração intermediária virtual da deformação, na qual o corpo está submetido somente a deformação isocórica, a qual é decomposta em dois distintos mecanismos de deformação: elástico e viscoso. Ao comparar a Figura 2.2 com a Figura 2.1, é possível notar que cada um dos elementos do modelo reológico está presente neste formato de decomposição da deformação.

Partindo-se da premissa da decomposição multiplicativa, o gradiente de deformação \mathbf{F} pode ser decomposto em

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}} \quad (2.2)$$

onde a parte volumétrica $\hat{\mathbf{F}}$ e a isocórica $\bar{\mathbf{F}}$ são definidas, respectivamente, por

$$\hat{\mathbf{F}} = J^{1/3} \mathbf{1}, \quad \det \hat{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F} = J, \quad (2.3)$$

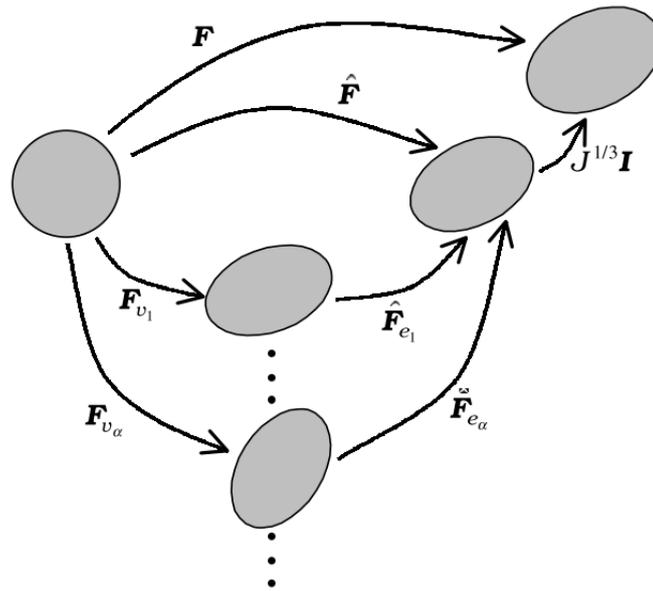


Figura 2.2 – Decomposição multiplicativa do gradiente de deformação.

FONTE: [Bonet, 2001].

$$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3} \mathbf{F}, \quad \det \bar{\mathbf{F}} = 1. \quad (2.4)$$

onde J é o Jacobiano da deformação.

Uma grande variedade de modelos constitutivos são baseados na decomposição (2.2), uma vez que ela permite a introdução de tensores de tensão e suas decomposições em partes cinematicamente correspondentes. De (2.2), pode-se extrair o tensor de Cauchy-Green à direita

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{U}}^2 = J^{-2/3} \mathbf{C}, \quad (2.5)$$

com $\det \bar{\mathbf{C}} = 1$.

Os principais invariantes de $\bar{\mathbf{C}}$ são

$$\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} = \text{tr} \bar{\mathbf{C}}, \quad \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}} = \frac{1}{2} ((\text{tr} \bar{\mathbf{C}})^2 - \text{tr} \bar{\mathbf{C}}^2), \quad \mathbf{III}_{\bar{\mathbf{C}}} = \det \bar{\mathbf{C}} = 1. \quad (2.6)$$

A decomposição multiplicativa do gradiente de deformação

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^v \quad (2.7)$$

em uma parte elástica \mathbf{F}^e e uma inelástica \mathbf{F}^v foi originalmente introduzida durante análise de plasticidade em metais por Kröner [1960] e Lee [1969] e vem também sendo utilizada para descrição de viscoelasticidade sujeita a deformações finitas em materiais não metálicos ([Holzapfel, 1996], [Reese e Govindjee, 1998b], [Bergström e Boyce, 1998a], [Bergström e Boyce, 1998b], [Huber e Tsakmakis, 2000], [Ehlers e Markert, 2001], [Hartmann, 2002], [Lion e Kardelky, 2004], [Govindjee, 2004], [Miehe e Göktepe, 2005], [Dal e Kaliske, 2009]).

2.2 Modelo viscoelástico para deformações finitas

Aplicando o conceito de decomposição multiplicativa ao desacoplamento da função energia de deformação (2.1), Lubliner [1985], Holzapfel e Reiter [1995] e Holzapfel e Simo [1996] mostraram que a mesma, além de poder ser escrita como uma soma de parcelas referentes a efeitos de equilíbrio Ψ_{eq} e viscosos Ψ_v , os primeiros ainda podem ser divididos na soma de um efeito de caráter volumétrico $U(J)$ (cuja única função é variar o volume do corpo em deformação) e de um caráter isocórico $\Psi_\infty(\bar{\mathbf{C}})$ (responsável pela alteração de forma do corpo). Logo, (2.1) pode ser reescrita como

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}_{v\alpha}) = U(J) + \Psi_\infty(\bar{\mathbf{C}}) + \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{C}_{v\alpha}) \quad (2.8)$$

Traduzindo (2.8) em tensões, conclui-se que três são os tipos de tensões a que um corpo viscoelástico sob deformação está sujeito: tensões de equilíbrio volumétricas σ_{vol}^{eq} , tensões de equilíbrio isocóricas σ_{iso}^{eq} e tensões viscosas σ^{ov} de tal forma que

$$\sigma = \sigma_{vol}^{eq} + \sigma_{iso}^{eq} + \sigma^{ov} \quad (2.9)$$

onde σ denota uma medida geral de tensão.

Nesta seção será apresentado o modelo de viscoelasticidade para grandes deformações proposto em Hartmann [2002] que se encaixa nas definições apresentadas. No contexto do presente trabalho, este modelo constitutivo serve ao propósito de mostrar que as contribuições aqui discutidas são necessárias e suficientes para fazer com que os esquemas de RK atinjam ordem total de convergência até $p = 4$ na integração temporal do fluxo viscoelástico em problemas onde a variação temporal da deformação é contínua e suave. Para uma descrição detalhada sobre a modelagem de materiais viscoelásticos, o leitor pode consultar os

livros [Haupt, 2002] e [Lakes, 1998] e para uma descrição sobre seus aspectos computacionais, os trabalhos de [Le Tallec, 2007] e [Hartmann, 2003].

As considerações necessárias para a correta utilização do modelo das Equações (2.10)-(2.20) são de material isotrópico e comportamento quase incompressível. Tensões hidrostáticas são advindas exclusivamente da teoria da elasticidade e as deformações são de tal grandeza que podem ser consideradas como finitas e, portanto, requerem uma abordagem de não-linearidade geométrica. O comportamento do material é dependente da velocidade da deformação e o comportamento histerético das tensões de equilíbrio é negligenciável, de tal maneira que uma abordagem viscoelástica é adequada. As tensões de equilíbrio são derivadas de uma relação hiperelástica e todos os processos são considerados isotérmicos. Para extensão a processos não-isotérmicos, ver [Reese e Govindjee, 1998b] e para consideração do efeito Payne, ver [Lion e Kardelky, 2004].

Decomposição da deformação	$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^v, \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$	(2.10)
----------------------------	--	--------

Decomposição da tensão	$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{\text{vol}}^{\text{eq}} + \mathbf{S}_{\text{iso}}^{\text{eq}} + \mathbf{S}^{\text{ov}}$	(2.11)
------------------------	---	--------

Tensão de equilíbrio	$\mathbf{S}_{\text{vol}}^{\text{eq}} = JU'(J)\mathbf{C}^{-1}, \text{ com } U'(J) = \frac{K}{10}(J^4 - J^{-6})$	(2.12)
----------------------	--	--------

	$\mathbf{S}_{\text{iso}}^{\text{eq}} = \varphi_1 \mathbf{1} + \varphi_2 \bar{\mathbf{C}} + \varphi_3 \bar{\mathbf{C}}^{-1}$	(2.13)
--	---	--------

	$\varphi_1 = 2(\det \mathbf{C})^{-1/3}(w_1 + w_2)$	(2.14)
--	--	--------

	$\varphi_2 = -2(\det \mathbf{C})^{-1/3}w_2$	(2.15)
--	---	--------

	$\varphi_3 = -\frac{2}{3}(\det \mathbf{C})^{-1/3}(w_1 \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})$	(2.16)
--	---	--------

	$w_1 = \frac{\partial w^{\text{eq}}}{\partial \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}} = c_{10} + 3c_{30}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)^2$	(2.17)
--	---	--------

	$w_2 = \frac{\partial w^{\text{eq}}}{\partial \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}} = c_{01}$	(2.18)
--	---	--------

Tensão viscosa	$\mathbf{S}^{\text{ov}} = 2\mu \frac{(\det \mathbf{C}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} \left((\mathbf{C}^v)^{-1} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} : (\mathbf{C}^v)^{-1})\mathbf{C}^{-1} \right)$	(2.19)
----------------	---	--------

Equação evolutiva	$\dot{\mathbf{C}}^v = \frac{4\mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} \left(\mathbf{C} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} : (\mathbf{C}^v)^{-1})\mathbf{C}^v \right)$	(2.20)
-------------------	--	--------

Tabela 2.1 – Modelo constitutivo para viscoelasticidade em deformações finitas.

O tensor de tensão total \mathbf{S} na equação (2.11) é o segundo tensor de Piola-Kirchhoff, o qual, por sua vez, pode ser decomposto aditivamente em uma parcela de equilíbrio $\mathbf{S}_{\text{vol}}^{\text{eq}} + \mathbf{S}_{\text{iso}}^{\text{eq}}$ e uma parcela viscosa \mathbf{S}^{ov} , como já demonstrado em (2.9). De acordo com a equação (2.12), \mathbf{S}^{vol} é a parcela volumétrica do tensor tensão de equilíbrio. A parcela isocórica é definida na equação (2.13) em termos de $\mathbf{1}$, $\bar{\mathbf{C}}$, $\bar{\mathbf{C}}^{-1}$ e das funções escalares $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ de acordo com (2.14) a (2.16). Nestas, as variáveis w_1 and w_2 são definidas como derivadas de w^{eq} em relação aos invariantes $\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}$ e $\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}$, respectivamente. A equação evolutiva para a deformação viscoelástica é dada em (2.20) e a tensão viscosa em (2.19). Em resumo, o modelo de viscoelasticidade isotrópica é escrito em função dos seguintes parâmetros: módulo de compressibilidade K , módulo de cisalhamento μ , constantes elásticas c_{10}, c_{30}, c_{01} e a viscosidade η .

Analisando o modelo da Tabela 2.1, se pode entender como o modelo constitutivo do material basicamente funciona:

- (i) Uma vez que o equilíbrio global do sistema é satisfeito, o seu resultado em termos dos deslocamentos \mathbf{u}_{n+1} são utilizados como dados de entrada para o modelo constitutivo (se for o primeiro passo de tempo, $\mathbf{u}_{n+1} = 0$);
- (ii) Com estes deslocamentos, são calculadas as deformações \mathbf{F}_{n+1} e \mathbf{C}_{n+1} , através de (2.10);
- (iii) De posse das constantes do material c_{10}, c_{01}, c_{30} e K (previamente determinadas), são calculadas as parcelas de equilíbrio isocórica $\mathbf{S}_{\text{iso}n+1}^{\text{eq}}$ e volumétrica $\mathbf{S}_{\text{vol}n+1}^{\text{eq}}$ da tensão;
- (iv) De posse das constantes do material μ e η , integra-se numericamente a equação evolutiva do fluxo viscoelástico (2.20), que tem como solução a deformação viscosa $\mathbf{C}_{n+1}^{\text{v}}$;
- (v) Com $\mathbf{C}_{n+1}^{\text{v}}$, se calcula a tensão viscosa $\mathbf{S}_{n+1}^{\text{ov}}$ através de (2.19);
- (vi) Une-se a tensão viscosa $\mathbf{S}_{n+1}^{\text{ov}}$ às demais parcelas $\mathbf{S}_{\text{iso}n+1}^{\text{eq}}$ e $\mathbf{S}_{\text{vol}n+1}^{\text{eq}}$ e se calcula a tensão total no ponto de Gauss \mathbf{S}_{n+1} de acordo com (2.11);
- (vii) Uma vez com as deformações e tensões calculadas no ponto de Gauss, se calcula a tangente algoritmicamente consistente $\mathbb{C}_{n+1}^{\text{ve}}$ (que neste caso foi calculada numericamente) para cálculo do equilíbrio global em t_{n+1} .

Este modelo se encaixa na classe geral de equações constitutivas do tipo

$$\mathbf{S} = \mathbf{h}(\mathbf{C}, \mathbf{z}) \quad (2.21)$$

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{f}(\mathbf{C}, \mathbf{z}), \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0, \quad (2.22)$$

onde (2.21) denota uma relação elástica e $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n_z}$ define um conjunto de variáveis internas que descrevem o comportamento viscoelástico do material. Aqui, $\mathbf{z} = \{\mathbf{C}^v\}$ com $n_z = 6$ para o caso tridimensional de medidas de deformação simétricas.

3. DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO UTILIZANDO MÉTODOS DE EULER E RUNGE-KUTTA

Na Seção 1.1 foram introduzidos os conceitos básicos do método de integração de Euler implícito. As principais características que se devem relembrar deste método são a ordem de convergência unitária, a aproximação constante da solução da EDO no intervalo de integração e o fato de ser implícito e estável para todo e qualquer passo de tempo (A-estável).

Neste capítulo será dada uma introdução à classe especial de métodos de integração de Runge-Kutta conhecidos como *Métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos (DIRK)*. A escolha por este conjunto de métodos para aplicação neste trabalho se justifica pelas suas boas características de estabilidade, sua semelhança com o método de Euler implícito no que diz respeito à sua implementação numérica e por apresentarem ordens de convergência p consideravelmente mais altas (até $p = 4$) do que o método de Euler implícito (motivos pelo qual são chamados *métodos de altas ordens*).

3.1 Equações básicas

Para entender os princípios de funcionamento dos métodos DIRK, primeiro é preciso introduzir o processo de solução de um PVI através de métodos implícitos de Runge-Kutta (IRK), conforme pode ser visto em Hairer et al. [2008], Hairer et al. [1989] e Hairer e Wanner [2002].

Para tanto, considere-se um PVI escrito como

$$\dot{\mathbf{z}} = f(\mathbf{z}), \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0, \quad t \in [t_0, T] \quad (3.1)$$

consistindo em uma equação diferencial ordinária (EDO) (3.1)₁ e condições iniciais (3.1)₂.

A equação (3.1)₁ não foi escrita em termos do argumento \mathbf{C} por questão de generalização, mas cabe lembrar que em inelasticidade computacional, o PVI é acoplado às equações de equilíbrio, as quais são resolvidas pelo método dos elementos finitos resultando

em deslocamentos \mathbf{u} e, conseqüentemente, deformações totais \mathbf{C} (Figura 1.1).

O intervalo de tempo total é dividido em sub-intervalos $t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_{n+1} < \dots < t_N = T$, e os passos de tempo são tais que $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n, 0 \leq n \leq N$. Assumindo que a solução exata em t_n é $\mathbf{z}(t_n)$, busca-se a solução $\mathbf{z}(t_{n+1})$ em t_{n+1}

$$\mathbf{z}(t_{n+1}) = \mathbf{z}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tau, \mathbf{z}(\tau)) d\tau. \quad (3.2)$$

Para a solução numérica $\mathbf{z}_{n+1} \approx \mathbf{z}(t_{n+1})$, a integral é calculada através de uma regra de quadratura de passo único com s estágios

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}(t_n) + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i \Delta t_n, \mathbf{z}(t_n + c_i \Delta t_n)) \quad (3.3)$$

com os pesos $b_i, i = 1, \dots, s$ e coeficientes $c_i, i = 1, \dots, s$, onde estes últimos irão definir os novos estágios $t_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n$.

As incógnitas $\mathbf{z}(t_n + c_i \Delta t_n)$ são calculadas por um segundo passo de integração em analogia a (3.3), utilizando os mesmos estágios c_i , mas com pesos a_{ij} , resultando na matriz de Runge-Kutta $A = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,s}$. Em resumo,

$$\mathbf{z}(t_n + c_i \Delta t_n) \approx \mathbf{Z}_{ni} = \mathbf{z}(t_n) + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_{nj}, \mathbf{Z}_{nj}), \quad i = 1, \dots, s. \quad (3.4)$$

De posse das derivadas nos estágios $\dot{\mathbf{Z}}_{nj} := f(t_{nj}, \mathbf{Z}_{nj})$, podemos reescrever (3.4) como

$$\mathbf{Z}_{ni} = \mathbf{z}(t_n) + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \dot{\mathbf{Z}}_{nj}, \quad i = 1, \dots, s. \quad (3.5)$$

Portanto, \mathbf{Z}_{ni} e $\dot{\mathbf{Z}}_{ni}$ são dois conjuntos de variáveis relacionadas entre si através de (3.5). Com as derivadas nos estágios $\dot{\mathbf{Z}}_{ni}$, a atualização para \mathbf{z}_{n+1} é obtida através de

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Z}}_{ni}. \quad (3.6)$$

Em resumo, a solução de um PVI de formato (3.1) através de um método de RK totalmente implícito é obtida pelo algoritmo da Tabela 3.1.

A representação típica de métodos de Runge-Kutta é feita através das chamadas

(I) Resolver o conjunto de equações não lineares para as *soluções nos estágios* \mathbf{Z}_{ni}

$$\mathbf{Z}_{ni} = \mathbf{z}_n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_{nj}, \mathbf{Z}_{nj}) \quad i = 1, \dots, s. \quad (3.7)$$

(II) Calcular as *derivadas nos estágios* $\dot{\mathbf{Z}}_{ni}$

$$\dot{\mathbf{Z}}_{ni} = f(t_{ni}, \mathbf{Z}_{ni}) \quad i = 1, \dots, s. \quad (3.8)$$

(III) Calcular a aproximação de \mathbf{z} no tempo t_{n+1}

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Z}}_{ni}. \quad (3.9)$$

Tabela 3.1 – Solução de uma EDO usando métodos IRK.

matrizes de Butcher (Tabela 3.2). Métodos de RK totalmente implícitos são caracterizados por matrizes triangulares superiores com pelo menos uma entrada $a_{ij} \neq 0$, $j > i$. Em outras palavras, todas as soluções \mathbf{Z}_{ni} nos estágios são acopladas. Para métodos de RK explícitos, $a_{ij} = 0$ para $j \geq i$, denotando completo desacoplamento entre as soluções nos estágios.

c_1	a_{11}	a_{12}	\dots	a_{1s}	c_1	a_{11}	0	\dots	0	c_1	a_{11}	0	\dots	0
c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	a_{2s}	c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	0	c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	0
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}	c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}	1	b_1	b_2	\dots	b_s
	b_1	b_1	\dots	b_s		b_1	b_1	\dots	b_s		b_1	b_2	\dots	b_s

Tabela 3.2 – Matrizes de Butcher para métodos de RK implícitos (IRK, esquerda), diagonalmente implícitos (DIRK, centro) e diagonalmente implícitos com $c_s = 1$ (direita).

Se os coeficientes satisfizerem as condições

- (i) $b_i \geq 0$, $i = 1, \dots, s$
(ii) $M := (b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j)_{i,j=1,\dots,s}$, é positiva semi-definida,

o esquema é chamado *algebricamente estável*. Pode ser mostrado que métodos RK implícitos algebricamente estáveis apresentam a qualidade de serem B-estáveis (e, por isso, também A-estáveis, ou incondicionalmente estáveis) [Hairer et al., 2008].

3.2 Esquemas DIRK

Para chamar a atenção para a potencialidade dos métodos DIRK, pode-se citar [Alexander, 1977]: *'Para integrar um sistema de n equações diferenciais, um método implícito com matrizes cheias $s \times s$ requer a solução de ns equações implícitas (em geral não-lineares) simultâneas em cada passo de tempo (...). Uma maneira de se contornar esta situação é usar uma matriz triangular inferior (a_{ij}), $a_{ij} = 0$ para $i < j$); as equações poderão, então, ser resolvidas em s estágios sucessivos com apenas um sistema de n dimensões a ser resolvido em cada estágio'.*

A estrutura triangular inferior da matriz $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, s$ de um método DIRK proporciona a utilização de um procedimento algorítmico multi-estágio análogo ao método de Euler implícito de um estágio somente. O procedimento se dá através da evolução ao longo do intervalo de tempo, de estágio para estágio, onde o problema em cada sub-estágio é semelhante ao método de Euler. Os métodos DIRK utilizados no presente trabalho são fortemente S-estáveis, o que indica que são particularmente adequados à solução de problemas rígidos, como é o caso da inelasticidade. A noção de S-estabilidade foi introduzida por Prothero e Robinson [1974] a partir da conclusão de que a A-estabilidade por si só não era suficiente para aplicação em problemas rígidos.

Como já foi comentado, a utilização de métodos DIRK se baseia no fato de eles se tratarem de métodos de integração numérica de ordens de convergência p superiores à unidade (caso do Euler implícito). Um método DIRK de s estágios apresenta ordem de convergência $p = s$ para $p = 1, 2, 3$, mas para ordem 4, pelo menos 5 estágios são necessários para construção de um método fortemente S-estável [Alexander, 1977]. Para maiores detalhes, uma visão geral é apresentada em Hairer et al. [2008]. Para trabalhos

com aplicação de métodos DIRK, ver [Cash, 1979] e [Alexander, 1977] e para aplicações a problemas de inelasticidade, ver [Ellsiepen, 1999], [Ellsiepen e Hartmann, 2001] e [Hartmann, 2003].

Para um esquema DIRK com $c_s = 1$, o passo II da Tabela 3.1 pode ser negligenciado, uma vez que estes esquemas preenchem o requisito $a_{si} = b_i$ para todos $i = 1, \dots, s$, e a solução aproximada \mathbf{z}_{n+1} do passo III coincide com a solução \mathbf{Z}_s do último estágio

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s b_j \dot{\mathbf{Z}}_{nj}. \quad (3.10)$$

Nestes casos, a equação (3.7) é escrita como

$$\mathbf{Z}_{ni} = \mathbf{z}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Z}}_{nj} = \Sigma_{ni} + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Z}}_{ni}, \quad (3.11)$$

onde Σ_{ni} é a variável interna acumulada que serve como valor inicial para o estágio i

$$\Sigma_{ni} = \mathbf{z}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Z}}_{nj}. \quad (3.12)$$

A derivada $\dot{\mathbf{Z}}_{nj}$ do estágio no somatório da equação (3.12) pertence aos estágios anteriores, como indicado pelo limite superior da soma $j_{\max} = i - 1$. Portanto, estas derivadas são conhecidas. Para o estágio atual elas são calculadas de (3.12), resolvendo para $\dot{\mathbf{Z}}_{ni}$ de acordo com

$$\dot{\mathbf{Z}}_{ni} = \frac{\mathbf{Z}_{ni} - \Sigma_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}. \quad (3.13)$$

3.3 Aplicação dos esquemas DIRK à viscoelasticidade finita

Tendo em vista que neste trabalho será utilizado o modelo de viscoelasticidade das equações (2.10)-(2.20), relembremos a equação evolutiva para o tensor de deformação viscoelástico de Cauchy-Green \mathbf{C}^v como sendo

$$\dot{\mathbf{C}}^v = \frac{4\mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} \left(\mathbf{C} - \frac{1}{3} (\mathbf{C} : (\mathbf{C}^v)^{-1} \mathbf{C}^v) \right). \quad (3.14)$$

Após a discretização no tempo, a aplicação de um método DIRK leva à fórmula de

atualização para \mathbf{C}_{ni}^v no estágio i dentro do intervalo de tempo $\Delta t_n = [t_n, t_{n+1}]$

$$\mathbf{C}_{ni}^v = \Sigma_{ni}^v + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{C}}_{ni}^v, \quad (3.15)$$

$$\text{com } \Sigma_{ni}^v = \mathbf{C}_n^v + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{C}}_{nj}^v, \quad (3.16)$$

onde $\mathbf{C}_n^v \approx \mathbf{C}^v(t_n)$. Com (3.14), (3.15) pode ser reescrita como

$$\frac{\mathbf{C}_{ni}^v - \Sigma_{ni}^v}{\Delta t_n a_{ii}} - \frac{4\mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C}(t_{ni}))^{1/3}} \left(\mathbf{C}(t_{ni}) - \frac{1}{3} (\mathbf{C}(t_{ni}) : (\mathbf{C}(t_{ni})^v)^{-1} \mathbf{C}_{ni}^v) \right) = 0. \quad (3.17)$$

Para reduzir o esforço computacional necessário para solução de 6 equações algébricas não-lineares para \mathbf{C}_{ni}^v , a seguinte reformulação é proposta baseada em Hartmann [2003]

$$\mathbf{C}_{ni}^v = \frac{1}{g(\mathbf{C}_{ni}^v)} \xi(\mathbf{C}_{ni}^v) \quad (3.18)$$

com a função escalar $g(\mathbf{C}_{ni}^v)$ e a função tensorial $\xi(\mathbf{C}_{ni}^v)$ de acordo com

$$g(\mathbf{C}_{ni}^v) = 1 + \frac{4}{3} \frac{\Delta t_n a_{ii} \mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C}(t_{ni}))^{1/3}} (\mathbf{C}(t_{ni}) : (\mathbf{C}_{ni}^v)^{-1}), \quad (3.19)$$

$$\xi(\mathbf{C}_{ni}^v) = \Sigma_{ni}^v + \frac{4\Delta t_n a_{ii} \mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C}(t_{ni}))^{1/3}} \mathbf{C}(t_{ni}). \quad (3.20)$$

Dois escalares são identificados na equação de atualização

$$x_1 := (\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3} \quad (3.21)$$

$$x_2 := \mathbf{C}(t_{ni}) : (\mathbf{C}_{ni}^v)^{-1} \quad (3.22)$$

os quais são usados como incógnitas no seguinte sistema, substituindo os 6 componentes de \mathbf{C}^v

$$\Phi_m(x_1, x_2) = 0 \quad m = 1, 2, \quad (3.23)$$

com

$$\Phi_1(x_1, x_2) := x_1 - g^{-1}(\det \xi)^{1/3}, \quad (3.24)$$

$$\Phi_2(x_1, x_2) := x_2 - g \xi^{-1} : \mathbf{C}_{ni}, \quad (3.25)$$

onde são utilizadas as abreviações

$$g = g(x_1, x_2) = 1 + \frac{\hat{k} x_1 x_2}{3 \eta}, \quad (3.26)$$

$$\xi = \xi(x_1, x_2) = \Sigma_{ni}^v + \hat{k} \frac{x_1}{\eta} \mathbf{C}_{ni}, \quad (3.27)$$

$$\text{e } \hat{k} = \frac{4\mu_k \Delta t_n a_{ii}}{(\det \mathbf{C}_{ni})^{1/3}}. \quad (3.28)$$

A aplicação do método de Newton-Raphson para solução deste sistema de equações não-lineares resulta no seguinte conjunto de equações lineares para cada iteração (r):

$$\begin{bmatrix} \Phi_{1,1} & \Phi_{1,2} \\ \Phi_{1,2} & \Phi_{2,2} \end{bmatrix}^{(r)} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix}^{(r)} \quad (3.29)$$

com incrementos $\Delta x_m = x_m^{(r+1)} - x_m^{(r)}$.

Para o último estágio $i = s$, o qual coincide com o fim do intervalo de tempo t_{n+1} , a solução x_1, x_2 é utilizada para cálculo da tensão viscoelástica atualizada em t_{n+1}

$$\mathbf{S}_{n+1}^{\text{ov}} = \frac{2\mu x_1}{(\det \mathbf{C}_{ni})^{1/3}} \left(g(x_1, x_2) \xi^{-1}(x_1, x_2) - \frac{1}{3} x_2 \mathbf{C}_{ns}^{-1} \right). \quad (3.30)$$

Observações

1. Os coeficientes da matriz $A = [a_{ij}]_{i,j=1,\dots,s}$ do DIRK em (3.15) e (3.16) são escolhidos da Tabela A.1 do Apêndice A. Os fatores de peso b_i não são mostrados, pois para DIRK com $c_s = 1$, $a_{si} = b_i$, e os coeficientes c_i , mais uma vez são retirados da Tabela A.1 do Apêndice A.

Como aproximar $\mathbf{C}_{ni} \approx \mathbf{C}(t_{ni})$ em uma maneira *consistente* é a questão chave e será respondida na Seção 4.

2. O método de Euler implícito nada mais é do que um caso especial de DIRK com $p = 1$ no que diz respeito à atualização de acordo com (3.15) e (3.16) para cada solução nos estágios dentro do passo de tempo. Este fato justifica a escolha de implementação dos métodos DIRK para modelos viscoelásticos quando já se dispõe do método de Euler implícito implementado.

4. ACOPLAMENTO ESPAÇO-TEMPO

4.1 Ideia geral

Em problemas de viscoelasticidade solucionados através do método dos elementos finitos, as equações de equilíbrio são resolvidas no nível global, tendo como variáveis primárias os deslocamentos. Estas quantidades cinemáticas advindas do nível global são então utilizadas para o cálculo das deformações totais no nível local (que são, tipicamente, os pontos de Gauss da malha), as quais, por sua vez, entram como valores iniciais para a solução do PVI do fluxo inelástico. A este mecanismo de utilização da solução global (ou espacial, devido à discretização ser no espaço) como dado de entrada para a solução local (ou temporal, devido à discretização ser no tempo) e posterior utilização dos resultados da solução local como entrada para o problema global, se denomina *Acoplamento espaço-tempo* ou *Acoplamento global-local*.

A variável integrada durante a EDO do fluxo viscoelástico é sempre uma medida de deformação, e no caso do modelo constitutivo da Tabela 2.1, é o tensor de deformação de Cauchy-Green à direita \mathbf{C} (equação (2.20)). A esta equação se aplicarão os métodos de RK de diferentes ordens de convergência e à deformação \mathbf{C} se aplicarão diferentes aproximações ao longo do intervalo de integração através de polinômios de diferentes graus.

Ao se utilizar métodos de Runge-Kutta para integração do problema temporal em âmbito local, uma vez que estes são métodos de passo único, porém de múltiplos estágios, seu uso requer o cálculo dos valores de deformação total em cada um dos estágios do RK (ver equação (3.17) e observação 1 na Seção 3.3).

O modo mais simples de determinação das deformações totais em cada estágio do RK é considerá-la constante ao longo do intervalo de tempo de integração. Isto é feito no método de Euler implícito, conforme mostra a Figura 1.1.

A Figura 4.1 ilustra um caso geral típico de viscoelasticidade, onde o comportamento da deformação ao longo do tempo é não-linear. Uma vez que não se conhece, *a priori*, como

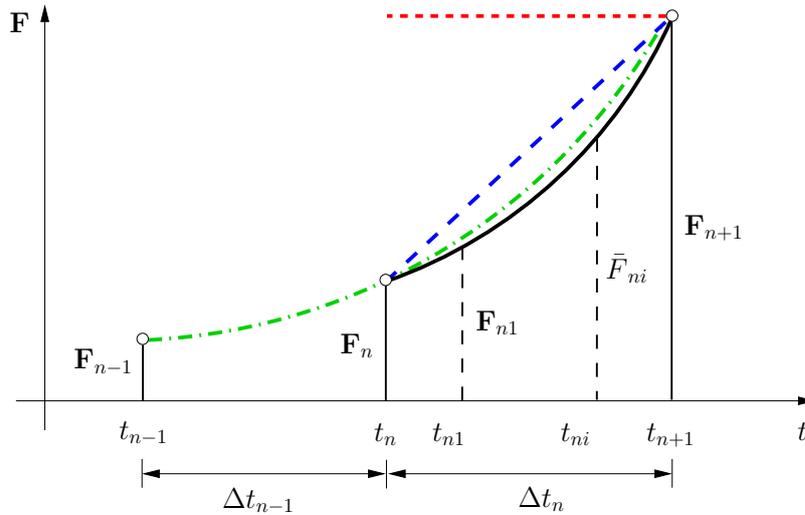


Figura 4.1 – Comportamento exato (porém ainda incógnito) da deformação ao longo do tempo (linha preta cheia) e suas aproximações através de deformação constante (linha vermelha pontilhada), linear (linha azul tracejada) e quadrática (linha verde traço-ponto.)

é a variação da deformação ao longo do tempo, é necessário se tomar uma decisão quanto ao grau do polinômio com que se quer aproximar a deformação no intervalo de integração $t_n \leq t \leq t_{n+1}$. Ao se utilizar o valor de \mathbf{F} no instante t_{n+1} , é possível se fazer apenas uma aproximação constante para esta grandeza, ou seja, $\mathbf{F}_{ni} = \mathbf{F}_{n+1}$. Por outro lado, se for desejado se utilizar dados de \mathbf{F} em t_{n+1} e t_n , se pode contruir uma aproximação linear para \mathbf{F} ao longo do intervalo de integração, de modo que $\mathbf{F}_{ni} = \mathbf{F}_n + (t_{ni} - t_n)(\mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n)/(\Delta t_n)$. Assim por diante, desde que se tenha armazenado na memória do programa os valores calculados de \mathbf{F} nos passos de tempo anteriores, é virtualmente possível se aproximar esta grandeza com polinômios de qualquer grau.

Na sequência será explicado como a escolha do grau do polinômio de aproximação para a variável que está sendo integrada é definitiva para obtenção da ordem de convergência nominal do método de integração utilizado. Basicamente, para um problema onde a variação temporal da deformação é contínua e suave, a única condição necessária e suficiente para que se atinja ordem nominal de convergência de um método de integração é que se tenha uma aproximação *consistente* entre grau do polinômio e ordem do método. É deste assunto que trata a próxima seção.

4.2 Consistência

A escolha do polinômio de aproximação adequado para a solução da evolução da deformação ao longo do tempo depende de uma análise de *consistência*, conforme Eidel [2011] e Eidel et al. [2013]. A EDO

$$\dot{\mathbf{z}} = f(\mathbf{F}(t), \mathbf{z}(t)) \quad (4.1)$$

que descreve o fluxo viscoelástico do material é resolvida utilizando-se um algoritmo de integração no tempo de ordem de convergência nominal p . Uma vez que o gradiente de deformação, que é tempo-dependente, é um dos argumentos em (4.1), a ordem de sua aproximação no tempo irá influenciar a ordem de convergência da sua integração no tempo. Apesar de esta dependência poder parecer óbvia, Eidel e Kuhn [2011] foi o primeiro trabalho a aplicá-la e demonstrá-la.

Um polinômio interpolador de grau $q - 1$ para a deformação total \mathbf{F} introduz um correspondente erro de aproximação de ordem Δt^q

$$\mathbf{F} = \mathcal{O}(\Delta t^q) \quad (4.2)$$

que implica que, por causa de (4.1), q é um limite para a ordem de convergência do integrador temporal. Mais genericamente, pode-se dizer que *para extrair do algoritmo de integração no tempo a sua ordem de convergência nominal p , é preciso que se aproxime a variável de integração com um polinômio de, no mínimo, grau $q = p$* , ou seja, é necessário que haja uma *consistência* entre as aproximações. Matematicamente, isto pode ser expresso como

$$\mathbf{z} = \mathcal{O}(\Delta t^{\min\{p,q\}}). \quad (4.3)$$

A partir daí, fica claro que um polinômio de aproximação de ordem inferior $q = p - n$, $n \geq 1$ irá reduzir a ordem de convergência da variável integrada \mathbf{z} . Por exemplo: uma aproximação linear da deformação baseada em valores em t_n e t_{n+1} (portanto introduzindo um erro de ordem 2) limita a ordem de convergência do método a ordem 2. Neste caso, mesmo que se utilizasse um método de integração de ordem $p \geq 3$, se verificaria ordem de convergência máxima do método de solução igual a 2. De modo semelhante, uma aproximação quadrática das deformações para cálculo das mesmas nos estágios do RK (portanto introdu-

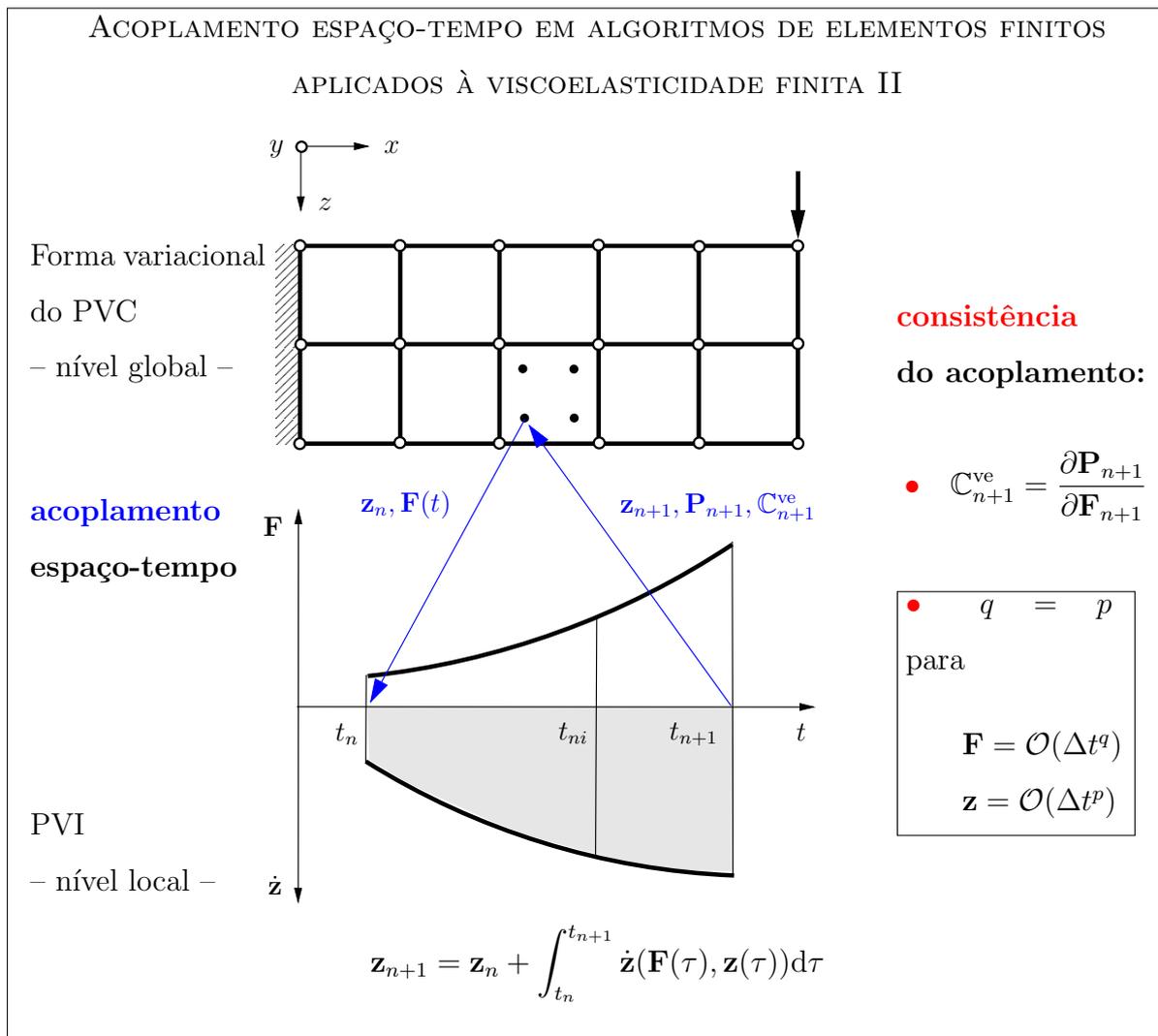


Figura 4.2 – Esquematização generalizada do acoplamento consistente de discretizações espaço-temporais aplicadas à simulação de viscoelasticidade finita para métodos de alta ordem $p \geq 2$. FONTE: [Eidel et al., 2013]

zindo erro de ordem 3) possibilita uma consistência e convergência no máximo de ordem 3, mesmo para integradores com $p \geq 3$. Esta relação foi publicada em Eidel [2011] e em Eidel et al. [2013], que foi um dos resultados do presente trabalho.

A ideia da consistência no acoplamento em viscoelasticidade mostrada na Figura 1.1 deve, portanto, ser expandida de acordo com a Figura 4.2. A condição $q = p$ garante ordem de convergência nominal do integrador no tempo, enquanto a condição típica de tangente algorítmica $\mathbb{C}_{n+1}^{ve} = \partial \mathbf{P}_{n+1} / \partial \mathbf{F}_{n+1}$ garante convergência quadrática da solução do conjunto de equações algébricas linearizadas originadas da discretização espacial das equações de

equilíbrio no método dos elementos finitos. O conceito de tangente algorítmica foi introduzido em inelasticidade computacional por Nagtegaal [1982] e generalizado por Simo e Taylor [1985].

Nesta seção, através da equação (4.3) foi cumprido o objetivo principal deste trabalho, que era de fornecer uma formalização matemática para o conceito proposto por Eidel e Kuhn [2011] de *consistência* entre ordem de aproximação da deformação total ao longo do tempo e ordem de convergência do método de integração utilizado. Somente se for satisfeito este conceito de consistência é que se poderá atingir a ordem nominal do método integrador. Em caso de não satisfação, será observada uma queda na ordem deste integrador e, por consequência, perda de precisão e eficiência da solução.

Cumprido este objetivo de cunho teórico, no Capítulo 5 serão mostrados diferentes casos computacionais onde foram implementados diferentes métodos DIRK para o modelo viscoelástico da Tabela 2.1 com o objetivo de verificar a validade da formulação aqui apresentada.

4.3 Construção de polinômios interpoladores para \mathbf{C}^v na busca de um acoplamento consistente

O primeiro passo para pôr em prática as considerações feitas na seção anterior, será adaptá-las ao modelo viscoelástico utilizado neste trabalho. Para tal, é preciso substituir as quantidades $\{\mathbf{z}, \mathbf{F}, \mathbf{P}\}$ por $\{\mathbf{C}^v, \mathbf{C}, \mathbf{S}\}$, respectivamente. Na sequência, os requisitos de consistência para a aproximação da deformação total são garantidos através da utilização de polinômios interpoladores de grau $q - 1$, com $q = p$.

As equações (4.1) e (4.3) são reescritas respectivamente como

$$\dot{\mathbf{C}}^v = f(\mathbf{C}(t), \mathbf{C}^v(t)), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{C}^v = \mathcal{O}(\Delta t^{\min\{p,q\}}) \quad (4.5)$$

e a tangente algoritmicamente consistente como $\mathbb{C}_{n+1}^{ve} = \partial \mathbf{S}_{n+1} / \partial \mathbf{C}_{n+1}$.

4.3.1 Caso $p = 1$: valores nos estágios para deformação total constante

O modo mais simples de determinação dos valores de deformação ao longo dos estágios do método de RK é considerá-la constante ao longo do intervalo de integração. Portanto, tem-se um polinômio de grau 0 dado por $\mathbf{p}_0(\tilde{t}) = \mathbf{C}_{n+1}$, e

$$\mathbf{C}(t = t_{ni}) \approx \mathbf{p}_0(\tilde{t} = c_i \Delta t) = \mathbf{C}_{n+1}. \quad (4.6)$$

Partindo-se da premissa de que as deformações são continuamente diferenciáveis ao longo deste intervalo $t \in [t_n, t_{n+1}]$ e $\tilde{t} \in [0, \Delta t]$, o erro de interpolação das deformações é $|\mathbf{C}(\tilde{t}) - \mathbf{p}_0(\tilde{t})| \leq M_1(\Delta t)$ com $M_1 = \max\{|\mathbf{C}'(\tilde{t})| : \tilde{t} \in [0, \Delta t]\}$.

Observação. O método implícito de Euler preenche o requisito $q = p$, uma vez que a aproximação constante para a deformação $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{n+1}$ implicando em $q = 1$ é consistente com ordem linear $p = 1$.

4.3.2 Caso $p = 2$: valores nos estágios via interpolação linear

Introduzindo uma nova escala de tempo $\tilde{t} := t - t_n$ no intervalo de tempo $t \in [t_n, t_{n+1}]$, o polinômio de interpolação linear entre $(0, \mathbf{C}_n)$ e $(\Delta t, \mathbf{C}_{n+1})$ é $\mathbf{p}_1(\tilde{t}) = \mathbf{C}_n + \tilde{t}/\Delta t(\mathbf{C}_{n+1} - \mathbf{C}_n)$, o que leva a uma aproximação de \mathbf{C} no tempo $t = t_{ni} = t_n + c_i \Delta t$

$$\mathbf{C}(t = t_{ni}) \approx \mathbf{p}_1(\tilde{t} = c_i \Delta t) = \mathbf{C}_n + c_i(\mathbf{C}_{n+1} - \mathbf{C}_n). \quad (4.7)$$

Partindo-se da premissa de que as deformações são duas vezes continuamente diferenciáveis ao longo deste intervalo $t \in [t_n, t_{n+1}]$ e $\tilde{t} \in [0, \Delta t]$, o erro de interpolação das deformações é $|\mathbf{C}(\tilde{t}) - \mathbf{p}_1(\tilde{t})| \leq M_2/2(\Delta t)^2$ com $M_2 = \max\{|\mathbf{C}''(\tilde{t})| : \tilde{t} \in [0, \Delta t]\}$.

Observação. O cálculo dos valores das deformações nos estágios intermediários através de interpolação linear foi utilizado em Büttner [2003] aplicado à elasto-plasticidade. No entanto, foi observada uma redução de ordem de 3 para 2 em um método de ordem 3 de RK totalmente implícito.

4.3.3 Caso $p = 3$: valores nos estágios via interpolação quadrática

É proposta aqui uma interpolação polinomial $\mathbf{p}_2(\tilde{t})$ baseada nos dados $(-\Delta t, \mathbf{C}_{n-1})$, $(0, \mathbf{C}_n)$ e $(\Delta t, \mathbf{C}_{n+1})$. Dado que $\mathbf{C}(\tilde{t})$ é três vezes continuamente diferenciável em $[-\Delta t, \Delta t]$,

o erro da interpolação é tido como $|\mathbf{C}(\tilde{t}) - \mathbf{p}_2(\tilde{t})| \leq M_3/6(\Delta t^3)$ com $M_3 = \max\{|\mathbf{C}'''(\tilde{t})| : \tilde{t} \in [-\Delta t, \Delta t]\}$.

A interpolação polinomial \mathbf{p}_2 é tal que

$$\mathbf{p}_2(\tilde{t}) = \frac{1}{2\Delta t^2}(\mathbf{C}_{n-1} - 2\mathbf{C}_n + \mathbf{C}_{n+1})\tilde{t}^2 + \frac{1}{2\Delta t}(\mathbf{C}_{n+1} - \mathbf{C}_{n-1})\tilde{t} + \mathbf{C}_n. \quad (4.8)$$

Tem-se, para os valores de deformação \mathbf{C} nos estágios intermediários do RK $t = t_{ni} = t_n + c_i\Delta t$ e $\tilde{t} = c_i\Delta t$

$$\mathbf{C}(t = t_{ni}) \approx \mathbf{p}_2(\tilde{t} = c_i\Delta t) = \frac{c_i}{2}(c_i - 1)\mathbf{C}_{n-1} + (1 - c_i^2)\mathbf{C}_n + \frac{c_i}{2}(c_i + 1)\mathbf{C}_{n+1}. \quad (4.9)$$

4.3.4 Caso $p = 4$: valores nos estágios via interpolação cúbica

Para a convergência de ordem 4 na integração temporal, o polinômio de interpolação consistente para a deformação total deve ser de grau 3. Para tal, são necessários um total de 4 pontos de interpolação, que são $(-\Delta t_{n-2}, \mathbf{C}_{n-2})$, $(-t_{n-1}, \mathbf{C}_{n-1})$, $(0, \mathbf{C}_n)$, $(\Delta t_n, \mathbf{C}_{n+1})$. Dado que $\mathbf{C}(\tilde{t})$ é quatro vezes continuamente diferenciável no intervalo $[-2\Delta t, \Delta t]$, o erro de interpolação é tido como $|\mathbf{C}(\tilde{t}) - \mathbf{p}_3(\tilde{t})| \leq M_4/24(\Delta t^4)$, com $M_4 = \max\{|\mathbf{C}''''(\tilde{t})| : \tilde{t} \in [-2\Delta t, \Delta t]\}$.

$$\mathbf{p}_3(t) = \sum_{i=0}^3 f(t_{ni})\mathbf{l}_i(t_{ni}) \quad (4.10)$$

onde

$$\mathbf{l}_0 = \frac{(t_{ni} - t_{n-1})(t_{ni} - t_n)(t_{ni} - t_{n+1})}{(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n+1})} \mathbf{C}_{n-2} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{l}_1 = \frac{(t_{ni} - t_{n-2})(t_{ni} - t_n)(t_{ni} - t_{n+1})}{(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n+1})} \mathbf{C}_{n-1} \quad (4.12)$$

$$\mathbf{l}_2 = \frac{(t_{ni} - t_{n-2})(t_{ni} - t_{n-1})(t_{ni} - t_{n+1})}{(t_n - t_{n-2})(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n+1})} \mathbf{C}_n \quad (4.13)$$

$$\mathbf{l}_3 = \frac{(t_{ni} - t_{n-2})(t_{ni} - t_{n-1})(t_{ni} - t_n)}{(t_{n+1} - t_{n-2})(t_{n+1} - t_{n-1})(t_{n+1} - t_n)} \mathbf{C}_{n+1}. \quad (4.14)$$

O roteiro apresentado através das equações (4.15) a (4.22) mostra como os esquemas DIRK são utilizados para a integração temporal de ordem $p = 2 \dots 4$, juntamente com suas interpolações consistentes para a deformação.

(I) Cálculo dos valores iniciais Σ_{ni} para a integração no tempo (a_{ij}, c_j da Tabela A.1):

$$\text{Para } i = 1 : \Sigma_{ni}^v = \mathbf{C}_n^v. \quad \text{Para } i \geq 2 : \Sigma_{ni}^v = \mathbf{C}_n^v + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{C}}_{nj}^v \quad (4.15)$$

(II) Aproximação da deformação total por polinômios de grau consistente $p - 1$:

$$\text{para } p \in \{2, 3, 4\} : \quad \mathbf{C}_{ni} = \hat{\mathbf{C}}_{ni}(c_i, \mathbf{C}_{n+1}, \mathbf{C}_n, \dots, \mathbf{C}_{n-p+2}) \quad (4.16)$$

de acordo com (4.7) para $p = 2$, (4.9) para $p = 3$, e (4.10) para $p = 4$.

(III) Cálculo das soluções \mathbf{C}_{ni}^v nos estágios:

$$\mathbf{C}_{ni}^v = \Sigma_{ni}^v + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{C}}_{ni}^v \quad (4.17)$$

$$\text{com } \dot{\mathbf{C}}_{ni}^v = \frac{4\mu (\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3}}{\eta (\det \mathbf{C}_{ni})^{1/3}} \left(\mathbf{C}_{ni} - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_{ni} : (\mathbf{C}_{ni}^v)^{-1}) \mathbf{C}_{ni}^v \right) \quad (4.18)$$

Solução das equações algébricas não-lineares $\Phi_m = 0, m = 1, 2$, de acordo com (3.24) e (3.25) para $x_i, i = 1, 2$ com $x_1 = (\det \mathbf{C}_{ni}^v)^{1/3}$, $x_2 = \mathbf{C}_{ni} : (\mathbf{C}_{ni}^v)^{-1}$ resultando nas soluções nos estágios:

$$\mathbf{C}_{ni}^v = \left[1 + \frac{\hat{k} x_1 x_2}{3\eta} \right]^{-1} \left[\mathbf{C}_{ni-1}^v + \hat{k} \frac{x_1}{\eta} \right] \quad (4.19)$$

$$\text{com } \hat{k} = \frac{4\mu \Delta t_n a_{ii}}{(\det \mathbf{C}_{ni})^{1/3}} \quad (4.20)$$

(IV) Cálculo das derivadas nos estágios $\dot{\mathbf{C}}_{ni}^v$:

$$\dot{\mathbf{C}}_{ni}^v = \frac{\mathbf{C}_{ni}^v - \Sigma_{ni}^v}{\Delta t_n a_{ii}} \quad (4.21)$$

Se $i < s$ então $i = i + 1$ e volta para (I), senão, continua.

(V) Atualização da deformação viscoelástica \mathbf{C}_{n+1}^v e tensão viscosa $\mathbf{S}_{n+1}^{\text{ov}}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{n+1}^v &= \mathbf{C}_{ns}^v \\ \mathbf{S}_{n+1}^{\text{ov}} &= 2\mu \frac{(\det \mathbf{C}_{ns})^{1/3}}{(\det \mathbf{C}_{ns}^v)^{1/3}} \left((\mathbf{C}_{ns}^v)^{-1} - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_{ns} : (\mathbf{C}_{ns}^v)^{-1}) \mathbf{C}_{ns}^{-1} \right) \end{aligned} \quad (4.22)$$

4.4 Comparação conceitual com métodos de elementos finitos existentes aplicados à inelasticidade

O tratamento da solução do equilíbrio global com o PVI local (para solução da equação evolutiva do fluxo viscoelástico) da inelasticidade como um sistema de equações algébricas diferenciais foi proposto por Ellsiepen e Hartmann [2001] para elasto-plasticidade e usado juntamente com métodos DIRK para viscoelasticidade finita por Hartmann [2002] e Hartmann e Wensch [2007]. Este método é conhecido como DAE/MLNA (*Differential Algebraic Equation/Multi-Level Newton Approach*). Foi demonstrado que este método é capaz de atingir ordem de convergência total até ordem 3 e pode apresentar melhora considerável na eficiência quando comparado ao método de Euler implícito. No entanto, este método requer a solução das equações de equilíbrio no nível global não somente nos tempos t_n e t_{n+1} , mas também em cada estágio do RK durante o intervalo de tempo atual.

A vantagem da metodologia aqui apresentada em relação à DAE/MLNA é a de que ela restringe a solução do equilíbrio global do MEF somente nos tempos t_n e t_{n+1} , o que é o caso típico de uma simulação numérica de inelasticidade em um código de elementos finitos. Isto é facilmente visualizado na esquematização da representação do acoplamento espaço-tempo (ou global-local) da Figura 4.2. Se o método DIRK possui 5 estágios, como é o caso do método de ordem 4 (DIRK4), a presente metodologia requer somente uma solução global do equilíbrio entre t_n e t_{n+1} , enquanto que a metodologia DAE/MLNA requer 5 soluções no mesmo Δt . Isto implica em uma relação direta de aumento de 5 vezes na velocidade de computação. Sob um diferente ponto de vista, o presente método é capaz de gerar resultados de deformações por interpolação em cada estágio do RK com a mesma qualidade do DAE/MLNA, mas com apenas uma fração do tempo de computação necessário. Há, é claro, na metodologia aqui apresentada, uma maior necessidade de memória para armazenar os resultados de deformações obtidos pela interpolação, no entanto, o custo computacional ainda assim é consideravelmente menor do que aquele para solução do equilíbrio global a cada estágio do RK.

5. RESULTADOS NUMÉRICOS

5.1 Implementação numérica

Para a implementação tanto do modelo viscoelástico apresentado na Seção 2.2, como dos métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos da Seção 3.2 e do algoritmo de acoplamento espaço-tempo do Capítulo 4, foi utilizado o *software* acadêmico de código aberto *FEAP 8.2*. Trata-se de um programa escrito em código FORTRAN para plataforma Linux onde se pode facilmente incluir novas subrotinas com códigos de elementos ou materiais personalizados. Para o presente trabalho, foi desenvolvida uma subrotina com o código do material viscoelástico de Hartmann da Tabela 2.1. É na própria subrotina do material (e, portanto, no nível do ponto de Gauss) que a equação evolutiva (2.20) é resolvida através dos métodos DIRK ou de Euler implícito. A Figura 5.1 mostra de maneira esquemática a sequência de cálculo feita na subrotina.

Esta estrutura de algoritmo é bastante conhecida e amplamente utilizada em códigos comerciais de elementos finitos. A subrotina é chamada para cada ponto de Gauss da malha e, uma vez que ela calcula a tangente consistente e a segunda tensão de Piola-Kirchhoff, estas grandezas voltam para a subrotina do elemento e o cálculo do equilíbrio global da estrutura é realizado.

Cabe mais uma vez ressaltar que a estrutura de integração temporal da deformação através de métodos de alta ordem aqui apresentada é de fácil implementação em programas que utilizam este tradicional algoritmo de cálculo por elementos finitos, pois se trata de uma alteração no código em nível local. Como comentado na Seção 1.1, Ellsiepen e Hartmann [2001] e Hartmann [2002] propuseram também uma metodologia de utilização de métodos de alta ordem para integração da deformação, porém, nestes casos, os métodos DIRK foram aplicados ao nível global no código, de forma que, para cada estágio do método de Runge-Kutta, o equilíbrio global da malha deve ser satisfeito, o que, apesar dos bons resultados, encarece de maneira excessiva o problema do ponto de vista computacional.

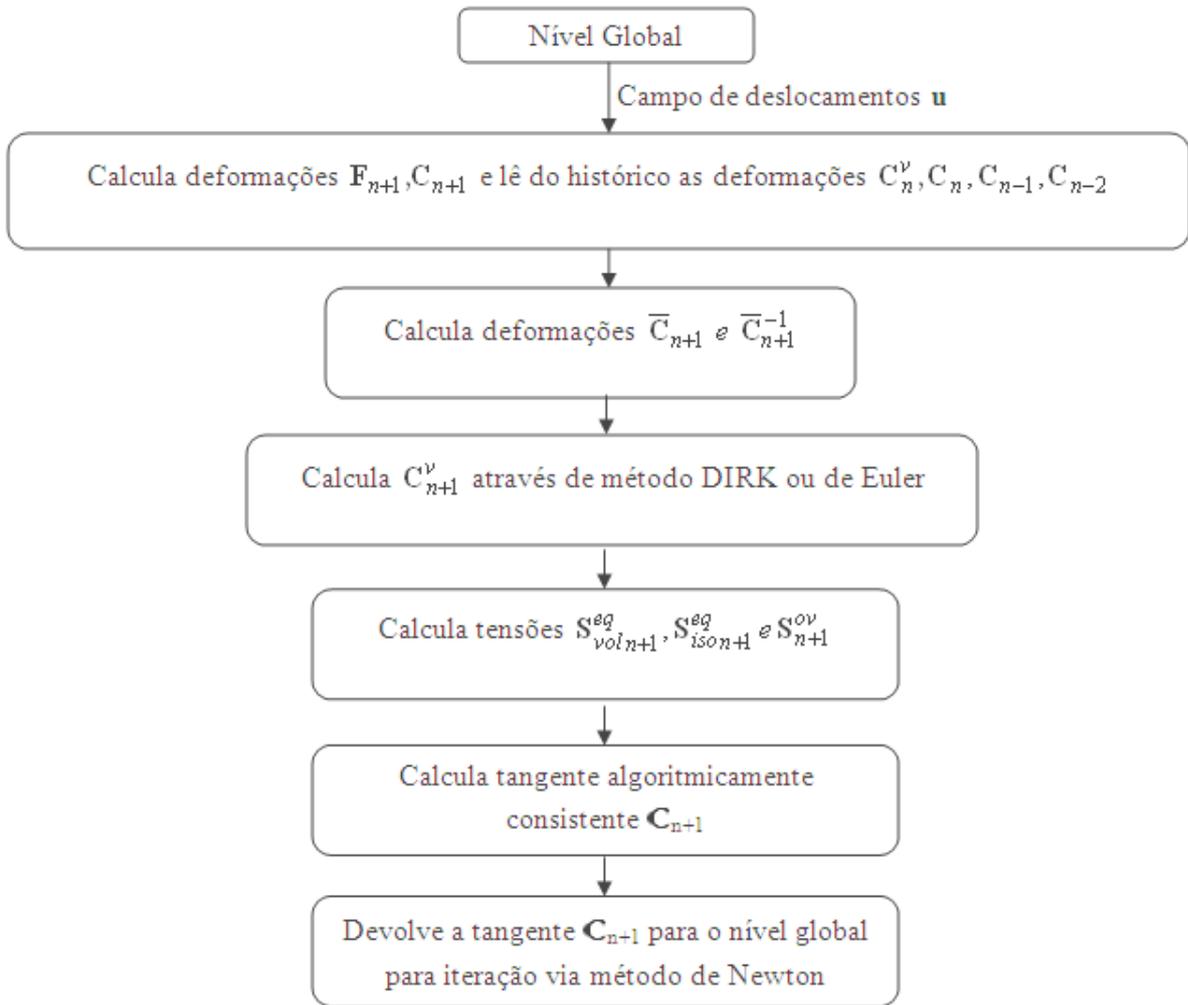


Figura 5.1 – Esquema de cálculo simplificado da subrotina do material.

5.2 Resultados

Nesta seção, o desempenho dos diferentes esquemas DIRK, conforme listados na Tabela 5.1 são analisados. Os métodos foram abreviados baseado na seguinte lógica: DIRK**YZ**, onde **Y** indica a ordem de convergência do método DIRK e **Z** indica o grau do polinômio de interpolação que foi utilizado para a deformação (onde *cons* indica *constante*, *l* indica *linear*, *q* indica *quadrática* e *c* indica interpolação *cúbica*). A sigla **BE** se refere ao método de Euler implícito (*Backward Euler*). Por exemplo: DIRK4q implica em um método DIRK de 4ª ordem e interpolação quadrática da deformação, enquanto DIRK3cons é um método DIRK de 3ª ordem e interpolação constante da deformação ao longo do intervalo de integração.

A Tabela 5.1 resume a hipótese chave deste trabalho. Um método de integração no

Método/ abreviação	Número de estágios s	$\min\{p, q\}$	vs.	p	q	aprox. da deformação
DIRK1/BE	1	1	=	1	p	constante
DIRK2l	2	2	=	2	p	linear
DIRK3cons	3	1	<	3	$p - 2$	constante
DIRK3l	3	2	<	3	$p - 1$	linear
DIRK3q	3	3	=	3	p	quadrática
DIRK4q	5	3	<	4	$p - 1$	quadrática
DIRK4c	5	4	=	4	p	cúbica

Tabela 5.1 – Diferentes métodos DIRK, suas abreviações, número de estágios s , ordem esperada para integração no tempo $\min\{p, q\}$ comparada com ordem nominal p e ordem de aproximação da deformação total q .

tempo de ordem nominal p requer uma aproximação consistente de grau $q = p$ do tensor de deformação total \mathbf{C} , a fim de garantir sua ordem de convergência nominal. Os métodos DIRK que preenchem este requisito estão destacados em cinza na Tabela 5.1. Se, no entanto, uma interpolação de ordem $p - n$ com $n \geq 1$ é utilizada, invariavelmente será observada uma redução para ordem $p - n$ na integração. O foco principal é voltado para os seguintes aspectos:

1. **Ordem de convergência.** Testes de ordem de convergência serão feitos a fim de validar este novo conceito generalizado.

A ordem de convergência é medida para as variáveis deformação total \mathbf{C} , deformação viscoelástica \mathbf{C}^v e tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} , das quais \mathbf{C}^v e \mathbf{S}^{ov} são resultantes diretas da integração no tempo (ver equação (4.22)). A solução de referência \mathbf{X}^{ex} para \mathbf{X} , onde \mathbf{X} pode representar qualquer uma das grandezas tensoriais \mathbf{C} , \mathbf{C}^v ou \mathbf{S}^{ov} , com precisão suficiente é obtida através da utilização de passos de tempo muito pequenos, de modo a tentar garantir que a precisão da solução seja da mesma ordem de grandeza da precisão de máquina. Baseado nesta solução de referência, um erro relativo global é calculado

para as simulações de verificação da teoria, conforme

$$e(\mathbf{X}) = \frac{1}{N_{\text{el}} \cdot N_{\text{gauss}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{el}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{gauss}}} \frac{\|\mathbf{X}(\Delta t) - \mathbf{X}^{\text{ex}}\|}{\|\mathbf{X}^{\text{ex}}\|}, \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{X}(\Delta t)$ é a solução (para \mathbf{C} , \mathbf{C}^v ou \mathbf{S}^{ov}) para um passo de tempo de valor Δt , N_{el} é o número de elementos no domínio e N_{gauss} é o número de pontos de Gauss por elemento.

A seguir, o erro relativo em função do tamanho do passo de tempo Δt será representado em gráficos com dupla escala logarítmica.

2. **Eficiência.** A eficiência é medida em termos do erro calculado por (5.1) em função do tempo total de computação. Desta forma, é possível comparar de maneira imparcial os diferentes esquemas de integração. Adicionalmente, o eventual ganho na velocidade de computação será comparado ao método de Euler implícito, e dependerá da tolerância escolhida para o erro global.
3. **Confiabilidade.** De forma a obter conclusões confiáveis em termos do desempenho dos integradores, simulações serão feitas em uma série de casos significativamente diferentes entre si. Em Eidel e Kuhn [2011] é observado que os métodos de integração temporal demonstram uma qualidade muito maior quando aplicados a exemplos de estados de deformação homogênea (como tração pura, cisalhamento simples ou tensão biaxial) comparado a estados de deformação não-homogênea. Conseqüentemente, Eidel e Kuhn [2011] conclui que análises baseadas em casos de deformações homogêneas tendem a superestimar a ordem real de convergência do problema. A fim de verificar este tipo de fenômeno detectado, os primeiros resultados deste trabalho serão feitos em cima de um caso de deformação homogênea. Uma vez detectada tal superestimativa das ordens de convergência neste caso especial, se partirá para simulações de casos de deformação não-homogêneas:
 - (a) **CASO I:** Deformação homogênea em placa submetida a tração pura, com o objetivo de verificar a conclusão de que estes casos superestimam a ordem de convergência dos métodos de integração;

- (b) **CASO II:** Contração radial de um flange, procurando aplicar a metodologia a um caso de combinação de tensões normais e cisalhantes;
- (c) Placa quadrada com um furo submetida a (1) **CASO III:** carga de tração linearmente crescente, como um segundo caso de tensões combinadas, (2) **CASO IV:** carga senoidal, procurando aplicar não-linearidade às condições de contorno, e (3) **CASO V:** superposição de (1) e (2), com o mesmo objetivo do caso anterior;
- (d) Variação dos parâmetros do material. O caso isocórico (**CASO IV.1**) é considerado aplicando-se $\nu = 0,499239$. Em um segundo momento, a condição isocórica é relaxada e o coeficiente de Poisson utilizado é $\nu = 0,33$ (**CASO IV.2**), procurando avaliar a influência da compressibilidade nos resultados. O cálculo do coeficiente de Poisson, conforme Hartmann [2003], é feito como segue:

$$\nu = \frac{3K - 4(c_{10} + c_{01})}{6K + 2(c_{10} + c_{01})} \quad (5.2)$$

onde o módulo de compressibilidade K é modificado e todos os demais parâmetros $c_{10}, c_{01}, c_{30}, \eta$ são mantidos constantes até que se atinja o valor desejado para ν .

- (e) **CASO VI:** Ovalização de um cilindro, buscando efeitos acoplados de flexão e membrana.

Os esquemas DIRK, juntamente com o modelo de viscoelasticidade finita da Seção 2.2, foram implementados em uma versão estendida do software FEAP 8.2 [Zienkiewicz e Taylor, 2000] e o elemento utilizado em todas as simulações foi de geometria hexaédrica com oito nós Q1P0, que apresenta pressão constante no elemento e aproximação linear para os deslocamentos entre os nós.

5.2.1 Deformação homogênea

Na primeira simulação feita, o intuito é o de verificar se, para o código escrito, haverá uma superestimativa para as ordens de convergência dos métodos de integração quando utilizados juntamente com problemas de deformação homogênea, conforme previsto em Eidel e Kuhn [2011]. Uma tira retangular de dimensões 10 mm por 1 mm é submetida a tração pura conforme Figura 5.2, onde o deslocamento u segue uma relação direta proporcional

com o tempo de sua aplicação de 10:1, gerando, portanto, deformação de 100% ao final de $t = 1$ s. Em outras palavras, $u_r(t) = 10\text{mm/s} \cdot t$. A malha utilizada é de 8 x 20 elementos.

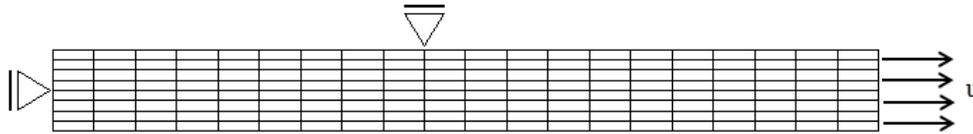


Figura 5.2 – Tira retangular submetida a tração pura.

Os passos de tempo utilizados foram $\Delta t = \{0,001; 0,005; 0,01; 0,02; 0,04; 0,1\}$ s. A solução de referência foi calculada utilizando o método DIRK4c com um tamanho de passo de tempo de $\Delta t = 1,0\text{E-}05$. Os parâmetros do material estão apresentados na Tabela 5.2 e foram retirados de Hartmann [2003].

c_{01} (N/mm ²)	c_{10} (N/mm ²)	c_{30} (N/mm ²)	K (N/mm ²)	μ (N/mm ²)	η_0 (Ns/mm ²)
0,5	0,264	0,5	1000,0	0,2	1,0

Tabela 5.2 – Contração radial de um flange: parâmetros viscoelásticos do material.

Resultados e discussão:

Os diagramas da Figura 5.3 mostram os gráficos de convergência para as grandezas deformação total \mathbf{C} e tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} .

Ao analisar o gráfico para $e(\mathbf{C})$ na Figura 5.3, logo podemos notar que os métodos de Euler implícito e DIRK3cons apresentam ordem de convergência unitária para todos os tamanhos de passo de tempo utilizados. Os métodos DIRK2l, DIRK3l, DIRK3q e DIRK4q apresentaram, para o trecho entre os passos de tempo $\Delta t = 0,1$ s e $\Delta t = 0,04$ s, ordem de convergência igual a 8, enquanto DIRK4c, para este mesmo trecho, apresentou ordem 4. Para os demais trechos, a precisão da solução pareceu não ser influenciada pela redução nos passos de tempo, pois o erro já era da ordem de precisão da máquina (entre 1,0E-14 e 1,0E-15).

Já os resultados de ordem de convergência para a tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} , apesar de parecerem mais condizentes com a teoria da Seção 4.2, ainda apresentam certas não confor-

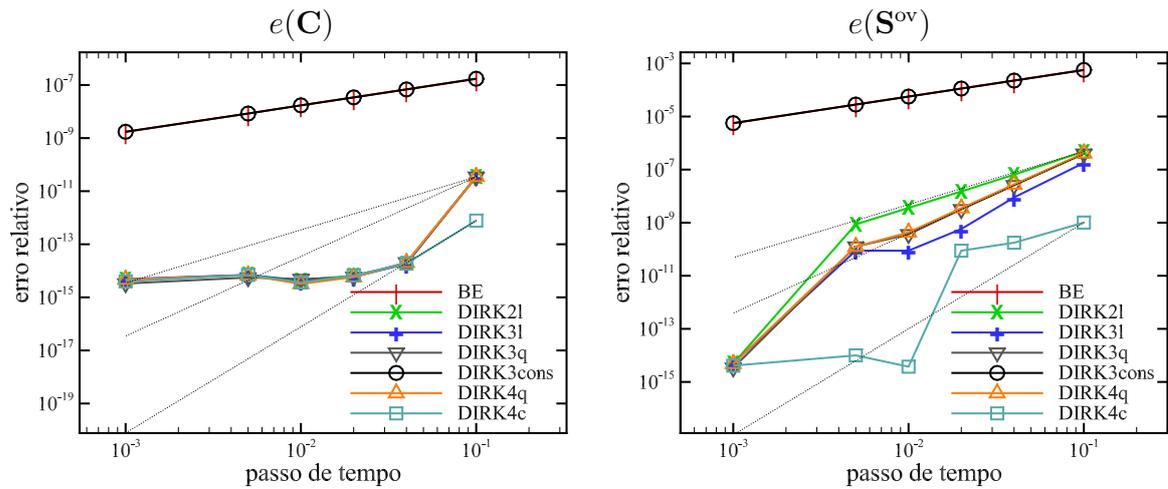


Figura 5.3 – CASO I: erro *versus* Δt analisado em $t = 1$ s para diferentes integradores. $\max \Delta t = 0,1$ s, $\min \Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

midades, como por exemplo o fato de DIRK3l ter ordem de convergência igual a 3, quando segundo a teoria não poderia ser maior do que 2. Os resultados de DIRK4c para os três maiores passos de tempo (dois trechos mais à direita da sua curva) são de ordem de convergência 2 e 1, respectivamente. A explicação para este comportamento tão pobre de um método de 4ª ordem está no fato de a deformação total (que é dado de entrada para cálculo de \mathbf{S}^{ov}), para estes mesmos dois trechos, já sofrer prejuízo por ser da ordem de precisão de máquina ($e(\mathbf{C}) = 1,87\text{E-}14$ para $\Delta t = 0,04$ s).

De fato, casos de deformação homogênea parecem não ser uma abordagem adequada e confiável para avaliação de ordem de convergência de métodos de integração de altas ordens, e a principal explicação para esta conclusão está no fato de que, por serem casos muito simples, as deformações calculadas via métodos de altas ordens apresentam erros baixíssimos mesmo para passos de tempo relativamente grandes, comprometendo a qualidade dos resultados. Esta conclusão vai ao encontro das constatações feitas por Eidel e Kuhn [2011].

Na sequência serão analisados casos de deformações complexas não-homogêneas com o intuito de verificar as afirmações de consistência feitas na Seção 4.2.

5.2.2 Contração radial de um flange

CASO II: Carga linearmente crescente

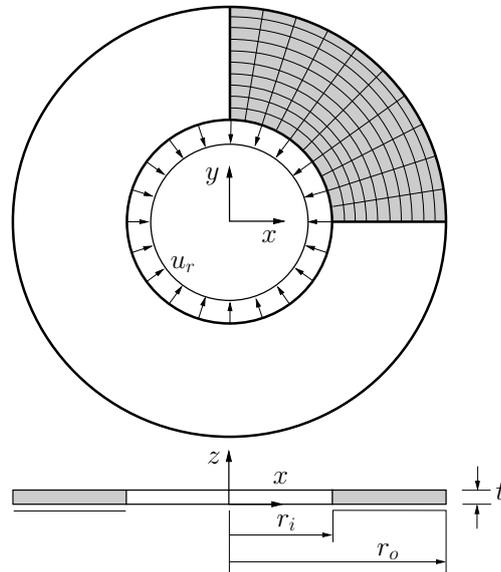


Figura 5.4 – Contração radial de um flange através de deslocamentos prescritos em sua circunferência interna.

Neste conjunto de testes, foi considerada a contração radial de um flange de raio interno $r_i = 20$ mm, raio externo $r_o = 40$ mm e espessura $t = 1$ mm, conforme mostrado na Figura 5.4. Os parâmetros do material para o modelo viscoelástico da Tab 2.1 são mostrados na Tab 5.2. A simetria do problema foi explorada, de modo que somente um quarto da estrutura foi modelado. Como visualizado na Figura 5.4, o sistema foi discretizado em 10 elementos na direção circunferencial, 10 elementos na direção radial e 1 elemento na espessura. Iniciando com $t = 0$ s, o diâmetro interno é deslocado continuamente na direção radial, através de deslocamentos prescritos, até um deslocamento total de $u_r = 1,5$ mm no tempo $t = 1,5$ s (portanto, $u_r(t) = 1\text{mm/s} \cdot t$).

Os passos de tempo utilizados foram $\Delta t = \{0,025; 0,05; 0,075; 0,1; 0,125; 0,25\}$ s. A solução de referência foi calculada utilizando o método DIRK4c com um tamanho de passo de tempo de $\Delta t = 1,0\text{E-}04$.

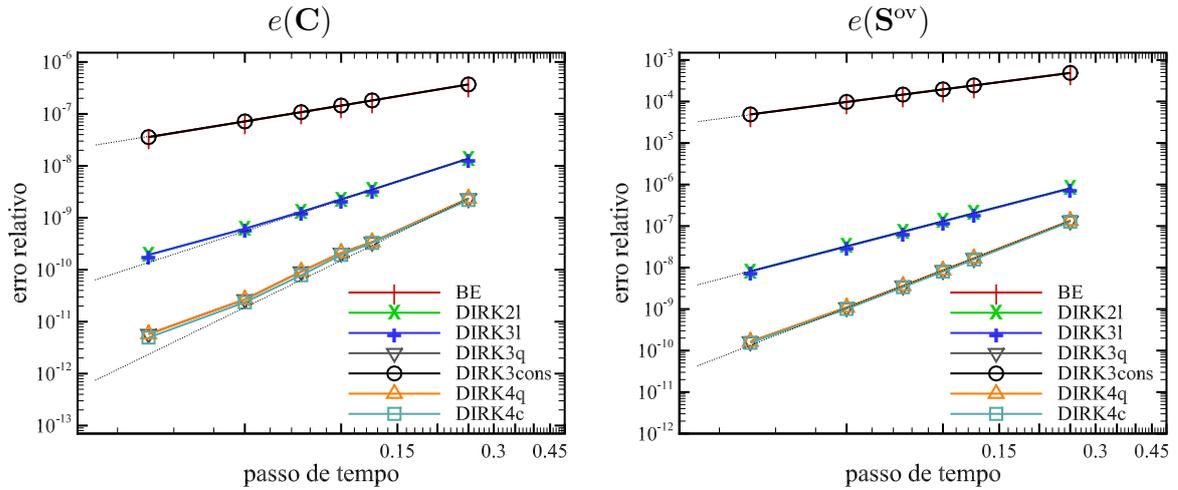


Figura 5.5 – CASO II: erro *versus* Δt analisado em $t = 1,5$ s para diferentes integradores. $\max \Delta t = 0,25$ s, $\min \Delta t = 0,025$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

Resultados e discussão:

Os resultados de convergência são mostrados na Tabela 5.3 e nos diagramas da Figura 5.5. Neles, conclui-se que o método DIRK3 de 3ª ordem atinge sua ordem de convergência nominal apenas para uma interpolação quadrática (e, portanto, consistente) da deformação total (DIRK3q). A interpolação linear da deformação, no entanto (DIRK3l), induz um erro local de aproximação para a deformação total de ordem 2, a qual, por sua vez, leva a uma redução na integração temporal para ordem 2. Alinhado a estes resultados está a redução de ordem para ordem 1, a qual ocorre quando se considera uma deformação constante ao longo do intervalo de integração (DIRK3cons), ou seja, $\mathbf{C} := \mathbf{C}_{n+1}$.

Estes resultados de simulações estão de acordo com as considerações feitas na Seção 4 e com a formalização proposta na equação (4.4). A ordem de aproximação da deformação total \mathbf{C} ao longo do tempo é um limitador para a ordem de convergência de \mathbf{C}^v , \mathbf{S}^{ov} e \mathbf{S} .

O único resultado que pareceu não estar de acordo com estas previsões foi o fato de o método DIRK4c ter mostrado ordem de convergência 3, ainda que uma interpolação de ordem cúbica tenha sido utilizada. Nos próximos resultados serão introduzidos alguns fatores com o fim de gerar não-linearidades mais acentuadas através da aplicação de condições de contorno mais complexas do que a utilizada neste último caso.

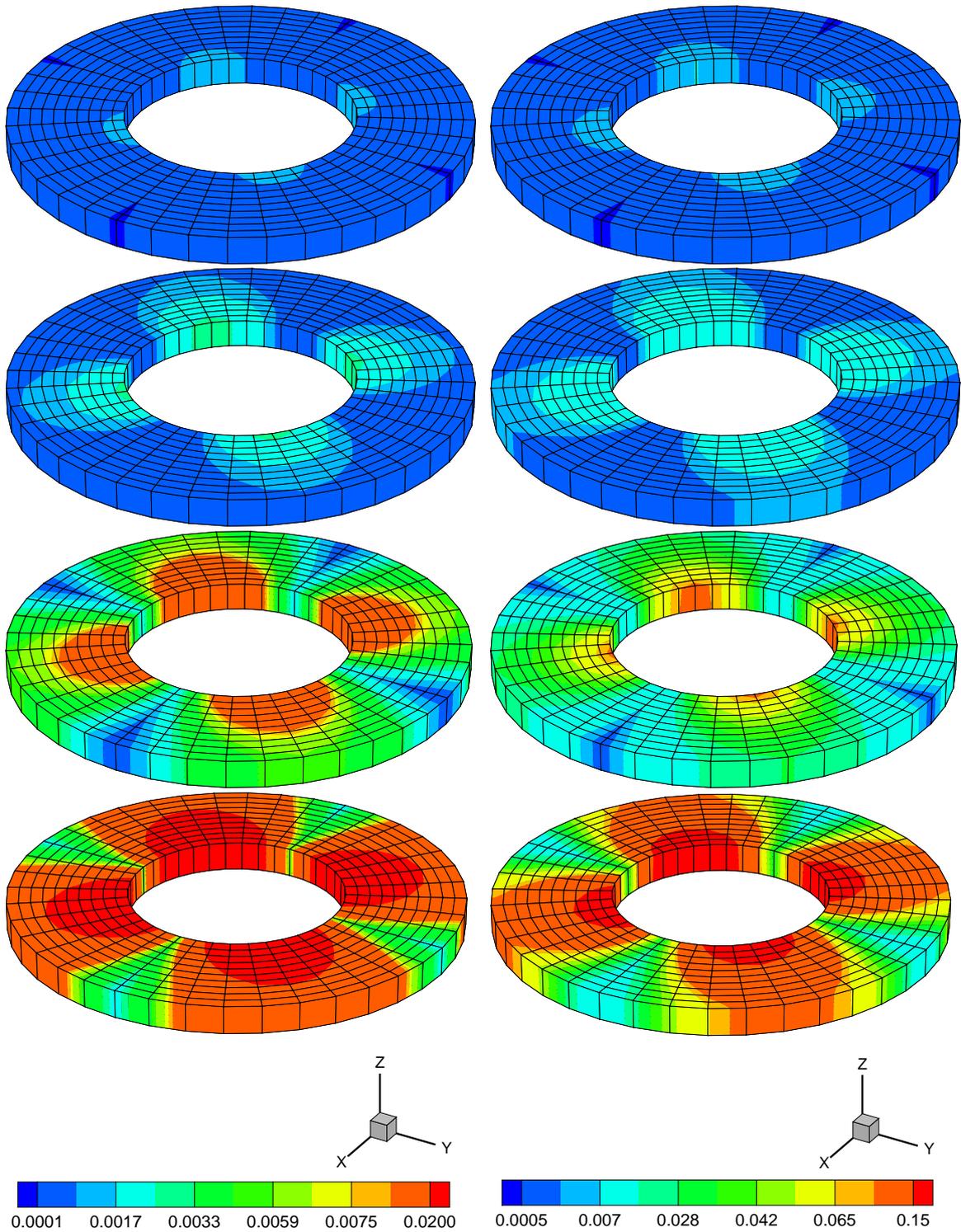


Figura 5.6 – CASO II. Coluna esquerda: tensão viscoelástica S_{xy}^{ov} (N/mm²).

Coluna direita: tensão total S_{xy} (N/mm²) em $t = \{0, 05; 0, 1; 0, 5; 1, 5\}$ s de cima para baixo.

tempo $t = 1.5$ s				
erro	$e(\mathbf{C})$	$e(\mathbf{C}^v)$	$e(\mathbf{S}^{ov})$	$e(\mathbf{S})$
BE	1,01	1,00	1,00	1,00
DIRK2l	1,94	1,93	1,93	1,94
DIRK3cons	1,01	1,00	1,00	1,00
DIRK3l	2,14	1,76	1,73	1,94
DIRK3q	2,82	2,96	2,95	2,91
DIRK4q	2,82	2,96	2,95	2,91
DIRK4c	2,80	2,93	2,93	2,89

Tabela 5.3 – CASO II: ordem de convergência para diferentes métodos DIRK.

A Figura 5.5 mostra que todos os métodos DIRK utilizados em conjunto com uma aproximação consistente para a deformação apresentam significativa melhoria de desempenho quando comparados com o método de Euler implícito. A fim de uma comparação apropriada entre os métodos, suas eficiências foram medidas em termos do erro na tensão viscosa *versus* o tempo total de computação. Como resultado, os métodos DIRK de altas ordens se mostraram mais eficientes do que o método de Euler implícito. Em teoria, quanto maior a ordem do método DIRK, mais eficiente será o método. No entanto, uma vez que parece haver uma limitação a ordem 3 neste exemplo em particular, DIRK4c não poderá desempenhar melhor do que DIRK3q. O primeiro apresentou mesma ordem de convergência que o segundo, mas como DIRK4 é um método com 5 estágios, ao invés de 3, foi natural que ele se mostrasse menos eficiente que DIRK3.

A melhora na eficiência é sustentada por fatores de aceleração mostrados na Tab 5.4. Nesta tabela, os tempos totais de computação para cada método foram normalizados pelo tempo total de computação do método de Euler implícito, o qual serve como base de comparação por ser o método amplamente utilizado em códigos de MEF. Por esta razão, os fatores de aceleração para Euler serão sempre iguais à unidade, e valores maiores que ele indicam um ganho no tempo de computação, enquanto que valores menores indicam perda. Um resultado de fator de aceleração de 30, por exemplo, indica que o método levou 30 vezes menos tempo que o método de Euler para obter uma solução de mesma ordem de erro que

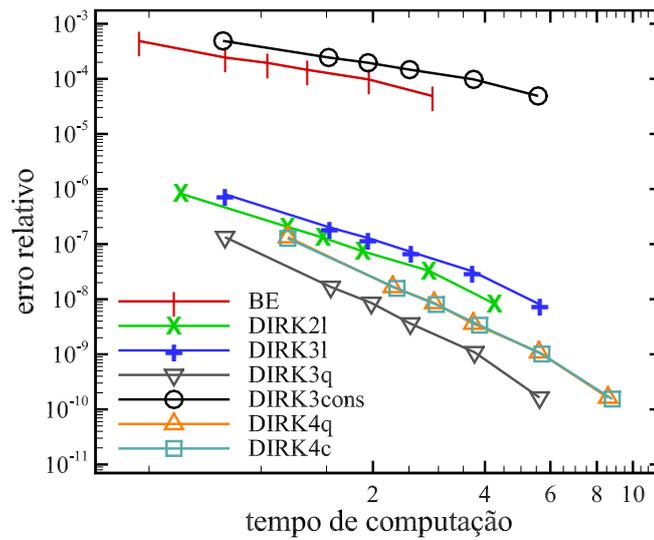


Figura 5.7 – CASO II: eficiência para carregamento linearmente crescente em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo de computação (s) para resultados em $t = 1,5$ s.

este último.

tol. erro $e(\mathbf{S}^{ov})$	fator de aceleração	
	1,0E-04	1,0E-06
BE	1,0	1,0
DIRK2l	31,7	250,3
DIRK3cons	0,5	0,5
DIRK3q	19,0	327,8
DIRK4c	13,6	225,7

Tabela 5.4 – CASO II: fatores de aceleração dos métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculo do erro para $e(\mathbf{S}^{ov})$ em $t = 1,5$ s.

Analizando a Tabela 5.4 se nota que até mesmo o método DIRK2l já mostra melhora considerável em relação ao método de Euler implícito (BE), sugerida por um fator de aceleração de 30 para uma tolerância de erro de 1,0E-4. Lembrando que quanto menor for a tolerância para o erro, mais acentuados serão os fatores de aceleração. O pior resul-

tado de desempenho foi obtido no caso de o método DIRK3 ser utilizado com aproximação constante da deformação no intervalo de integração $\mathbf{C} := \mathbf{C}_{n+1}$ (DIRK3cons). A ordem de convergência neste caso será de 1, tal qual o método de Euler, mas como DIRK3 é um método multi-estágio de 3 estágios, seu desempenho em geral será ainda pior que o método de Euler (ver Figura 5.7).

5.2.3 Placa quadrada com furo

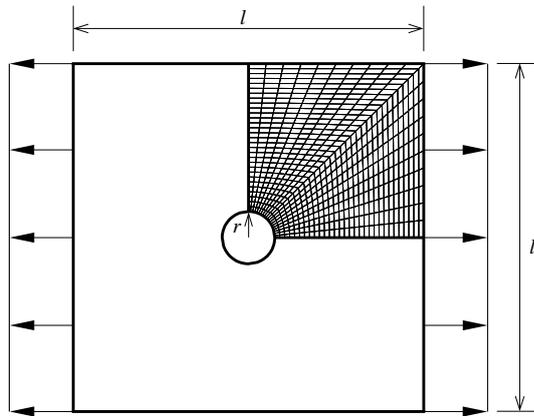


Figura 5.8 – Modelo de elementos finitos para a placa com furo. Geometria, condições de contorno e discretização de um oitavo da estrutura.

CASO III: Carga linearmente crescente

Neste exemplo será considerada a tração de uma placa quadrada com um furo circular em seu centróide. A geometria da placa é dada por um comprimento $l = 100$ mm e espessura $t = 2$ mm. O raio do furo circular é de $r = 3$ mm. A malha utilizada tem 4 elementos na direção radial e 8 elementos na direção circunferencial.

Iniciando em tempo $t = 0$ s, a placa é tracionada através do deslocamento prescrito de uma das bordas até um total de $u_r = 15$ mm no tempo final $t = 1,5$ s. Isto quer dizer uma velocidade de aplicação de carga de $u_r(t) = 10$ mm/s $\cdot t$. Explorando a simetria da estrutura, apenas um quarto da mesma foi modelada e a malha é mostrada na Figura 5.8. O modelo de material viscoelástico utilizado é o mesmo que o do exemplo anterior e seus parâmetros são mostrados na Tabela 5.2. Os passos de tempo considerados nas simulações

são $\Delta t = \{0,025; 0,05; 0,075; 0,1; 0,125; 0,25\}$ s e a solução de referência foi obtida com $\Delta t = 1,0E-04$ s com o método DIRK4c.

Resultados e discussão:

A análise das ordens de convergência está resumida na Tabela 5.5 e nos diagramas da Figura 5.9. A exemplo do CASO II, pode-se observar que o método DIRK3 apresenta ordem de convergência 3 somente se interpolação quadrática é utilizada. O método DIRK2l, por sua vez, por ser de segunda ordem, apresenta ordem de convergência igual a 2 para uma interpolação linear da deformação total. Isto sustenta a linha de raciocínio do presente trabalho de que um método de integração de ordem p requer uma aproximação da deformação de mesma ordem $q = p$. Se polinômios de menores ordens $q < p$ são utilizados, será notada uma queda na ordem de convergência do método de integração. Isto é claramente visto através dos resultados do método DIRK3cons, quando um método de terceira ordem atinge apenas ordem unitária se a deformação for interpolada como constante ao longo do intervalo de integração.

tempo $t = 1,5$ s				
erro	$e(\mathbf{C})$	$e(\mathbf{C}^v)$	$e(\mathbf{S}^{ov})$	$e(\mathbf{S})$
BE	1,00	1,00	1,00	1,00
DIRK2l	1,78	1,56	1,91	1,73
DIRK3cons	1,00	1,00	1,00	1,00
DIRK3l	1,78	1,55	1,91	1,69
DIRK3q	2,61	2,50	2,94	2,72
DIRK4q	2,61	2,50	2,94	2,67
DIRK4c	2,69	2,47	2,94	2,67

Tabela 5.5 – CASO III: ordem de convergência de diferentes grandezas para diferentes métodos DIRK. Resultados de aproximações consistentes da deformação estão destacados.

O método DIRK4c mostrou mais uma vez um limite superior de 3 para sua ordem de convergência, a exemplo do já ocorrido para o caso II da contração do flange. Esta

ordem de aproximadamente 3 para a deformação total indica que polinômios cúbicos não são superiores aos quadráticos para a interpolação da deformação total, neste problema em particular. Como poderá ser visto no próximo exemplo, uma possível explicação está no fato de que a não-linearidade deste PVI em particular não é acentuada o suficiente. No próximo conjunto de simulações, não-linearidades mais fortes serão introduzidas através da aplicação de condições de contorno mais complexas do que as aqui aplicadas.

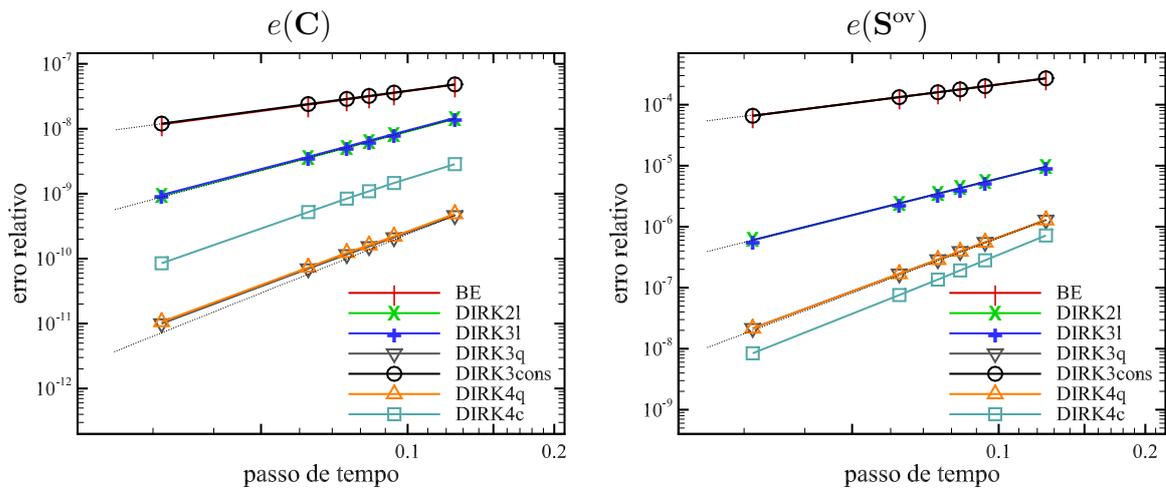


Figura 5.9 – CASO III: erro *versus* Δt em $t = 1,5$ s para diferentes integradores. Máximo $\Delta t = 0,25$ s. Mínimo $\Delta t = 0,025$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$.
Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

Os resultados das simulações estão de acordo com as considerações teóricas do Capítulo 1 do presente trabalho. A ordem de aproximação da deformação total \mathbf{C} é um limite superior para a ordem de convergência da deformação viscoelástica \mathbf{C}^v e da tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} .

A Figura 5.9 mostra que todos os métodos DIRK com aproximação consistente da deformação mostraram um ganho na ordem de convergência em comparação com o método de Euler. A eficiência dos métodos foi medida em termos do erro na tensão viscosa *versus* tempo total de computação, o que pode ser visto na Figura 5.11. Como resultado, métodos DIRK de alta ordem são mais eficientes que o método de Euler e a tendência é que, quanto maior a ordem do método DIRK, mais eficiente ele será. Esta tendência é verificada para um erro na ordem de $1,0E-04$, mas se torna ainda mais pronunciada para erros menores. DIRK3cons é, mais uma vez, o método com pior desempenho, uma vez que combina baixa

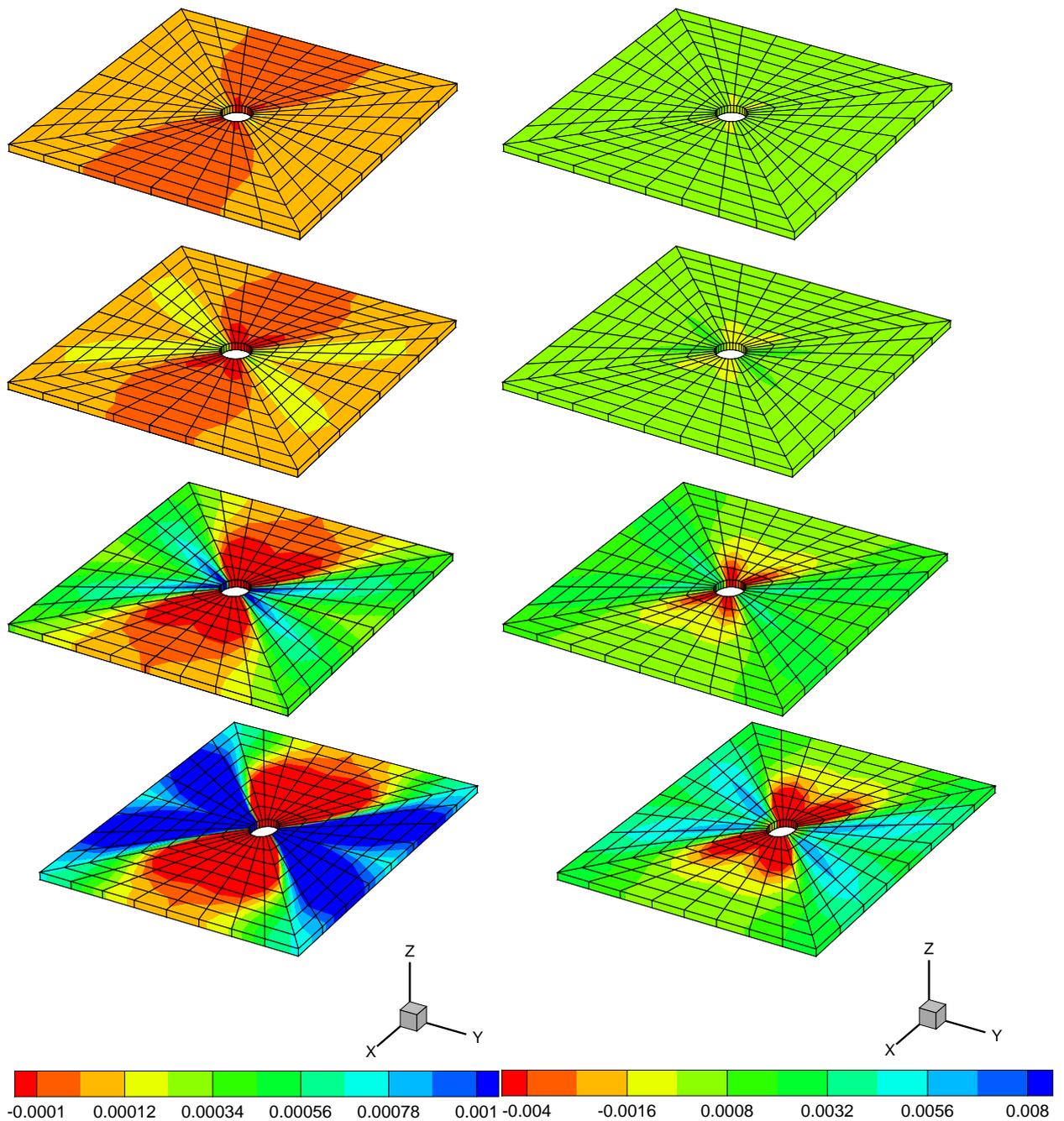


Figura 5.10 – CASO III. Coluna esquerda: tensão viscoelástica S_{xy}^{ov} (N/mm^2). Coluna direita: tensão total S_{xy} (N/mm^2) em $t = \{0, 05; 0, 1; 0, 5; 1, 5\}$ s de cima para baixo.

ordem de convergência com alto custo computacional devido ao seu método de 3 estágios. Isto o torna menos eficiente até do que o método de Euler.

Para um erro de $1,0\text{E}-04$ para a tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} , a relação entre os fatores de aceleração segue a ordem $11,8(\text{DIRK2l}) > 7,6(\text{DIRK3q}) > 5,5(\text{DIRK4c})$. Esta relação

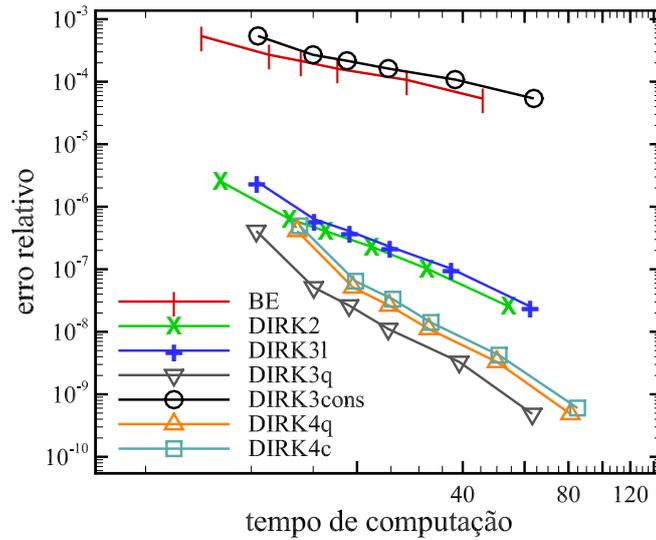


Figura 5.11 – CASO III: eficiência para carregamento linearmente crescente em termos do erro $e(\mathbf{S}^{\text{ov}})$ versus tempo de computação (s) para resultados a $t = 1,5$ s.

tol. do erro $e(\mathbf{S}^{\text{ov}})$	1,0E-04	1,0E-06
	aceleração	aceleração
BE	1,0	1,0
DIRK2l	11,8	179,2
DIRK3cons	0,7	0,7
DIRK3q	7,6	226,2
DIRK4c	5,5	164,3

Tabela 5.6 – CASO III: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 1,5$ s para $e(\mathbf{S})$.

indica que, neste caso, a alta ordem não prevalece frente ao gasto computacional devido a métodos de 2, 3 e 5 estágios. Mesmo assim, todos os métodos apresentaram fatores de aceleração consideravelmente mais vantajosos do que o método de Euler. O método que desempenhou melhor foi DIRK2l, com um fator de 11,8, indicando que, para uma mesma tolerância de erro no resultado de $1,0\text{E-}04$, este método gasta computacionalmente um tempo

11,8 vezes menor do que o método de Euler necessitaria. Para erros ainda menores, como $1,0E-06$, os métodos DIRK3q e DIRK4c desempenham melhor do que DIRK2l. Para esta tolerância de erro, todos os métodos mostraram um fator de aceleração entre 160 e 230 quando comparados com o método de Euler.

Os resultados de eficiência para os métodos DIRK e o método de Euler em termos dos fatores de aceleração estão mostrados na Tabela 5.6.

CASO IV.1: Carga senoidal - material incompressível

Para este caso, a mesma discretização da placa com furo da Figura 5.8 foi utilizada, porém o carregamento linear com o tempo foi substituído por um carregamento senoidal de acordo com $u(t) = 10 \text{ mm/s} \cdot \text{sen}(2/3\pi t)$. A finalidade de aplicar uma condição de contorno diferente é a de introduzir não-linearidade mais acentuada ao problema.

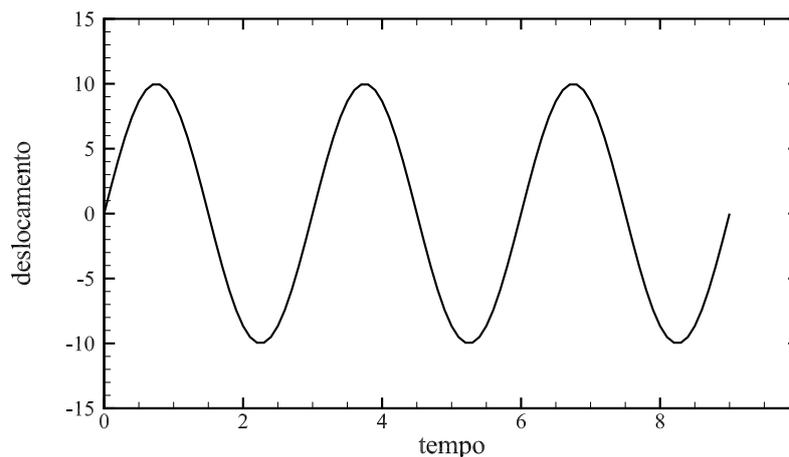


Figura 5.12 – Carga senoidal aplicada à placa com furo.

Da mesma forma que no casos II e III, a solução de referência foi calculada utilizando-se um passo de tempo de $\Delta t = 1,0E-04 \text{ s}$ e método DIRK4c. Os passo de tempo utilizados para as simulações e cálculo dos erros estão entre $\Delta t = 0,001 \text{ s}$ e $\Delta t = 0,10 \text{ s}$.

Resultados e discussão:

Os resultados de convergência estão mostrados na Figura 5.13 e Tabela 5.7. Em contraste com o exemplo anterior, o método DIRK4c agora atinge ordem de convergência superior a 3,2 (quando antes sequer alcançava ordem 3). Uma vez que a única modificação feita entre o último e o atual exemplo foi a variação do carregamento com o tempo (de

linearmente crescente para senoidal), conclui-se que a interpolação via polinômio de ordem cúbica é mais adequada, para este caso, do que a quadrática, no sentido de aproximar melhor a variação da deformação total ao longo do tempo. Os resultados de obtenção de ordem 3,2 do método DIRK4c e ordem 3 do método DIRK4q em comparação com o caso anterior sustentam esta hipótese. Em outras palavras, a não-linearidade da deformação ao longo do tempo se tornou mais acentuada, fazendo com que um polinômio de maior grau a aproxime mais fielmente.

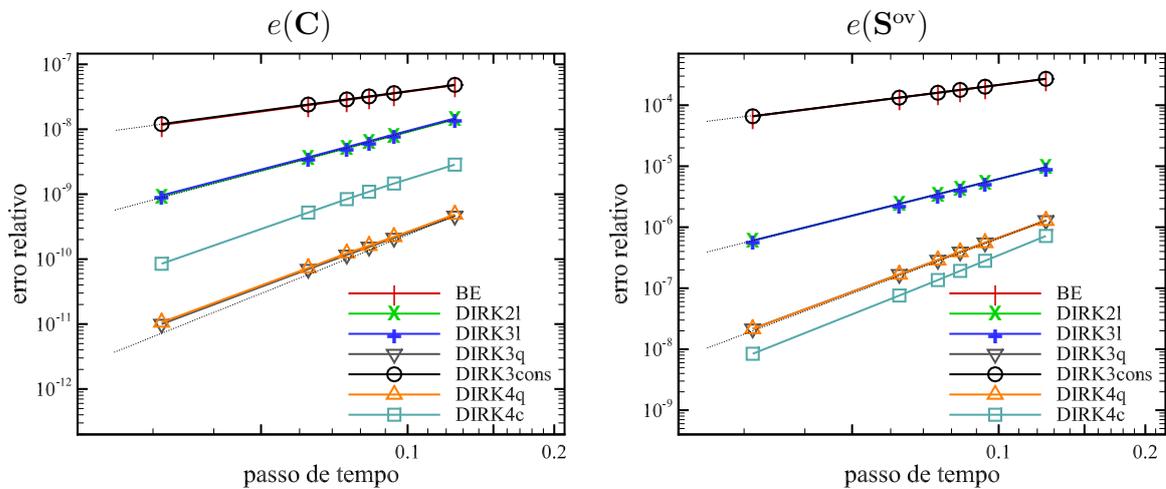


Figura 5.13 – CASO IV.1: erro *versus* Δt analisado em $t = 17,25$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s.

Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

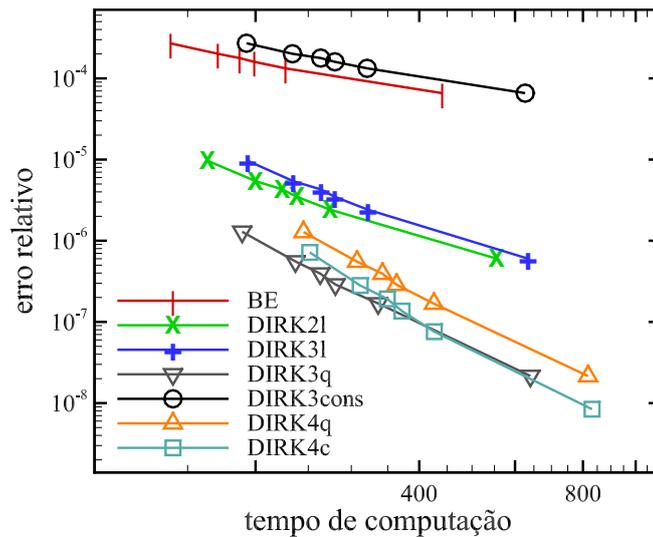
Similarmente, todos os outros métodos mostraram um comportamento quanto à ordem de convergência igual àqueles previstos na Tabela 5.1. As grandezas \mathbf{C} , \mathbf{C}^v , \mathbf{S}^{ov} e \mathbf{S} mostraram o mesmo padrão de erro que o observado para os exemplos anteriores Tabela 5.7.

O diagrama da Figura 5.14 mostra a eficiência numérica em termos do erro na tensão viscosa *versus* tempo total de computação. Ele revela que, para $1 \leq p \leq 4$, quanto maior o grau do método DIRK, maior sua eficiência. Neste caso, no entanto, pode ser possível que o método DIRK4c, pelo fato de ser um método mais custoso (5 estágios) do que o método DIRK3q (3 estágios), desempenhe pior do que este último.

A Tabela 5.8 mostra os fatores de aceleração dos métodos DIRK em comparação com o método de Euler. Para tolerâncias de erro de $1,0E-04$, fatores entre 4 e 6 são obtidos, e para erros de $1,0E-06$, os fatores de aceleração estão na faixa entre 30 a 60 para todos

erro	$e(\mathbf{C})$		$e(\mathbf{C}^v)$		$e(\mathbf{S}^{ov})$		$e(\mathbf{S})$	
	8,75 s	17,25 s	8,75 s	17,25 s	8,75 s	17,25 s	8,75 s	17,25 s
BE	1,00	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
DIRK2l	1,92	1,89	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00
DIRK3cons	0,99	1,00	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
DIRK3l	1,93	1,89	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00
DIRK3q	2,83	2,61	2,91	2,90	2,94	2,95	2,94	2,95
DIRK4q	2,72	2,61	2,91	2,90	2,94	2,95	2,94	2,95
DIRK4c	2,49	2,50	3,24	3,24	3,23	3,23	3,24	3,24

Tabela 5.7 – CASO IV.1: ordem de convergência para diferentes métodos.

Figura 5.14 – CASO IV.1: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ em relação ao tempo total de computação (s) no tempo $t = 17,25$ s.

métodos DIRK com $p \geq 2$.

CASO IV.2: Carga senoidal - material compressível

Será estudada agora a influência de uma pequena alteração nos parâmetros do material. O módulo de compressibilidade será definido como $K = 3 \text{ N/mm}^2$, o que, de acordo com a equação (5.2), leva a um coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, relaxando a condição de quase

tol. do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$	fator de aceleração	
	1,0E-04	1,0E-06
BE	1,0	1,0
DIRK2l	4,4	25,0
DIRK3cons	0,7	0,7
DIRK3q	5,4	52,8
DIRK4c	3,8	46,0

Tabela 5.8 – CASO IV.1: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 17, 25$ s.

incompressibilidade do material.

Os resultados das simulações deste caso serão comparados com aqueles do caso isocórico IV.1. Será monitorado o comportamento da deformação C_{xy} ao longo do tempo em todos os pontos de Gauss do elemento adjacente ao furo, localizado no plano vertical de simetria da placa. Nesta região, o gradiente das deformações cisalhantes é bastante acentuado, chegando a zero no plano de simetria e sendo máximas a um ângulo de 45° à direção do carregamento. Como se pode ver na Figura 5.15 se nota uma diferença bastante acentuada no comportamento das deformações cisalhantes quando comparados os casos compressível e incompressível entre si.

O comportamento da deformação cisalhante é qualitativamente diferente, conforme visto na Figura 5.15. Para o caso incompressível, esta deformação segue o mesmo comportamento senoidal do carregamento prescrito, enquanto que para o caso compressível este componente já não é mais senoidal. Adicionalmente, para o caso compressível, a deformação sequer apresenta a característica de periodicidade inerente ao seno. Os caminhos da deformação para o caso compressível podem ser aproximados de maneira mais fiel ao se utilizar polinômios de grau cúbico em detrimento do quadrático, conforme pode ser visto, para $e(\mathbf{C})$ na Tabela 5.9 para DIRK4c (ordem de convergência para \mathbf{C} em $t = 17, 25$: DIRK4q= 2, 68, DIRK4c= 2, 98).

erro	$e(\mathbf{C})$		$e(\mathbf{C}^v)$		$e(\mathbf{S}^{ov})$	
	8,75 s	17,25 s	8,75 s	17,25 s	8,75 s	17,25 s
BE	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02
DIRK2l	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00
DIRK3cons	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02
DIRK3l	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00
DIRK3q	2,67	2,68	2,94	2,95	2,95	2,95
DIRK4q	2,67	2,68	2,94	2,94	2,94	2,95
DIRK4c	3,03	2,98	3,58	3,58	3,64	3,64

Tabela 5.9 – CASO IV.2: ordem de convergência para diferentes métodos DIRK.

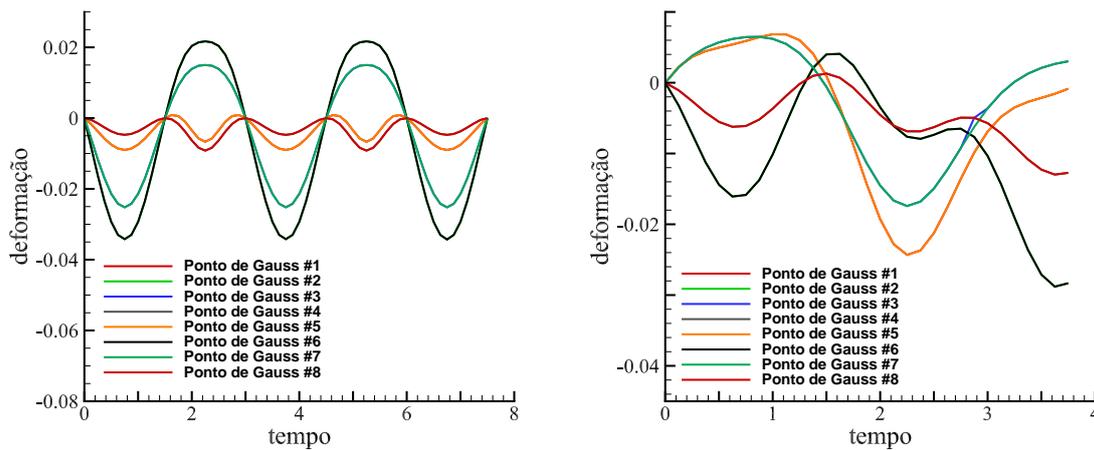


Figura 5.15 – CASO IV.2. Evolução da deformação C_{xy} ao longo do tempo para os pontos de Gauss localizados na borda superior do furo central para **esquerda:** material viscoelástico incompressível ($\nu = 0,499$) e **direita:** material viscoelástico compressível ($\nu = 0,3$).

A ordem de convergência para o método DIRK4c para as grandezas \mathbf{C}^v e \mathbf{S}^{ov} atingiram valores de 3,58 e 3,64, respectivamente, configurando um aumento em relação ao caso IV.1, onde estes valores foram de 3,24 e 3,23. Partindo-se do princípio de que a única diferença entre estes dois casos foi a relaxação da condição de quase incompressibilidade do material, que por consequência levou a comportamentos mais complexos (mais não-lineares)

para as deformações no caso compressível, conclui-se que este foi o fator decisivo para melhora do desempenho do método DIRK4c. Pode-se dizer que o polinômio de grau 3 aproximou melhor do que o polinômio de grau 2 o comportamento da deformação ao longo do intervalo de deformação.

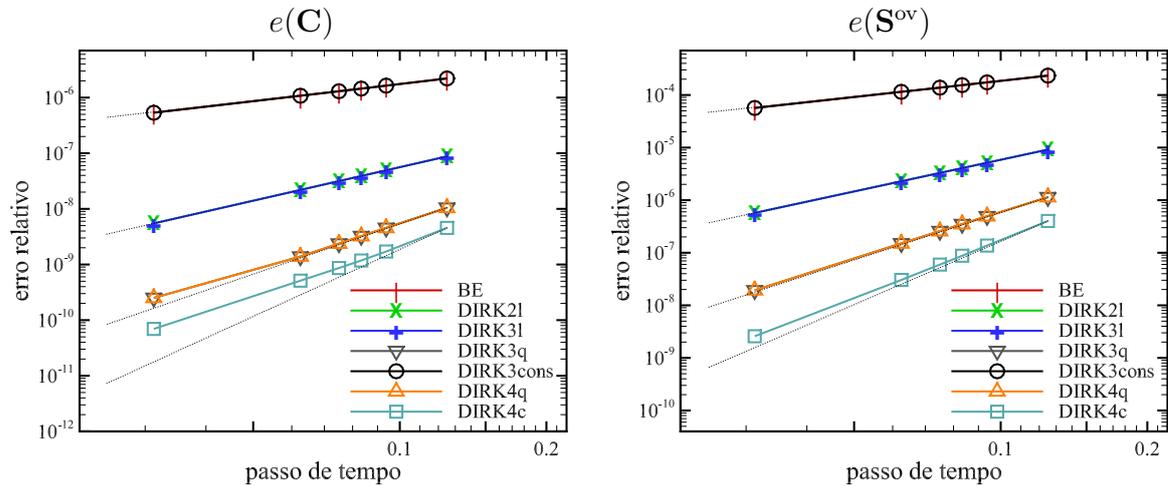


Figura 5.16 – CASO IV.2: erro *versus* Δt analisado em $t = 17,25$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s.

Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

O diagrama da Figura 5.17 mostra a eficiência numérica em termos do erro na tensão viscosa *versus* tempo total de computação. Nota-se que, para $1 \leq p \leq 4$, quanto maior o grau do método DIRK, melhor será a eficiência da simulação.

Na Tabela 5.10 estão explicitados os valores de fator de aceleração dos métodos DIRK comparados com o método de Euler. Foi observado um fator de aceleração de no mínimo 4 para todos métodos com $p \geq 2$.

CASO V: Superposição de carga linearmente crescente com senoidal

Neste caso será considerado o carregamento combinado dos deslocamentos prescritos linearmente crescentes e puramente senoidal, resultando ao mostrado na Figura 5.18. A ideia de se performar este exemplo é no mesmo sentido anterior de acentuar a não-linearidade do comportamento das deformações totais ao longo do tempo, mas neste caso sem ferir a propriedade de quase incompressibilidade do material.

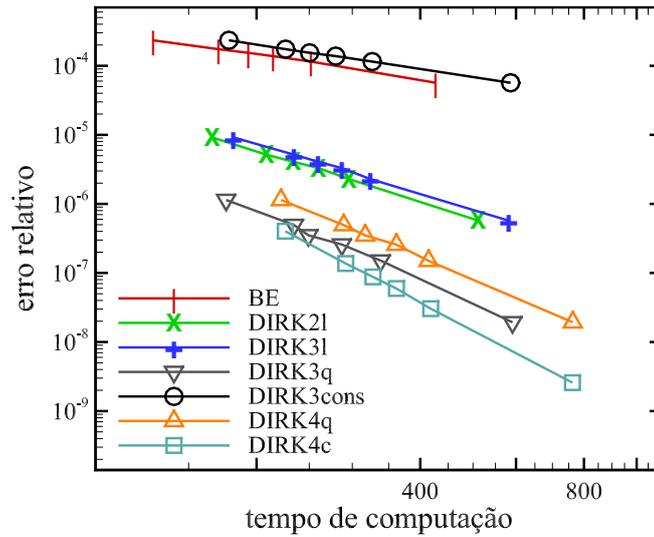


Figura 5.17 – CASO IV.2: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{\text{ov}})$ versus tempo total de computação (s) no tempo $t = 17, 25$ s.

tol. do erro $e(\mathbf{S}^{\text{ov}})$	fator de aceleração	
	1,0E-04	1,0E-06
BE	1,0	1,0
DIRK21	4,4	21,6
DIRK3cons	0,8	0,5
DIRK3q	7,3	48,1
DIRK4c	4,6	48,7

Tabela 5.10 – CASO IV.2: fatores de aceleração para diferentes métodos comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro. Cálculos no tempo $t = 17, 25$ s.

$$u(t) = 10 \text{ (mm/s)} \cdot t + 20 \text{ (mm/s)} \cdot \text{sen} \left(\frac{2}{3} \pi t \right) \quad (5.3)$$

Mais uma vez a solução de referência foi simulada utilizando-se um passo de tempo de $\Delta t = 1,0\text{E-}04$ s e método de integração DIRK4c e os parâmetros listados na Tabela 5.2.

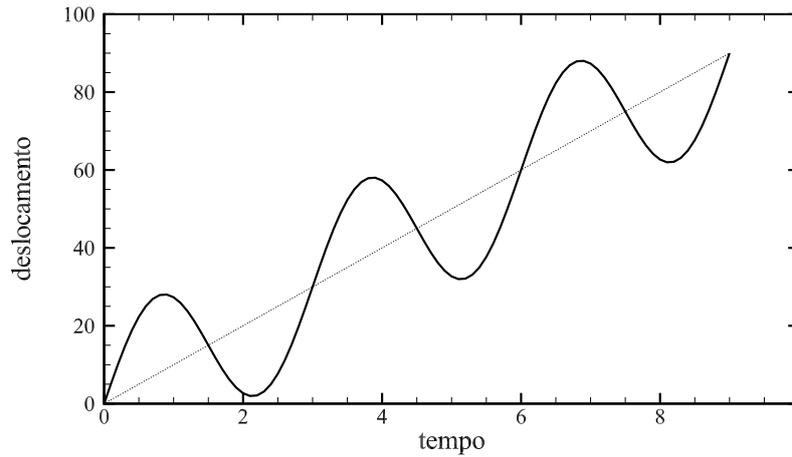


Figura 5.18 – Superposição de carregamento linear com senoidal.

Resultados e discussão

Os resultados de convergência são mostrados na Figura 5.19 e na Tabela 5.11. Novamente, a exemplo dos casos II, III e IV.1 todos os métodos DIRK, com exceção de DIRK4c, alcançaram ordem de convergência completa quando interpolados de maneira consistente. De certa maneira, pode-se concluir que este tipo de carregamento não introduziu a ampliação da não-linearidade do comportamento das deformações totais ao longo do tempo que era desejada.

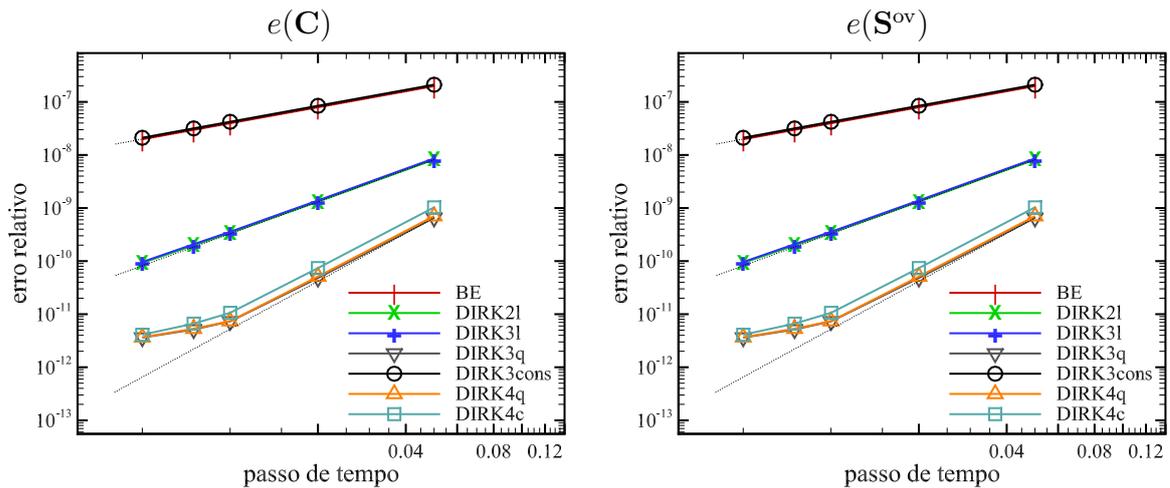


Figura 5.19 – CASO V: erro *versus* Δt em $t = 9,0$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,1$ s. Mínimo $\Delta t = 0,001$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita:

$$e(\mathbf{S}^{ov}).$$

A Tabela 5.11 revela que a ordem de aproximação para a deformação total \mathbf{C} age como um limite superior para a ordem de convergência das grandezas \mathbf{C}^v e \mathbf{S}^{ov} , de maneira que é observada uma redução de ordem para interpolações inconsistentes $p - n, n \geq 1$. Como previsto pela teoria, isto ocorre para os casos DIRK3cons, DIRK3l e DIRK4q.

erro	$e(\mathbf{C})$		$e(\mathbf{C}^v)$		$e(\mathbf{S}^{ov})$		$e(\mathbf{S})$	
	3 s	9 s	3 s	9 s	3 s	9 s	3 s	9 s
BE	1,01	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
DIRK2l	1,92	1,95	2,00	2,00	2,00	1,99	1,99	1,99
DIRK3cons	1,01	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
DIRK3l	1,92	1,95	2,00	2,00	2,00	1,99	1,99	1,99
DIRK3q	2,42	2,35	2,86	2,75	2,79	2,85	2,80	2,55
DIRK4q	2,43	2,38	2,85	2,76	2,79	2,84	2,79	2,59
DIRK4c	2,61	2,44	2,90	2,86	2,80	2,67	2,86	2,46

Tabela 5.11 – CASO V: ordem de convergência para diferentes métodos.

A análise de eficiência em termos do erro na tensão viscosa *versus* tempo total de computação pode ser vista na Figura 5.20. Ela revela que todos os métodos DIRK com $p \geq 2$ superam o método de Euler com um fator de aceleração de no mínimo 15 (ver Tabela 5.12). Aqui, o método DIRK3q supera o DIRK4c para erros de $1,0E-04$ e $1,0E-06$, por este último ser relativamente mais custoso computacionalmente, uma vez que tem 5 estágios de integração. Para erros de $1,0E-06$, estes fatores estão na faixa entre 130-230 quando comparados com o método de Euler.

5.2.4 Ovalização de um cilindro

Visando aplicar um caso de deformação ainda mais completo, com efeitos combinados de flexão, tração, compressão e cisalhamento, o CASO VI simulado é de um cilindro, cujo carregamento consistiu de deslocamentos prescritos em duas linhas diametralmente opostas, comprimindo a seção transversal, conforme se pode ver na Figura 5.21. O raio externo do cilindro é $r_{ext} = 10\text{mm}$ e a espessura da parede é $t = 2\text{mm}$. A simetria longitudinal do cilindro foi explorada, de maneira que apenas uma de suas metades foi modelada. No

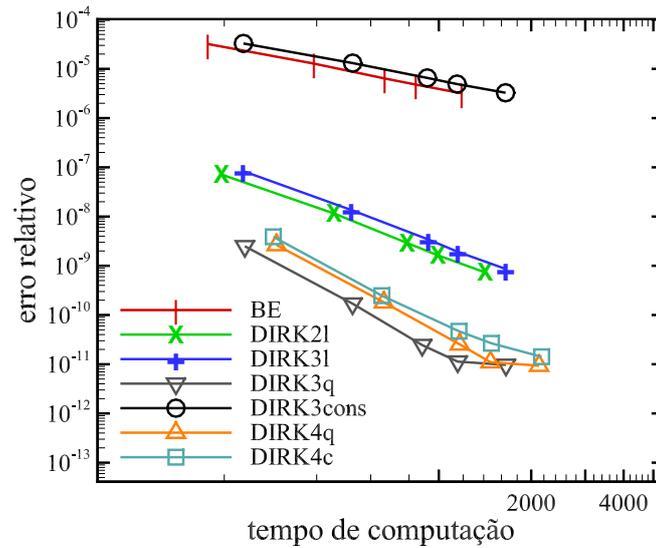


Figura 5.20 – CASO V: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo total de computação (s). Resultados em $t = 9,0$ s.

tol. do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$	fator de aceleração	
	1,0E-04	1,0E-06
BE	1,0	1,0
DIRK21	23,6	127,0
DIRK3cons	0,7	0,6
DIRK3q	19,5	232,3
DIRK4c	15,2	186,1

Tabela 5.12 – CASO V: fatores de aceleração para diferentes métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro.

Resultados em $t = 9,0$ s.

plano de simetria foram aplicadas as condições de contorno adequadas a esta situação e o amassamento foi promovido através da aplicação de deslocamentos verticais prescritos nos elementos superiores do cilindro (Figura 5.21) com uma relação linear ao tempo, ou seja, $u(t) = 1\text{mm/s} \cdot t$.

A geometria foi discretizada utilizando-se os mesmo elemento P1Q0 que nos casos anteriores. Os dados do material foram os mesmos da Tabela 5.2 e a malha consistiu de

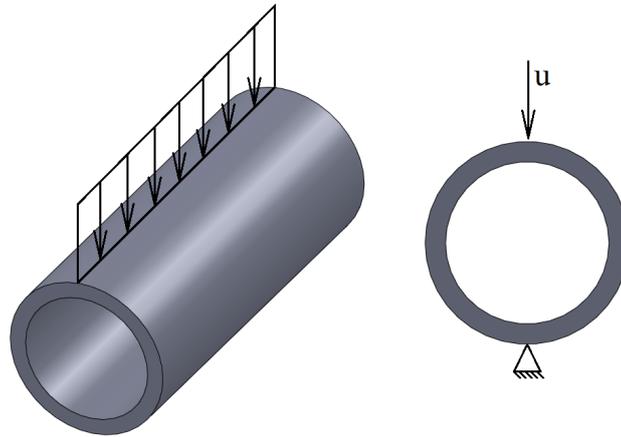


Figura 5.21 – Geometria do cilindro submetido à carga de amassamento.

10 elementos no comprimento, 24 elementos circunferenciais (em uma das metades) e 2 elementos na espessura da parede.

Resultados e discussão

A Figura 5.22 mostra a distribuição de tensões normais na direção y para este caso. A exemplo dos outros casos rodados até aqui, o objetivo é avaliar as ordens de convergência dos métodos de integração aplicados neste trabalho. A solução de referência para este caso foi obtida através de um passo de tempo $\Delta t = 1,0E-04$ juntamente com o método DIRK4 e interpolação cúbica para a deformação (DIRK4c). As demais soluções foram obtidas através de passos de tempo $\Delta t = \{0,005; 0,01; 0,025; 0,067\}$ s. A Figura 5.23 apresenta os resultados de curvas de convergência da deformação total \mathbf{C} e tensão viscosa \mathbf{S}^{ov} para o caso VI.

Todos os métodos que utilizaram uma interpolação consistente com a sua ordem de convergência seguiram a condição proposta na equação (4.3), com exceção, mais uma vez, do método DIRK4 com interpolação cúbica DIRK4c. A Tabela 5.13 mostra de maneira mais clara os resultados obtidos para as ordens de convergência de cada caso.

Os métodos de Euler implícito de DIRK3cons, o primeiro por ser um método de 1ª ordem e o segundo por ter uma aproximação de grau 0 da deformação (limitando assim a ordem de convergência 3 do DIRK3) apresentaram ordem unitária, como previsto pela equação (4.3). Ainda conforme a equação (4.3), DIRK2l e DIRK3l apresentaram ordem de convergência 2 e DIRK3q e DIRK4q ordem 3. Mais uma vez, a exemplo dos casos II, III, IV.1 e V, o método DIRK4c não atingiu ordem 4, como era esperado. A conclusão a que

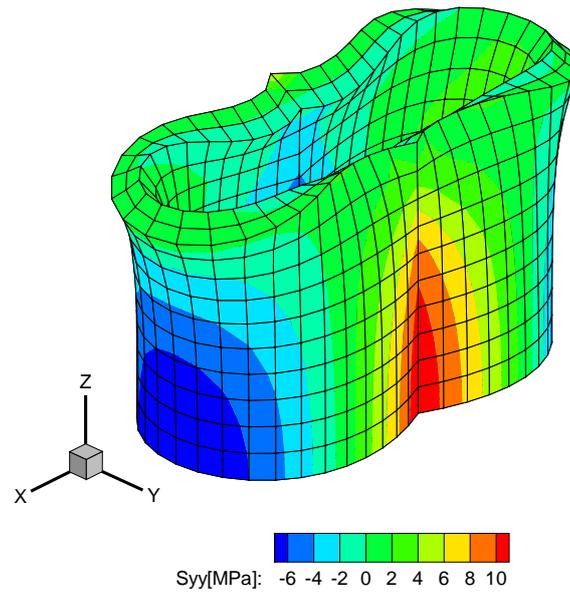


Figura 5.22 – Cilindro deformado submetido a carga de amassamento.

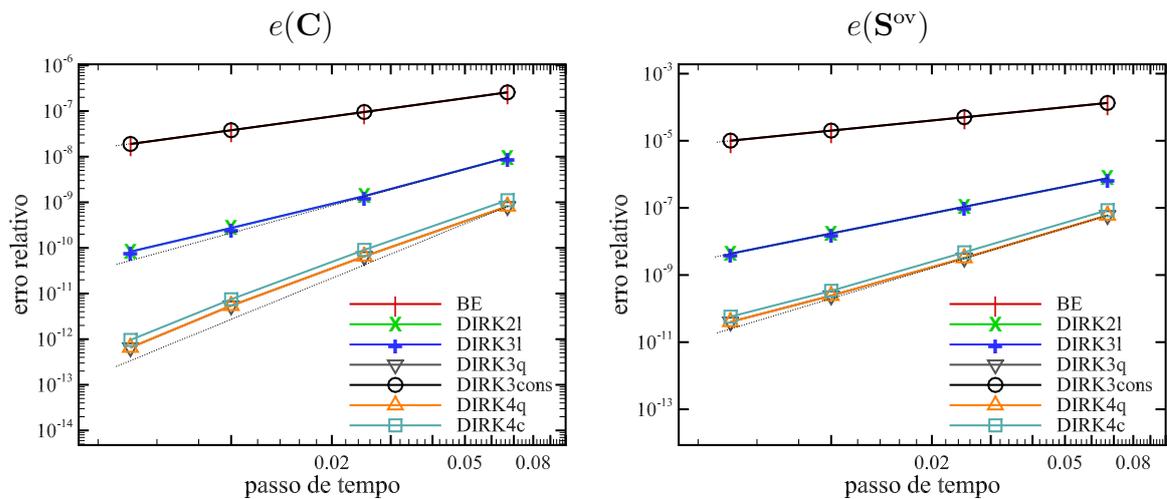


Figura 5.23 – CASO VI: erro *versus* Δt em $t = 1,0$ s para diferentes métodos DIRK. Máximo $\Delta t = 0,067$ s. Mínimo $\Delta t = 0,005$ s. Esquerda: $e(\mathbf{C})$. Direita: $e(\mathbf{S}^{ov})$.

se chega é a mesma dos casos anteriores em que isto se verificou, ou seja, a não-linearidade do problema (refletida no comportamento das deformações totais ao longo do tempo) não é acentuada o suficiente a ponto de uma interpolação cúbica desempenhar melhor do que uma quadrática, no intervalo de integração.

O gráfico que exhibe a comparação de eficiência entre os métodos é apresentado na

tempo $t = 1.0$ s			
erro	$e(\mathbf{C})$	$e(\mathbf{C}^v)$	$e(\mathbf{S}^{ov})$
BE	1,00	0,99	0,99
DIRK2l	1,81	1,91	2,00
DIRK3cons	1,00	0,99	0,99
DIRK3l	1,81	1,91	2,00
DIRK3q	2,78	2,86	2,79
DIRK4q	2,78	2,86	2,79
DIRK4c	2,74	2,84	2,79

Tabela 5.13 – CASO VI: ordem de convergência para diferentes métodos de integração.

Figura 5.24 e os fatores de aceleração na Tabela 5.14.

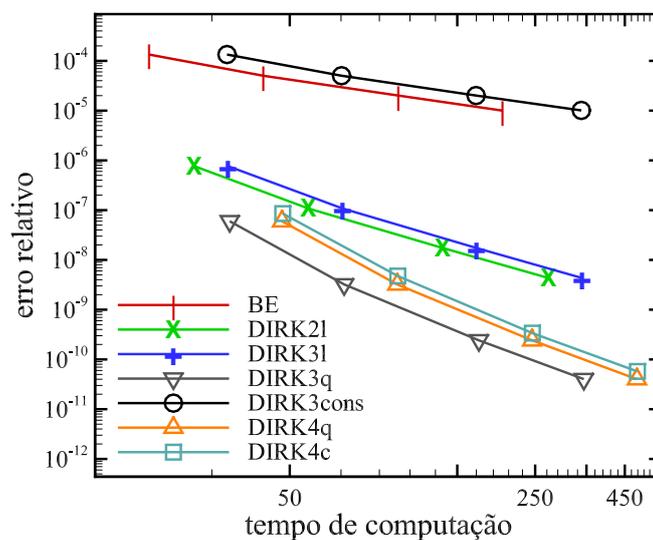


Figura 5.24 – CASO VI: eficiência em termos do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$ versus tempo total de computação (s). Resultados em $t = 1,0$ s.

Mais uma vez o método DIRK3cons desempenha ainda pior do que o método de Euler. Adicionalmente, o método DIRK3q parece ser o mais adequado para solução do problema, pois apresenta mesma ordem de convergência que o DIRK4c, porém com menor tempo de computação, afinal é um método de 3 estágios em contraste com os 5 do DIRK4.

tol. do erro $e(\mathbf{S}^{ov})$	fator de aceleração	
	1,0E-04	1,0E-06
BE	1,0	1,0
DIRK2l	1,9	76,5
DIRK3cons	0,6	0,6
DIRK3q	4,9	120,2
DIRK4c	3,3	78,4

Tabela 5.14 – CASO VI: fatores de aceleração para diferentes métodos DIRK comparados com o método de Euler para diferentes valores de erro.

Resultados em $t = 1,0$ s.

5.2.5 Investigação dos casos DIRK4c

O objetivo aqui é apresentar uma conclusão a respeito do porquê de o método DIRK4c não ter atingido ordem nominal 4 mesmo quando a deformação é interpolada com polinômio de grau cúbico consistente. Segundo o que foi proposto genericamente por Eidel e Kuhn [2011] e formalizado matematicamente tanto em Eidel et al. [2013] como no presente trabalho, a condição necessária e suficiente para um método de integração de ordem p atingir ordem nominal de convergência para problemas de integração do fluxo viscoelástico com variação temporal da deformação contínua e suave, é a de que a deformação total seja aproximada, ao longo do intervalo de integração, por um polinômio de grau *consistente* $q = p$. Em um caso de aproximação via um polinômio de grau $q = p - n, n \geq 1$, será observada redução de ordem na integração para ordem $p - n$.

No entanto, o que ficou evidenciado no Capítulo 5 através dos casos II, III, IV.1, V e VI, foi uma redução de ordem de 4 para 3 do método DIRK4c, mesmo com a aproximação consistente da deformação total. Somente no caso IV.2, quando se relaxou a hipótese de incompressibilidade do material, ocorreu de DIRK4c apresentar ordem de convergência próxima de 4 para as tensões viscosas \mathbf{S}^{ov} (ordem 3,64). Como ficou claro na Figura 5.15, as deformações deste caso apresentaram comportamento muito mais disperso e complexo do que o caso incompressível IV.1.

A conclusão a que se chega é de que, em todos aqueles casos em que DIRK4c desempenhou abaixo do esperado, a causa para tal acontecimento foi o problema não apresentar um nível de não-linearidade no tempo suficiente para que uma aproximação via polinômio de maior grau aproximasse melhor o comportamento da deformação no intervalo de integração do que um polinômio de um grau menor. A Figura 5.25 procura explicar esta conclusão graficamente. A partir de uma solução exata do tipo senoidal para a deformação total e ampliando-se um pedaço da curva para simular um intervalo de integração onde a deformação está sendo aproximada, se conclui que, neste exemplo em particular (que pode ser considerado um caso de carga real que componentes mecânicos constituídos deste tipo de material sofrem), não se tem ganho algum ao se aproximar uma variável temporal senoidal por uma curva cúbica ao invés de uma quadrática.

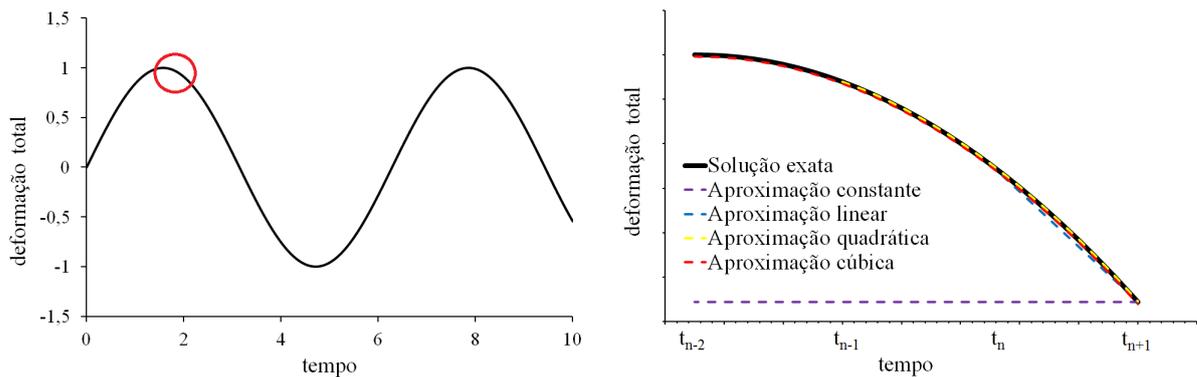


Figura 5.25 – Comportamento genérico da deformação total ao longo do tempo em um caso de viscoelasticidade. Esquerda: visão geral. Direita: ampliação em um intervalo de integração e diferentes aproximações.

Nos casos em que o carregamento aplicado apresentava um maior nível de não-linearidade (casos de cargas senoidais IV.1 e IV.2), a ordem de convergência atingida para S^{ov} pelo método DIRK4c foi maior (3,23 e 3,64, respectivamente (Tabelas 5.7 e 5.9)) do que nos casos de carga linear II, III e VI (2,93, 2,94 e 2,79, respectivamente (Tabelas 5.3, 5.5 e 5.13)). Infere-se, portanto, que a não-linearidade das condições de contorno foram fundamentais para elevar a ordem de convergência do método DIRK4c.

Nos casos de carga linear, ainda se esperaria que a própria não-linearidade do material induzisse um comportamento complexo da deformação com o tempo. No entanto, como

podemos ver pela Figura 5.26, mesmo este sendo um material não-linear, esta não-linearidade não é tão pronunciada. Somada a linearidade do carregamento com a baixa não-linearidade do material, fica evidente que, neste caso, não há ganho algum ao se aproximar a deformação no intervalo de integração por um polinômio cúbico ao invés de um quadrático.

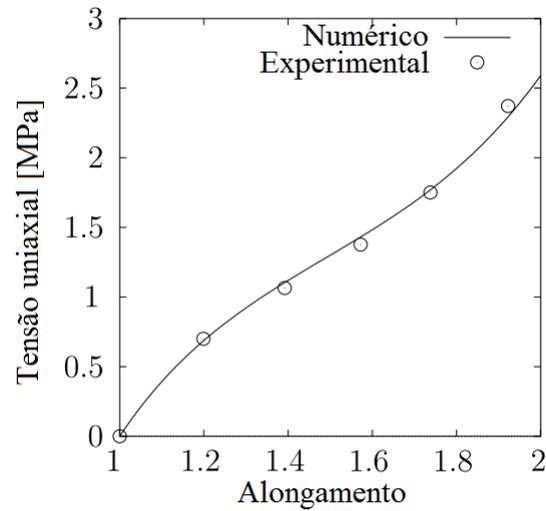


Figura 5.26 – Curva tensão *versus* alongamento para o material analisado.

Apesar de este ser um material particular, sua curva tensão-deformação não difere de materiais usuais de engenharia. Todos estes aspectos considerados sugerem que não se deve alcançar ordens superiores a aproximadamente 3 em problemas moderadamente não-lineares.

6. CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou uma teoria unificada para garantir ordem de convergência nominal $p \geq 2$ para métodos de Runge-Kutta utilizados como integradores temporais de modelos viscoelásticos analisados pelo método dos elementos finitos. Aqui, a validade do conceito é mostrada para um modelo viscoelástico de grandes deformações de Hartmann, e o foco principal foram os métodos RK diagonalmente implícitos (DIRK). O aspecto chave deste trabalho é o de que, para garantir ordem de convergência nominal do método de integração, a aproximação da deformação ao longo do tempo deve ser consistente com a ordem de convergência do integrador temporal.

Como um dos argumentos originais deste trabalho, os conceitos de consistência para o acoplamento global-local (ou espacial-temporal) propostos anteriormente ([Eidel e Kuhn, 2011] e [Eidel et al., 2013]) foram levados à prova para o caso de viscoelasticidade em grandes deformações. Para isto, foi realizada a implementação no *software* FEAP da rotina do material viscoelástico de Hartmann (equações (2.10) a (2.20)). Inédita também foi a implementação, ao nível do ponto de Gauss do elemento, de métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos para solução da equação evolutiva do fluxo viscoelástico.

Os principais resultados desta tese foram:

1. Métodos de Runge-Kutta de ordem p , para atingirem ordem de convergência nominal, requerem uma aproximação consistente para a deformação total ao longo do tempo de ordem $q = p$. A interpolação é feita através de polinômios de grau $p - 1$ baseados em p pontos de colocação, os quais são escolhidos como sendo em $t_{n+1}, t_n, \dots, t_{n-(p-2)}$. De acordo com as previsões teóricas de Eidel e Kuhn [2011], inevitavelmente será observada redução de ordem de convergência no caso de a interpolação da deformação ser feita através de ordem inferior a p . Se a interpolação for de ordem $p - n, n \geq 1$, então a ordem de convergência da integração no tempo sofrerá uma redução para ordem $p - n$. Por este motivo, trata-se o grau de interpolação da deformação como um limite superior para a ordem de convergência do integrador no tempo.

2. Os métodos DIRK utilizados no presente trabalho se mostraram uma escolha adequada para a integração no tempo. Isto ocorre porque eles requerem uma implementação numérica de relativa simplicidade, onde os estágios do Runge-Kutta estão desacoplados uns dos outros (Tabela 3.2). Por este fator, para um método com s estágios, a solução do problema é uma sequência de s passos que podem ser tratados individualmente como integrações pelo método de Euler implícito. As incógnitas para cada estágio são as deformações viscosas ao fim de cada estágio.
3. Ficou evidenciado na Seção 5.2.1 que casos de deformação homogênea não são confiáveis para avaliação de desempenho de convergência de métodos de integração de altas ordens. Estes métodos apresentam uma precisão muito superior ao Euler implícito e, mesmo utilizando-se passos de tempo relativamente grandes, os erros obtidos já são muito baixos (principalmente pelo fato de serem problemas de simples solução), comprometendo a confiabilidade da análise das ordens de convergência.

Como pôde ser visto na Figura 5.3, ordens de convergência de até 8 são obtidas com métodos de integração de 2^a ou 3^a ordens.

4. O ganho que se tem na interpolação da deformação total no intervalo de integração através de polinômios de mais altos graus está fortemente ligado ao nível de não-linearidade da própria deformação ao longo do tempo, conforme discutido na Seção 5.2.5. Um comportamento suave e com baixo grau de não-linearidade da deformação total, às vezes, pode ser melhor ou tão bem interpolado com um polinômio de grau 2 em comparação com polinômios de graus 3 ou 4, o que pode levar métodos de integração de altas ordens, mesmo com interpolações consistentes, a não atingirem suas ordens nominais. Isto é o que se conclui ter ocorrido com o método DIRK4c nos casos II, III, IV.1, V e VI. O que sustenta esta conclusão é que, a partir do momento em que a incompressibilidade do material foi relaxada e as deformações se comportaram de maneira mais acentuadamente não-linear (ver Figura 5.15), o método DIRK4c passou a apresentar maior ordem de convergência.

Materiais usuais de engenharia apresentam graus moderados de não-linearidade no seu comportamento tensão-deformação, de onde se conclui que dificilmente se analisa um problema em que uma aproximação da deformação através de um polinômio de grau

3 ou 4 vá apresentar melhor resultado do que uma de polinômio de grau 2.

Baseado nestas conclusões, juntamente com os resultados aqui obtidos, podemos dizer que o método DIRK3q é o mais indicado para solução de problemas de viscoelasticidade em grandes deformações, e o que sustenta esta afirmação são os resultados de fatores de aceleração das tabelas 5.4, 5.6, 5.8, 5.10, 5.12 e 5.14. Até mesmo no caso IV.2 quando o método DIRK4c apresentou ordem próxima de 4 (ordem 3,64), o método DIRK3q o superou na análise dos fatores de aceleração.

5. Através dos exemplos apresentados, com exceção do método DIRK4c, conforme já foi explicado, todos os integradores obtiveram ordem de convergência nominal, aprovando o conceito de aproximação da deformação de grau p proposto em Eidel e Kuhn [2011] e formalizado matematicamente em Eidel et al. [2013] e na Seção 4.2 do presente trabalho. As considerações de viscoelasticidade não-linear de grandes deformações atesta a aplicabilidade dos métodos DIRK juntamente com a técnica de interpolação da deformação via polinômios de altas ordens. Quando comparados com o método de Euler implícito, um ganho considerável de eficiência foi alcançado.
6. Os conceitos de integração numérica do fluxo viscoelástico através de métodos DIRK apresentados no presente trabalho estão de acordo com a estrutura usual de códigos de elementos finitos, onde a integração temporal da parcela inelástica é feita exclusivamente ao nível do elemento. Por esta razão, tanto a migração do algoritmo dos integradores DIRK de um código para outro pode ser facilmente realizada, como também a adaptação para métodos DIRK de um algoritmo já existente onde se utilize o método de Euler implícito.
7. Uma sugestão subliminar que este trabalho apresenta, e relacionado ao nível de não-linearidade do problema em questão, é o relativo grau de complexidade do mesmo quando se superpõe geometria, condições de contorno e relação constitutiva de diferentes graus de não-linearidade. Isto é, a metodologia aqui utilizada é recomendável também em casos aonde a não-linearidade material é baixa, mas as forças de superfície e deslocamentos prescritos apresentam maior complexidade, em especial no domínio do tempo.

Os objetivos propostos para este trabalho na Seção 1.2 foram todos satisfeitos. O item (i) daquela seção propunha apresentar uma estrutura de algoritmo para MEF onde o aspecto da consistência entre a ordem do integrador temporal e a ordem de aproximação para as deformações totais fosse satisfeito. Isto foi feito ao longo do Capítulo 4 do presente trabalho.

O item (ii) da Seção 1.2 objetivou a descrição da implementação dos métodos DIRK ao modelo viscoelástico apresentado no Capítulo 2 e isto também foi apresentado no Capítulo 4, mais especificamente no roteiro descrito das equações (4.15) a (4.22).

O terceiro e último item dos objetivos deste trabalho foi totalmente preenchido através de demonstrações numéricas do Capítulo 5 de que o aspecto da consistência proposto no Capítulo 4.2 através das equações (4.1) a (4.4) deve ser satisfeito para obtenção de altas ordens de convergência para os integradores temporais.

Como conclusão final, a considerável melhora na eficiência vista através do cálculo dos fatores de aceleração e a fácil implementação dos métodos DIRK os credenciam como uma boa escolha para solução do fluxo viscoelástico em problemas de viscoelasticidade em grandes deformações e, portanto, altamente recomendável.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

Como sugestões para a trabalhos futuros, se pode citar:

1. Implementação da capacidade de estimativa de erro inerente aos métodos DIRK. Se for possível estimar *a priori* o erro no intervalo de integração para o passo de tempo utilizado, se pode construir uma rotina de adaptatividade automática para o passo de tempo, otimizando a eficiência do algoritmo;
2. Estudar mais a fundo o porquê da discrepância, tanto qualitativa como quantitativa, do comportamento da deformação cisalhante ao longo do tempo quando se considera material compressível ou material incompressível (ver Figura 5.15). Este estudo é interessante para se poder entender o que leva o material a apresentar maior ou menor "grau de não-linearidade" deste componente de deformação e também para poder estimar um limite para o grau de convergência de soluções de viscoelasticidade;

3. Estudar efeitos de pressão hidrostática em materiais compressíveis resolvidos através da metodologia utilizada;
4. Para boa parte dos casos aqui analisados, os erros do método de Euler implícito já eram de ordens aceitáveis. Pode-se pesquisar casos em que os resultados obtidos por este método apresentem erros apreciáveis, justificando ainda mais a aplicação desta metodologia;
5. Testar a metodologia para problemas envolvendo aspectos não considerados aqui, como pós-flambagem, termo-elasticidade com parâmetros variáveis com a temperatura e impacto;
6. Verificar o desempenho desta metodologia para outros tipos de materiais, preferivelmente aqueles que exibem comportamento tensão-deformação altamente não-lineares;
7. Estudar e testar o algoritmo para casos bidimensionais;
8. Utilizar um método de integração de ordem ainda mais alta (6ª ou 7ª ordem) e verificar se a hipótese de que há um certo limite para que se tenha ganho na aproximação de um polinômio de alto grau devido à baixa não-linearidade do problema se verifica.

Referências Bibliográficas

- Alexander, R. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff O.D.E.s, **SIAM Journal of Numerical Analysis**, vol. 14, p. 1006–1021, 1977.
- Bergström, J. e Boyce, M. Constitutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 46, p. 931–954, 1998a.
- Bergström, J. e Boyce, M. Constitutive modeling of the time-dependent and cyclic loading of elastomers and application to soft biological tissues, **Mechanics of Materials**, vol. 33, p. 523–530, 1998b.
- Bonet, J. Large Strain Viscoelastic Constitutive Models, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 38, p. 2953–2968, 2001.
- Büttner, J. **Numerische Simulation zeitabhängiger Materialgleichungen mit Fließfläche (em alemão)**. Tese de doutorado, Fortschritts-Berichte VDI, 2003.
- Cash, J. Diagonally implicit Runge-Kutta formulae with error estimates, **Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications**, vol. 24, p. 293–301, 1979.
- Coleman, B. e Noll, W. An Approximation Theorem for Functionals with Application in Continuum Mechanics, **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, vol. 6, p. 355–370, 1960.
- Coleman, B. e Noll, W. Foundations of Linear Viscoelasticity, **Reviews of Modern Physics**, vol. 33, p. 239–249, 1961.
- Dal, H. e Kaliske, M. Bergström-Boyce model for nonlinear finite rubber viscoelasticity: theoretical aspects and algorithmic treatment for the FE method, **Computational Mechanics**, vol. 44, p. 809–823, 2009.

Ehlers, W. e Markert, B. A linear viscoelastic biphasic model for soft tissues based on the theory of porous media, **Journal of Biomechanical Engineering**, vol. 123(5), p. 418–424, 2001.

Ehret, A. e Itskov, M. Modeling of anisotropic softening phenomena: Application to soft biological tissues, **International Journal of Plasticity**, vol. 25(5), p. 901–919, 2009.

Eidel, B. **Modeling and Numerical Analysis of Inelasticity On and Across Multiple Length Scales**. Habilitationsschrift, Universidade de Duisburg-Essen, 2011.

Eidel, B. e Kuhn, C. Order reduction in computational inelasticity: why it happens and how to overcome it? The ODE case of viscoelasticity, **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 87(11), p. 1046–1073, 2011.

Eidel, B.; Stumpf, F.; e Schröder, J. Finite strain viscoelasticity: how to consistently couple discretizations in time and space on quadrature-point level for full order $p \geq 2$ and a considerable speed-up, **Computational Mechanics**, 2013.

Ellsiepen, P. **Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien (em alemão)**. tese de doutorado, Universidade de Stuttgart, 1999.

Ellsiepen, P. e Hartmann, P. Remarks on the interpretation of current nonlinear finite element analyses as differential-algebraic equations, **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 51, p. 679–707, 2001.

Fancello, E.; Ponthot, J.; e Stainier, L. A variational formulation of constitutive models and updates in nonlinear finite viscoelasticity, **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 65(11), p. 1831–1864, 2006.

Govindjee, S., **Mechanics and Thermomechanics of Rubberlike Solids**, chapter Numerical Issues in Finite Elasticity and Viscoelasticity, pages 187–232. Springer, 2004.

Govindjee, S. e Simo, J. Mullins' effect and the strain amplitude dependence of the storage modulus, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 29, p. 1737–1751, 1992.

- Govindjee, S. e Simo, J. Coupled stress-diffusion : case II, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 41, p. 863–867, 1993.
- Hairer, E.; Lubich, C.; e Roch, M. **The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods**. Springer, Heidelberg, 1989.
- Hairer, E.; Nørsett, S.; e Wanner, G. **Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems**. Springer, Heidelberg, 2008.
- Hairer, E. e Wanner, G. **Solving Ordinary Differential Equations II, Stiff and Differential-Algebraic Problems**. Springer, Heidelberg, 2002.
- Hartmann, S. Computation in finite strain viscoelasticity: finite elements based on the interpretation as differential-algebraic equations, **Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 191, p. 1439–1470, 2002.
- Hartmann, S. **Finite-Elemente Berechnung inelastischer Kontinua - Interpretation als Algebro-Differentialgleichungssysteme (em alemão)**. Habilitationsschrift, Universidade de Kassel, 2003.
- Hartmann, S. e Wensch, J. Finite element analysis of viscoelastic structures using Rosenbrock-type methods, **Computational Mechanics**, vol. 40, p. 383–398, 2007.
- Haupt, P. Intermediate configurations and the description of viscoelastic-plastic material behaviors, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 79(3), p. 289–300, 1984.
- Haupt, P. On the mathematical modelling of material behaviour in continuum mechanics, **Acta Mechanica**, vol. 100, p. 129–154, 1993.
- Haupt, P. **Continuum Mechanics and theory of materials**. Springer, Berlin, Heidelberg e Nova York, 2002.
- Haupt, P. e Lion, A. On finite linear viscoelasticity of incompressible isotropic materials, **Acta Mechanica**, vol. 159, p. 87–124, 2002.
- Holzappel, G. On large strain viscoelasticity: Continuum formulation and finite element applications to elastomeric structures, **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 39, p. 3903–3926, 1996.

Holzapfel, G. e Gasser, T. A Viscoelastic Model for Fiber-reinforced Composites at Finite Strains: Continuum Basis, Computational Aspects and Applications, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 190, p. 4379–4403, 2001.

Holzapfel, G. e Reiter, G. Fully Coupled Thermomechanical Behaviour of Viscoelastic Solids Treated with Finite Elements, **International Journal of Engineering Science**, vol. 33, p. 1037–1058, 1995.

Holzapfel, G. e Simo, J. A New Viscoelastic Constitutive Model for Continuous Media at Finite Thermomechanical Changes, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 33, p. 3019–3034, 1996.

Huber, N. e Tsakmakis, C. Finite deformation viscoelasticity laws, **Mechanics of Materials**, vol. 32, p. 1–18, 2000.

Kaliske, M. e Rothert, H. Formulation and implementation of three-dimensional viscoelasticity at small and finite strains, **Computational Mechanics**, vol. 19, p. 238–239, 1997.

Kröner, E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, vol. 4, p. 273–334, 1960.

Lakes, R. **Viscoelastic Solids**. CRC Press, Boca Ratón, 1998.

Le Tallec, P. **Numerical Methods for Nonlinear Viscoelastic Problems in Continuum Mechanics**. École Polytechnique, Département de Mécanique, Paris/Berlin, 2007.

Lee, E. Elastic-plastic deformation at finite strains, **Journal of Applied Mechanics**, vol. 36, p. 1–6, 1969.

Lion, A. On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 2045(11-12), p. 1805–1834, 1997a.

Lion, A. A physically based method to represent the thermo-mechanical behaviour of elastomers, **Acta Mechanica**, vol. 123, p. 1–25, 1997b.

Lion, A. Thixotropic behavior of rubber under dynamic loading histories: Experiments and theory, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 46, p. 895–930, 1998.

Lion, A. e Kardelky, C. The Payne effect in finite viscoelasticity: Constitutive modelling based on fractional derivatives and intrinsic time scales, **International Journal of Plasticity**, vol. 20(7), p. 1313–1345, 2004.

Lubliner, J. A Model for rubber viscoelasticity, **Mechanics Research Communications**, vol. 12, p. 93–99, 1985.

Meinecke, E. e Taftaf, M. Effect of the Carbon-black on the Mechanical Properties of Elastomers, **Rubber Chemistry and Technology**, vol. 61(3), p. 2231–2258, 2005.

Miehe, C. e Göktepe, S. A micro-macro approach to rubber-like materials. Part II: The micro-sphere model of finite rubber viscoelasticity, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 53, p. 2231–2258, 2005.

Miehe, C. e Keck, J. Superimposed finite elastic-viscoelastic-plastoelastic stress response with damage in filled rubbery polymers. Experiments, modelling and algorithmic implementation, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 48, p. 323–365, 2000.

Mullins, L. Softening of Rubber by Deformation, **Rubber Chemistry and Technology**, vol. 42, p. 339–362, 1969.

Nagtegaal, J. On the implementation of inelastic constitutive equations with special reference to large deformation problems, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 33, p. 469–484, 1982.

Payne, A. The Dynamic Properties of Carbon Black-Loaded Natural Rubber Vulcanizates. Part I, **Journal of Applied Polymer Science**, vol. 6(19), p. 57–63, 1962.

Prothero, A. e Robinson, A. On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations, **Mathematics of Computation**, vol. 28(125), p. 145–162, 1974.

Reese, S. e Govindjee, S. Theoretical and numerical aspects in the thermo-viscoelastic material behavior of rubber-like polymers, **Mechanics of Time-dependent Materials**, vol. 1(4), p. 357–396, 1998a.

Reese, S. e Govindjee, S. A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 35, p. 3455–3482, 1998b.

Simo, J. On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model : formulation and computational aspects, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 60, p. 153–173, 1987.

Simo, J., **Handbook of Numerical Analysis Vol. 6, Numerical methods for solids (Parte 3)**, chapter Modelling and Simulation of Plasticity, pages 183–499. Elsevier: Amsterdam, 1998.

Simo, J. e Taylor, R. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 48, p. 101–118, 1985.

So, H. e Chen, U. A Nonlinear Mechanical Model for Solid-Filled Rubbers, **Polymer Engineering and Science**, vol. 31, p. 410–416, 1991.

Vaziri, A. e Gopinath, A. Cell and biomolecular mechanics in silico, **Nature**, vol. 7, p. 15–23, 2008.

Zienkiewicz, O. e Taylor, R. **The Finite Element Method**. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.

A. Matrices de Butcher para métodos DIRK

(a) DIRK2 (Método de Cash), $s = 2, p = 2$, Alexander [1977], p.1012.

$$\begin{array}{c|cc}
 \alpha & & \alpha \\
 1 & 1 - \alpha & \alpha \\
 \hline
 & 1 - \alpha & \alpha
 \end{array}
 \quad
 \alpha = 1 - \frac{1}{2}\sqrt{2}$$

(b) DIRK3 (Método de Cash), $s = 3, p = 3$, Alexander [1977], p.1012.

$$\begin{array}{c|ccc}
 \gamma & & & \gamma \\
 \delta & \tau - \gamma & & \gamma \\
 1 & \alpha & \beta & \gamma \\
 \hline
 & \alpha & \beta & \gamma
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \alpha = 1.2084966491760101 \\
 \beta = -0.6443631706844691 \\
 \gamma = 0.4358665215084580 \\
 \delta = 0.7179332607542295 \\
 \tau - \gamma = 0.2820667392457705
 \end{array}$$

(c) DIRK4, $s = 5, p = 4$, Cash [1979].

$$\begin{array}{c|cccc}
 \tau_1 & \alpha & & & \\
 \tau_2 & \alpha_{21} & \alpha & & \\
 \tau_3 & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha & \\
 \tau_4 & \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha \\
 1 & b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & \alpha \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & \alpha
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \alpha = 0.4358665215 \\
 \alpha_{21} = -1.13586652150 \\
 \alpha_{31} = 1.08543330679 \\
 \alpha_{32} = -0.721299828287 \\
 \alpha_{41} = 0.416349501547 \\
 \alpha_{42} = 0.190984004184 \\
 \alpha_{43} = -0.118643265417
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \tau_1 = \alpha \\
 \tau_2 = 0.7 \\
 \tau_3 = 0.8 \\
 \tau_4 = 0.4924556761814 \\
 b_1 = 0.896869652944 \\
 b_2 = 0.0182725272734 \\
 b_3 = -0.0845900310706 \\
 b_4 = -0.266418670647
 \end{array}$$

Continuação da Tabela A.1

(d) DIRK4, $s = 5$, $p = 4$, Hairer e Wanner [2002], p.100.

$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$				
$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$			
$\frac{11}{20}$	$\frac{17}{50}$	$-\frac{1}{25}$	$\frac{1}{4}$		
$\frac{1}{2}$	$\frac{371}{1360}$	$-\frac{137}{2720}$	$\frac{15}{544}$	$\frac{1}{4}$	
1	$\frac{25}{24}$	$-\frac{49}{48}$	$\frac{125}{16}$	$-\frac{85}{12}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{25}{24}$	$-\frac{49}{48}$	$\frac{125}{16}$	$-\frac{85}{12}$	$\frac{1}{4}$

Tabela A.1 – Matrizes de Butcher para diferentes métodos DIRK. s : Número de estágios, p : Ordem de convergência.