

PGMEC

Universidade Federal Fluminense

Centro Tecnológico

Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Dissertação de Mestrado

Análise de um modelo de difusão em tubos

Leandro Soares da Costa

Niterói

Rio de Janeiro, 01 de Agosto de 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

LEANDRO SOARES DA COSTA

ANÁLISE DE UM MODELO DE DIFUSÃO EM TUBOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da UFF como parte dos requisitos para a obtenção do Grau de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica. Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos.

Orientadora: Prof^a Dr^a ÂNGELA CRISTINA CARDOSO DE
SOUZA

NITERÓI

2008

Ficha Catalográfica elaborada pela Biblioteca da Escola de Engenharia e Instituto de Computação da UFF

C837 Costa, Leandro Soares da.
Análise de um modelo de difusão em tubos / Leandro Soares da
Costa. – Niterói, RJ : [s.n.], 2008.
37 f.

Orientador: Ângela Cristina Cardoso de Souza.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade
Federal Fluminense, 2008.

1. Mecânica do sólido. 2. Difusão (Sólido). 3. Método de Euler. 4.
Modelo axissimétrico. 5. Engenharia mecânica. I. Título.

CDD 620.105

LEANDRO SOARES DA COSTA

ANÁLISE DE UM MODELO DE DIFUSÃO EM TUBOS

Dissertação apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Engenharia
Mecânica da UFF como parte dos requisitos
para a obtenção do Grau de Mestre em
Ciências em Engenharia Mecânica. Área de
Concentração: Mecânica dos Sólidos.

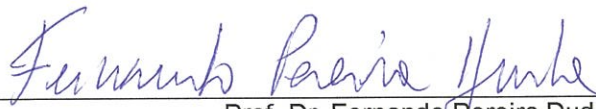
Aprovada em agosto de 2008.

Banca examinadora:



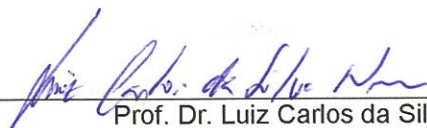
Prof.^a Dr.^a Angela Cristina Cardoso de Souza - Orientadora

PGMEC/LMTA/TEM – Universidade Federal Fluminense – UFF



Prof. Dr. Fernando Pereira Duda

COPPE/PEM – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ



Prof. Dr. Luiz Carlos da Silva Nunes

PGMEC/LMTA/TEM – Universidade Federal Fluminense – UFF

NITERÓI

2008

*Aos meus pais e minha irmã,
a quem muito devo, especialmente
pelo carinho, pela confiança
e pela dedicação.*

Agradecimentos

À Universidade Federal Fluminense, por mais uma oportunidade de obter uma conquista na minha formação acadêmica.

Ao PGMEC, representado por todos os seus integrantes, pelo apoio irrestrito.

À professora, Ângela Cristina Cardoso de Souza pela orientação segura, dedicação contínua e por todo apoio direcionado a mim, que com certeza foi essencial à realização e conclusão deste trabalho.

Aos professores do PGMEC, pelos valiosos conhecimentos transmitidos durante o curso.

Aos colegas e companheiros de jornada pelo convívio, amizade e motivação em todas as horas.

Aos meus amigos pela compreensão e carinho em todos os momentos de dificuldade, pelos quais passei.

À minha família, por sempre estar do meu lado me apoiando e incentivando.

Resumo

Este trabalho apresenta resumidamente um modelo descrito no contexto da mecânica do contínuo, para a difusão de soluto e deformação induzida pelo soluto em sólidos elásticos. Para analisar o modelo apresentamos alguns resultados numéricos relativos ao transporte de hidrogênio através de um cilindro. A implementação numérica foi baseada no método de elementos finitos e método de Euler implícito para as discretizações espacial e temporal, respectivamente. Mesmo fazendo escolhas constitutivas simples, nós obtivemos resultados muito bons.

Abstract

This work briefly presents a model, described within the framework of modern continuum mechanics, for the solute diffusion and solid-induced deformation in elastic solids. In order to analyze the model, we present some numerical results concerning the hydrogen transport through hollow cylinder. The numerical implementation was based on the finite element method and the Euler implicit scheme for spatial and temporal discretizations, respectively. Even by using simple constitutive choices, the results obtained were very satisfactory.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	TEORIA GERAL	5
2.1	LEIS BÁSICAS	5
2.2	EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS	8
2.3	CASO PARTICULAR	9
2.4	EQUAÇÕES GERAIS	10
3	EQUAÇÃO PARA TUBOS	12
4	MODELO NUMÉRICO	16
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	22
6	CONCLUSÕES	33
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	35

LISTA DE TABELAS

TABELA 1: PARÂMETROS UTILIZADOS NO MODELO NUMÉRICO	23
--	----

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: DIVISÃO DOS NÓS DE UM ELEMENTO	16
FIGURA 2: CAMPO DE DESLOCAMENTO PARA CONCENTRAÇÃO DE SOLUTO IGUAL A ZERO	23
FIGURA 3: CAMPO DE TENSÃO RADIAL PARA CONCENTRAÇÃO DE SOLUTO IGUAL A ZERO	24
FIGURA 4: CAMPO DE TENSÃO CIRCUNFERENCIAL PARA CONCENTRAÇÃO DE SOLUTO IGUAL A ZERO (ANALÍTICO)	25
FIGURA 5: CAMPO DO SOLUTO PARA PRESSÃO IGUAL A ZERO	26
FIGURA 6: CAMPO DO SOLUTO PARA O PROBLEMA ACOPLADO	27
FIGURA 7: CAMPO DE DESLOCAMENTO PARA O PROBLEMA ACOPLADO	28
FIGURA 8: CAMPO DE TENSÃO RADIAL PARA O PROBLEMA ACOPLADO	29
FIGURA 9: CAMPO DE TENSÃO CIRCUNFERENCIAL PARA O PROBLEMA ACOPLADO	30
FIGURA 10: CAMPO DE TENSÃO LONGITUDINAL PARA O PROBLEMA ACOPLADO	31
FIGURA 11: CAMPO DO TRAÇO DA TENSÃO PARA O PROBLEMA ACOPLADO	32

1 INTRODUÇÃO

A prevenção da falha em sistemas mecânicos tem sido uma questão importante em projetos de engenharia desde o início da era industrial. Cada componente desses sistemas deve ser dimensionado de tal modo que resista aos esforços mecânicos a que são submetidos durante seu serviço, como também, que resista aos efeitos de um ambiente hostil. A degradação provocada por um processo de difusão no sólido será o fenômeno abordado neste estudo na prevenção da falha de um componente mecânico. Entre as várias situações nas quais pode existir um processo de difusão em um sólido, a fragilização por hidrogênio é uma das mais importantes.

O hidrogênio se introduz em materiais metálicos (em particular, aços carbono de alta resistência) dissolvendo-se no estado atômico. Durante sua permeação por difusão, os átomos de hidrogênio se concentram em diversos tipos de imperfeições na microestrutura, em locais de maior concentração de tensões, enfraquecendo as ligações metálicas e deteriorando as propriedades mecânicas do material. Soforis, 1995 [17], estudou a influência do deslocamento intersticial

do hidrogênio no comportamento linear elástico dos metais e ligas metálicas e Buxbaum e Kinne, 1996 [3], descreveram experimentos com extração de hidrogênio em membranas de paládio, revestimento de Nióbio e tubos trocadores de calor em Tântalo.

Sob condições apropriadas, este efeito provoca a nucleação de trincas, a sua propagação e a fratura dos componentes contaminados. O resultado é a falha do componente sob um estado de tensão inferior ao do projeto sem considerar este efeito, ou seja, a fragilização por hidrogênio, como descreve o texto de Gamgloff R., 2003[8].

Este fenômeno, sendo freqüentemente um subproduto da corrosão em metais, tem sido de grande interesse, como mostram os seguintes artigos, entre muitos outros: Sofronis, 1995 [17], e Thomas e Chopin, 1999 [19] desenvolveram modelos constitutivos de deformações lineares elásticas acopladas com a difusão de hidrogênio. Blagoeva, 2004 [2], resolve numericamente um modelo não linear de difusão em polímeros. Wang et al, 2005 [21] e Toribio, 1997 [20] estudam o efeito do hidrogênio na resistência ao entalhe em um aço de alta resistência. Fried e Sellers, 2000 [5], apresentam um modelo utilizando a mecânica do contínuo multicampos, similar ao modelo desenvolvido por Duda et al., 2006 [4], para descrever a difusão atômica num reticulado deformável.

Em 1878 Gibbs , introduziu a idéia do sólido que contem componentes fluidos, que podem ser introduzidos e podem mover-se através do sólido deformando-o, e, por outro lado, o sólido comporta-se elasticamente. Como comentado por Li, 1966 [14], um exemplo genuíno deste tipo de corpo são soluções sólidas intersticiais com temperaturas suficientemente baixas, com espécies de lacunas e interstícios como se fossem partes do sólido e do fluido, respectivamente. Exemplos adicionais podem ser encontrados nos campos da geologia, estudo de polímeros e metalurgia, como mostra Larch e Cahn, 1973 [13], que estendeu a idéia de Gibbs de difusão em sólidos. Essa extensão foi básica para os conhecimentos modernos de equilíbrio e difusão cinemática em soluções sólidas

sob tensão (ver Larch e Cahn, 1982 [11], e Larch e Cahn, 1985 [12]) assim como o tratamento unificado do transporte atômico dado por Fried e Gurtin, 1999 [6], (ver também e Fried e Gurtin, 2004 [7]).

Wang e Chen, 2002 [23], verificaram o efeito da tensão química em um cilindro oco para o plano de deformação e sem força axial. Neste trabalho foram estudados dois processos de difusão: de superfície de tensão constante e de superfície de potencial constante.

Thomas e Chopin, 1997 [19], desenvolveram um modelo de deformação com difusão em sólidos não porosos utilizando um código em elementos finitos para problemas de uma ou duas dimensões.

O modelo que vamos apresentar e analisar neste trabalho, foi baseado em sólidos que podem conter um componente fluido (aqui denominado “soluto”) e, conforme Gibbs [9], a presença desse soluto induz uma deformação mecânica do sólido. Especificamente, consideraremos pequenas deformações e problemas isotérmicos.

De acordo com o formalismo moderno da mecânica do contínuo (ver Fried e Gurtin, 1999 [6]) este modelo baseou-se em: i) leis básicas de balanço, ii) desigualdade de energia livre (que representa a segunda lei da termodinâmica) e iii) teoria constitutiva.

Foi considerada a lei básica de balanço de massa para sólido e soluto, e o balanço das forças conjugadas para os campos cinemáticos independentes escolhidos, i) deslocamento do sólido, ii) fluxo de soluto e iii) densidade do soluto.

Este modelo é similar ao que foi usado por Fried e Sellers, 2000 [5], em que a densidade do soluto e o fluxo do soluto são considerados como descrições cinematicamente independentes. Em particular, o uso da densidade do soluto

como um grau independente foi inspirado em Gurtin, 1996 [10] (ver Podio-Guidugli, 2006 [15]).

O objetivo deste trabalho é apresentar brevemente o modelo teórico e mostrar alguns resultados numéricos para uma geometria tubular. O tubo foi modelado usando-se um modelo axissimétrico, unidimensional, discretizado através do método de elementos finitos. A integração numérica para a equação de evolução do soluto baseou-se no método de Euler implícito. Mostraremos alguns resultados para avaliar e discutir o algoritmo utilizado.

Este texto está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 apresentamos o modelo teórico geral, no contexto 3D, no capítulo 3 mostraremos o modelo axissimétrico unidimensional, no capítulo 4 descrevemos o algoritmo utilizado, no capítulo 5 apresentamos os testes numéricos realizados e finalmente as conclusões estão no capítulo 6.

2 TEORIA GERAL

2.1 LEIS BÁSICAS

A cinemática aplicada neste estudo compreende o movimento do sólido através do vetor $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$, onde o deslocamento é dado por $\mathbf{u} = \mathbf{y} - \mathbf{x}$ e a deformação por $\mathbf{F} = \nabla \mathbf{y}$.

Para descrever o processo de difusão serão usadas duas variáveis: concentração de soluto $c(\mathbf{x}, t)$ e fluxo de soluto $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$, que representa o movimento do soluto no sólido.

No contexto de pequenas deformações usaremos como medida de deformação o tensor $\mathbf{E}$.

$$\mathbf{E} := \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) =: \nabla \mathbf{u}^S \quad (1)$$

As leis básicas utilizadas neste trabalho serão o princípio das potências virtuais, o balanço de massa para o soluto e a desigualdade de dissipação (2ª lei da termodinâmica).

Definindo $\mathbf{V} = (\dot{\mathbf{u}}, \dot{c}, \dot{\mathbf{J}})$ como o campo das velocidades virtuais realizáveis e o campo $\bar{\mathbf{V}} = (\bar{\mathbf{u}}, \bar{c}, \bar{\mathbf{J}})$ de velocidades virtuais, para qualquer parte P do corpo, as potências externa e interna são determinadas pelas equações (2) e (3), respectivamente.

$$P_{ext}(P, \bar{\mathbf{V}}) = \int_P (\mathbf{b} \cdot \bar{\mathbf{u}} + \gamma^e \bar{c} + \boldsymbol{\sigma}^e \cdot \bar{\mathbf{J}}) dV \quad (2)$$

$$P_{int}(P, \bar{\mathbf{V}}) = - \int_P (\mathbf{T} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\Gamma} \cdot \nabla \bar{c} + \gamma^i \bar{c} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \bar{\mathbf{J}} + \boldsymbol{\sigma}^i \cdot \bar{\mathbf{J}}) dV \quad (3)$$

Desta forma, três sistemas de forças independentes são identificados:

- Sistema de forças padrão ou macroscópico, descrito pelo tensor $\mathbf{T}$ e pela força de corpo $\mathbf{b}$;
- Sistema de forças associado à concentração de soluto c , descrito pelo vetor micro tensão $\boldsymbol{\Gamma}$ e pelos escalares micro forças interna e externa, γ^i e γ^e , respectivamente;
- Sistema de forças associada ao fluxo de soluto $\mathbf{J}$, descrito pelo tensor micro tensão $\boldsymbol{\Sigma}$ e pelos vetores micro forças interna e externa, $\boldsymbol{\sigma}^i$ e $\boldsymbol{\sigma}^e$, respectivamente.

O princípio das potências virtuais estabelece que para qualquer parte P do corpo tem-se que:

$$P_e(P, \bar{V}) + P_i(P, \bar{V}) = 0 \quad (4)$$

Substituindo as equações (2) e (3) na equação (4) são obtidas as seguintes relações:

$$Div \mathbf{T} + \mathbf{b} = 0 \quad (5)$$

$$Div \mathbf{\Gamma} - \gamma^i + \gamma^e = 0 \quad (6)$$

$$Div \mathbf{\Sigma} - \sigma^i + \sigma^e = 0 \quad (7)$$

O balanço de massa para o soluto é obtido através da equação:

$$\dot{c} = -Div \mathbf{J} + h \quad (8)$$

,onde h é a taxa de fornecimento do soluto.

Neste caso, a 2ª lei da termodinâmica pode ser escrita de acordo com a equação (9):

$$\frac{d}{dt} \int \psi dV \leq P_{ext} + \int \mu h dV \quad (9)$$

,onde ψ é a densidade de energia livre e μ é a energia de Gibbs [9], ou potencial químico (que pode ser visto como parâmetro para ajustar as unidades).

Utilizando as equações (4) e (8) na inequação (9),

$$\frac{d}{dt} \int \psi dV \leq P_{ext} + \int \mu(\dot{c} + \text{div} \mathbf{J}) dV \quad (10)$$

A forma local da desigualdade (10) é dada por:

$$\dot{\psi} \leq \mathbf{T} \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}}^s + (\gamma^i + \mu) \dot{c} + (\boldsymbol{\Sigma} + \mu \mathbf{I}) \cdot \nabla \mathbf{J} + \boldsymbol{\sigma}^i \cdot \mathbf{J} \quad (11)$$

2.2 EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS

De acordo com a desigualdade de dissipação obtida na equação (11) serão consideradas equações constitutivas para as quantidades

$$\begin{aligned} \psi &= \hat{\psi}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}); \\ \mathbf{T} &= \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}); \\ \boldsymbol{\Gamma} &= \hat{\boldsymbol{\Gamma}}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}); \\ \gamma^i + \mu &= \hat{\gamma}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}); \\ \boldsymbol{\Sigma} + \mu \mathbf{I} &= \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}); \\ \boldsymbol{\sigma}^i &= \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}). \end{aligned} \quad (12)$$

A desigualdade expressa pela equação (11) deve ser obedecida para quaisquer valores de $\dot{\mathbf{E}}_e$, $\nabla \mathbf{J}$ e $\dot{\mathbf{J}}$, já que não são variáveis primitivas. Substituindo as equações (12) em (11), são obtidas as seguintes equações constitutivas:

$$\begin{aligned}
\psi &= \hat{\psi}(\mathbf{E}, c); \\
\hat{\mathbf{T}} &= \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathbf{E}}; \\
\hat{\Gamma} &= 0; \\
\hat{\gamma} &= \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial c}; \\
\hat{\Sigma} &= 0.
\end{aligned} \tag{13}$$

A desigualdade de dissipação fica reduzida a:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{E}, c, \mathbf{J}) \cdot \mathbf{J} \geq 0 \tag{14}$$

Através da equação (14) admite-se que $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\mathbf{H}}(E, c, \mathbf{J})\mathbf{J}$, onde $\hat{\mathbf{H}}$ é um tensor positivo semi-definido.

2.3 CASO PARTICULAR

Para obter as equações completas do modelo devemos escolher as funções constitutivas $\hat{\psi}$ e $\hat{\mathbf{H}}$, as forças externas $\mathbf{b}$, γ^e e $\boldsymbol{\sigma}^e$, e definir as condições de contorno e condições iniciais. Neste item vamos identificar as funções constitutivas e forças externas.

Inicialmente vamos assumir que a deformação é decomposta aditivamente nas parcelas elástica ($\mathbf{E}_e$) e química ($e(c - c_0)\mathbf{I}$), como:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + e(c - c_0)\mathbf{I} \tag{15}$$

,onde, c_0 é uma concentração de referência e e é a fração do volume atômico do sólido por volume atômico do soluto.

Por simplicidade será considerado que as forças externas são nulas ($\gamma^e = \mathbf{b} = \boldsymbol{\sigma}^e = 0$) e que não há fonte de soluto ($h = 0$). Vamos admitir que a energia livre é dada por:

$$\hat{\psi}(\mathbf{E}, c) = \frac{1}{2} \left[\bar{\lambda} (tr \mathbf{E}_e)^2 + 2\bar{\mu} |\mathbf{E}_e|^2 \right] + \alpha (\ln c - 1) c \quad (16)$$

, onde $\alpha = \frac{kT}{v}$, k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta e v é o volume da solução por átomo de sólido. $\mathbf{E}$, $\bar{\lambda}$ e $\bar{\mu}$ são os parâmetros de Lamé.

O tensor $\hat{\mathbf{H}}$ será dado por:

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{\alpha}{Dc} \mathbf{I} \quad (17)$$

Onde D é o coeficiente de difusão.

2.4 EQUAÇÕES GERAIS

Com as escolhas feitas na seção anterior têm-se as seguintes equações do modelo:

- Balanço de forças padrão, equação (5), $div \mathbf{T} = 0$:

$$\mathbf{T} = \bar{\lambda} (tr \mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\bar{\mu} \mathbf{E} - e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \mathbf{I} \quad (18)$$

,onde $\mathbf{E} = \nabla \mathbf{u}^s$ e $\mathbf{T} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}}$.

- Equação de transporte de massa, equação (8), $Div \mathbf{J} + \dot{c} = 0$:

$$\mathbf{J} = -D \nabla c + \frac{De}{\alpha} c \nabla (tr \mathbf{T}) \quad (19)$$

,onde $\mathbf{J}$ é obtida pelas equações (6), (7), (13), (16) e (17).

Na forma fraca as equações (18) e (19) ficam, respectivamente:

$$\int_B \mathbf{T} \cdot \nabla v dV = \int_{\partial B_T} \hat{\mathbf{t}} \cdot v dA \quad (20)$$

$$\int_B \mathbf{J} \cdot \nabla \varphi dV - \int_B \dot{c} \varphi dV = \int_{\partial B_J} \hat{\mathbf{J}} \varphi dA \quad (21)$$

,onde v e φ são campos vetorial e escalar, respectivamente, suficientemente regulares, $\hat{\mathbf{t}}$ é a força de superfície prescrita em ∂B_T e $\hat{\mathbf{J}}$ é o fluxo prescrito na superfície ∂B_J .

3 EQUAÇÃO PARA TUBOS

Usaremos o sistema de coordenadas cilíndrico (R, θ, z) para descrever o tubo, mas devido à simetria do problema, teremos somente R como variável. Então, todas as quantidades vetoriais $\mathbf{v}$ definidas anteriormente serão descritas como:

$$\mathbf{v} = v(R)\mathbf{e}_R \quad (22)$$

,onde $\mathbf{e}_R$ é o vetor unitário na direção R .

Para o estado plano de deformações os tensores $\mathbf{T}$ e $\nabla \mathbf{v}$ são descritos através das formas abaixo, respectivamente:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \sigma_r(R) & & \\ & \sigma_\theta(R) & \\ & & \sigma_z(R) \end{bmatrix} \quad (23)$$

$$\nabla v = \begin{bmatrix} \frac{dv}{dR} & & \\ & \frac{v}{R} & \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (24)$$

,onde σ_r , σ_θ e σ_z são as componentes de tensão radial, circunferencial e longitudinal, respectivamente.

Sendo p_i a pressão interna, correspondente ao raio R_i e p_e a pressão externa correspondente ao raio R_e , ou seja, $\hat{\mathbf{t}} = \begin{cases} p_i \mathbf{e}_r & \text{em } R = R_i \\ -p_e \mathbf{e}_r & \text{em } R = R_e \end{cases}$, a equação de balanço padrão na forma fraca (equação (20)) fica:

$$\int_{R_i}^{R_e} \left[\sigma_r \frac{dv}{dR} + \sigma_\theta \frac{v}{R} \right] R dR = -p_i R_i - p_e R_e \quad (25)$$

Sendo o tensor deformação dado por:

$$\mathbf{E} = (\nabla u)^s = \begin{bmatrix} \frac{du}{dR} & & \\ & \frac{u}{R} & \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (26)$$

Então, considerando as equações (18) e (26), temos que:

$$\sigma_r = \left[(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{du}{dR} + \bar{\lambda} \frac{u}{R} - e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \right] \quad (27)$$

$$\sigma_{\theta} = \left[(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{u}{R} + \bar{\lambda} \frac{du}{dR} - e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \right] \quad (28)$$

$$\sigma_z = \left[\bar{\lambda} \left(\frac{du}{dR} + \frac{u}{R} \right) - e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \right] \quad (29)$$

$$tr\mathbf{T} = (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \left[\frac{du}{dR} + \frac{u}{R} - 3e(c - c_0) \right] \quad (30)$$

Então, de (30) temos que:

$$\frac{d}{dR}(tr\mathbf{T}) = (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \left[\frac{d^2u}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{du}{dR} - \frac{u}{R^2} - 3e \frac{dc}{dR} \right] \quad (31)$$

Portanto, temos que:

$$\begin{aligned} \int_{R_i}^{R_e} \sigma_R \frac{dv}{dR} R dR &= \int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{du}{dR} \frac{dv}{dR} R dR + \int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} u \frac{dv}{dR} dR - ... \\ ... - \int_{R_i}^{R_e} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \cdot \frac{dv}{dR} R dR \end{aligned} \quad (32)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} \sigma_{\theta} \frac{v}{R} R d\theta = \int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{u}{R} v dR + \int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} \frac{du}{dR} v dR - \int_{R_i}^{R_e} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) v dR \quad (33)$$

Então a equação (25) fica:

$$\begin{aligned} \int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{du}{dR} \frac{dv}{dR} R dR + \int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} u \frac{dv}{dR} dR + \int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{u}{R} v dR + \int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} \frac{du}{dR} v dR = ... \\ ... = \int_{R_i}^{R_e} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \left[\frac{dv}{dR} R + v \right] dR - p_i R_i - p_e R_e \end{aligned} \quad (34)$$

Considerando a equação (21) temos para o soluto a seguinte forma fraca:

$$\int_{R_i}^{R_e} J \frac{d\varphi}{dR} R dR - \int_{R_i}^{R_e} \dot{c} \varphi R dR = 0 \quad (35)$$

,já que as condições de contorno que usaremos serão concentrações prescritas nas superfícies interna e externa do tubo.

Considerando J como na equação (19) temos que:

$$J = -D \frac{dc}{dR} + \frac{De}{\alpha} c \frac{d}{dR} (tr \mathbf{T}) = -D \frac{dc}{dR} + \frac{De}{\alpha} c (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \left[\frac{d^2 u}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{du}{dR} - \frac{u}{R^2} - 3e \frac{dc}{dR} \right] \quad (36)$$

Então a equação (35) fica:

$$\begin{aligned} & \int_{R_i}^{R_e} \dot{c} \varphi R dR + \int_{R_i}^{R_e} D \frac{dc}{dR} \frac{d\varphi}{dR} R dR + \int_{R_i}^{R_e} \frac{3De^2}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) c \frac{dc}{dR} \frac{d\varphi}{dR} R dR - \dots \\ & \dots - \int_{R_i}^{R_e} \frac{De}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) c \left(\frac{d^2 u}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{du}{dR} - \frac{u}{R^2} \right) \frac{d\varphi}{dR} R dR = 0 \end{aligned} \quad (37)$$

4 MODELO NUMÉRICO

Como vimos no capítulo anterior, temos duas equações, na forma integral, acopladas, para a solução do problema de difusão de um soluto em uma geometria tubular, equações (34) e (37).

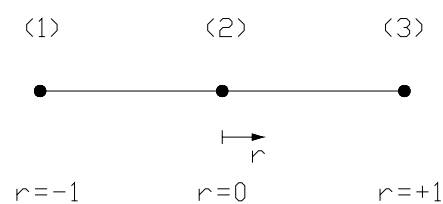


Figura 1: Divisão dos nós de um elemento

Para a discretização espacial usaremos um elemento unidimensional com 3 nós, como mostra a Figura 1, com funções de interpolação isoparamétricas:

$$h_1(r) = \frac{(1-r)}{2} - \frac{(1-r^2)}{2} \quad (38)$$

$$h_2(r) = 1 - r^2 \quad (39)$$

$$h_3(r) = \frac{(1+r)}{2} - \frac{(1-r^2)}{2} \quad (40)$$

Desta forma, todas as funções do tipo $a(R)$ serão interpoladas como:

$$a = \sum_{i=1}^3 h_i a_i = \mathbf{h} \cdot \mathbf{a} \quad (41)$$

,onde a_i representa o valor da função a no nó i . E também, temos que:

$$\frac{da}{dR} = \left(\frac{da}{dr} \right) \left(\frac{dr}{dR} \right) = \frac{2}{l} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{dh_i}{dr} \right) (a_i) = \frac{2}{l} \mathbf{h}' \cdot \mathbf{a} \quad (42)$$

$$\frac{d^2 a}{dR^2} = \frac{4}{l^2} \mathbf{h}'' \cdot \mathbf{a} \quad (43)$$

,onde l é o comprimento do elemento.

Usaremos a seguinte definição para o produto tensorial, presente em várias matrizes calculadas a seguir:

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})\mathbf{u} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{u})\mathbf{a} \quad (44)$$

,onde $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ e $\mathbf{u}$ são vetores.

E usando a interpolação dada pelas equações (41), (42) e (43), temos que os termos da equação (34) serão os seguintes:

$$\int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{du}{dR} \frac{dv}{dR} R dR = \left[\frac{2(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})}{L} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}') (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \quad (45)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} u \frac{dv}{dR} dR = \left[\bar{\lambda} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}) dr \right] (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \quad (46)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} (\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \frac{u}{R} v dR = \left[\frac{L(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})}{2} \int_{-1}^1 \frac{(\mathbf{h} \otimes \mathbf{h})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})} dr \right] (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \quad (47)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} \bar{\lambda} \frac{du}{dR} v dR = \left[\frac{L\bar{\lambda}}{2} \int_{-1}^1 \frac{(\mathbf{h} \otimes \mathbf{h}')}{(\mathbf{h}' \cdot \mathbf{R})} dr \right] (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \int_{R_i}^{R_e} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(c - c_0) \left[\frac{dv}{dR} R + v \right] dR &= \left[e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{h} - c_0) \int_{-1}^1 (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] (\mathbf{h}' \cdot \mathbf{v}) + \dots \\ \dots + \left[\frac{L}{2} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{h} - c_0) \int_{-1}^1 dr \right] (\mathbf{h} \cdot \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (49)$$

E os termos da equação (37) ficam:

$$\int_{R_i}^{R_e} \dot{c} \varphi R dR = \left[\frac{L}{2} \int_{-1}^1 (\mathbf{h} \otimes \mathbf{h}) (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] (\dot{\mathbf{c}} \cdot \varphi) \quad (50)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} D \frac{dc}{dR} \frac{d\varphi}{dR} R dR = \left[\frac{2D}{L} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}') (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] (\mathbf{c} \cdot \varphi) \quad (51)$$

$$\int_{R_i}^{R_e} \frac{3De^2}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) c \frac{dc}{dR} \frac{d\varphi}{dR} R dR = \left[\frac{6De^2}{L\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h})(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{h}' \otimes \mathbf{c}) dr \right] (\mathbf{c} \cdot \varphi) \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \int_{R_i}^{R_e} \frac{De}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) c \left[\frac{d^2 u}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{du}{dR} - \frac{u}{R^2} \right] \frac{d\varphi}{dR} R dR = & \left[\frac{De}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \int_{-1}^1 \left[\frac{4}{L^2} (\mathbf{h}'' \cdot \mathbf{u}) + \dots \right. \right. \\ & \left. \left. \dots + \frac{2}{L} \frac{(\mathbf{h}' \cdot \mathbf{u})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})} - \frac{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})^2} \right] (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h})(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] (\mathbf{c} \cdot \varphi) \end{aligned} \quad (53)$$

Desta forma, com os resultados obtidos em (45) - (49), a equação na forma fraca para o deslocamento do tubo, equação (34), fica:

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{F}(\mathbf{c}) \quad (54)$$

,onde:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} = & \left[\frac{2(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})}{L} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}') (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] + \left[\bar{\lambda} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}) dr \right] + \left[\frac{L(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})}{2} \int_{-1}^1 \frac{(\mathbf{h} \otimes \mathbf{h})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})} dr \right] + \dots \\ & \dots + \left[\frac{L\bar{\lambda}}{2} \int_{-1}^1 \frac{(\mathbf{h} \otimes \mathbf{h}')}{(\mathbf{h}' \cdot \mathbf{R})} dr \right] \end{aligned}$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{c}) = \left[e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{h} - c_0) \int_{-1}^1 (\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] + \left[\frac{L}{2} e(3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{h} - c_0) \int_{-1}^1 dr \right]$$

E também, com os resultados obtidos em (49) - (53), a equação na forma fraca para a concentração de soluto no tubo, equação (37), fica:

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{c}} + \mathbf{G}(\mathbf{u}) \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad (55)$$

,onde:

$$\mathbf{M} = \left[\frac{L}{2} \int_{-1}^1 (\mathbf{h} \otimes \mathbf{h})(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right]$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{u}) = & \left[\frac{2D}{L} \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h}')(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] + \left[\frac{6De^2}{L\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \int_{-1}^1 (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h})(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{h}' \otimes \mathbf{c}) dr \right] + \dots \\ & \dots + \left[\frac{De}{\alpha} (3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}) \int_{-1}^1 \left[\frac{4}{L^2} (\mathbf{h}'' \cdot \mathbf{u}) + \frac{2}{L} \frac{(\mathbf{h}' \cdot \mathbf{u})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})} - \frac{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u})}{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R})^2} \right] (\mathbf{h}' \otimes \mathbf{h})(\mathbf{h} \cdot \mathbf{R}) dr \right] \end{aligned}$$

Vamos usar o método de Euler implícito para a discretização temporal, ou seja, definindo o sub-índice n pelo instante de tempo t_n , ou seja, $\mathbf{c}_n = \mathbf{c}(t = t_n)$.

Temos que: $\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{c}_n + \Delta t f(\mathbf{c}_{n+1}, t_{n+1})$, onde $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Portanto, a equação (55)

$$\text{fica: } \mathbf{M} \left(\frac{\mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n}{\Delta t} \right) + \mathbf{G}(\mathbf{u}_{n+1}) \mathbf{c}_{n+1} = 0.$$

Desta forma, no instante t_{n+1} , temos que:

$$\mathbf{K} \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{c}_{n+1}) \quad (56)$$

$$\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{c}_{n+1} + \mathbf{G}(\mathbf{u}_n) \mathbf{c}_{n+1} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{c}_n \quad (57)$$

Observe-se que é um problema acoplado, ou seja, em ambas equações temos as incógnitas $\mathbf{u}_{n+1}$ e $\mathbf{c}_{n+1}$. Vamos desacoplar este sistema usando, por simplicidade, o algoritmo descrito a seguir:

- Inicialização: $t = 0$, $\mathbf{c} = 0$ e $\mathbf{u} = 0$
- Para cada passo de tempo : $t_{n+1} = t_n + \Delta t$

- Calcular $\mathbf{c}_{n+1}$ na equação: $\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{c}_{n+1} + \mathbf{G}(\mathbf{u}_n) \mathbf{c}_{n+1} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{c}_n$
- Calcular $\mathbf{u}_{n+1}$ na equação: $\mathbf{K} \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{c}_{n+1})$
- Calcular as tensões $\sigma_{R_{n+1}}$, $\sigma_{\theta_{n+1}}$ e $\sigma_{z_{n+1}}$ usando as equações (27), (28) e (29)

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Um exemplo de aplicação desta teoria de difusão de um soluto em meio sólido corresponde ao transporte de hidrogênio atômico em metais. Neste caso o soluto é a concentração de hidrogênio atômico medida em átomos de hidrogênio por átomos do meio sólido. O hidrogênio se introduz em materiais metálicos (em particular, aços carbono de alta resistência) dissolvendo-se no estado atômico. Durante sua permeação por difusão, os átomos de hidrogênio se concentram em diversos tipos de imperfeições na microestrutura e em locais de maior concentração de tensões, enfraquecendo as ligações metálicas e deteriorando as propriedades mecânicas do material. O resultado é a falha do componente sob um estado de tensão inferior ao do projeto sem considerar este efeito, ou seja, à fragilização por hidrogênio, como descreve os trabalhos de Pound, 1998 [16] e Beghini et al., 1998 [1]. Este fenômeno, sendo freqüentemente um subproduto da corrosão em metais, tem sido de grande interesse.

Inicialmente vamos avaliar a solução para cada problema separadamente, ou seja, o problema de pressão interna e externa, sem difusão e o problema da

difusão sem pressão. Para esses exemplos vamos usar os dados de um aço de alta resistência (ver Sofronis, 1995 [17] e Taha & Sofronis, 2001 [18])

Tabela 1: Parâmetros utilizados no modelo numérico

λ	119 GPa
$\bar{\mu}$	79 GPa
D	$1 \times 10^{-8} \text{ m}^2 / \text{s}$
α	$3.5 \times 10^{+8} \text{ J} / \text{m}^3$
e	0.0937 Fe/H

A geometria utilizada será um tubo com raio interno 150mm e 40mm de espessura com 101 nós. Para o problema de pressão somente, com $p_i = 100 \text{ MPa}$ e $p_e = 50 \text{ MPa}$, obtemos os resultados mostrados nas figuras Figura 2, Figura 3 e Figura 4.

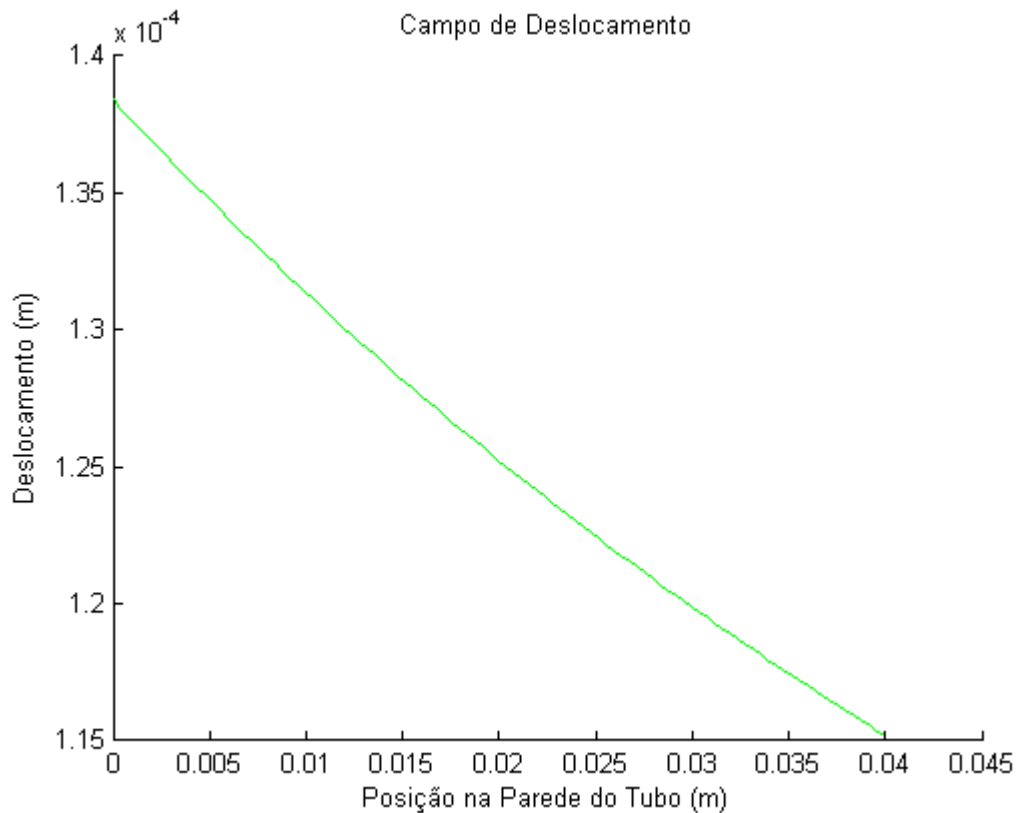


Figura 2: Campo de deslocamento para concentração de soluto igual a zero

Como o problema de pressão interna e externa tem solução analítica, as curvas de tensão radial e circunferencial, mostradas nas Figuras 03 e 04, são comparadas com as seguintes equações:

$$\sigma_r = \frac{p_i r_i^2 - p_e r_e^2 + \frac{r_i^2 r_e^2}{r^2} (p_e - p_i)}{r_e^2 - r_i^2} \quad (58)$$

$$\sigma_\theta = \frac{p_i r_i^2 - p_e r_e^2 - \frac{r_i^2 r_e^2}{r^2} (p_e - p_i)}{r_e^2 - r_i^2} \quad (59)$$

Variando o valor de r, raio da parede que se deseja medir os valores das tensões, foram obtidos os resultados mostrados nas figuras 4 e 5.

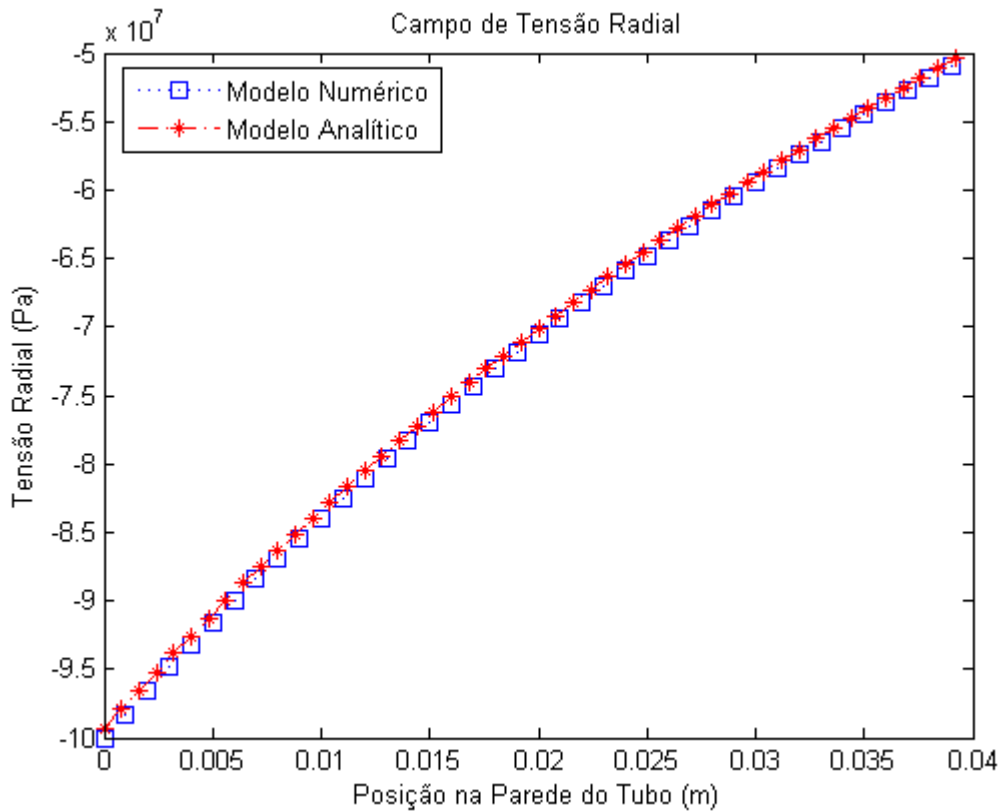


Figura 3: Campo de tensão radial para concentração de soluto igual a zero

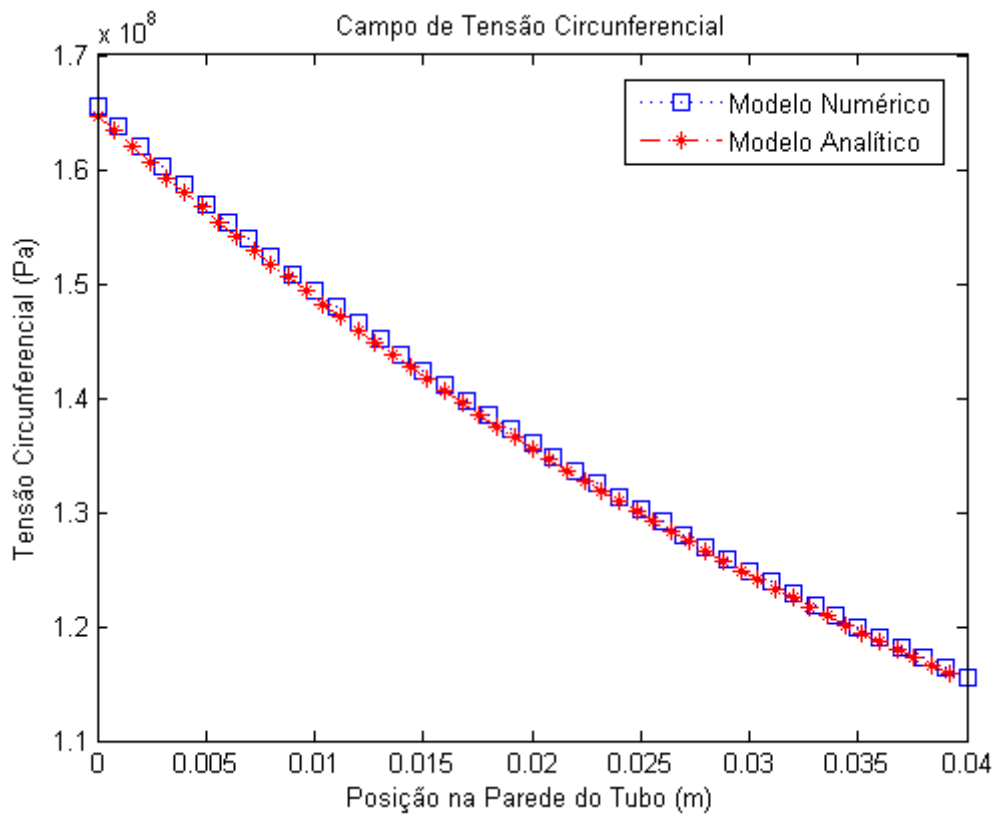


Figura 4: Campo de tensão circunferencial para concentração de soluto igual a zero (analítico)

Comparando os resultados obtidos através do modelo numérico com os obtidos através da formulação analítica, figuras Figura 3 e Figura 4, respectivamente, foi observado que os resultados são praticamente os mesmos. Logo, o modelo proposto neste trabalho, desconsiderando a concentração de soluto, foi considerado satisfatório.

Para o problema de difusão somente, usamos as concentrações interna e externa dadas por $c_i = c_e = 0,011 \frac{H}{Fe}$. Observe que a unidade de concentração é átomos de hidrogênio por unidade de átomos de Ferro.

Os resultados estão mostrados na Figura 5.

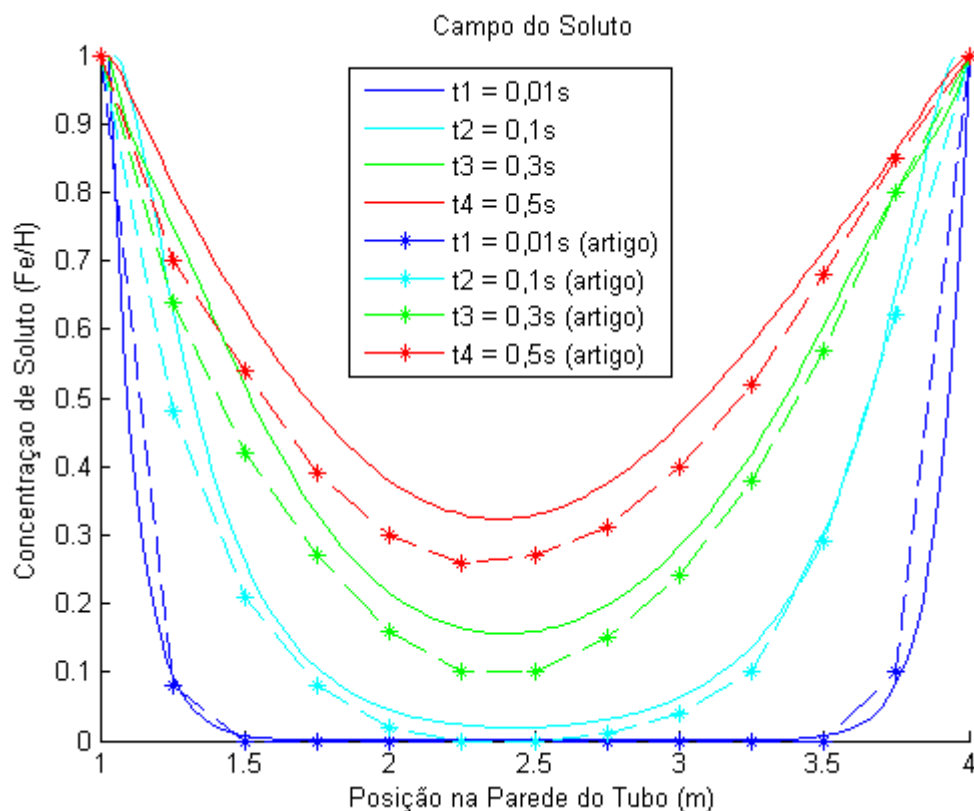


Figura 5: Campo do soluto para pressão igual a zero

Na Figura 5 é apresentada a variação da concentração de soluto através da parede do tubo para tempos determinados, desconsiderando pressões internas e externas. Temos duas curvas para cada tempo. A mais regular é obtida através da formulação do modelo numérico descrita neste trabalho e a outra, feita a partir do trabalho feito por Wang, 2000 [22].

Os resultados obtidos foram muito parecidos, a diferença está na formulação de cada modelo. No descrito por Wang, 2000 [22], foi usada a lei de Fickian para a difusão de solutos, ou seja, foi usada a separação de variáveis para se obter a variação da concentração de soluto pelo raio. Para isto foi necessário utilizar as funções de Bessel como base matemática. Já o modelo descrito neste trabalho é baseado nas equações resultantes do princípio das potências virtuais, do balanço de massa para o soluto e da desigualdade de dissipação (2ª lei da termodinâmica), como foi mostrado no capítulo 2.

As figuras Figura 6, Figura 7, Figura 8, Figura 9, Figura 10 e Figura 11 mostram os resultados do problema acoplado, ou seja, onde há pressão interna, pressão externa e concentração de soluto.

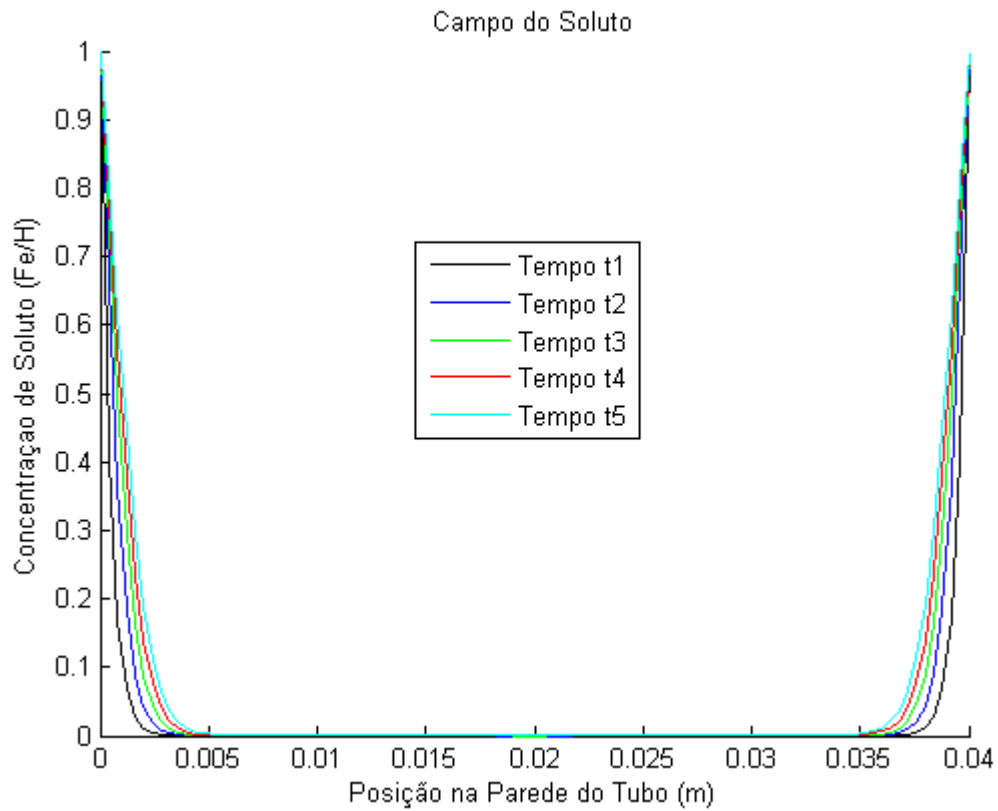


Figura 6: Campo do soluto para o problema acoplado

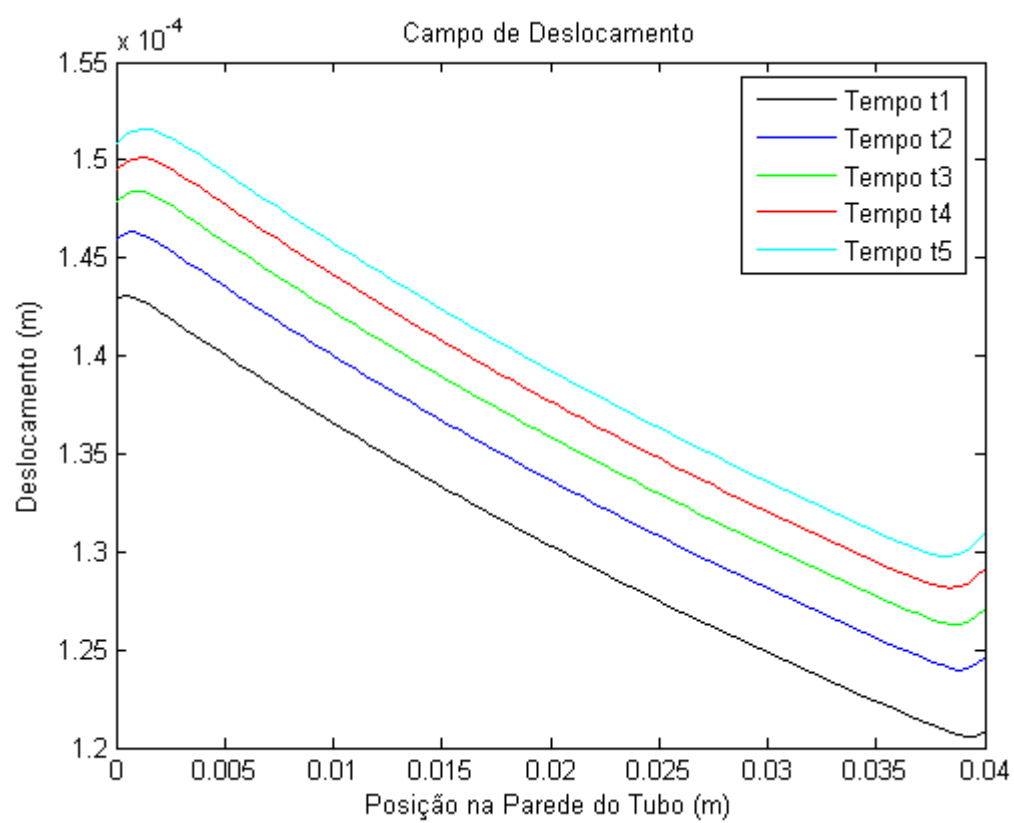


Figura 7: Campo de deslocamento para o problema acoplado

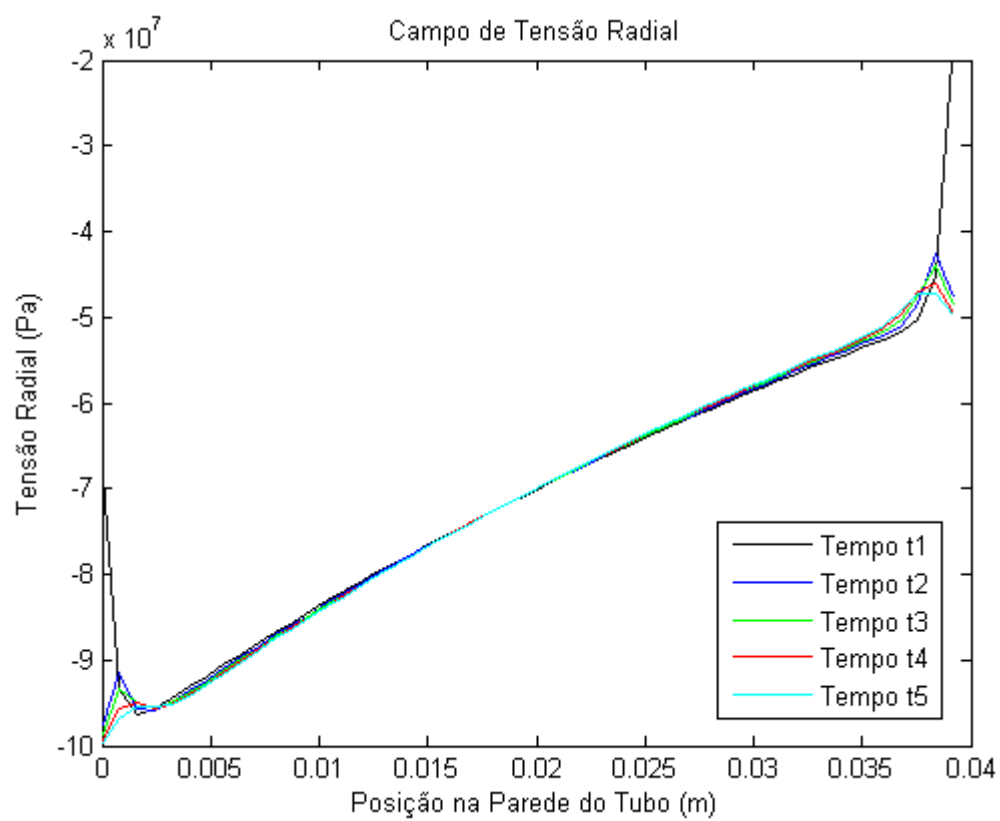


Figura 8: Campo de tensão radial para o problema acoplado

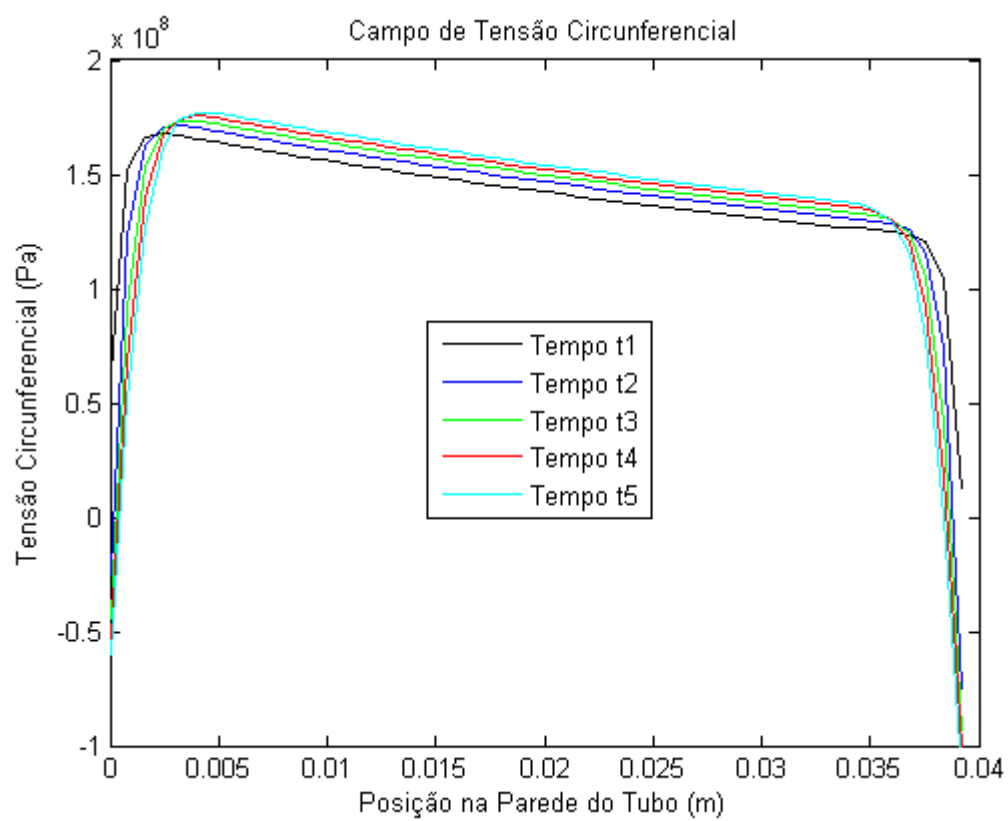


Figura 9: Campo de tensão circunferencial para o problema acoplado

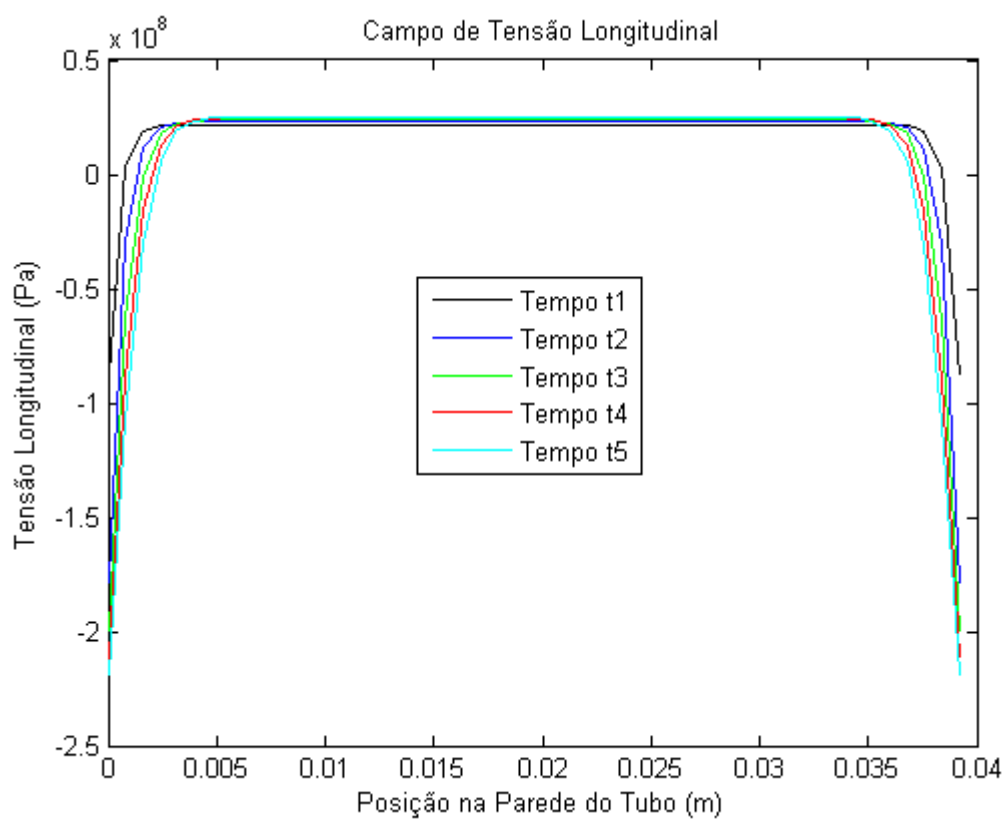


Figura 10: Campo de tensão longitudinal para o problema acoplado

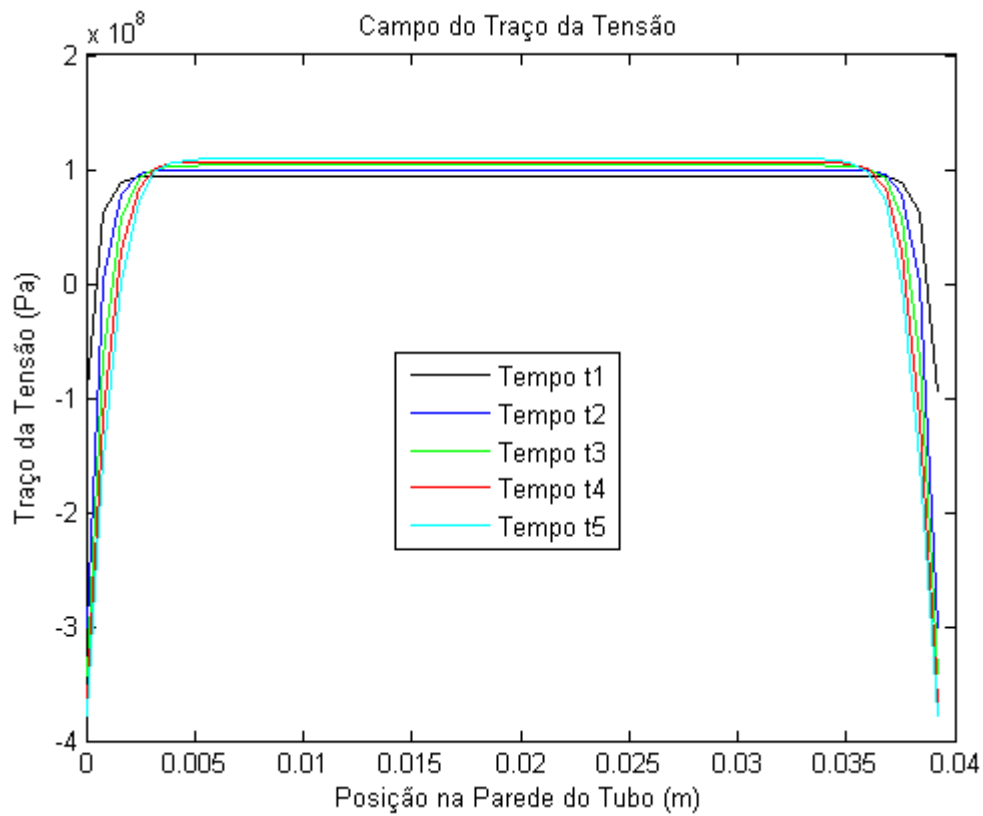


Figura 11: Campo do traço da tensão para o problema acoplado

Para análise do problema acoplado foram utilizadas a mesma geometria e as mesmas pressões externa e interna adotadas para o primeiro caso, descrito através das figuras Figura 2, Figura 3 e Figura 4. As curvas das figuras Figura 6, Figura 7, Figura 8, Figura 9, Figura 10 e Figura 11, mostram os primeiros instantes da evolução do problema, onde $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5$, e assim podemos observar que longe do contorno, onde a concentração de soluto é prescrita, as curvas se aproximam dos resultados sem concentração de soluto.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho nós apresentamos um modelo teórico, baseado no formalismo da mecânica do contínuo multi campos, para descrever o problema da difusão de um soluto em meio sólido, de modo que o sólido sofra deformações induzida pelo soluto. As escolhas constitutivas que fizemos foram as mais simples e os resultados numéricos que apresentamos correspondem a uma geometria tubular. Na implementação numérica utilizamos o método de elementos finitos e método de Euler implícito para as discretizações espaciais e temporais, respectivamente. O algoritmo que desenvolvemos desacopla as equações utilizando o deslocamento calculado no instante anterior.

Para uma versão inicial do modelo, os resultados foram muito bons. Obtivemos para o problema somente com pressão interna resultados quase idênticos às equações das tensões em tubos de parede grossa. E para o problema acoplado resultados bastante coerentes, já que não encontramos na literatura problemas acoplados com as mesmas condições de contorno que utilizamos.

Para uma versão posterior sugerimos avaliar outros algoritmos de solução de modo que as aproximações para o acoplamento sejam minimizadas.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Beghini M., Benamati G., Bertini L. and Valentini R., *Effect of hydrogen on tensile properties of martensitic steels for fusion application*, J. Nuclear Materials, 258, 1295-1299, 1998.
- [2] Blangoeva R., *A problem for diffusion with relaxation in polymers*, Mech. Res. Comm., 31, 91-96, 2004.
- [3] Buxbaum R.E. and Kinney A.B., *Hydrogen transport through Tubular Membranes of Palladium-Coated Tantalum and Niobium*, Ind. Eng. Chem. Res., 35, 530-537, 1996
- [4] Duda F.P., Souza A.C., Guimarães L.J. and Barbosa J.M., *An one dimensional coupled model for deformation, degradation and solute diffusion in elastic solids*. III European Conference on Computational Mechanics Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering C.A. Mota Soares et.al. (eds.). Lisbon, Portugal, 5–8 June 2006
- [5] Fried E. and Sellers S., *Theory for atomic diffusion on fixed and deformable crystal lattices*, Journal of Elasticity, 59, 67-81, 2000.

- [6] Fried E. and Gurtin M., *Coherent Solid-State Phase Transitions with Atomic Diffusion: A Thermomechanical Treatment*, J. Statistical Physics, 95, N.5-6, 1361-1427, 1999.
- [7] Fried E. and Gurtin M., *A unified treatment of evolving interfaces accounting for small deformations and atomic transport with emphasis on grain-boundaries and epitaxy*, Advances in Applied Mechanics, 40, 1-177, 2004.
- [8] Gamgloff R., *Hydrogen Assisted cracking of high strength alloys: comprehensive structural integrity*, Vol. 6, Elsevier Science, NY, 2003.
- [9] Gibbs J.W., *The Scientific Papers of J. Williard Gibbs*, Volume One, Thermodynamics, 1993.
- [10] Gurtin M.E., Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard, *Equations based on a microforce balance*, Physica D, 92, 178-192, 1996.
- [11] Larch F.C. and Cahn J.W., *The effect of self-stress on diffusion in solids*, Acta Metallurgica, 30, 1835-1845, 1982.
- [12] Larch F.C. and Cahn J.W., *The interactions of composition and stress in crystalline solids*, Acta Metallurgica, 33, 331-357, 1985.
- [13] Larch F.C. and Cahn J.W., *A linear theory of thermochemical equilibrium of solids under stress*, Acta Metallurgica, 21, 1051-1063, 1973.
- [14] Li J.C.M., Oriani R.A. and Darken L.S., The thermodynamics of stressed solids, Z. physik. Chem. Neue Folg, Bd. 49, 271-290, 1966.
- [15] Podio-Guidugli P., *Models of phase segregation and diffusion of atomic species on a lattice*, Ricerche di Matematica, 55, 105-118, 2006.
- [16] Pound B.G., *Hydrogen trapping in high-strength steels*, Acta Mater, 46, 5733-5743, 1998.
- [17] Sofronis P., *The influence of mobility of dissolved hydrogen on the elastic response of a metal*, J. Mech. Phys. Solids, 43, 1385-1407, 1995.
- [18] Taha A. and Sofronis P., *A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement*, Eng. Fracture Mech., 68, 803-837, 2001.
- [19] Thomas J.P. and Chopin C.E., *Modeling of coupled deformation-diffusion in non-porous solids*, International Journal of Engineering Science, 37, 1-24, 1999.

- [20]Toribio J.P., *A fracture criterion for high strength steel notched bars*, Eng. Fracture mech, 57, 391-404, 1997.
- [21]Wang M., Akiyana E. and Tsuzaki K., *Effect of hydrogen and stress concentration on the notch tensile strength of AISI 4135 steel*, Mat. Sc. Eng. A., 398, 37-46, 2005.
- [22]Wang W.L., Lee S. and Chen J.R., *Diffusion-induced stresses in a hollow cylinder*, Mat. Sc. Eng. A., 285, 186-194, 2000.
- [23]Wang W.L., Lee S. and Chen J.R., *Effect of chemical stress on diffusion in a hollow cylinder*, Journal of applied physics, Volume 91, number 12, 2002

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)