

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
ENGENHARIA DE MATERIAIS

APLICAÇÃO DE MODELOS DE FRATURA ELÁSTICA E DE DANO PARA A
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DO HIDROGÊNIO NA
PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA

Jorge Antonio Palma Carrasco

Campina Grande
Fevereiro/2008

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
ENGENHARIA DE MATERIAIS

APLICAÇÃO DE MODELOS DE FRATURA ELÁSTICA E DE DANO PARA A
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DO HIDROGÊNIO NA
PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA

Jorge Antonio Palma Carrasco

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Ciência e Engenharia
de Materiais como requisito parcial
à obtenção do título de MESTRE EM
CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS

Orientador: Dr. Antonio Almeida Silva

Co-orientador: Dr. Neilor Cesar dos Santos

Campina Grande

Fevereiro/2008



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFPG

C313a

2008 Carrasco, Jorge Antonio Palma.

Aplicação de modelos de fratura elástica e de dano para a simulação numérica da influência do hidrogênio na propagação de trincas em aços de alta resistência / Jorge Antonio Palma Carrasco. — Campina Grande, 2008. 114f. : il

Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

Referências.

Orientador: Dr. Antonio Almeida Silva.

1. Mecânica - Fratura. 2. Fragilização. 3. Método dos Elementos Finitos.
I. Título.

CDU 531.45(043)

DEDICATÓRIA

A meu pai, Nicéforo Palma e à memória da minha mãe, Leonor Carrasco.

A eles devo tudo o que sou.

Jorge Antonio Palma Carrasco

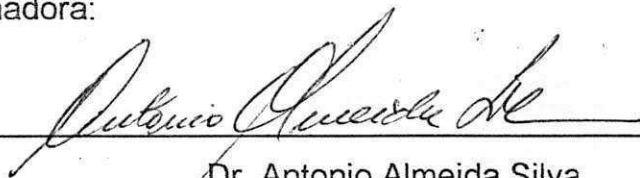
Engenheiro Agrícola pela UFPB (1987).

**APLICAÇÃO DE MODELOS DE FRATURA ELÁSTICA E DE DANO PARA A
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DO HIDROGÊNIO NA
PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA**

Jorge Antonio Palma Carrasco

Dissertação aprovada em 29 de fevereiro de 2008, pela banca examinadora constituída dos seguintes membros:


Banca Examinadora:



Dr. Antonio Almeida Silva

Orientador


UAEM - UFCG



Dr. Neilor Cesar dos Santos

Co-Orientador

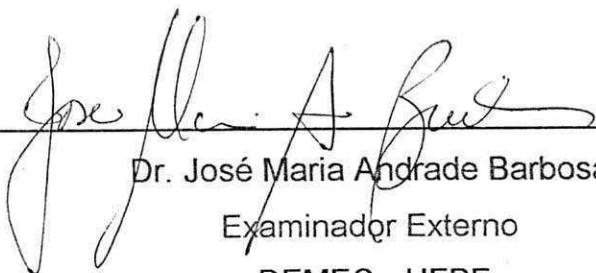
CEFET - PB



Dr. Marco Antonio dos Santos

Examinador Interno

UALM - UFCG



Dr. José Maria Andrade Barbosa

Examinador Externo

DEMEC - UFPE

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter colocado no meu caminho esta oportunidade de realização pessoal e profissional.

A minha esposa e filhos, pelo apoio e compreensão mostrados ao longo destes anos de estudo. Nem sempre é fácil ter um estudante-velho em casa.

Ao Prof. Dr. Antonio Almeida Silva, pela excelente orientação, profissionalismo e particular dedicação a este trabalho. Sou especialmente grato pela sua fraterna amizade e pela confiança em mim depositada.

Ao Prof. Dr. Neilor Cesar dos Santos, pelo apoio na orientação do trabalho, os conhecimentos transmitidos e pelas sugestões realizadas durante o desenvolvimento e conclusão da pesquisa.

Ao Prof. Dr. José Maria Andrade Barbosa, pelo apoio na busca de soluções para levantar as dúvidas surgidas durante a pesquisa, e pelos importantes conhecimentos transmitidos. A rotina computacional de sua autoria, utilizada na simulação, foi chave na obtenção dos resultados finais.

Ao Prof. Dr. Marco Antonio dos Santos, cujos ensinamentos e experiência na área da mecânica da fratura me motivaram a procurar o aperfeiçoamento no trabalho.

Aos membros da equipe do Projeto DANODUTOS, pelo apoio, interesse e incentivo constante. Aos colegas de trabalho do Laboratório de Simulação e Modelagem Computacional do DEM/UFCCG, pela colaboração e amizade.

Aos órgãos FINEP / CTPETRO / CNPq / PETROBRAS, por ter financiado o desenvolvimento deste trabalho de pesquisa.

APLICAÇÃO DE MODELOS DE FRATURA ELÁSTICA E DE DANO PARA A SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DO HIDROGÊNIO NA PROPAGAÇÃO DE TRINCAS EM AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA

RESUMO

Foi implementado um modelo computacional consistente, baseado na Mecânica da Fratura Linear Elástica e na Mecânica do Dano Contínuo, para simular o problema da propagação de uma trinca submetida a um esforço mecânico e ao efeito da degradação provocada pela difusão do hidrogênio na estrutura cristalina de um aço de alta resistência. Na implementação dos modelos para o cálculo do fator de intensidade de tensões no material hidrogenado e na simulação do crescimento e propagação de trincas, foram utilizados o Método dos Elementos Finitos e o Método de Runge-Kutta de quarta ordem, respectivamente. Os resultados obtidos nas simulações confirmaram a influência da presença do hidrogênio na variação do fator de intensidade de tensões quando é considerado o seu efeito sobre os módulos elásticos do material. Do mesmo modo, a partir da aplicação do modelo de dano, foi observada a influência da presença do hidrogênio na diminuição do tempo de início e propagação de trincas.

PUBLICAÇÕES

- CARRASCO, J.P.; SANTOS, N.C.; SILVA, A.A. Numerical Simulation of the Hydrogen Effect on the Deformations of Test Body Models Loaded Under Tensile Stress. **International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry**, v.1, n.1, p. 55-62, 2007.
- CARRASCO, J.P.; SANTOS, N.C.; SILVA, A.A. Análisis Numérico del Efecto del Hidrógeno sobre las Deformaciones de una Chapa Cargada Axialmente. In: 8º CONGRESO IBEROAMERICANO DE INGENIERÍA MECÁNICA, CIBIM 8, 2007, Cusco - Perú.
- CARRASCO, J.P. *et al.* Simulación Numérica del Efecto del Hidrógeno en Modelos de Cuerpo de Prueba Sometidos a Cargamentos de Tracción. In: XVII CONGRESO NACIONAL DE INGENIERÍA MECÁNICA, CNIM XVII, 2008, v.1, p. 783-789, Gijón - España.

SUMÁRIO

	Pág.
AGRADECIMENTOS.....	i
RESUMO.....	II
ABSTRACT.....	iii
PUBLICAÇÕES.....	iv
SUMÁRIO.....	v
ÍNDICE DE TABELAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
SÍMBOLOS E ABREVIações.....	xiii
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Motivação do Trabalho.....	1
1.2 Objetivos.....	6
1.2.1 Objetivo geral.....	6
1.2.2 Objetivos específicos.....	6
1.3 Metodologia Empregada no Desenvolvimento do Trabalho.....	7
1.4 Delimitação do Trabalho.....	8
1.5 Organização do Trabalho.....	9
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	11
3. EFEITOS DO HIDROGÊNIO NOS METAIS.....	24
3.1 Ingresso, Transporte e Aprisionamento de Hidrogênio nos Metais..	24
3.1.1 Ingresso.....	24
3.1.2 Transporte.....	25
3.1.3 Aprisionamento.....	29
3.2 Danos Ocasionados pelo Hidrogênio nos Metais.....	29
3.2.1 Fragilização por hidrogênio (Hydrogen Embrittlement - HE ou Hydrogen Stress Cracking - HSC).....	30
3.2.2 Trincamento induzido pelo hidrogênio (Hydrogen Induced Cracking - HIC).....	30

	Pág.
3.2.3 Trincamento gradual induzido pelo hidrogênio (Stepwise Cracking - SWC).....	31
3.2.4 Fragilização por compostos de enxofre (Sulphide Stress Cracking - SSC).....	32
3.2.5 Trincamento induzido pelo hidrogênio sob tensão orientada (Stress Oriented Hydrogen Induced Cracking - SOHIC).....	32
3.2.6 Reação do hidrogênio com a matriz metálica - formação de hidretos (hydrogen reaction with the metal matrix - hydride formation).....	33
3.2.7 Reação do hidrogênio com fases não metálicas (hydrogen reactions with non-metallic phases).....	33
3.3 Mecanismos de Fragilização por Hidrogênio.....	33
3.3.1 Modelo da decoesão intensificada pelo hidrogênio - HEDE.....	34
3.3.2 Modelo de plastificação localizada intensificada pelo hidrogênio - HELP.....	35
3.4 Efeitos da Interação do Hidrogênio com o Material.....	35
3.5 Concentração de Hidrogênio no Reticulado Cristalino.....	37
4. MECÂNICA DA FRATURA LINEAR ELÁSTICA.....	39
4.1 Fratura Assistida pelo Hidrogênio.....	44
4.2 Mecânica da Fratura Computacional.....	46
4.2.1 Elementos finitos especiais.....	47
4.2.1.1 Elementos com funções de forma distorcidas.....	48
4.2.2 Métodos para determinação dos parâmetros da fratura linear elástica.....	49
4.2.2.1 Técnica de correlação dos deslocamentos - TCD.....	50
4.2.2.2 Método da integral de fechamento de trinca modificado - IFTM....	51
4.2.2.3 Método da integral de domínio equivalente - IDE.....	54
5. MECÂNICA DO DANO CONTÍNUO.....	57
5.1 Aspectos Fenomenológicos do Dano.....	58
5.1.1 Elasticidade e dano.....	60

	Pág.	
5.1.2	Plasticidade e dano.....	61
5.2	Descrição do Dano na Meso-escala.....	61
5.2.1	Dano frágil ou quase-frágil.....	62
5.2.2	Dano dúctil.....	62
5.2.3	Dano por fluência.....	63
5.2.4	Dano por fadiga de baixo ciclo.....	63
5.2.5	Dano por fadiga de alto ciclo.....	63
5.3	Manifestações do Dano na Macro-escala.....	63
5.3.1	Manifestação do dano frágil.....	64
5.3.2	Manifestação do dano dúctil.....	64
5.3.3	Manifestação do dano por fluência.....	65
5.3.4	Manifestação do dano por fadiga de baixo ciclo.....	65
5.3.5	Manifestação do dano por fadiga de alto ciclo.....	66
5.4	Dano Isotrópico.....	67
5.5	Dano Assistido pelo Hidrogênio.....	68
5.6	Início e Crescimento de Trincas em Processos de Danificação Assistida pelo Hidrogênio.....	73
5.6.1	Mecânica do crescimento das trincas.....	73
5.6.2	Transporte de massa através das trincas.....	76
6.	METODOLOGIA COMPUTACIONAL	80
6.1	Formulação Numérica.....	80
6.1.1	Problema da mecânica da fratura linear elástica - cálculo do fator de intensidade de tensões.....	80
6.1.1.1	Formulação com elementos finitos.....	84
6.1.2	Problema da mecânica do dano - propagação de uma trinca sob efeitos de um carregamento estático e do hidrogênio.....	86
7.	RESULTADOS E DISCUSÃO	91
7.1	Solução do Problema do Cálculo do Fator de Intensidade de Tensões.....	92

	Pág.
7.2 Solução do Problema do Crescimento e Propagação da Trinca....	96
8. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	105
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	108

ÍNDICE DE TABELAS

	Pág.
Tabela 1.1 Evolução do consumo de gás natural no Brasil.....	2
Tabela 3.1 Preferência do hidrogênio para a ocupação dos NILS em diferentes metais.....	26
Tabela 3.2 N° de sítios intersticiais por átomo em estruturas CCC e CFC.....	27
Tabela 7.1 Composição química do aço MARAGING T-250.....	91
Tabela 7.2 Propriedades físicas e mecânicas do aço MARAGING T-250.....	91
Tabela 7.3 Dimensões do corpo material mostrado na Figura 6.2.....	92
Tabela 7.4 Parâmetros materiais.....	92
Tabela 7.5 Fatores de intensidade de tensões teórico e simulado para diferentes carregamentos aplicados.....	93
Tabela 7.6. Fator de intensidade de tensões para diferentes concentrações de hidrogênio, considerando o efeito no módulo de Young.....	95
Tabela 7.7. Fator de intensidade de tensões para diferentes concentrações de hidrogênio, sem considerar o efeito no módulo de Young.....	95
Tabela 7.8 Parâmetros materiais.....	96

ÍNDICE DE FIGURAS

		Pág.
Figura 1.1	Custos de diferentes tipos de transporte de petróleo e derivados.....	1
Figura 2.1	Curvas tensão-deformação plotadas para um aço Maraging. classe 300.....	13
Figura 2.2	Distribuição de hidrogênio na ponta da trinca: (a) nos NILS; (b) nos aprisionadores.....	14
Figura 2.3	Distribuição das tensões na estrutura de três modelos materiais com o material hidrogenado.....	15
Figura 2.4	Profundidade do dano Vs. o tempo de fragilização.....	17
Figura 2.5	Estágios da propagação da trinca.....	18
Figura 2.6	Variação do fator de intensidade de tensões com o tempo para a fratura plástica de um cristal CCC.....	19
Figura 2.7	Evolução de uma micro-trinca numa estrutura CCC tensionada: (a) livre de hidrogênio; (b) com um átomo de hidrogênio.....	21
Figura 2.8	Evolução do dano com $\lambda = 0,1$	22
Figura 2.9	Distribuição do dano ao longo de uma barra devido à ação do hidrogênio.....	23
Figura 3.1	Modelo de McCrighth da evolução do movimento do hidrogênio no seu ingresso ao material.....	25
Figura 3.2	Sítios intersticiais em estruturas CCC: (a) octaédricos; b) tetraédricos.....	26
Figura 3.3	HIC de um aço-carbono em ambiente de H ₂ S. As bolhas são associadas às inclusões de MnS.....	31
Figura 3.4	Dano por trincamento gradual Induzido pelo hidrogênio - SWC.....	31
Figura 3.5	Trincamento induzido pelo hidrogênio sob tensão orientada – SOHIC.....	32
Figura 4.1	Modos básicos de carregamento de uma trinca.....	40

	Pág.	
Figura 4.2	Distribuição de tensões na vizinhança da ponta de uma trinca.....	41
Figura 4.3	Esquema da região plastificada na frente da ponta da trinca..	43
Figura 4.4	Alteração de K_I com a propagação subcrítica da trinca num ensaio com controle de carga.....	45
Figura 4.5	Elementos singulares <i>quarter-point</i>	48
Figura 4.6	Rosetas de elementos <i>quarter-point</i> : (a) padrão; (b) com elementos a 40°; (c) com elementos a 30°	49
Figura 4.7	Elemento <i>quarter-point</i> na ponta da trinca.....	51
Figura 4.8	Conceito de Irwin para o fechamento da trinca.....	52
Figura 4.9	Forças nodais na frente da ponta da trinca.....	53
Figura 4.10	Contorno arbitrário em torno da ponta da trinca.....	54
Figura 4.11	Área anelar para o cálculo da integral J	55
Figura 5.1	Processo de transição entre dano e fratura.....	59
Figura 5.2	Elemento de volume representativo.....	62
Figura 5.3	Resposta macroscópica frágil.....	64
Figura 5.4	Resposta macroscópica dúctil.....	64
Figura 5.5	Manifestação macroscópica do dano por deformação lenta no meio contínuo.....	65
Figura 5.6	Manifestação do dano por fadiga de baixo ciclo no meio contínuo.....	66
Figura 5.7	Manifestação do dano por fadiga do alto ciclo no meio contínuo.....	66
Figura 5.8	Distribuição dos danos mecânico e de fragilização numa trinca superficial no modo I.....	72
Figura 5.9	Definição das variações-G.....	74
Figura 5.10	Classificação do estado dos corpos trincados, sob os pontos de vista do equilíbrio e da estabilidade.....	75
Figura 5.11	Distribuição do agente ativo dentro de uma trinca.....	78
Figura 6.1	Fluxograma do algoritmo utilizado na solução do problema	

	Pág.
	do cálculo do fator de intensidade de tensões..... 81
Figura 6.2	Concentração de hidrogênio ao redor da ponta de uma trinca superficial no modo I de carregamento 82
Figura 6.3	Geometria do corpo material utilizado na simulação..... 83
Figura 6.4	Geometria da trinca presente no corpo material utilizado na simulação..... 83
Figura 6.5	Roseta de elementos <i>quarter-point</i> utilizada na simulação..... 86
Figura 6.6	Fluxograma do algoritmo utilizado para a solução do problema de propagação da trinca..... 87
Figura 6.7	Distribuição das tensões na frente de uma trinca superficial no modo I de carregamento..... 90
Figura 7.1	(a) Corpo material submetido a um esforço de tração; (b) distribuição de tensões na estrutura..... 93
Figura 7.2	Distribuição de tensões na frente da ponta da trinca..... 94
Figura 7.3	Transporte de hidrogênio na ponta da trinca. Solução da equação de transporte de massa..... 97
Figura 7.4	Evolução da concentração do agente na ponta da trinca. Aplicação do modelo completo..... 98
Figura 7.5	Evolução do dano na ponta da trinca devido à ação do hidrogênio..... 99
Figura 7.6	Evolução do dano na ponta da trinca devido ao carregamento mecânico..... 99
Figura 7.7	Evolução do crescimento da trinca..... 100
Figura 7.8	Evolução do raio efetivo da ponta da trinca..... 101
Figura 7.9	Evolução do fator de intensidade de tensões..... 102
Figura 7.10	Evolução do dano na ponta da trinca devido à corrosão em SCC..... 103
Figura 7.11	Evolução do dano na ponta da trinca devido ao carregamento mecânico em SCC..... 103
Figura 7.12	Evolução do raio efetivo da ponta da trinca em SCC..... 104

SÍMBOLOS E ABREVIações

a	Comprimento da trinca (m)
A	Área (m ²)
b	Espessura (m)
c_L	Concentração de equilíbrio nos NIS (átomos soluto/átomo solvente)
c	Concentração (% p)
c_b	Concentração característica para o rápido crescimento da trinca (% p)
c_e	Concentração de entrada na boca da trinca (% p)
c_h	Concentração estacionária para uma trinca estacionária (% p)
c_0	Concentração inicial nos NIS (átomos soluto/átomo solvente)
D	Constante de difusão (m ² /s)
e^H	Dilatação local da estrutura provocada pelo hidrogênio (adim.)
E	Módulo de Young (Pa)
E^H	Módulo de Young do material hydrogenado (Pa)
F	Força nodal (N)
G_j	Força generalizada de propagação (J/m ²)
G_I	Taxa de liberação de energia de deformação elástica no modo I (J/m ²)
G_{IC}	Taxa crítica de liberação de energia de deformação elástica (J/m ²)
J_D	Fluxo de difusão (kg/m ² ·s)
J	Integral J (J/m ²)
k	Constante de Boltzmann (J/átomo·K)
k_0	Parâmetro de transferência de massa (m/s)
l	Comprimento (m)
K	Fator de intensidade de tensões (Pa√m)
K_I	Fator de intensidade de tensões no modo I (Pa√m)
K_{IC}	Fator de intensidade de tensões crítico no modo I em EPD (Pa√m)
K_C	Fator de intensidade de tensões crítico no modo I em EPT (Pa√m)
K_{IIAC}	Fator de intensidade de tensões limite no modo I em HAC (Pa√m)
K_L	Constante de equilíbrio (adim.)

N_A	Número de Avogadro (átomos/mol)
P	Força aplicada (N)
r	Raio (m)
R	Constante universal dos gases (J/mol·K)
S	Comprimento circular (m)
t	tempo (s)
t_c	Constante do tempo (s)
T	Temperatura absoluta (K)
v	Volume (m ³)
V_H	Volume parcial molar do hidrogênio no ferro (m ³ /mol)
V_M	Volume molar do ferro (m ³ /mol)
w	Largura (m)
W	Trabalho (J)
W_{int}^1	Energia de interação de 1ª ordem (J)
W_{int}^2	Energia de interação de 2ª ordem (J)
Y	Fator de forma (adim.)
∇	Operador gradiente (adim.)
α	Parâmetro material (adim.)
β	Nº de NILS disponíveis (adim.)
γ	Trabalho específico de fratura (J/m ²)
γ_0	Trabalho específico de fratura para um corpo não danificado (J/m ²)
Γ_j	Força generalizada de resistência (J/m ²)
δ_{ij}	Delta de Kronecker (adim.)
ε_{ij}	Deformações (m/m)
ε_{ij}^H	Deformação da estrutura provocada pelo hidrogênio (adim.)
θ_l	Ocupação dos NILS (adim.)
λ_D	Comprimento característico da zona de difusão (µm)
λ_h	Comprimento da zona de processo da fragilização (µm)

μ	Módulo de cisalhamento (Pa)
μ^H	Módulo de cisalhamento do material hidrogenado (Pa)
ρ	Raio de curvatura da ponta da trinca (μm)
ρ_s	Raio de curvatura da ponta aguçada (μm)
ρ_b	Raio de curvatura da ponta embotada (μm)
σ	Tensão normal (Pa)
σ_e	Tensão de escoamento (Pa)
σ_h	Tensão hidrostática (Pa)
σ_{max}	Tensão máxima (Pa)
σ_r	Tensão limite de resistência do material (Pa)
σ_w	Tensão aplicada (Pa)
σ_s	Parâmetro de resistência ao dano pelo carregamento estático (Pa)
σ_{th}	Tensão limiar (Pa)
τ_D	Tempo característico da difusão (s)
ν	Módulo de Poisson (adim.)
φ	Potencial químico (J/mol)
χ	Parâmetro que caracteriza a tenacidade à fratura residual (adim.)
ψ_h	Dano na ponta da trinca devido à fragilização (adim.)
ψ_s	Dano na ponta da trinca devido ao carregamento estático (adim.)
ω	Dano (adim.)
ω_h	Dano devido à fragilização (adim.)
ω_s	Dano devido ao carregamento estático (adim.)
Ω	Volume atômico médio do átomo hospedeiro (m^3)
$[B]$	Matriz deformação-deslocamento
$[c_L]$	Matriz das concentrações
$[E]$	Matriz das propriedades constitutivas
$[E^H]$	Matriz das propriedades constitutivas modificadas pelo hidrogênio
$[K]$	Matriz de rigidez

- [N] Matriz das funciones de forma
- { r_e } Vetor das forças aplicadas
- { P } Vetor das forças externas
- { U } Vetor dos deslocamentos nodais
- { ε^H } Vetor das deformações provocadas pelo hidrogênio
- [σ_{kk}] Matriz das tensões locais

1. INTRODUÇÃO

1.1 Motivação do Trabalho

A movimentação de petróleo e derivados por dutos atualmente é uma das mais importantes alternativas de transporte, pois continua sendo uma das mais baratas dentre as usadas pela indústria petrolífera (KENNEDY *apud* CABRAL, 2007). O custo de transporte através deles somente é maior que o realizado por navios, como pode ser observado na Figura 1.1. Os dutos também se destacam por apresentarem um baixo consumo de energia por tonelada de carga transportada em relação a outros tipos de transporte, e por merecer uma alta confiabilidade devido ao seu grau de automação, o que permite que operem continuamente sem serem afetados pela ação da natureza, pois a maioria deles é enterrada (LIU *apud* CABRAL, 2007).

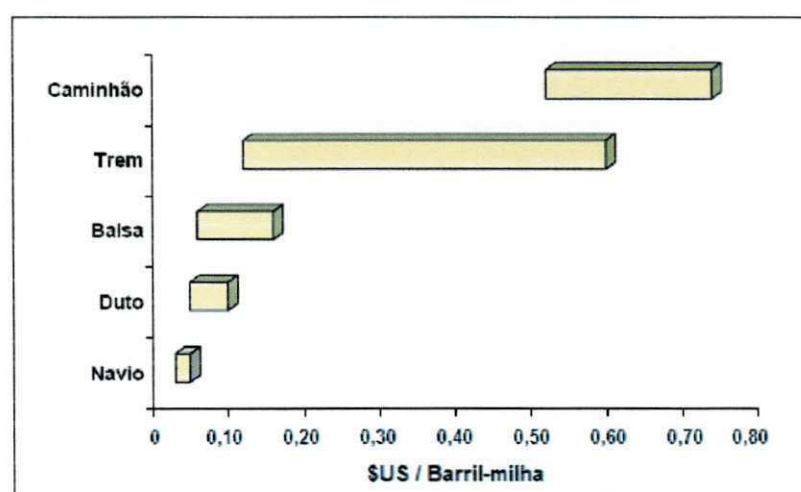


Figura 1.1. Custos de diferentes tipos de transporte de petróleo e derivados.

(Fonte: adaptado de CABRAL, 2007)

A partir da entrada do gás natural da Bolívia e o conseqüente aumento de oferta interna, das gestões em diversos níveis para seu uso mais intenso e, finalmente, da instalação de usinas termoeletricas motivada pelo racionamento de energia elétrica ocorrido em 2001, o gás natural começou a apresentar um crescimento de consumo mais acentuado, que até 1998 foi bastante lento

(Tabela 1.1). Em 1999 foi o energético que apresentou a maior taxa de crescimento de consumo em relação a 1998. Enquanto em 1973 o consumo de gás natural representou 0,4% do total da energia consumida no país, em 2006 passou a representar 9,6%; no mesmo período de tempo, o consumo de petróleo e derivados, que representava 45,6% da energia total consumida no país, passou a representar 37,8%. Em 2006, o consumo de petróleo e derivados obteve um crescimento de 1,1% em relação a 2005 e o consumo de gás natural de 5,8% (BALANÇO ENERGETICO NACIONAL - BEN 2003; BEN 2007).

Segundo as projeções realizadas pela PETROBRAS para os próximos cinco anos, o crescimento do consumo de gás natural deverá continuar a uma taxa anual de 19,4% (PLANO ESTRATÉGICO PETROBRAS 2020, 2007).

Tabela 1.1. Evolução do consumo de gás natural no Brasil.

Período	Consumo (10³ TEP)
1970	70
1975	364
1980	882
1985	2.233
1990	3.034
1995	3.930
2000	7.115
2001	8.254
2002	10.066
2003	10.901
2005	20.500
2006	21.600

Fonte: Elab. Própria. Dados do BEN, 2003 e do BEN, 2007

O crescimento do consumo de derivados de petróleo e gás natural, alavancado principalmente por este último, associado às vantagens do seu transporte por dutos, tem exigido não só o uso intensivo da malha dutoviária existente no país, como incentivado a sua expansão. A PETROBRAS projeta realizar investimentos de 2.264 milhões de dólares até 2020 na construção de novos dutos para ampliar os 31.000km existentes na malha nacional (PLANO

ESTRATÉGICO PETROBRAS 2020, 2007). Por tal motivo, além da implantação de novas tubulações, há também uma preocupação em estender a vida útil das unidades já instaladas, fazendo-se necessário investir em componentes estruturais de maior confiabilidade e em métodos de monitoramento da integridade estrutural dos dutos que garantam maior segurança na operação.

Dois avanços importantes durante os últimos anos facilitaram o gerenciamento de sistemas de supervisão da integridade estrutural de componentes em aplicações de alto desempenho: primeiro, a Mecânica da Fratura foi estabelecida como o principal ambiente para modelar a tolerância ao trincamento de componentes em aplicações críticas (IRWIN & POÇOS; PARIS) *apud* (GANGLOFF, 2003); segundo, foram desenvolvidas ligas metálicas com um excelente equilíbrio entre alta resistência e alta tenacidade à fratura (GARRISON; WELLS; BOYER; STARKE & STANLEY; OLSON; KOLTS) *apud* (GANGLOFF, 2003). Estas ligas novas e a incorporação de ferramentas de análise mais sofisticadas satisfizeram as necessidades tecnológicas de otimização e administração do desempenho de componentes estruturais nos setores aeroespacial, da defesa, do transporte e da energia.

Em função do crescente aumento do transporte de derivados de petróleo em dutos terrestres sob severas condições de trabalho, as especificações dos tubos para gasodutos e oleodutos, foram-se tornando mais exigentes. A tendência mundial aponta para a utilização de tubos de grandes diâmetros que operem sob alta pressão, possibilitando um aumento na produtividade tanto pelo aumento do volume do fluido transportado, quanto pela redução do peso da estrutura devido à menor espessura da parede. Isto só é possível com o desenvolvimento de aços com características de soldabilidade, resistência mecânica e tenacidade cada vez melhores, entre os que se podem citar os da série API 5L: X60, X70, X80 e a nova geração X100, que já se encontra em serviço nos EUA (HARDIE *et al.*, 2006). Denominados também de aços ARBL (Alta Resistência e Baixa Liga), além de apresentar características de alta resistência, estes aços mostram comportamento dúctil na fratura, o que

possibilita a detecção antecipada do crescimento de trincas e a previsão de pressões de colapso em dutos (HIPPERT, 2004).

Apesar destes avanços, a presença do hidrogênio nas ligas metálicas de alta resistência continua causando problemas como a diminuição da sua tenacidade à fratura: os níveis do Fator de Intensidade de Tensões que produzem trincamento subcrítico induzido pelo hidrogênio continuam muito baixos, da ordem de 5% a 25% da sua tenacidade à fratura (GANGLOFF, 2003). Embora tenha sido desenvolvida uma ampla pesquisa sobre os efeitos do hidrogênio nos metais, resultando em mais de uma centena de artigos científicos, estes efeitos continuam sendo um fator crítico em aplicações estruturais com aços de alta resistência; é fato comprovado que, quanto maior é a resistência mecânica de um aço, maior é sua suscetibilidade à fragilização por hidrogênio (BASTIAN *apud* STROHAECKER, 2006; INTERRANTE *apud* TELICHEV & VINOGRADOV, 2006; HARDIE *et al.*, 2006). Em outras palavras, as melhoras obtidas em décadas de pesquisa metalúrgica vêm sendo comprometidas pela persistente ocorrência desse fenômeno.

Vários procedimentos de engenharia foram desenvolvidos pela indústria e pelos órgãos reguladores em diversos países para avaliar a integridade de estruturas trincadas (CRUZ *apud* HIPPERT, 2004) e de estruturas sob assistência do ambiente (NATIONAL ENERGY BOARD, 1996). Nos sistemas dutoviários essas avaliações têm por objetivo aumentar a confiabilidade operacional das unidades, estenderem a sua vida útil e minimizar riscos de perdas de produto e desastres ambientais. Pelo fato de que elas operam em meios agressivos e têm sua vida limitada pela degradação dos materiais utilizados, as avaliações estruturais dos efeitos do ambiente se tornam cada vez mais necessárias.

Assim, a identificação, o monitoramento do crescimento e a determinação precisa do tamanho crítico dos defeitos existentes no material dos dutos, e do efeito do ambiente sobre eles, tornam-se de fundamental importância para a operação segura de sistemas dutoviários modernos. No entanto, devido à complexidade das condições reais de carregamento, o estudo analítico e a quantificação dos valores da tenacidade de uma estrutura

específica são bastante caros e demorados. Outra limitante de grande importância é a dificuldade em se transferir resultados obtidos em corpos-de-prova de laboratório para as condições reais encontradas em estruturas de engenharia.

Estas questões vêm motivando o desenvolvimento de diversas metodologias para o estudo da fratura em materiais estruturais, via simulação numérica, no contexto da teoria da Mecânica do Dano Contínuo e vêm sendo recebidas com muito interesse por parte da comunidade científica. Dessas novas metodologias, as mais robustas consideram o acoplamento de modelos micro-mecânicos do mecanismo de falha do material ao regime macroscópico, o que é feito empregando-se equações constitutivas para descrever as etapas do processo fenomenológico de dano e a conseqüente perda de resistência do material.

As teorias da Mecânica do Dano Contínuo e da Mecânica da Fratura são geralmente usadas em forma separada para descrever a falha do material. O início da propagação de uma trinca pode ser vista como o resultado de uma acumulação não tolerável do dano, mas se a sua localização e a direção segundo a qual se propaga forem desconhecidas, muito dificilmente a Mecânica da Fratura poderá ser utilizada, uma vez que a falha crítica a partir da qual a trinca se inicia tem que ser determinada previamente. A Mecânica do Dano Contínuo oferece a vantagem essencial de prever a localização dessa falha crítica através da evolução de um campo de defeitos, considerado inicialmente distribuído numa região específica da estrutura, mas não define a sua orientação e tamanho.

Já existem propostas para a solução destes problemas que pretendem estabelecer uma ligação entre modelos de dano e de fratura numa abordagem unificada de forma a caracterizar a localização do dano e a conseqüente iniciação de fratura, o que também permite formular problemas de origem tanto mecânica, como não mecânica, com a vantagem de evitar a confrontação com problemas decorrentes da aplicação das duas teorias em forma separada (SÁ *et al.*, 2007).

Dentro dessa mesma linha, neste trabalho pretende-se simular numericamente o problema da propagação de uma trinca num corpo material de aço de alta resistência submetido à combinação de uma ação mecânica e de uma ação ambiental, caracterizada pela presença de átomos de hidrogênio em solução sólida, utilizando os recursos da Mecânica da Fratura Linear Elástica e da Mecânica do Dano Contínuo.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo geral

Implementar computacionalmente um modelo teórico consistente, baseado na Mecânica da Fratura Linear Elástica e na Mecânica do Dano Contínuo, para simular o problema da propagação de uma trinca submetida a um esforço mecânico e ao efeito da degradação provocada pela difusão do hidrogênio na estrutura cristalina de um aço de alta resistência.

1.2.2 Objetivos específicos

- Adotar um modelo de transporte de hidrogênio para simulação numérica de problemas de fragilização por hidrogênio em materiais metálicos.
- Estudar a influência do hidrogênio nos módulos elásticos, incorporando no modelo uma formulação para o desenvolvimento deste estudo.
- Estudar um modelo da Mecânica do Dano que permita seu acoplamento com modelos estudados na Mecânica da Fratura.
- Determinar numericamente o fator de intensidade de tensões levando em consideração a concentração de hidrogênio na estrutura do material e os seus efeitos nas suas propriedades constitutivas.
- Estudar o crescimento da trinca como resultado do processo de degradação do material devido à aplicação de um carregamento mecânico estático e à ação do hidrogênio.

1.3 Metodologia Empregada no Desenvolvimento do Trabalho

- Estudo dos diferentes fenômenos de degradação provocados pelo hidrogênio nos metais e dos modelos dos mecanismos mais viáveis que tentam explicá-los. Adoção da Fragilização por Hidrogênio como o tipo de dano a ser estudado e do mecanismo da Decoesão Intensificada pelo Hidrogênio.
- Obtenção via pesquisa bibliográfica, de um modelo de transporte de hidrogênio válido para sua aplicação na simulação numérica de problemas de fragilização por hidrogênio em materiais metálicos. Foi adotado o modelo de transporte de hidrogênio de Lufrano & Sofronis (1998) e de Krom (1998).
- Adoção desse modelo para simular o processo de concentração de hidrogênio num aço de alta resistência e os efeitos da sua interação com o material. Para incorporar no modelo o efeito do hidrogênio nos módulos elásticos do aço foi adotada a relação proposta por Lunarska *et al.* (1976).
- Emprego do modelo na solução de problemas simples. A experiência adquirida na sua formulação, modelagem e simulação, permitiu sua utilização em problemas mais complexos, como o do cálculo das deformações no regime elástico, em estruturas com variações de geometria (CARRASCO *et al.*, 2007), que requer o uso de elementos bidimensionais isoparamétricos.
- Estudo de um modelo de dano, que fosse aplicável a problemas de degradação provocada por ações mecânicas e não mecânicas no regime das deformações elásticas e que permitisse sua conexão com modelos estudados na Mecânica da Fratura. Foi adotado o modelo proposto por Bolotin & Shipkov (2001a).
- Formulação numérica para o cálculo do fator de intensidade de tensões na frente da ponta de uma trinca no modo I acoplado ao problema da concentração de hidrogênio na estrutura do material e dos efeitos nas suas propriedades constitutivas. O problema é considerado bidimensional e a modelagem realizada com o Método dos Elementos Finitos.

- Formulação do problema do início e crescimento da trinca no modo I como resultado do processo de deterioração do material na sua frente devido à aplicação de um carregamento mecânico estático e à ação do hidrogênio. O problema é considerado unidimensional e a modelagem é realizada através do Método de Runge-Kutta de 4ª ordem.
- Acoplamento dos dois problemas através do Fator de Intensidade de Tensões, de uso comum em ambas as formulações. O parâmetro é calculado via Método dos Elementos Finitos sempre que é requerido no problema de crescimento da trinca

1.4 Delimitação do Trabalho

O propósito do trabalho é o de simular numericamente o crescimento e a propagação de uma trinca passante de borda no modo I, submetida a um carregamento mecânico estático e ao efeito de um agente ambiental. Na simulação é considerado um corpo material de um aço de alta resistência com átomos de hidrogênio em solução sólida na sua estrutura cristalina, em estado plano de deformação. Assume-se que o material é homogêneo e isotrópico, de resposta elástico-linear em toda a sua estrutura.

No processo de hidrogenação do material não é considerado o transporte do hidrogênio pelas discordâncias nem o seu aprisionamento nos defeitos micro-estruturais, assumindo-se que a distribuição inicial do hidrogênio é uniforme através de toda a estrutura. As concentrações de equilíbrio são calculadas com as equações básicas e de equilíbrio do modelo de transporte de hidrogênio de Lufrano & Sofronis (1998) e de Krom (1998). O mecanismo adotado neste trabalho para explicar a fragilização por hidrogênio em aços de alta resistência, é o da Decoesão Intensificada pelo Hidrogênio - HIEDÉ, proposto na Teoria de Decoesão (TROIANO *apud* GANGLOFF, 2003).

São utilizadas as teorias da Mecânica da Fratura e da Mecânica do Dano Contínuo dentro do regime das deformações elásticas. O problema do cálculo do Fator de Intensidade de Tensões é considerado bidimensional e o problema da acumulação de dano e a propagação da trinca, unidimensional.

1.5 Organização do Trabalho

O trabalho está dividido em 8 capítulos cuja organização, que guarda uma seqüência lógica de abordagem dos temas, é apresentada a seguir.

No capítulo 2 é realizada uma revisão da literatura necessária ao desenvolvimento do trabalho, referenciando-se os principais artigos utilizados. Inicia-se com citações de artigos que descrevem os efeitos do hidrogênio nos metais em geral e nos aços em particular; em seguida abordam-se artigos que mostram o esforço da comunidade científica em modelar numericamente essa influência e o comportamento dos materiais. A seguir, mostram-se trabalhos que apresentam modelos para a simulação numérica do fenômeno da fragilização por hidrogênio e da fratura assistida pelo ambiente e finalmente, modelos de dano propostos para descrever os processos de deterioração dos materiais provocados por agentes ambientais.

No capítulo 3 apresenta-se uma revisão dos mecanismos de transporte do hidrogênio nos metais, dos diferentes fenômenos de degradação ocasionados por ele, e dos mecanismos mais viáveis propostos pela comunidade científica para explicar o fenômeno da fragilização por hidrogênio. Mostra-se também, o modelo matemático adotado para simular numericamente os efeitos das interações hidrogênio com o metal e sua concentração no reticulado cristalino.

No capítulo 4 são apresentados de forma resumida os fundamentos da Mecânica da Fratura Linear Elástica, com ênfase no tema da Fratura Assistida pelo Ambiente, e da Mecânica da Fratura Computacional, com uma abordagem pelo método dos elementos finitos e das técnicas utilizadas para o cálculo do Fator de Intensidade de Tensões via simulação numérica.

No capítulo 5 apresentam-se alguns fundamentos da Mecânica do Dano Contínuo e um detalhamento do modelo adotado para simular o crescimento de uma trinca sob o efeito de uma solicitação mecânica estática num meio agressivo, que é caracterizado pela difusão do hidrogênio na estrutura cristalina do metal.

No Capítulo 6 apresentam-se os recursos materiais e a metodologia utilizada para a simulação numérica dos problemas acoplados da Mecânica da Fratura e da Mecânica do Dano Contínuo. Basicamente, a metodologia consiste em: (a) uso do Método dos Elementos Finitos para o processo de hidrogenação de um aço de alta resistência e para o cálculo do Fator de Intensidade de Tensões na frente da ponta de uma trinca do material sob os efeitos do hidrogênio; (b) uso desse fator como parâmetro de entrada no problema da simulação do crescimento da trinca, que é resolvido pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

No capítulo 7 apresentam-se os resultados obtidos nas simulações, a sua análise e discussão e a validação da aplicabilidade dos modelos. Os resultados obtidos mostram a influência dos átomos de hidrogênio na variação dos fatores de intensidade de tensões quando é considerado o seu efeito sobre os módulos elásticos do material e a sua grande importância na diminuição do tempo de início e propagação de trincas em materiais hidrogenados.

No capítulo 8 são apresentadas as conclusões do trabalho e recomendações para futuras pesquisas.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O “efeito danoso” do hidrogênio sobre as propriedades mecânicas dos materiais foi inicialmente documentado por Johnson *apud* Robertson (2001), que reportou uma redução da ductilidade e da resistência à fratura do ferro e do aço. Desde então vem sendo comprovado que o hidrogênio degrada também outros metais e ligas metálicas, e que sua presença em solução sólida pode incrementar a taxa de crescimento das trincas (ORIANI, 1993), alterar a mobilidade das discordâncias (ROBERTSON, 2001), e mudar as propriedades constitutivas dos materiais, afetando os seus módulos elásticos.

O efeito da presença do hidrogênio num Ferro- α de alta pureza foi observado por Lunarska *et al.* (1976). Eles verificaram diminuições no seu módulo de cisalhamento, encontrando uma relação entre essa redução e a concentração de hidrogênio. Ko *et al.* (1979), ao calcular as constantes elásticas do Vanádio, encontraram diminuições nos seus módulos de Young e de Elasticidade Volumétrica como uma função da concentração de hidrogênio. Mazzolai & Birnbaum (1985b), analisaram a correlação entre as mudanças nos módulos elásticos do Nióbio e a concentração de hidrogênio com base em resultados experimentais do cálculo das constantes elásticas do sistema Nióbio-Hidrogênio (MAZZOLAI & BIRNBAUM, 1985a).

Também foi observado que o hidrogênio promove efeitos antagônicos sobre os módulos elásticos do mesmo metal, aumentando-os ou diminuindo-os. Enquanto Wriedt & Oriani *apud* Ortiz & Ovejero-García (1992) verificaram experimentalmente que o hidrogênio dissolvido no Vanádio e no Tântalo fez incrementar os seus módulos de Young, Fisher *et al.* *apud* Ortiz & Ovejero-García (1992) reportaram o efeito contrário.

Trabalhando com uma liga de Titânio, Senkov *et al.* (1990), observaram que as variações nos módulos elásticos, como consequência da concentração de hidrogênio e da temperatura, foram diferentes para as fases existentes na liga. Eles explicaram as diferenças encontradas, pela forma de interação do hidrogênio com o material, condicionada pela estrutura cristalina existente em cada fase.

Em cada um dos casos descritos, as diferenças do comportamento do mesmo material frente à ação do hidrogênio, foram atribuídas ao procedimento experimental empregado, à sua escala, à temperatura e à estrutura cristalina predominante nas amostras. Em qualquer caso, a interpretação do comportamento dos materiais hidrogenados na escala macroscópica passa por uma correta compreensão do comportamento do hidrogênio e da resposta dos materiais a nível da micro-estrutura (PUNDT & KIRCHHEIM, 2006).

Atualmente já está bem estabelecido que a ação do hidrogênio varia de acordo com o tipo de aço utilizado (INTERRANTE *apud* TELINCHEV & VINOGRADOV, 2006; HARDIE *et al.*, 2006) e que ocorrem mudanças nas suas propriedades constitutivas provocadas pela introdução desse elemento na sua estrutura cristalina. Esses efeitos também se encontram bem documentados na literatura científica: Igata *et al. apud* Nibur *et al.* (2006) encontraram diminuições no módulo de Young de um aço austenítico Fe-Cr-Mn sob o efeito do hidrogênio. Ortiz & Ovejero-García (1992) trabalhando com os aços AISI 1070 e AISI 1005 observaram diminuições do módulo de Young, que foram correlacionados com a presença de hidrogênio no reticulado cristalino, e estabeleceram uma relação entre a variação desse módulo com a susceptibilidade desses aços à fragilização por hidrogênio.

Tiwari *et al.* (2000) ao estudar o fenômeno da fragilização por hidrogênio em aços e utilizando um novo método de concentração, encontraram incrementos muito importantes nos módulos tangenciais de um aço MARAGING e de um aço de médio teor de carbono. Esses módulos, descritos como a inclinação da porção linear da curva tensão-deformação, são dependentes do módulo de Young. Na Figura 2.1 podem ser observadas as variações na inclinação da porção linear das curvas levantadas para um aço MARAGING classe 300 com e sem hidrogênio.

Recentemente, Nibur *et al.* (2006) ao estudar os efeitos do hidrogênio no movimento e nucleação de discordâncias durante a deformação plástica de um aço inoxidável austenítico, utilizando uma técnica experimental de nano-indentação, observaram diminuições de aproximadamente 20% nos seus módulos elásticos, atribuídas à presença do hidrogênio. Estes resultados foram

mais significativos que os reportados em estudos anteriores e atribuídos ao uso da técnica utilizada, que trabalha em escala nanométrica.

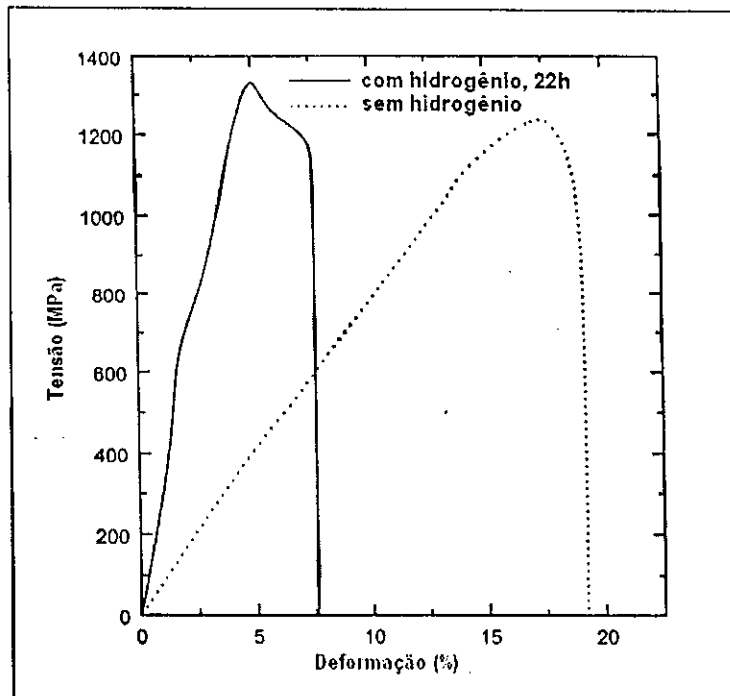


Figura 2.1. Curvas tensão-deformação plotadas para um aço Maraging classe 300 (Fonte: adaptado de TIWARI *et al.*, 2000).

A importância dos efeitos do hidrogênio no comportamento dos materiais e a complexidade de realização de trabalhos experimentais motivaram o desenvolvimento de modelos matemáticos destinados a simular o processo do seu transporte através do reticulado cristalino, sua acumulação e os fenômenos que acompanham sua introdução nele. As simulações numéricas que procuram quantificar os processos elementares em diferentes modelos são bastante promissoras, pois permitem relacionar quantidades locais com parâmetros macroscópicos mensuráveis. Contudo, um número representativo de trabalhos de pesquisa vem sendo desenvolvido envolvendo modelos matemáticos e experimentos macroscópicos (WEBER *et al.*, 2005; GAVRILJUK *et al.*, 2005; YAJIANG *et al.*, 2005) ou unicamente na área experimental (BANERJEE & CHATTERJEE, 2001; ELIAZ *et al.*, 2002; ZOLTOWSKY, 2002; SONG *et al.*, 2004; CHARCA, 2005; STROE, 2006).

Sofronis & McMeeking (1989) utilizando um modelo de difusão baseado na teoria de equilíbrio de Oriani, representado por deslocamento devido à tensão hidrostática e por aprisionamento gerado pela deformação plástica, analisaram a difusão transiente do hidrogênio em ferros e aços e o seu aprisionamento na área em torno da ponta de uma trinca embotada. Esse modelo foi estendido por Lufrano & Sofronis (1998) para estudar o comportamento de aços de alta e baixa resistência com a inclusão do efeito da dilatação induzida pelo hidrogênio nas leis constitutivas do material.

Krom (1998) introduziu na equação da difusão do modelo de Lufrano & Sofronis (1998) um fator da taxa de deformação para explicar com precisão o balanço do hidrogênio nos sítios intersticiais da estrutura cristalina - NILS e nos aprisionadores. Este último modelo foi utilizado por Krom *et al.* (1999) para estudar o efeito da taxa de deformação na distribuição do hidrogênio nos aços e seu efeito no comportamento do material. Eles estabeleceram que as concentrações nos aprisionadores são muito pequenas comparadas com as dos NILS e que não só é importante a quantidade de hidrogênio acumulado na ponta da trinca, mas também o tamanho e a forma das regiões de concentração (Figura 2.2).

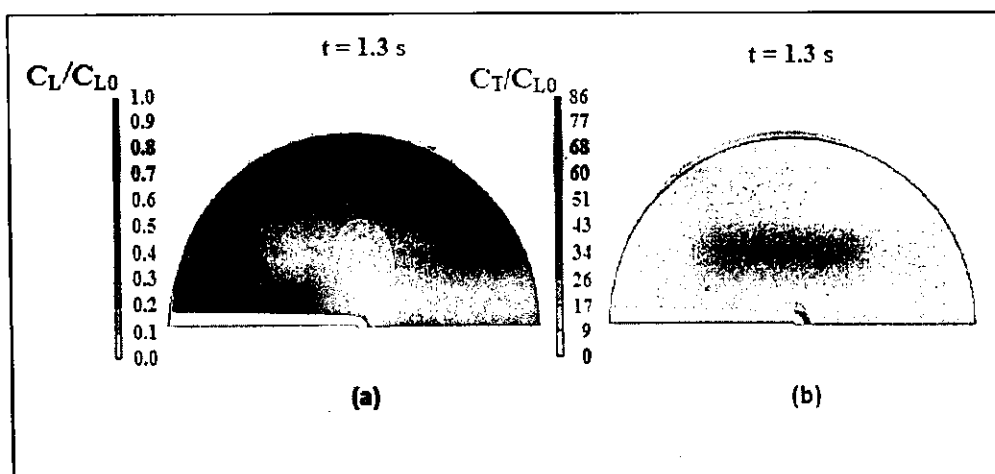


Figura 2.2. Distribuição de hidrogênio na ponta da trinca: (a) nos NILS; (b) nos aprisionadores (Fonte: KROM *et al.*, 1999).

Com o propósito de estudar o efeito do hidrogênio no início da instabilidade plástica em metais e ligas, Sofronis *et al.* (2001) e Liang *et al.* (2003), calcularam as populações de hidrogênio nos NIS em equilíbrio com a tensão hidrostática local na presença de aprisionamento utilizando as equações básicas e de equilíbrio do modelo de Lufrano & Sofronis (1998) e de Krom (1998).

Carrasco *et al.* (2007) utilizaram as equações básicas e de equilíbrio deste último modelo para simular com o Método dos Elementos Finitos, o efeito do hidrogênio no comportamento elástico de um aço de alta resistência, utilizando três modelos materiais (Figura 2.3). Os resultados obtidos permitiram estabelecer que, embora as mudanças no módulo de Young e as variações de volume provocadas pela introdução do hidrogênio na estrutura cristalina do material ocorreram de forma simultânea, a porção mais importante da deformação associada a essas mudanças foi devida ao efeito dilatacional provocado pelos átomos de hidrogênio, sendo praticamente desprezível a parcela atribuída à mudança do módulo de Young.

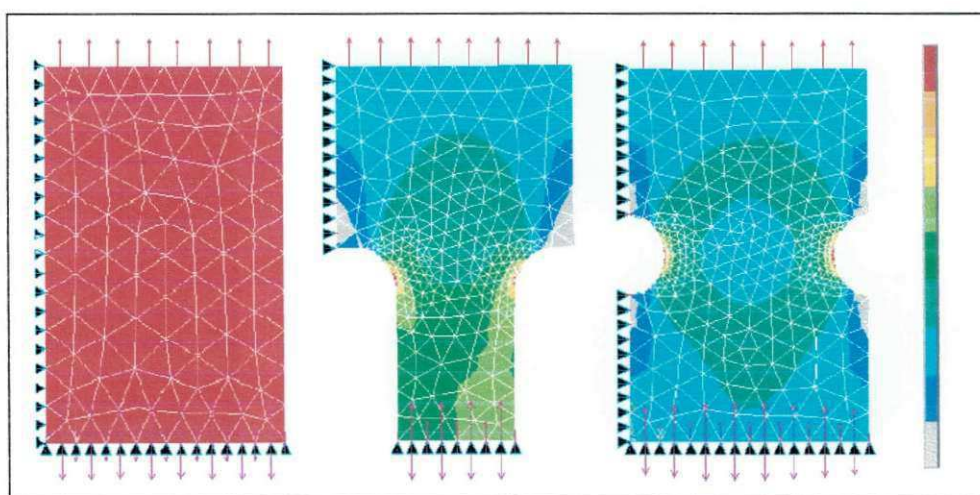


Figura 2.3. Distribuição das tensões na estrutura de três modelos materiais com o material hidrogenado (Fonte: Carrasco *et al.*, 2007).

Existem ainda numerosos trabalhos relativos ao processo de transporte e acumulação do hidrogênio no material. Em geral, os seus autores, seja com base em resultados obtidos em simulações computacionais, em experimentos

de laboratório ou em ambos, são unânimes em concluir que os efeitos do hidrogênio são bastante significativos na degradação das propriedades mecânicas dos materiais, em decorrência de processos de fragilização ou de corrosão, que também podem acarretar o crescimento e propagação de trincas, até a fratura final.

O estudo do fenômeno acoplado da fragilização a nível local e do processo de fraturamento em condições de assistência pelo ambiente, dada a complexidade do trabalho, que envolve as áreas da Ciência dos Materiais e da Mecânica da Fratura, vêm sendo realizado por numerosos pesquisadores e equipes multidisciplinares. São desenvolvidos trabalhos de pesquisa no campo experimental (SELVARAJ, 2002; CAYÓN *et al.*, 2003; MARROW, 2006; ZHANG *et al.*, 2007; TORIBIO & OVEJERO, 2007), com o acoplamento de modelos matemáticos e experimentos de laboratório (ARAGÓN *et al.*, 2003), no campo da simulação numérica com propostas de novos modelos (SMITH, 2000) ou com a aplicação dos modelos já existentes.

Lufrano & Sofronis (1996) analisaram as implicações da interação do hidrogênio com as tensões locais perto da ponta de uma trinca sobre a resistência à fratura do material. As tensões e deformações foram determinadas por intermédio de uma análise iterativa de Elementos Finitos, levando em conta o relaxamento do volume local induzido pelo hidrogênio devido à associação da deformação dilatacional e a mudança local no módulo de elasticidade. As concentrações de equilíbrio foram calculadas por meio da fórmula de Fermi-Dirac, que leva em consideração a saturação dos sítios intersticiais. Os resultados numéricos mostraram que a zona saturada com hidrogênio se encontra na frente da ponta da trinca, que o tamanho dessa zona depende dos carregamentos aplicados e da concentração nominal de hidrogênio e que, quando o hidrogênio induz mudanças nos módulos elásticos do material, provoca uma blindagem da ponta da trinca (*crack tip shielding*).

Toribio *et al.* (1998) apresentaram uma aproximação integrada para a modelagem da fratura assistida pelo hidrogênio num aço AISI 316L. Nesse trabalho foram incluídas análises experimentais, fractográficas e teóricas do fenômeno, discutindo-se a adequação física dos modelos mecânicos de

fragilização por hidrogênio adotados, e comparando-se a profundidade do dano virtual (teórico) predita pelos modelos, com a zona fragilizada (micro-física) medida na análise fractográfica. Também foi estabelecida uma relação matemática entre a profundidade do micro-trincamento (dano) e o tempo de fragilização. Os resultados dos testes para dois corpos-de-prova entalhados (A - entalhe com raio pequeno e C - entalhe com raio grande) são mostrados na Figura 2.4. Além disso, foi executada uma modelagem numérica da difusão de hidrogênio, concluindo-se que ela tem pouca importância na fragilização por hidrogênio do aço AISI 316L e que deveria ser levado em conta o transporte de hidrogênio acelerado pelo próprio micro-dano.

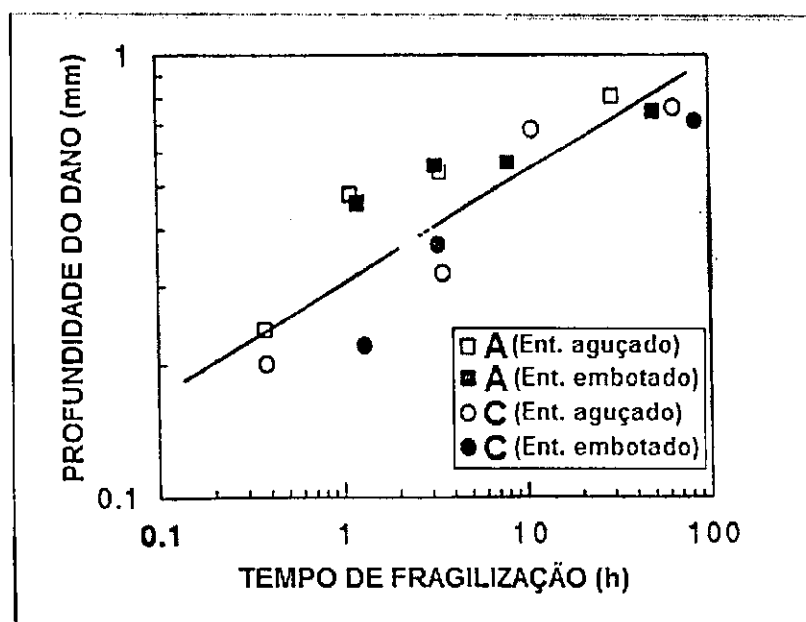


Figura 2.4. Profundidade do dano Vs. o tempo de fragilização (Fonte: adaptado de TORIBIO *et al.*, 1998)

Oliveira *et al.* (2001), utilizando um aço API P-110 e fazendo uso das propriedades físicas obtidas em testes de permeação do hidrogênio, desenvolveram uma metodologia para a determinação da concentração de hidrogênio crítica para a propagação de trincas causadas pela fragilização pelo hidrogênio. Eles observaram, através de curvas da velocidade de propagação da trinca versus concentração crítica de hidrogênio, que a susceptibilidade à fragilização pelo hidrogênio diminui à medida que a velocidade de propagação

da trinca aumenta, e concluíram que as concentrações críticas são atingidas para baixas taxas de deformação. A determinação desse valor crítico é de grande importância na obtenção dos parâmetros de fratura em problemas de fraturamento assistido pelo hidrogênio.

Na Figura 2.5 é mostrada a fenomenologia de crescimento de uma trinca de acordo com o modelo utilizado, resumida em três etapas: (a) difusão do hidrogênio para a zona de processo da pré-trinca; (b) saturação da zona de processo; (c) propagação da trinca na zona de processo da pré-trinca e migração do hidrogênio para uma nova zona de processo.

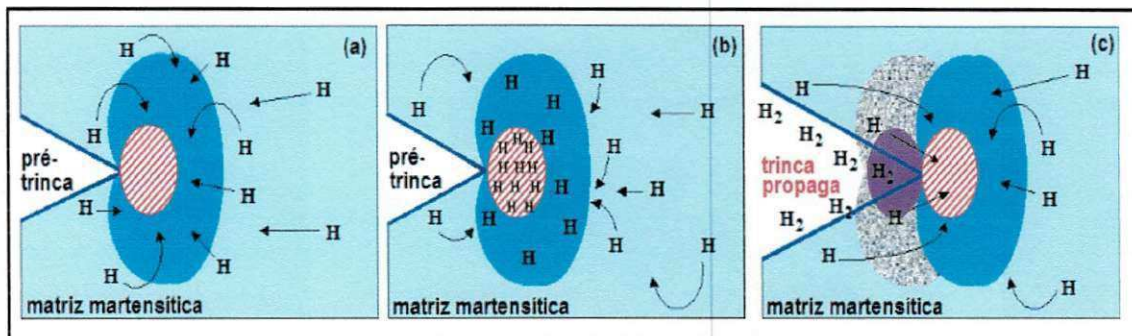


Figura 2.5. Estágios da propagação da trinca (Fonte: OLIVEIRA *et al.*, 2001).

Com base na obtenção desse valor crítico, Zhang *et al.* (2007) puderam estabelecer as condições de segurança no ambiente de armazenamento de foguetes militares, que tiveram problemas provocados pela fragilização e quebra de parafusos de aço.

Chateau *et al.* (2002) propuseram um método para a modelagem da propagação de trincas em corrosão sob tensão fraturante em aços inoxidáveis com estrutura CFC. Este método foi baseado nas equações básicas para o acoplamento entre tensão e difusão de hidrogênio utilizadas por Sofronis e Birnbaum (1995), na equação de difusão que inclui um termo do gradiente da tensão hidrostática e numa nova discretização do campo de concentração de hidrogênio. A simulação foi aplicada a configurações de discordâncias elementares para estabelecer a influência do hidrogênio como soluto nas suas interações e no comportamento do material. Finalmente, obtiveram uma expressão geral simples para o efeito "screening" do hidrogênio sobre duas

discordâncias co-planares, que foi usada para investigar a influência da difusão do hidrogênio no início do deslizamento cruzado de discordâncias em cunha.

Karpisnkii & Sannikov (2003) estudaram o efeito do hidrogênio dissolvido num cristal CCC sobre a evolução da deformação plástica na ponta de uma trinca, utilizando o modelo numérico de Vlasov & Zaznova, em termos das noções formuladas por Chateau *et al.* (2002). Eles calcularam a variação do Fator de intensidade de tensões no modo I com o tempo, para um cristal de Fe- α com uma trinca, levando em conta a influência do hidrogênio intersticial na evolução da deformação plástica na sua ponta, determinada pela relevância de mecanismos relacionados com: (i) o efeito dilatacional causado pelo hidrogênio como soluto e (ii) a diminuição no ponto de escoamento causada pela plasticidade induzida pelo hidrogênio. A partir disso, concluíram que para os parâmetros físicos selecionados, o mecanismo de plastificação tem a maior relevância na deformação plástica na ponta de trinca. Na Figura 2.6 mostram-se três curvas da variação do fator de intensidade de tensões com o tempo, plotadas a partir das seguintes condições: (1) desprezando-se a plasticidade induzida pelo hidrogênio; (2) desprezando-se o efeito dilatacional causado pelo hidrogênio e (3) com a inclusão desses dois mecanismos. Os pontos finais das curvas correspondem ao tempo de imobilização da deformação plástica.

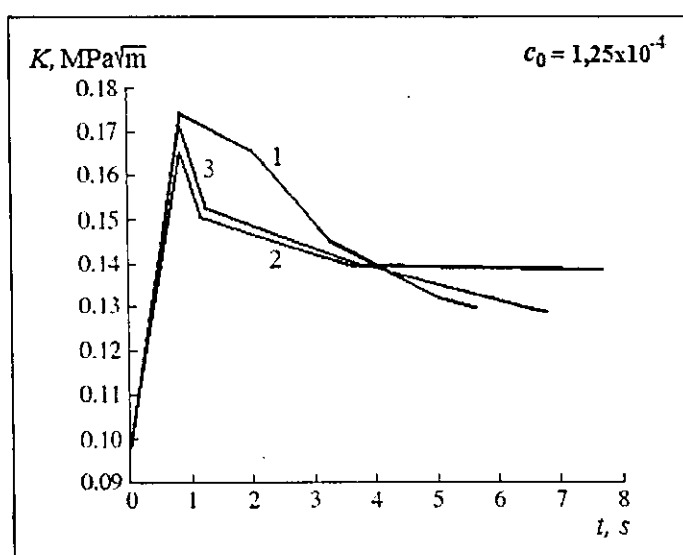


Figura 2.6. Variação do fator de intensidade de tensões com o tempo para a fratura plástica de um cristal CCC (Fonte: KARPISNKII & SANNIKOV, 2003).

Serebrynsky *et al.* (2004) apresentaram um modelo de fragilização por hidrogênio em que foi considerado o efeito da resistência ao escoamento, do fator de intensidade de tensões, da concentração de hidrogênio no ambiente e da temperatura. O modelo proporcionou resultados qualitativos e quantitativos sobre observações experimentais tais como: tempo do início do trincamento em função do fator de intensidade de tensões aplicado e da resistência ao escoamento, comprimento da trinca para início da propagação e crescimento intermitente da trinca. As previsões do modelo sugerem que a degradação da coesão induzida pelo hidrogênio é um mecanismo provável para o trincamento assistido pelo hidrogênio.

Telichev e Vinogradov (2006) apresentaram um modelo de simulação em escala nanométrica para estudar o fenômeno da fratura assistida pelo hidrogênio. Foi testada numericamente uma estrutura cristalina, na qual as forças interatômicas hidrogênio-ferro e ferro-ferro foram definidas pelas funções potenciais de Morse e pelas funções potenciais modificadas de Morse. O modelo e o código desenvolvidos foram aplicados num cristal de ferro CCC no modo I de carregamento, com: (a) a estrutura livre de hidrogênio e (b) átomos de hidrogênio agregados perto da ponta de uma micro-trinca. A influência do hidrogênio no comportamento elástico, plástico e à fratura foi simulada com testes de tração em nano-escala, sendo obtidas as curvas tensão-deformação para o processo de deformação inteiro. Os resultados da simulação demonstraram que a presença do hidrogênio atômico perto da ponta da trinca conduz a uma distorção severa do reticulado, a uma decoesão da estrutura e à perda da resistência do material (Figura 2.7).

Nos últimos anos os modelos de dano contínuo têm sido amplamente aceitos como alternativa para a simulação de comportamentos constitutivos dos materiais que apresentam perda de rigidez com a evolução do trincamento interno e o surgimento de macro-trincas. Após a introdução do primeiro modelo proposto por Kachanov (1958), uma impressionante atividade de pesquisa foi desenvolvida para o desenvolvimento de modelos viáveis para a descrição do dano numa grande quantidade de materiais como o concreto (MAZARS, 1984; LA BORDEIRE *apud* PITUBA & PROENÇA, 2005), o aço (CELENTANO &

CHABOCHE, 2007), materiais compósitos (MAIMÍ, 2006) e outros, com o propósito de resolver uma ampla gama de problemas conectados com a degradação das propriedades dos materiais, tais como efeitos térmicos (PACHECO, 1994), térmicos e inerciais (BARBOSA, 1998), e fatores ambientais (BARENBLATT *apud* NATALINI, 2003; DUDA *et al.*, 2007a; BARBOSA *et al.*, 2007).

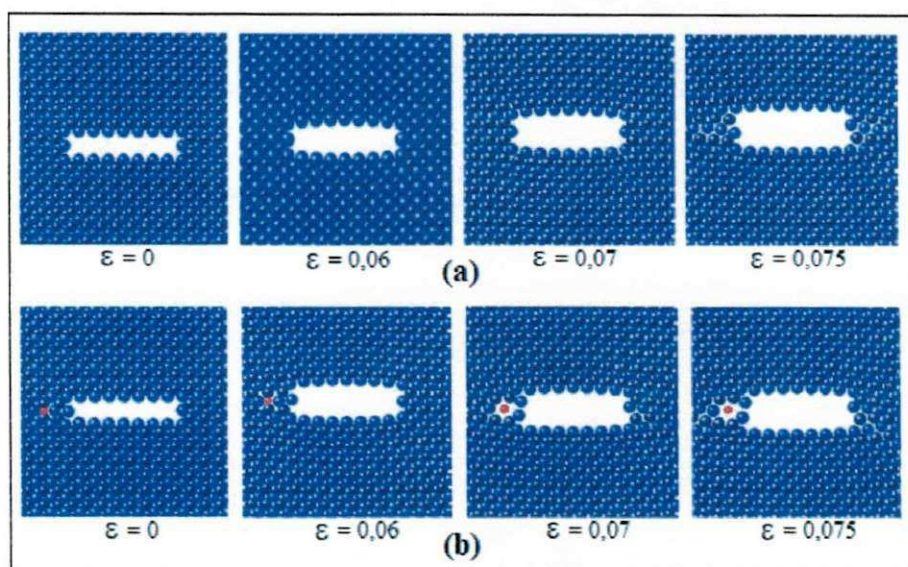


Figura 2.7. Evolução de uma micro-trinca numa estrutura CCC tensionada: (a) livre de hidrogênio; (b) com um átomo de hidrogênio (Fonte: TELICHEV & VINOGRADOV, 2006).

Natalini *et al.* (2003) utilizaram o modelo proposto por Barenblatt, que consiste de um sistema de equações parabólicas fortemente acopladas, para descrever a evolução do dano num espécime de material homogêneo sob os efeitos de tensões mecânicas e agentes químicos. A análise foi restrita ao caso isotrópico unidimensional, onde o dano é representado por uma função escalar considerada como a fração média do rompimento das ligações num elemento micro-estrutural dentro do corpo. Na totalidade do material íntegro, ela é nula e igual à unidade nos pontos de fratura, definindo-se o tempo de ruptura do espécime, o tempo em que o dano atinge a unidade em alguns pontos da estrutura.

O principal resultado da análise foi que a frente do dano não foi essencialmente influenciada pelo agente químico, porém, que a sua evolução foi fortemente acelerada. Foi observado também, que se a concentração do agente químico é incrementada perto de um valor limiar, o tempo de ruptura decresce dramaticamente. Na Figura 2.8 observam-se curvas da evolução do dano em função do parâmetro micro-estrutural de comprimento (λ) para diferentes razões do tempo de processo e do tempo de ruptura (θ/θ_0).

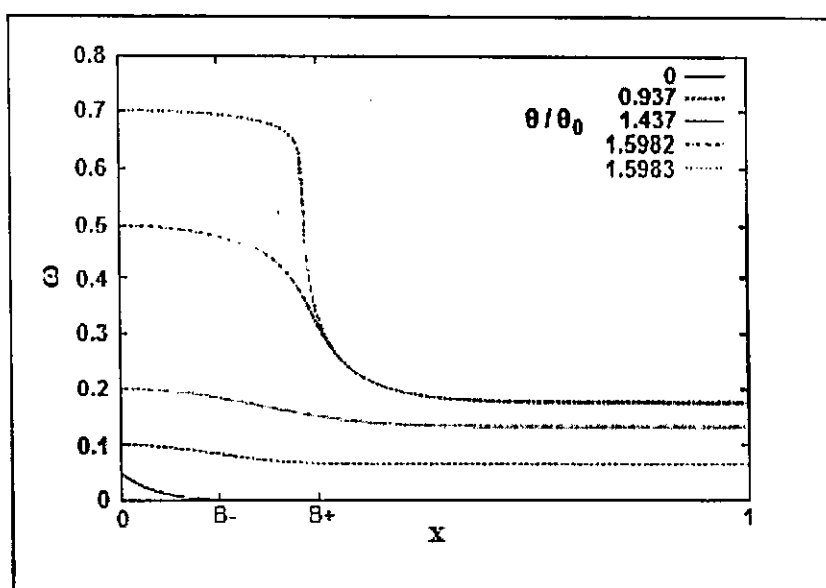


Figura 2.8. Evolução do dano com $\lambda = 0,1$ (Fonte: NATALINI *et al.*, 2003).

Duda *et al.* (2007b) formularam um modelo unidimensional no contexto da mecânica dos meios contínuos para simular deformação, degradação e difusão de soluto em sólidos elásticos. Na formulação realizada, além dos campos padrão, foram introduzidos campos extras para descrever os processos de difusão e dano e as equações de governo foram obtidas a partir das leis básicas de equilíbrio e de uma teoria constitutiva termodinamicamente consistente. O acoplamento que foi implementado via potencial de energia livre, inclui deformação e dano assistido pela difusão. A implementação numérica foi baseada no método dos elementos finitos e no esquema implícito de Euler para discretizações espaciais e temporais, respectivamente. Na Figura

2.9 mostra-se a distribuição do dano numa barra de aço AISI 4340 submetida a uma força de corpo singular e à ação da difusão do hidrogênio.

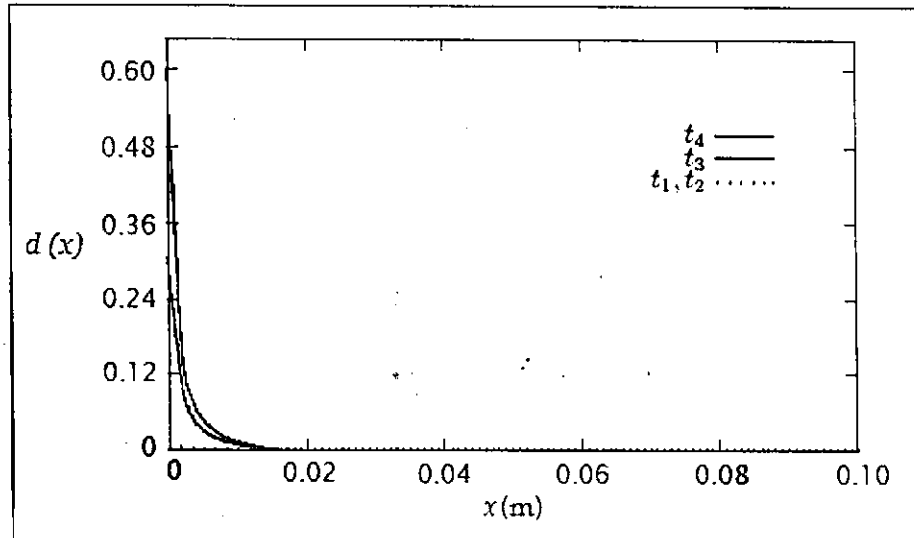


Figura 2.9. Distribuição do dano ao longo de uma barra devido à ação do hidrogênio (Fonte: Duda *et al.*, 2007).

Foram desenvolvidos ainda, diversos modelos para simular numericamente a degradação provocada pela difusão do hidrogênio em sólidos elásticos, com uma relativa complexidade, dado que são envolvidos processos físicos múltiplos e acoplados, como difusão, deformação e dano e condicionantes tais como as características micro-estruturais dos materiais. A formulação de modelos que possam prever o comportamento material de forma cada vez mais realista apresenta-se como uma alternativa viável para o monitoramento da integridade estrutural em dutos de transporte de petróleo e derivados.

3. EFEITOS DO HIDROGÊNIO NOS METAIS

3.1 Ingresso, Transporte e Aprisionamento de Hidrogênio nos Metais

3.1.1 Ingresso

O hidrogênio pode ser introduzido como soluto em solução sólida nos metais a partir de uma grande variedade de fontes, que vão desde meios eletroquímicos até a partir do existente no ar ambiental. Segundo Stroe (2006), os passos que ele segue nesse processo são os seguintes:

O primeiro é a adsorção sobre a superfície do material. O segundo, a absorção através da interface da superfície metálica, que leva à acumulação de uma concentração subsuperficial c_0 e que está diretamente relacionada com a disponibilidade dos espaços para a hospedagem dos átomos do soluto. O último passo é o transporte de hidrogênio através do reticulado cristalino.

Dado que não é o propósito do presente trabalho um aprofundamento nos processos de adsorção e absorção, somente para fins ilustrativos apresenta-se na Figura 3.1 o modelo proposto por McCright (CHALAFTRIS *apud* CHARCA, 2004), que descreve o movimento do hidrogênio desde a sua introdução através da superfície do material, até o início do seu transporte através dele. Neste caso, a fonte de hidrogênio é uma reação de corrosão que ocorre quando o metal é introduzido numa solução ácida.

As etapas principais do modelo são:

- 1- Transporte de átomos de H^+ na solução, do meio até a superfície do material.
- 2- Separação dos átomos de H^+ da solução por adsorção na superfície do material.
- 3- Adsorção do H^+ e acúmulo de elétrons aportados pelo material.
- 4- Redução do H^+ (descarregamento).
- 5- Combinação de átomos de H entre si ou com H^+ do meio.
- 6- Ingresso do H no material.
- 7- Início da difusão de H.

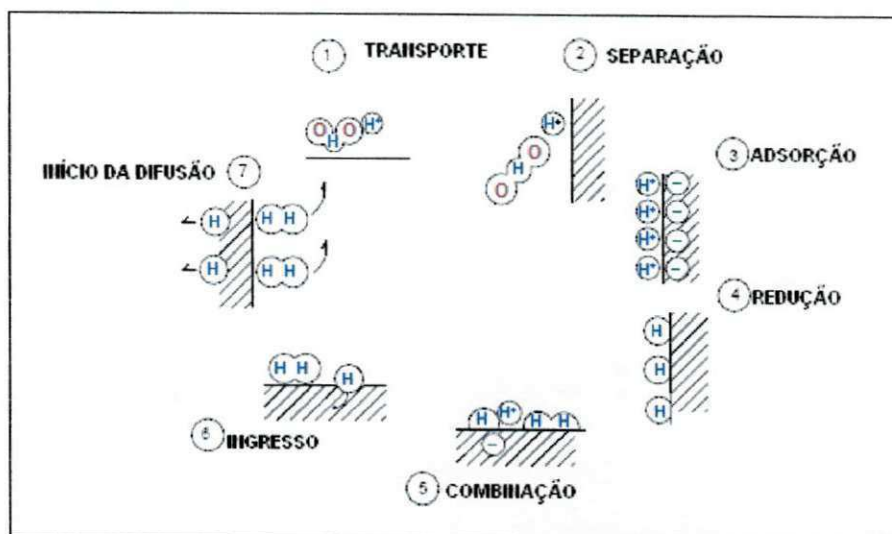


Figura 3.1 Modelo de McCright da evolução do movimento do hidrogênio no seu ingresso ao material (Fonte: adaptado de CHARCA, 2004).

3.1.2 Transporte

Dado que o hidrogênio é um átomo muito pequeno e leve, pode se movimentar nos metais mais facilmente que outros elementos, utilizando o mecanismo de difusão intersticial através dos sítios intersticiais da estrutura cristalina, denominados NILS - Normal Interstitial Lattice Sites (TAHA & SOFRONIS, 2001). Um sítio intersticial sempre é denominado pela figura poliédrica formada pelos átomos que estão em volta do espaço vazio, encontrando-se desta forma, sítios intersticiais tetraédricos e octaédricos, que existem tanto nas estruturas CCC quanto nas estruturas CFC. Na Figura 3.2 mostram-se os sítios intersticiais octaédricos e tetraédricos de estruturas CCC.

Normalmente existem vários interstícios em uma estrutura cristalina e quanto menor o fator de empacotamento maior é o volume destinado a eles, embora o tamanho de cada um dependa do raio atômico e da estrutura cristalina. Nos sistemas CCC os interstícios tetraédricos são maiores que os octaédricos, enquanto que nos sistemas CFC os octaédricos são os maiores (ORIANI, 1993).

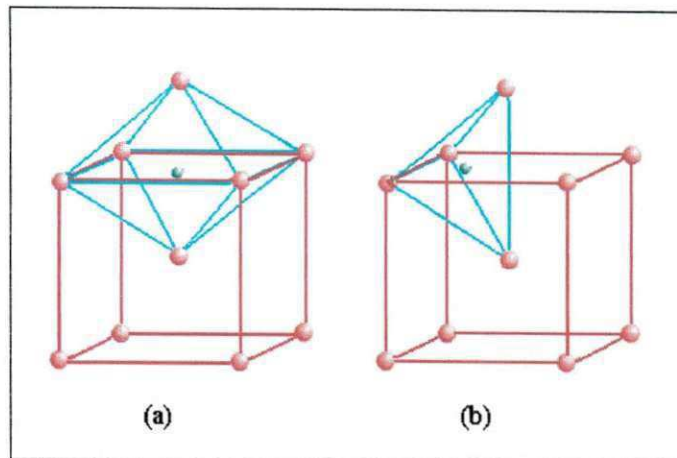


Figura 3.2. Sítios intersticiais em estruturas CCC: (a) octaédricos; (b) tetraédricos.

A consequência disso é que, no caso das soluções sólidas, os interstícios maiores terão preferência de ocupação pelo soluto antes que os menores. Na tabela 3.1 mostra-se a preferência de ocupação dos NISL pelo hidrogênio em diferentes metais.

Tabela 3.1. Preferência do hidrogênio para a ocupação dos NISL em diferentes metais (Fonte: adaptado de STROE, 2006).

Metal hospedeiro	Estrutura cristalina	NISL preferenciais
Fe- α	CCC	Tetraédrico
Fe- γ	CFC	Octaédrico
Pd	CFC	Octaédrico
Ta	CCC	Tetraédrico
V	CCC	Tetraédrico
Nb	CCC	Tetraédrico

O número de interstícios é diferente para cada tipo de estrutura cristalina, mudando em função da quantidade de átomos existentes na célula unitária. Em estruturas mais compactas como as CFC, o número de NISL é menor e conseqüentemente, a difusão intersticial é mais difícil. Na Tabela 3.2 mostra-se o número de NISL para estruturas cristalinas CCC e CFC.

Tabela 3.2. N° de sítios intersticiais por átomo em estruturas CCC e CFC
(Fonte: adaptado de KROM, 1998).

Estrutura cristalina	Tipo de NILS	N° de NILS por célula unitária	N° de átomos por célula unitária
CCC	Octaédrico	6	2
CCC	Tetraédrico	12	2
CFC	Octaédrico	4	4
CFC	Tetraédrico	8	4

De acordo com as leis de difusão de Fick, o soluto pode difundir através do material pela existência de um gradiente de concentração, propiciado por uma concentração subsuperficial c_0 , que é o motor que possibilita o movimento do soluto dentro do solvente. Não existindo reações químicas entre os átomos de soluto e os do solvente, ocorrerá um fluxo dos átomos do soluto da região de maior para a de menor concentração. Em regime permanente, pode ser representado pela primeira lei de Fick:

$$J = -D\nabla c_L \quad (3.1)$$

onde J denota o fluxo, D é a constante de difusão que é assumida independente da tensão, ∇ denota o operador gradiente e c_L é a concentração nos NILS.

Quando uma tensão é aplicada, o hidrogênio pode difundir de regiões de baixa tensão em direção a regiões de alta tensão. Logo, o fluxo de difusão depende não somente do gradiente de concentração, porém, também do gradiente de tensões de acordo com a seguinte equação:

$$J = -D \left(\nabla c_L - \frac{c_L V_H}{RT} \nabla \sigma_h \right) \quad (3.2)$$

onde V_H é o volume parcial molar do hidrogênio, R a constante universal dos gases, T a temperatura do sistema e σ_h a tensão hidrostática.

A difusão do hidrogênio induzida pela tensão ocorre se ela é causada por forças ou tensões residuais ou aplicadas. Devido ao gradiente de tensões,

a difusão do hidrogênio pode ocorrer mesmo quando a sua distribuição dentro do material é uniforme, ou seja, quando $\nabla c_L = 0$ (ORIANI, 1993).

Nas regiões com tensões hidrostáticas de tração, o hidrogênio intersticial tem potencial químico muito baixo e nas regiões com tensão hidrostática de compressão, o seu potencial é alto. Como consequência, pode ser gerada uma difusão cuja força motriz é o gradiente de potencial químico que, por sua vez, é sensível aos gradientes de tensão (VHOLKL & ALEFELD, 1978; FUKAI *apud* SEREBRINSKY, 2004); dessa forma, regiões com tensão hidrostática de compressão são esvaziadas, enquanto regiões com tensão hidrostática de tração são preenchidas. O fluxo da difusão devida ao gradiente de potencial químico dos átomos intersticiais, também é descrito fenomenologicamente pela primeira lei de Fick:

$$J = -\frac{Dc_L}{kT} \nabla \varphi \quad (3.3)$$

onde φ é o potencial químico do soluto e k é a constante de Boltzmann.

O transporte do hidrogênio pelo movimento das discordâncias é um aspecto muito importante no entendimento dos efeitos do hidrogênio nas propriedades do material e muita controvérsia foi levantada com respeito ao exato papel que este tipo de transporte desempenha no processo de fragilização. Os modelos de plasticidade propostos para explicá-la sugerem que o hidrogênio aumenta a velocidade de deslocamento das discordâncias e que simultaneamente, elas podem transportar hidrogênio durante o seu movimento (STROE, 2006). Robertson (2001), num meticuloso trabalho realizado com base em estudos anteriores, mostrou que o hidrogênio causa um incremento na velocidade de deslocamento de discordâncias em materiais com diversa estrutura cristalina. Mostrou também que isso acontece o mesmo para discordâncias em cunha, em hélice, mistas e parciais, independentemente do tipo de estrutura cristalina do material em que elas se encontrem.

3.1.3 Aprisionamento

O hidrogênio transportado por difusão através dos NISL pode se acumular em algumas heterogeneidades micro-estruturais como discordâncias, contornos de grão, inclusões, lacunas, superfícies e átomos de impureza, denominadas aprisionadores ou armadilhas (*traps*).

De acordo com a sua energia de ativação ou de aprisionamento, dividem-se em reversíveis e irreversíveis. São reversíveis os que têm as suas energias baixas, comparáveis à energia dos NISL, e o hidrogênio pode abandoná-los facilmente. São irreversíveis quando uma quantidade muito maior de energia deve ser aplicada para que o hidrogênio seja liberado (STROE, 2006). Outra diferença muito clara é que os aprisionadores reversíveis estão associados com um tempo limitado de residência do hidrogênio no material, enquanto que nos irreversíveis o hidrogênio tem um tempo de residência permanente para uma dada temperatura (ORIANI, 1993).

Quando o hidrogênio se acumula nos defeitos, dificulta a difusão porque o tempo de residência neles é incrementado comparativamente ao seu tempo de residência nos NISL. Em função desse fenômeno, foi estabelecido que o aprisionamento (*trapping*) é uma parte muito importante da fragilização por hidrogênio porque sua principal conseqüência é a redução da taxa de transporte de hidrogênio através do material (HIRTH; GIBALA; THOMPSON) *apud* (TAHA & SOFRONIS, 2001).

3.2 Danos Ocasionados pelo Hidrogênio nos Metais

Os fenômenos de degradação do material ocasionados pelo hidrogênio são classificados de acordo com os seguintes fatores (STROE, 2006):

- A forma do hidrogênio que produz o dano: atômico, gasoso, presente em outros gases ou hidretos metálicos.
- A fonte de hidrogênio: hidrogênio eletroquímico, hidrogênio gasoso do ar ambiental, H₂S ou outras substâncias, etc.

- A presença ou ausência de tensões residuais ou aplicadas.

3.2.1 Fragilização por hidrogênio (Hydrogen Embrittlement - HE ou Hydrogen Stress Cracking - HSC)

É definida como o dano ocasionado pela perda da resistência e ductilidade do material, induzido pela presença de hidrogênio atômico na sua estrutura cristalina sob tensões residuais ou aplicadas (STROE, 2006). Ela pode ser causa de falhas prematuras em distintas situações, pois acima de certos níveis toleráveis, o acúmulo de hidrogênio na rede cristalina enfraquece as ligações atômicas e diminui a capacidade de deformação do material, podendo nuclear uma trinca e provocar o colapso da estrutura para níveis de carregamento que são muito baixos comparados com aqueles que podem ser suportados por materiais livres de hidrogênio. O resultado geralmente é uma fratura catastrófica de natureza frágil e que acontece inesperadamente, em alguns casos após muitos anos sob serviço (TAHA & SOFRONIS, 2001). O problema a ser abordado neste trabalho é o relacionado com este tipo de dano.

3.2.2 Trincamento induzido pelo hidrogênio (Hydrogen Induced Cracking- HIC)

É definido como o dano ocasionado pelo trincamento interno do material induzido pela presença de hidrogênio atômico que difunde e se recombina ao estado gasoso em sítios específicos, geralmente em inclusões de MnS alongadas, desenvolvendo altas pressões nesses sítios. Em materiais dúcteis, essas altas pressões deformam o material, promovendo a formação de bolhas de hidrogênio gasoso (Figura 3.3). Em materiais com baixa ductilidade, a fratura pode ocorrer desde que a pressão exceda um valor crítico.

Este fenômeno ocorre em situações de trabalho onde o hidrogênio é produzido por reações de corrosão na ausência de tensões aplicadas e é típico de dutos de aços-carbono de média ou alta resistência que transportam produtos que contém H_2S (STROE, 2006).

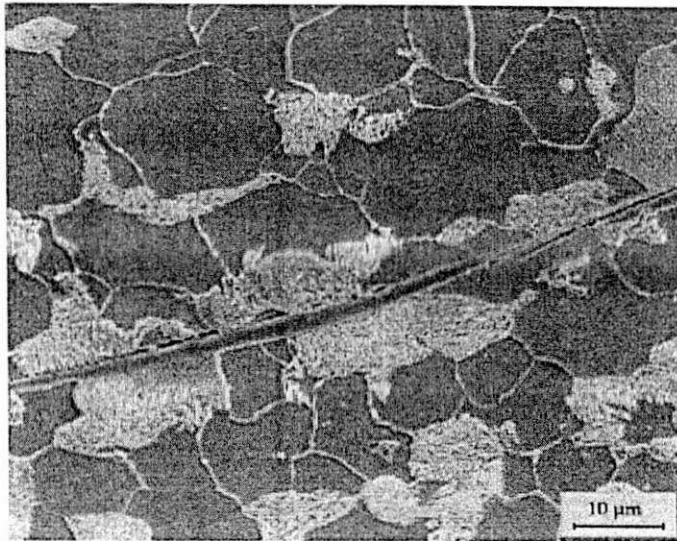


Figura 3.3. HIC de um aço-carbono em ambiente de H_2S . As bolhas são associadas às inclusões de MnS (Fonte: STROE, 2006).

3.2.3 Trincamento gradual induzido pelo hidrogênio (Stepwise Cracking-SWC)

É o mesmo caso do HIC, com a diferença de que o trincamento pode se propagar de uma maneira gradual (STROE, 2006). A Figura 3.4 ilustra este processo de degradação numa escala ampliada.

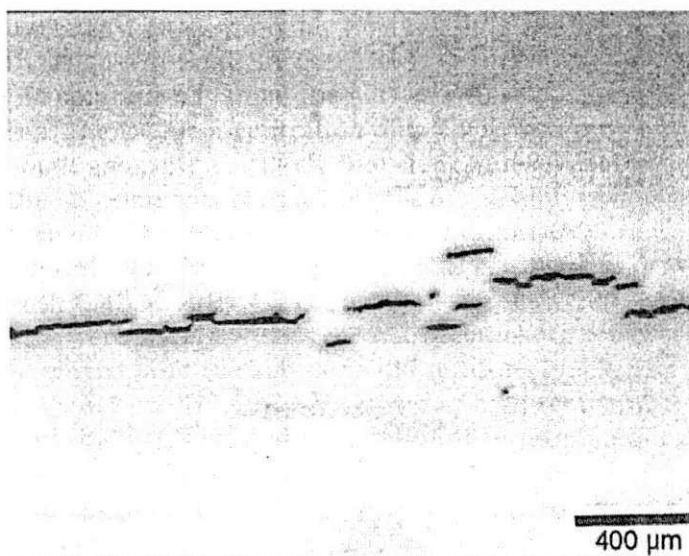


Figura 3.4. Dano por trincamento gradual Induzido pelo hidrogênio - SWC (Fonte: STROE, 2006).

3.2.4 Fragilização por compostos de enxofre (Sulphide Stress Cracking-SSC)

É um caso especial de HE que pode ser particularmente rápido e catastrófico, em que compostos de enxofre promovem o ingresso de hidrogênio atômico no reticulado. O nome provém da sua relação com este tipo de compostos químicos e afeta com mais frequência materiais com microestrutura mais dura. Tratamentos térmicos inapropriados são causa freqüente e pode ser prevenida limitando o endurecimento do material (STROE, 2006).

3.2.5 Trincamento induzido pelo hidrogênio sob tensão orientada (Stress Oriented Hydrogen Induced Cracking-SOHIC)

É uma combinação do HIC com o SSC ou com o HE, envolvendo bolhas formadas por H_2 , ocorrendo na presença de tensões residuais ou aplicadas. A presença conjunta do H atômico e a tensão produzem trincas que podem interconectar as trincas originadas na HIC (Figura 3.5). Essas trincas são desenvolvidas perpendicularmente à direção da tensão aplicada (STROE, 2006).

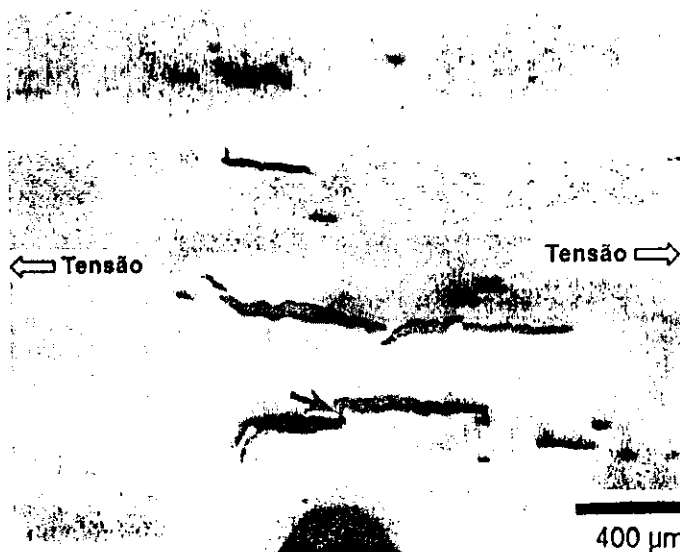


Figura 3.5. Trincamento induzido pelo hidrogênio sob tensão orientada - SOHIC
(Fonte: STROE, 2006).

3.2.6 Reação do hidrogênio com a matriz metálica - formação de hidretos (hydrogen reaction with the metal matrix - hydride formation)

O hidrogênio pode formar hidretos fragilizantes com muitos metais: Ti, Zr, V, Nb, Ta, Mg, U, Th e suas ligas. A formação de hidretos pode ocorrer acima de uma concentração crítica de hidrogênio. Trincas pré-existentes podem ser sítios de iniciação, dado que o H tende a difundir para regiões de alta tensão como a ponta da trinca. A fase hidreto tem um volume maior que o do metal-base e provoca deformações elásticas ou plásticas locais. Este tipo de falha não ocorre em materiais de base ferrosa (STROE, 2006).

3.2.7 Reação do hidrogênio com fases não metálicas (hydrogen reactions with non-metallic phases)

A temperaturas na faixa de 200°C a 300°C o hidrogênio pode reagir com carburetos de ferro no aço formando CH_4 . Esse dano de descarburização afeta o material em dois sentidos: pela redução da quantidade de carbono (redução da resistência do material) e pelas altas pressões internas geradas pelo metano que podem levar à ruptura. O hidrogênio também pode reagir a altas temperaturas com algumas inclusões não metálicas. Um exemplo é a reação com inclusões de óxido de cobre durante a têmpera do cobre em atmosfera de hidrogênio que resulta no enfraquecimento da matriz de cobre (STROE, 2006).

3.3 Mecanismos de Fragilização por Hidrogênio

Apesar de estudos extensos, os mecanismos de fragilização por hidrogênio permanecem pouco claros. Alguns modelos foram desenvolvidos, mas nenhum dos propostos até agora pode explicar todos os fenômenos observados no processo fragilizante nem inclui o papel de todos os fatores (STROE, 2006). Uma dificuldade está associada à própria falta de uniformidade na terminologia empregada, que causa problemas de entendimento do assunto. Muitas vezes o termo corrosão sob tensão é empregado sem que

existam evidências de dissolução eletroquímica no processo (STROHAECKER, 2006).

Durante a década passada, foram alcançados consensos acerca do papel essencial dos efeitos da interação hidrogênio/deformação. Entre os vários mecanismos propostos, os da plasticidade e do dano induzidos pelo hidrogênio são citados de forma crescente para muitos sistemas material/soluto (CHATEAU, 2003). Dois modelos de mecanismos parecem ser os mais viáveis (TAHA & SOFRONIS, 2001; STROE, 2006): o da Decoção Intensificada pelo Hidrogênio (Hydrogen Enhanced Decohesion - HEDE), proposto por Troiano *apud* Gangloff (2003) e melhorado por Oriani *apud* Stroe (2006), e o da Plasticidade Localizada Intensificada pelo Hidrogênio (Hydrogen Enhanced Localized Plasticity - HELP), cujas bases foram propostas por Beachem *apud* Stroe (2006) e aperfeiçoado por Birnbaum & Sofronis (1994). As principais características desses modelos são:

3.3.1 Modelo da decoção intensificada pelo hidrogênio - HEDE

Este modelo é baseado no postulado de que o hidrogênio diminui as forças para separar os cristais ao longo de um plano cristalográfico, ou seja, diminui as forças de coesão entre átomos e conseqüentemente, a energia para formar planos de clivagem. O hidrogênio é relacionado com mecanismos de decoção pelos quais as ligações atômicas perto da ponta da trinca são enfraquecidas pela presença de hidrogênio em solução sólida. A diminuição dessas forças é proporcional à concentração de hidrogênio, devendo-se atingir uma concentração de hidrogênio (denominada crítica), após a qual ocorre a fratura.

O modelo é suportado pelo fato de que a fragilização parece ocorrer na ausência de deformações locais significativas, por argumentos termodinâmicos e por cálculos teóricos da distribuição eletrônica na presença de hidrogênio e somente pode ser aplicado a fraturas frágeis, pois não explica as fraturas acompanhadas por plasticidade.

3.3.2 Modelo de plastificação localizada intensificada pelo hidrogênio – HELP

Este modelo é baseado em observações consistentes para intervalos de temperatura e taxas de deformação, que indicam que a presença do hidrogênio em solução sólida incrementa a mobilidade das discordâncias e promove a criação de regiões de alta plasticidade. O incremento dessa mobilidade é atribuído à redução das interações entre discordâncias e outros obstáculos quando o hidrogênio está presente no sistema, incrementando assim a quantidade de deformação que ocorre numa região adjacente à superfície da fratura. Dessa forma, as discordâncias movem-se mais perto umas das outras e dos obstáculos, provocando a formação de colunas de discordâncias (pile-ups dislocations), que são mais compactas na medida em que o hidrogênio atua dentro do material. A falha ocorre por fratura interna dos pontos frágeis.

3.4 Efeitos da Interação do Hidrogênio com o Material

A interação entre hidrogênio e o campo de tensões aplicado provém das mudanças no volume e nos módulos elásticos locais (PEISL *apud* LUFRANO & SOFRONIS, 1996; MAZZOLAI & BIRNBAUM, 1985a, 1985b) provocadas pela introdução do hidrogênio como soluto na estrutura cristalina. Sofronis & Birnbaum (1995) calcularam com o uso da teoria da elasticidade linear e do método dos elementos finitos, o efeito do hidrogênio sobre a energia de interação entre discordâncias em cunha do mesmo vetor de Burgers e entre discordâncias em cunha e átomos de soluto. Levando em conta a formação de atmosferas de hidrogênio ao redor das discordâncias, eles consideraram duas interações elásticas: uma interação de 1ª ordem, associada à mudança de volume provocada pela introdução do átomo de hidrogênio no campo de tensões de um defeito, e uma interação de 2ª ordem, que resulta da mudança nos módulos elásticos locais causados pelo hidrogênio.

A energia de interação de 1ª ordem pode ser expressa por:

$$W_{\text{int}}^1 = -\frac{1}{3} \sigma_{kk} \Delta v \quad (3.4)$$

onde Δv é a mudança de volume da estrutura do metal hospedeiro, que é diretamente relacionada com o volume parcial molar do hidrogênio em solução sólida, $V_H = \Delta v N_A$, onde N_A é o número de Avogadro. σ_{kk} são as tensões normais.

A deformação da estrutura cristalina provocada pelo hidrogênio é uma deformação puramente dilatacional dada por:

$$\varepsilon_{ij}^H = \frac{1}{3} e^H \delta_{ij} \quad (3.5)$$

δ_{ij} é o delta de Kronecker, e^H é a dilatação local da estrutura provocada pelo hidrogênio, dada por (SOFRONIS & BIRNBAUM, 1995):

$$e^H = c_L \frac{\Delta v}{\Omega} \quad (3.6)$$

onde Ω é o volume atômico médio do metal hospedeiro e c_L é a concentração de hidrogênio nos NLS.

A energia de interação de 2ª ordem pode ser expressa por:

$$W_{\text{int}}^2 = \frac{1}{2} (C'_{ijkl} - C_{ijkl}) \varepsilon'_{ij} \varepsilon_{kl}^a v_s \quad (3.7)$$

onde C'_{ijkl} e C_{ijkl} são as constantes elásticas com e sem hidrogênio. ε'_{ij} as deformações provocadas no elemento de volume v_s após a introdução do hidrogênio e ε_{kl}^a as deformações provocadas pelas tensões externas na ausência de hidrogênio.

A influência dos átomos de hidrogênio nos módulos elásticos do material pode ser descrita utilizando-se a relação encontrada por Lunarska *et al.* (1976), que pode ser expressa por:

$$\mu^H = \mu(1 - 0,08c_L) \quad (3.8)$$

onde μ^H e μ são os módulos de cisalhamento do material hidrogenado e do material livre de hidrogênio, respectivamente. O módulo de Young do material hidrogenado E^H , pode ser encontrado a partir da sua relação com μ^H .

3.5 Concentração de Hidrogênio no Reticulado Cristalino

Para o cálculo da concentração de hidrogênio no material, estudam-se as concentrações de hidrogênio nos NIS, assumindo-se que se encontram em equilíbrio com a tensão hidrostática local, e que uma vez que o hidrogênio é adsorvido e absorvido pelo material, passa a residir nos NIS numa distribuição contínua através dele; desta forma, pode ser formulada uma descrição contínua para a solução sólida (LUFRANO & SOFRONIS, 1996). A fórmula de Fermi-Dirac (HIRTH & CARNAHAN *apud* LUFRANO & SOFRONIS, 1996; SOFRONIS *et al.*, 2001; LIANG *et al.*, 2003) é usada para calcular a concentração de equilíbrio em termos da tensão hidrostática local e da concentração inicial no sólido livre do efeito de qualquer tensão:

$$\frac{\theta_L}{1-\theta_L} = \frac{\theta_L^0}{1-\theta_L^0} K_L \quad (3.9)$$

onde θ_L^0 é a ocupação inicial dos NIS de uma estrutura não tensionada a uma concentração inicial c_0 . θ_L denota a ocupação dos sítios intersticiais disponíveis e está relacionada com a concentração c_L por:

$$c_L = \beta \theta_L \quad (3.10)$$

onde β é o número de sítios intersticiais disponíveis por átomo metálico e K_L é a constante de equilíbrio dominada pela energia de interação elástica de 1ª ordem, dada por:

$$K_L = \exp\left(-\frac{W_{\text{int}}}{kT}\right) = \exp\left(\frac{\sigma_{kk} V_H}{3RT}\right) \quad (3.11)$$

onde k é a constante de Boltzmann, R é a constante universal dos gases e T a temperatura absoluta. Dado que a energia de interação de 2ª ordem decresce numa magnitude de $1/r^2$ com a distância do defeito, comparada com o decréscimo na magnitude de $1/r$ da Interação de 1ª ordem, o seu efeito na energia de interação total é muito pequeno e não é considerado (SOFRONIS & BIRNBAUM, 1995).

4. MECÂNICA DA FRATURA LINEAR ELÁSTICA

Falhas por fissuração ou trincamento têm sido a causa freqüente de problemas em projetos nos diversos campos da engenharia, problemas estes muitas vezes de efeitos catastróficos. Dado que as trincas sempre estão presentes nas estruturas, podendo existir como defeitos pré-existentes nos materiais constituintes, surgir durante a construção ou através de uma concentração de tensões, foi preciso estudar métodos que pudessem qualificar e, principalmente, quantificar os efeitos da sua presença, desenvolvendo-se assim, os fundamentos teóricos da Mecânica da Fratura. Os seus conceitos provaram ser adequados para a predição das condições de falhas de estruturas e foram divididos em dois ramos: o regido pelo comportamento linear-elástico, denominado Mecânica da Fratura Linear Elástica (MFLE) e o regido pelo comportamento elasto-plástico, denominado Mecânica da Fratura Elasto-Plástica (MFEP).

A Mecânica da Fratura Linear Elástica é a metodologia a ser empregada em situações onde há possibilidade do ocorrer fratura sem ser precedida de extensa deformação plástica. Esta restrição à deformação plástica pode ser decorrência das propriedades do material, como os aços de resistência mecânica elevada, da temperatura, se ela for o suficientemente baixa ou de fatores geométricos, como as dimensões da estrutura. Desde que empregados em uma espessura que garanta que o regime é o Estado Plano de Deformação e de que seja satisfeita a condição de uma mínima deformação plástica na ponta da trinca, a Mecânica da Fratura Linear Elástica também é aplicável para aços com resistência mecânica moderada.

Essa nova metodologia se somou aos conceitos tradicionais de projeto baseados em resistência, escoamento e instabilidade, que são insuficientes quando existem defeitos, sendo um dos seus principais avanços a definição do *Fator de Intensidade de Tensões*, K , como um parâmetro que permite obter uma avaliação do campo de tensões nas proximidades da trinca. A importância da definição desse fator está em se poder avaliar quando uma trinca irá se propagar ou, no limite, romper o material.

A Figura 4.1 apresenta os modos básicos de carregamento que envolvem deslocamentos diferentes das superfícies da trinca; uma situação geral de carregamento sobre um corpo trincado sempre pode ser decomposta nestes três modos. Para os casos usuais, pode-se dizer que o modo I de solicitação é o mais crítico, pois pode levar predominantemente ao mecanismo de ruptura por clivagem, levando a uma ruptura frágil com pequena absorção de energia no processo de fratura. Assim, em termos práticos, a grande maioria dos problemas e soluções é apresentada para o modo I, surgindo daí a notação de K_I para o Fator de Intensidade de Tensões no modo I de abertura da trinca. Para os outros dois modos, os fatores de intensidade de tensões correspondentes são denominados K_{II} e K_{III} . Tal fator tem como valor limite um parâmetro chamado de *Fator de Intensidade de Tensões Crítico* ou *Tenacidade à Fratura*, que é uma propriedade intrínseca do material da peça trincada para uma dada situação de temperatura, taxa de carregamento e condição microestrutural, podendo ser utilizado na análise de qualquer geometria.

A importância da determinação do Fator de Intensidade de Tensões é poder avaliar quando uma trinca começará a propagar de forma instável. No modo I, que por ser o mais comumente estudado, será o tratado neste trabalho, os fatores de intensidade de tensão críticos para corpos em Estado Plano de Deformação e em Estado Plano de Tensão, são representados por K_{IC} e K_C respectivamente.

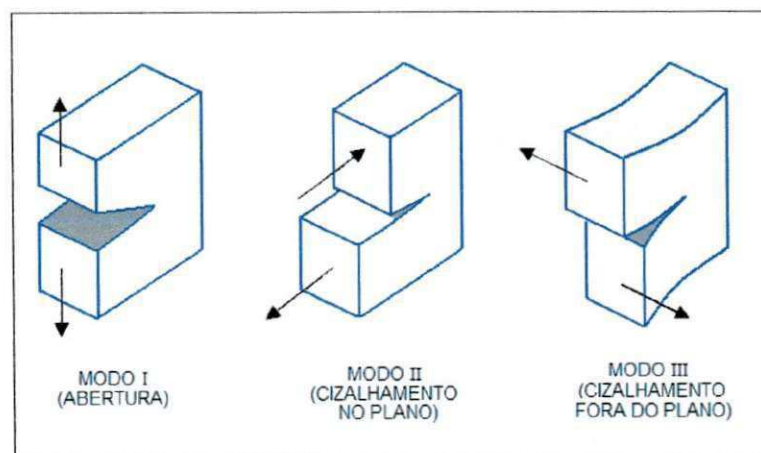


Figura 4.1. Modos básicos de carregamento de uma trinca.

É importante ressaltar que, dado um determinado modo de carregamento, a distribuição de tensões em torno de qualquer trinca em uma estrutura com comportamento no regime linear-elástico é semelhante, sendo completamente descrita pelo parâmetro fator de intensidade de tensões, K . Isto é, a diferença da magnitude de tensões alcançada entre componentes trincados depende apenas do fator K , que é governado pela configuração geométrica do componente trincado e pelo nível e modo do carregamento imposto. Portanto, o campo de tensões na vizinhança da ponta de uma trinca no modo I pode ser caracterizado em termos do fator intensidade de tensões K_I , desde que $r \ll a$, e que a , r e θ estejam definidos de acordo com a Figura 4.2, através da seguinte equação:

$$\sigma_{ij} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}(\theta) \quad (4.1)$$

onde σ_{ij} é o tensor de tensões, r e θ as coordenadas polares de um ponto próximo à frente da trinca para o caso tridimensional, e próximo à ponta da trinca para o caso bidimensional, em relação a um sistema com origem na sua frente, e $f_{ij}(\theta)$ é uma função adimensional de θ . Expressões similares são encontradas para trincas submetidas aos modos de carregamento II e III.

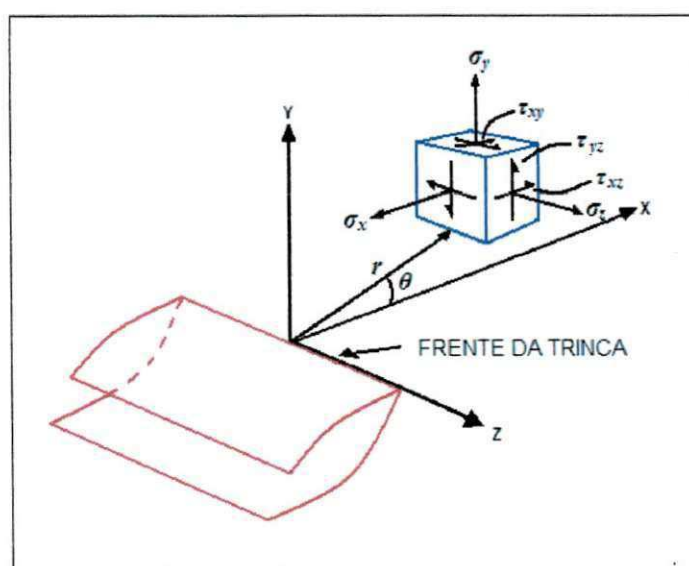


Figura 4.2. Distribuição de tensões na vizinhança da ponta de uma trinca.

Os fatores de intensidade de tensões independem de r e θ , portanto controlam a intensidade do campo de tensões, sendo interpretados fisicamente como parâmetros de redistribuição de tensões num corpo devido à introdução de uma trinca. A intensidade de tensões na vizinhança da trinca cresce proporcionalmente a esse fator, definido como:

$$K_I = Y\sigma_\infty\sqrt{\pi a} \quad (4.2)$$

onde Y representa uma função adimensional que depende da geometria e do carregamento, denominada *fator geométrico*, σ_∞ é a tensão nominal aplicada e a o comprimento característico da trinca. Para o caso de trincas internas o comprimento é $2a$, enquanto que para trincas passantes o comprimento é apenas a . O fator geométrico tem um valor normalmente próximo à unidade, sendo uma correção aplicada para calcular K_I para uma geometria específica em relação à geometria de Griffith, onde ele é unitário.

Irwin, no propósito de encontrar uma aplicabilidade à teoria de Griffith para o caso de materiais com alguma deformação plástica na ponta da trinca, desenvolveu uma relação explícita em termos de um parâmetro que representa a energia elástica total liberada no processo de propagação de uma trinca. Isto é, utilizando a taxa de liberação de energia elástica que representa a energia elástica liberada por unidade de aumento do comprimento da trinca e por unidade de espessura ($\partial U/\partial a$), mostrou que para o modo I de carregamento, ele é dado por:

$$G_I = \frac{\sigma^2 \pi a}{E} \quad (4.3)$$

Sua relação com o Fator de Intensidade de Tensões, para o estado plano de deformações (EPD) e o estado plano de tensões (EPT) é a seguinte:

$$G_I = \frac{K_I^2}{E}(1-\nu^2) \quad (4.4)$$

$$G_I = \frac{K_I^2}{E} \quad (4.5)$$

onde ν é o coeficiente de Poisson.

Quando é alcançado o valor crítico do fator de intensidade de tensões, a situação equivale ao método do balanço de Griffith-Irwin, onde tem que se atingir o valor crítico da taxa de liberação de energia de deformação elástica, G_{IC} . Nessa situação, substitui-se G_I por G_{IC} e K_I por K_{IC} ou K_C nas equações (4.4) e (4.5).

Dessa maneira, a formulação de Irwin deu uma grande contribuição ao estudo da fratura, tendo permitido a extensão da teoria de Griffith à fratura de materiais que apresentam alguma deformação plástica associada ao processo de propagação da trinca. Entretanto, a validade do Fator de Intensidade de Tensões como determinante da amplitude do campo de tensões em torno da ponta da trinca, depende da zona plástica ser pequena e estar confinada a uma região em torno da ponta da trinca, dominada pela singularidade da Equação (4.1), caracterizando-se assim a condição de *small scale yielding* (Figura 4.3). A existência dessa condição é a base para a aplicação da MFLE.

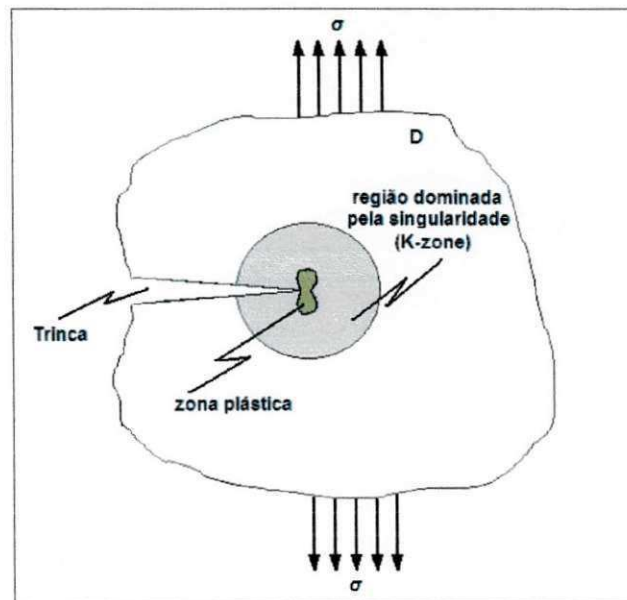


Figura 4.3. Esquema da região plastificada na frente da ponta da trinca.

4.1 Fratura Assistida pelo Hidrogênio

Dado que a existência de defeitos é praticamente inevitável em obras de engenharia, torna-se necessária a avaliação da resistência dos materiais à propagação de trincas nos meios em que serão utilizados. Por ser uma propriedade intrínseca do material, o valor da Tenacidade à Fratura do Material pode ser utilizado na análise de qualquer geometria, possibilitando o cálculo do tamanho máximo de trincas que a estrutura pode admitir antes de se propagar de forma instável até a fratura final. Esse tamanho máximo é conhecido como *dimensão crítica da trinca*.

Em geral, a fratura final é um evento brusco e terminal, mas as trincas podem se propagar estavelmente durante muito tempo antes que ela ocorra, como observado nos materiais com alta tenacidade. Por isso a propagação estável de uma trinca é chamada de *trincamento*, enquanto a sua propagação instável é chamada de *fraturamento* (MIRANDA, 2003). Para uma trinca existente num material não submetido a qualquer interação com o ambiente, com dimensão inferior à dimensão crítica (ou *trinca subcrítica*), não existe propagação instável. Entretanto, em situações onde há o fornecimento de uma energia adicional ao sistema, como no caso da fragilização a nível local, pode ocorrer a propagação instável de uma trinca subcrítica, dando-se lugar ao início da denominada *Fratura Assistida pelo Ambiente* (Environmental Assisted Cracking - EAC), que engloba qualquer fenômeno de interação de agentes ambientais com uma peça solicitada mecânicamente. O caso particular da interação com o hidrogênio é denominado *Fratura Assistida pelo Hidrogênio* (Hydrogen Assisted Cracking - HAC).

Em ensaios de corpos-de-prova pré-trincados, submetidos a uma carga constante e à ação de um ambiente agressivo através de uma célula de corrosão, observa-se que um corpo-de-prova, aparentemente, rompe com um valor de K_I inferior ao valor de K_{IC} do material. Na realidade, ocorre um crescimento subcrítico da trinca por assistência do hidrogênio para um determinado valor de K_I inicial, que faz com que haja um aumento do Fator de Intensidade de Tensões efetivo com o tempo, até atingir o valor de K_{IC} ,

acarretando então a fratura final do componente. Na Figura 4.4 pode-se observar que, quanto maior o valor de K_I inicial aplicado, menor será o tempo necessário para levar a peça à fratura, e que existe um valor de K_I abaixo do qual não existe propagação subcrítica da trinca.

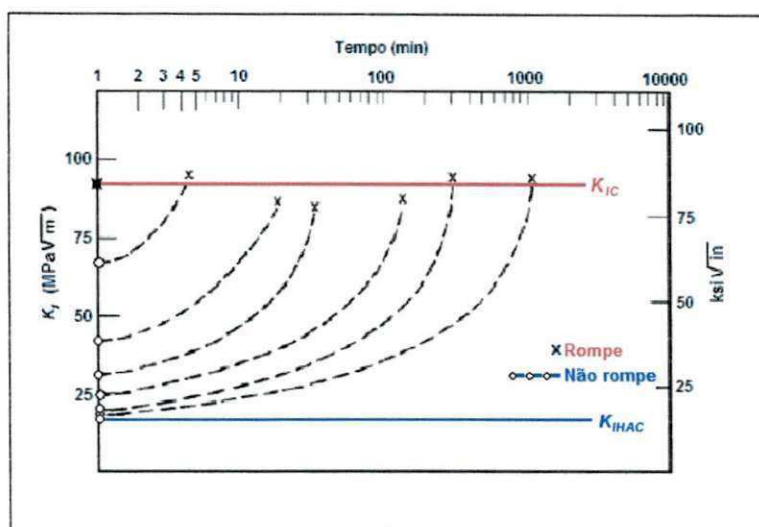


Figura 4.4. Alteração de K_I com a propagação subcrítica da trinca num ensaio com controle de carga.

Esse valor de K_I é o denominado K_{IHAC} do material, definido como o valor limite do Fator de Intensidade de Tensões em materiais que trabalham em ambientes com presença do hidrogênio, cujo cálculo permite determinar um patamar referencial abaixo do qual não haverá propagação de uma trinca subcrítica. Este termo é equivalente a um termo predecessor, K_{ISCC} , utilizado em processos de Corrosão Sob Tensão Fraturante (Stress Corrosion Cracking - SCC) (BROWN & BEACHEM; BARSOM & ROLFE) *apud* (GANGLOFF, 2003).

Os modelos propostos para explicar a existência desse valor limite postulam que a propagação de trincas subcríticas é controlada por uma combinação entre a concentração de hidrogênio no material e a tensão aplicada (TROIANO *apud* STROAHECKER, 2006). Gangloff (2003) associa a existência do K_{IHAC} com a diminuição da resistência à fratura causada pela degradação do material à frente da ponta das trincas, claramente provocada

pela ação do hidrogênio através de processos microscópicos que favorecem o seu avanço.

Uma constatação é definitiva: a concentração de hidrogênio é maior exatamente na região de maior triaxialidade à frente da trinca. Em outras palavras, justamente na região em que o campo de tensões atinge seu valor máximo haverá a maior concentração de hidrogênio (CAYÓN *et al.*, 2003). É quase uma unanimidade entre os pesquisadores que o campo de tensões hidrostático à ponta de uma trinca é o componente mais importante, sendo o parâmetro que governa o processo de fratura assistida pelo hidrogênio (STROHAECKER, 2006).

Há muitos mecanismos da HAC, a precondição para que eles possam operar é que a concentração local de hidrogênio provocada pela difusão devido ao gradiente de tensão atinja um valor crítico necessário para propagar as trincas geradas na fragilização. Segundo Gangloff (2003), o mecanismo básico de dano em ligas de alta resistência que não formam hidretos é o HEDE, visão que é suportada pela alta acumulação de hidrogênio no local da zona de processamento da fratura devido às altas tensões na ponta da trinca e ao seu aprisionamento ao longo desse caminho.

4.2 Mecânica da Fratura Computacional

Sempre é desejável determinar os campos de tensão e deformação em um corpo que está sujeito a carregamentos externos ou deslocamentos do ponto de vista da mecânica dos sólidos. No caso limite, é possível obter uma solução analítica para os campos de tensão e deformação, no entanto, na maioria dos casos, soluções exatas não são possíveis e as tensões em um corpo têm de ser modeladas numericamente. Várias soluções do fator de intensidade de tensões para diversas configurações de geometria e carregamento foram publicadas, porém para muitos dos casos reais de engenharia o parâmetro K não está disponível.

Uma grande variedade de técnicas numéricas tem sido aplicada em problemas da mecânica dos sólidos, incluindo o método das diferenças finitas,

elementos finitos e elementos de contorno; os dois últimos métodos são aplicados com maior frequência. No caso específico da modelagem com o método dos elementos finitos, os fatores de intensidade de tensão são calculados com o uso de elementos apropriados na ponta da trinca.

4.2.1 Elementos finitos especiais

Chan *et al.* *apud* Miranda (2003) foram alguns dos primeiros pesquisadores a utilizar o Método dos Elementos Finitos para determinar os fatores de intensidade de tensão. A principal dificuldade encontrada por eles foi representar a singularidade $1/\sqrt{r}$ da ponta da trinca com elementos convencionais. A partir de então, vários pesquisadores procuraram criar elementos especiais para modelar esta singularidade (HELLEN ; ZIENKIEWICZ *et al.*) *apud* (MIRANDA, 2003). As várias propostas de elementos finitos, surgidas a partir de 1970, podem ser agrupadas nos seguintes tipos de formulação (LIEBOWITZ; FAWKES, OWEN & LUXMOORE) *apud* (FERNANDES, 2002):

- Elementos baseados em soluções analíticas.
- Elementos enriquecidos (*enriched elements*).
- Elementos com funções de forma distorcidas (*distorted shape functions elements*).
- Elementos híbridos singulares.

Neste trabalho somente serão utilizados elementos com funções de forma distorcidas, por tal motivo, somente será realizado uma abordagem dessa formulação.

4.2.1.1 Elementos com funções de forma distorcidas

Neste tipo de formulação, a ponta da trinca é colocada em um dos nós do elemento e o comportamento singular do campo de tensões é obtido

modificando-se a função de interpolação polinomial do elemento. Uma variação dos elementos distorcidos, os elementos *ponto a um quarto* (*quarter point-QP*), foi desenvolvida por Henshell & Shaw e Barsoum *apud* Fernandes (2002). Eles demonstraram que para um elemento isoparamétrico quadrangular de oito nós, o deslocamento dos nós intermediários de dois lados concorrentes para a posição correspondente a $\frac{1}{4}$ da dimensão dos lados, cria no nó comum uma singularidade igual à existente na ponta da trinca, ou seja, do tipo $1/\sqrt{r}$ (Figura 4.5). Barsoum mostrou que tal singularidade também ocorre com o elemento triangular de seis nós, e mostrou ainda, que enquanto o elemento quadrangular apresentava a singularidade apenas ao longo dos lados concorrentes, o elemento triangular apresenta essa característica ao longo de qualquer raio com origem no ponto da singularidade, proporcionando melhores resultados.

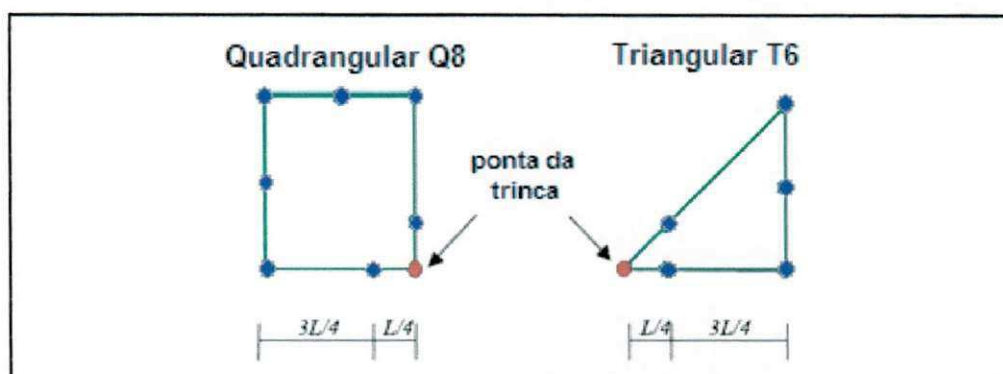


Figura 4.5. Elementos singulares *quarter-point* (Fonte: adaptado de MIRANDA, 2003).

Estes elementos, que se tornaram populares entre os pesquisadores por serem mais simples e proporcionarem resultados mais precisos com malhas relativamente grosseiras, são dispostos na ponta da trinca em forma de uma roseta. A roseta padrão é formada por oito elementos que formam entre si um ângulo de 45° , normalmente alinhada com a trinca. Outras configurações de rosetas podem ser formadas, como as rosetas de elementos com ângulo de 40° e com ângulo de 30° (Figura 4.6).

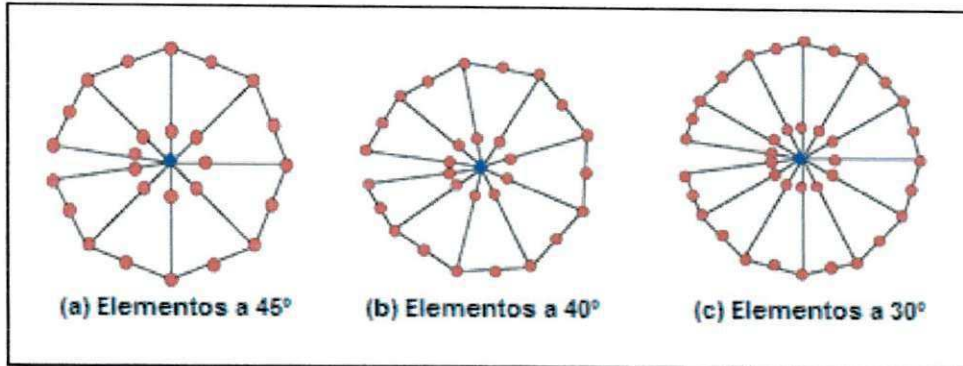


Figura 4.6. Rosetas de elementos *quarter-point*: (a) padrão; (b) com elementos a 40°; (c) com elementos a 30° (Fonte: MIRANDA, 2003).

4.2.2 Métodos para determinação dos parâmetros da fratura linear elástica

A determinação numérica do Fator de Intensidade de Tensões em regime elástico linear pode ser feita através de métodos que utilizam as tensões e deslocamentos resultantes de uma análise de elementos finitos e de métodos que utilizam a taxa de liberação de energia elástica. Habitualmente são empregados três métodos para calcular esse parâmetro:

- Técnica de Correlação dos Deslocamentos - TCD (*Displacement Correlation Technique - DCT*).
- Método da Integral de Fechamento de Trinca Modificado - IFTM (*Modified Crack Closure Integral - MCCI*).
- Método da Integral de Domínio Equivalente - IDE (*Equivalent Domain Integral - EDI*).

4.2.2.1 Técnica de correlação dos deslocamentos - TCD

A idéia básica desta técnica para calcular numericamente o Fator de Intensidade de Tensões é a de correlacionar os deslocamentos em determinados pontos nodais da trinca, obtidos pela análise de elementos finitos, com as soluções analíticas (ANDERSON *apud* ARAÚJO *et al.*, 2000).

Esta técnica é utilizada quando elementos especiais estão presentes na ponta da trinca, que em geral, são elementos finitos isoparamétricos, o que possibilita que o elemento possa representar adequadamente o campo de deslocamentos próximo à ponta da trinca.

Em modelos bidimensionais, esta técnica possibilita o cálculo de K para os modos I e II. Para o modo I, a expressão analítica para o deslocamento da abertura da ponta da trinca à distância r a partir da ponta da trinca ao longo da sua face é da forma:

$$\delta(r) = K_I \left(\frac{\kappa+1}{\mu} \right) \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \quad (4.6)$$

onde μ é o módulo de cisalhamento, $\kappa = (3-4\nu)$ para o EPD e $\kappa = (3-\nu)/(1+\nu)$ para o EPT; ν é o módulo de Poisson.

A abertura da trinca também pode ser descrita por uma expansão do deslocamento onde os termos de ordem mais alto são desprezados. Esta expressão é dada por:

$$\delta(r) = (4v_{j-1} - v_{j-2}) \sqrt{\frac{r}{L}} \quad (4.7)$$

onde v_{j-1} e v_{j-2} são os deslocamentos relativos na direção y para os nós $j-1$ e $j-2$ e L é a dimensão do elemento mostrado na Figura 4.7.

A partir das equações (4.6) e (4.7), o Fator de Intensidade de Tensões no modo de carregamento I pode ser calculado por:

$$K_I = \left(\frac{\mu}{\kappa+1} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{L}} (4v_{j-1} - v_{j-2}) \quad (4.8)$$

4.2.2.2 Método da integral de fechamento de trinca modificado - IFTM

Este método se baseia no modelo de Irwin da integral de fechamento da trinca e é empregado com alguns tipos de elementos finitos, incluindo o elemento *quarter-point*. Este conceito supõe que a abertura atrás da ponta de

trinca não se altera entre dois pontos consecutivos de propagação (RYBICKI *et al.*; RAJU) *apud* (MIRANDA, 2003).

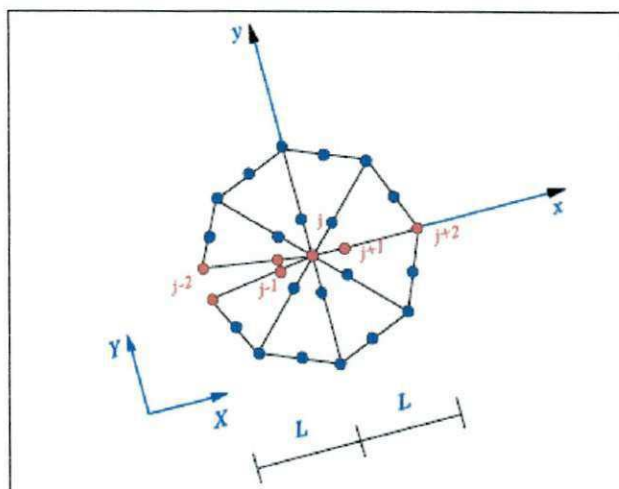


Figura 4.7. Elemento *quarter-point* na ponta da trinca (Fonte: MIRANDA, 2003).

Considerando que o trabalho para fechar uma trinca é igual à energia gasta para abri-la, pode-se dizer que o trabalho necessário para aumentar a trinca de a até $a+\delta a$ é o mesmo que o necessário para fazê-la voltar ao comprimento original (Figura 4.8). A partir desse conceito, Irwin obteve uma expressão para a taxa de liberação de energia elástica, que é somente uma estimativa do trabalho realizado pelas tensões sobre os deslocamentos produzidos pelo aumento virtual da trinca. A taxa de liberação de energia para o modo I é dada por:

$$G_I = \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{1}{2\delta a} \int_0^{\delta a} v(r) \sigma_y(r) dr \quad (4.9)$$

onde δa é o acréscimo virtual da trinca, σ_y é a tensão normal na frente da sua ponta, e $v(r)$ é o deslocamento de abertura numa distância r atrás da nova ponta da trinca.

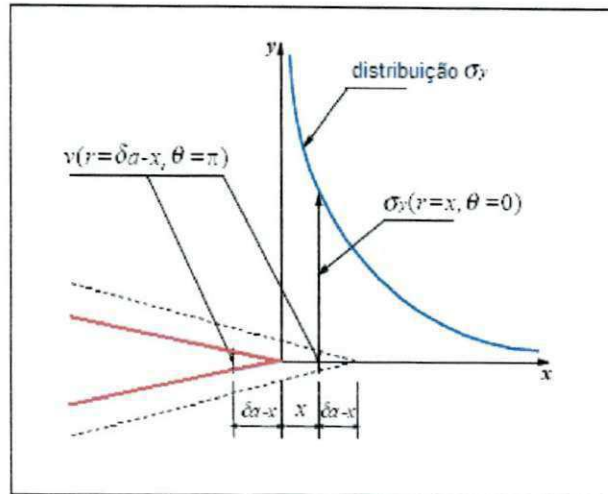


Figura 4.8. Conceito de Irwin para o fechamento da trinca.

Raju baseou este método na simetria dos elementos em torno dos planos da trinca; as distribuições de tensões obedecem à distribuição clássica $1/\sqrt{r}$ e os deslocamentos, $u(r)$, são determinados pelas funções de forma dos elementos. Então, as tensões são determinadas das forças equivalentes nodais na ponta da trinca e na frente dela. Portanto, somente os elementos que estão em torno da ponta da trinca são usados para determiná-las. Com os valores das tensões e dos deslocamentos provenientes da análise de elementos finitos, calcula-se G substituindo-os na Equação (4.9); as forças e os deslocamentos devem estar no sistema local de coordenadas da trinca.

As expressões para G são diferentes para cada tipo de elemento. Para o elemento singular *quarter-point*, Raju propôs dois tipos de fórmulas: a fórmula consistente, que usa três forças no elemento e a fórmula simplificada, que usa somente duas forças. Ele mostrou que as fórmulas simplificadas são mais fáceis de trabalhar e que apresentam resultados mais exatos do que as fórmulas consistentes. A fórmula simplificada para o modo I, é dada por:

$$G_I = -\frac{1}{2\delta a} \left[F_{y_i} \{t_{11}(v_m - v_{m'}) + t_{12}(v_l - v_{l'})\} + F_{y_j} \{t_{21}(v_m - v_{m'}) + t_{22}(v_l - v_{l'})\} \right] \quad (4.10)$$

onde $t_{11} = 6 - 3\frac{\pi}{2}$; $t_{12} = 6\pi - 20$; $t_{21} = \frac{1}{2}$; $t_{22} = 1$. F_{y_i}, F_{y_j} são as forças nodais equivalentes atuando nos nós i e j nas direções x e y , respectivamente; v são os deslocamentos nodais nos nós m, m', l e l' nas direções x e y , respectivamente. Os nós e as forças nodais, na direção y , para este elemento estão mostradas na Figura 4.9.

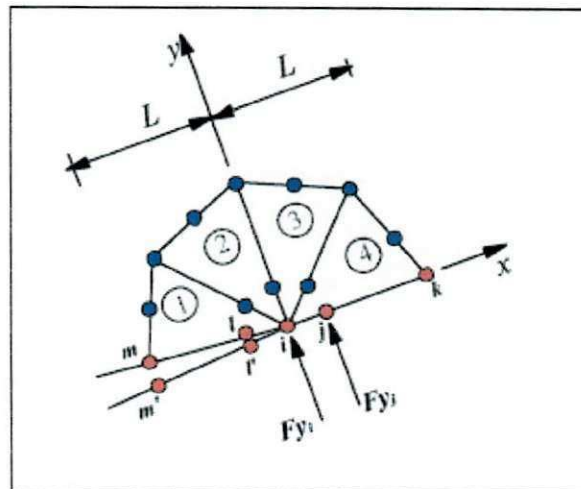


Figura 4.9. Forças nodais na frente da ponta da trinca (Fonte: MIRANDA, 2003).

Em regime linear-elástico, o Fator de Intensidade de Tensões é obtido diretamente a partir da sua relação com a taxa de liberação de energia elástica, dada pela seguinte expressão:

$$G_I = \frac{\kappa + 1}{8\mu} K_I^2 \quad (4.11)$$

4.2.2.3 Método da integral de domínio equivalente - IDE

A taxa de liberação de energia potencial em regime elástico linear pode ser avaliada pela integral J , que tem como base a lei de conservação da energia. É uma integral de contorno, inicialmente estudada por Rice *apud*

Araújo *et al.* (2000), cujo valor não varia ao longo de qualquer caminho de integração que envolva a trinca. Ela é definida por:

$$J_k = \int_{\Lambda} \left[W n_k - \sigma_{ij} n_j \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right] ds \quad (4.12)$$

onde k é a direção de um dos eixos coordenados (x,y) , Λ é qualquer caminho que comece na face inferior da trinca, envolva sua ponta e termine na face superior (Figura 4.10), W é a densidade de energia de deformação, n_k e n_j são as componentes do vetor unitário normal ao contorno de integração e s é o comprimento de arco ao longo do contorno.

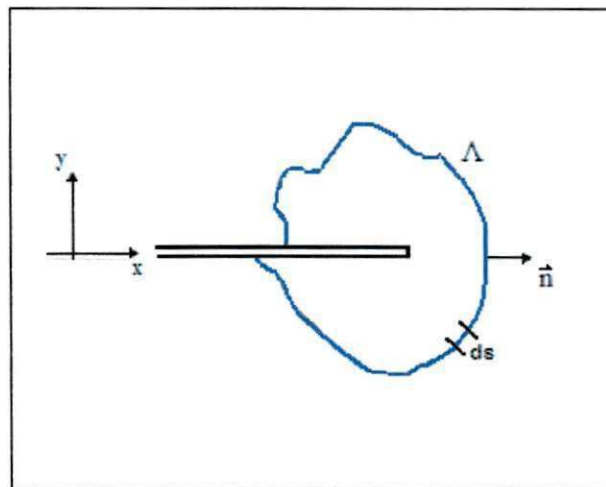


Figura 4.10. Contorno arbitrário em torno da ponta da trinca.

Essa integral foi desenvolvida inicialmente para avaliar a tenacidade a fratura de materiais em regime elasto-plástico. Mas para o caso do regime elástico linear seu valor é igual ao da taxa de liberação de energia. O cálculo da integral de contorno J na forma mostrada pela Equação (4.12) não é adequado para ser feito numericamente através de um modelo de elementos finitos. Pode-se evitar isso utilizando o teorema da divergência, transformando a integral de contorno em uma integral de domínio equivalente. O contorno Λ mostrado na Figura 4.10 é substituído pela área anelar mostrada na Figura

4.11. Para isso é utilizada uma função peso $q(x,y)$, que assume um valor unitário para Λ_1 e nulo para Λ_2 . Re-escrevendo a Equação (4.12) tem-se:

$$J_k = - \int_A \left[W \frac{\partial q}{\partial x_k} - \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial q}{\partial x_j} \right] dA - \int_A \left\{ \frac{\partial W}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right] \right\} q dA - \int_S t_i \frac{\partial u_i}{\partial x_k} q dS \quad (4.13)$$

onde t_i é o carregamento nas faces da trinca. Para o caso de um material elástico-linear, o segundo termo dessa equação desaparece, o terceiro desaparecerá se as faces da trinca não forem carregadas.

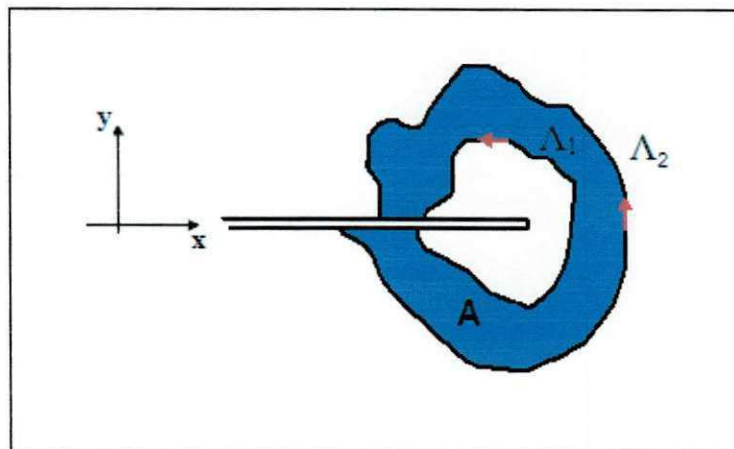


Figura 4.11. Área anelar para o cálculo da integral J .

Assim como no Método da Integral de Fechamento de Trinca Modificado, uma vez calculada a taxa de liberação de energia, pode-se avaliar os fatores de intensidade de tensões.

Araújo *et al.* (2000) testaram as três técnicas numéricas e os três tipos de rosetas para o cálculo do Fator de Intensidade de Tensões em problemas elásticos lineares e obtiveram resultados consistentes. Segundo eles, os resultados a partir dos métodos da Integral de Fechamento de Trinca Modificado e da Integral do Domínio Equivalente, podem ser considerados exatos, o que indica que o uso de fórmulas simplificadas e campos associados é viável. O método da Técnica de Correlação dos Deslocamentos, considerado por muitos autores de baixa precisão, apresentou uma percentagem de erro

satisfatória (5% abaixo do Fator de Intensidade de Tensões no modo dominante e abaixo de 10% para o modo não dominante).

Eles concluíram que as rosetas QP45, QP40 e QP30 apresentaram bons resultados, com erro abaixo de 2%, não havendo nenhuma diferença aparente ao usar as rosetas QP40 ou QP30. Entretanto, esses erros foram menores do que 5%, que é usualmente aceitável em problemas de engenharia.

5. MECÂNICA DO DANO CONTÍNUO

Atualmente, a Mecânica dos Meios Contínuos é a ferramenta de certificação mais amplamente utilizada (MAIMÍ, 2006). Ela parte da hipótese de que as variáveis do problema podem ser descritas mediante equações contínuas, o que requer que exista a suficiente diferença de escala entre o tamanho das descontinuidades do material e o tamanho da estrutura que se analisa. Logo dessa simplificação é possível tratar do problema mediante equações diferenciais.

Os modelos constitutivos se encarregam de definir uma relação entre as tensões e deformações. Os modelos constitutivos baseados na mecânica dos meios contínuos se apresentam como a ferramenta mais promissora para o tratamento da resposta estrutural, porque permitem o cálculo da resposta de estruturas geometricamente complexas e, ao mesmo tempo, o acoplamento de vários fenômenos constitutivos na mesma formulação (MAIMÍ, 2006).

As duas tipologias de descrição constitutiva utilizadas em cálculos quase-estáticos, que quantificam a variação das propriedades do material, são os modelos de plasticidade e os modelos de dano. Os modelos de plasticidade tratam das deformações plásticas ou deformações irreversíveis dos materiais quando ultrapassam certo limiar de tensões. Os modelos de dano tratam da perda de rigidez dos materiais devido à nucleação e crescimento de trincas.

A chamada Mecânica do Dano Contínuo (*Continuum Damage Mechanics*), ou simplesmente *Mecânica do Dano*, foi formalizada por Lemaitre & Chaboche com base numa metodologia fundamentada na termodinâmica dos processos irreversíveis. Ela é definida como o ramo da Mecânica dos Meios Contínuos que se ocupa de analisar os efeitos da deterioração progressiva de um material quando submetido a esforços de origem mecânica ou não mecânica, dedicando-se ao estudo e à definição de modelos constitutivos para as várias quantidades (escalares, vetoriais ou tensoriais) responsáveis pela qualificação do efeito dessa degradação (GURTIN; LAI *et al.*) *apud* (FERREIRA, 2002).

A Mecânica do Dano é de fato, uma extensão da mecânica clássica dos corpos deformáveis utilizada para modelar os vários tipos de dano a nível mesoscópico através da introdução de campos adicionais de variáveis que caracterizam médias, estatísticas ou formas homogeneizadas da distribuição de micro-trincas, micro-poros e de outros defeitos. Essas variáveis entram nas equações constitutivas junto a tensões comuns, deformações e outros campos de variáveis da mecânica dos meios contínuos, podendo ser diretamente relacionadas com a distribuição do micro-dano. Sua evolução é determinada mediante as leis do dano ou da plasticidade postuladas diretamente, ou que foram previamente definidas a partir da micro-mecânica.

Idealmente, as equações da mecânica do dano contínuo deveriam ser obtidas a partir de modelos micro-mecânicos que representam mais fielmente os fenômenos observados, com o uso de qualquer tipo de homogeneização como a estatística ou aproximações de energia estendida. Na realidade, muitos modelos da mecânica do dano foram introduzidos num sentido puramente fenomenológico com ou sem interpretação do aspecto micro-mecânico (BOLOTIN, 1999).

Sob outro ponto de vista, a Mecânica do Dano é uma teoria fenomenológica com variáveis internas que são governadas com equações cinéticas adicionais.

5.1 Aspectos Fenomenológicos do Dano

A resposta não linear dos sólidos, observada macroscopicamente, é uma manifestação de processos irreversíveis que ocorrem na sua micro-estrutura, alguns dos quais têm sua origem em micro-defeitos constituídos por inclusões ou vazios que, pelas suas características, favorecem a concentração de micro-tensões e constituem o que é conhecido por *dano inicial* do material. Dependendo das condições ambientais e devido à existência de solicitações mecânicas, ainda dentro dos limites do regime elástico, o dano inicial pode evoluir como conseqüência do rompimento das ligações interatômicas ou por rupturas na interface dos componentes micro-estruturais.

Macroscopicamente, esse processo de *evolução* do *dano inicial* ou *danificação*, acaba tendo uma influência direta nas propriedades elásticas do material, refletindo-se via de regra, numa diminuição da sua tenacidade à fratura. Já num estágio mais avançado de solitação, a danificação leva à formação e ao crescimento de micro-trincas, que se traduzem em parcelas adicionais de deformações permanentes. A transição de um estado de dano distribuído ao de uma fratura discreta (Figura 5.1) pode ser considerada como o resultado do processo de localização do dano numa região de pequena largura do meio, seguido da sua evolução numa faixa progressivamente mais estreita, até a formação da descontinuidade (PROENÇA, 2002b).

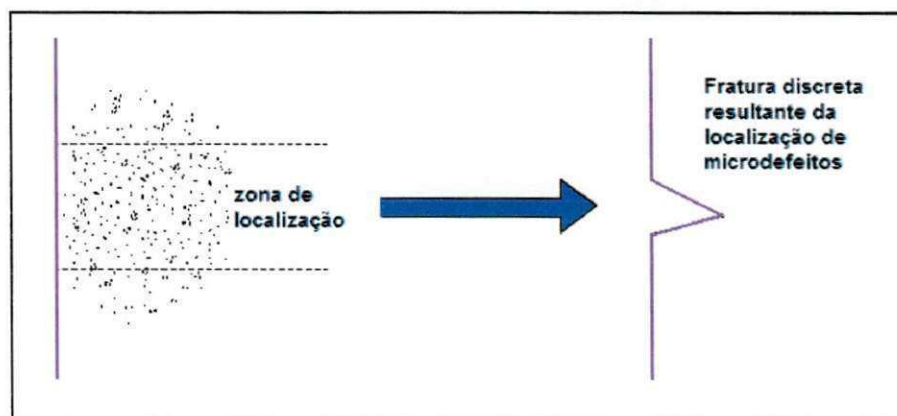


Figura 5.1. Processo de transição entre dano e fratura (Fonte: PROENÇA, 2002b).

Do ponto de vista fenomenológico, pode-se estudar o comportamento dos materiais danificados em três níveis ou escalas diferentes; os dois primeiros níveis são estudados por meio da inclusão de variáveis de dano nas formulações da Mecânica do Contínuo. O terceiro nível usualmente é estudado através da Mecânica da Fratura com variáveis definidas na macro-escala (LEMAITRE, 1992):

Micro-escala - denominada também escala atômica ou microscópica por trabalhar na escala de átomos e grãos isolados, é onde se estudam os mecanismos que modificam a elasticidade, a diminuição da rigidez ou a

plasticidade. A elasticidade encontra-se relacionada com os movimentos dos átomos e a plasticidade com o movimento relativo das discordâncias entre os cristais do material. O dano nesta escala é caracterizado pelo acúmulo de micro-tensões na vizinhança de defeitos e interfaces e pela perda de coesão atômica.

Meso-escala - denominada escala intermediária ou mesoscópica por trabalhar na escala de células unitárias, cristais ou aglomerados atômicos, é onde podem se definir as equações constitutivas para a análise mecânica. Nesta escala o dano é caracterizado pelo crescimento e coalescência de micro-trincas ou micro-vazios que iniciam uma trinca.

Macro-escala - é a escala das estruturas a analisar e o dano é caracterizado pelo crescimento de uma trinca.

5.1.1 Elasticidade e dano

Os materiais são constituídos por átomos, ligados através de campos eletromagnéticos. Os Fenômenos elásticos estão relacionados ao movimento relativo de átomos do material, associado a uma perceptível variação de volume e da distância interatômica. Apesar da sua natureza microscópica, é possível tratar a teoria da elasticidade através de modelos constitutivos matemáticos em meso-escala, usando a reversibilidade das deformações elásticas e incorporando conceitos como linearidade e isotropia.

O dano se inicia quando se dá a perda de coesão interatômica. Em metais submetidos a um carregamento cisalhante, as discordâncias podem se deslocar devido à variação das ligações atômicas e criar micro-deformações plásticas por deslizamento de planos cristalográficos. Se os valores de tensão ultrapassam um determinado limite, o processo se torna irreversível devido ao acúmulo de discordâncias em pontos específicos do material, causando perda de coesão e formando micro-trincas. Este mecanismo é caracterizado pela introdução de deformações plásticas microscópicas no material.

A elasticidade é diretamente influenciada pelo dano, dado que a diminuição no número de ligações atômicas reflete na redução da elasticidade do material. O acoplamento que ocorre do ponto de vista do estado do material, definido neste caso pela deformação elástica e pelo dano, é denominado *acoplamento de estado* (LEMAITRE, 1992).

5.1.2 Plasticidade e dano

Ao contrário da elasticidade, a qual está relacionada ao movimento relativo de átomos, a plasticidade em metais está relacionada ao deslizamento de planos cristalinos. A plasticidade é influenciada pelo dano devido à redução da área efetiva de resistência do material e à perda da coesão atômica. O dano não influencia o mecanismo de deslizamento de planos cristalinos diretamente, não havendo acoplamento de estado. O acoplamento indireto que leva a um aumento na tensão efetiva atuante no material é denominado *acoplamento cinético* e pode ser entendido apenas através de equações constitutivas cinéticas (LEMAITRE, 1992).

5.2 Descrição do Dano na Meso-escala

A mecânica dos meios contínuos parte da hipótese de que o material é homogêneo e contínuo numa determinada escala, e que as equações que descrevem o meio e as suas propriedades termomecânicas podem ser representadas mediante funções contínuas. Dado que os materiais não são contínuos porque apresentam defeitos iniciais ou gerados ao longo da sua vida, é necessário definir um elemento onde os fenômenos a serem estudados sejam médias representativas e tratados como contínuos ao longo dele. Esse elemento é denominado *Elemento de Volume Representativo* (Figura 5.2) e é definido na meso-escala, que é onde os fenômenos da micro-escala podem ser tratados como contínuos. Esses fenômenos serão válidos enquanto os processos micro-mecânicos possam ser considerados como estatisticamente homogêneos dentro do elemento representativo de volume; a partir desse

momento, o tratamento da evolução das variáveis internas deverá ser realizado com o uso de outras considerações (MAIMÍ, 2006).

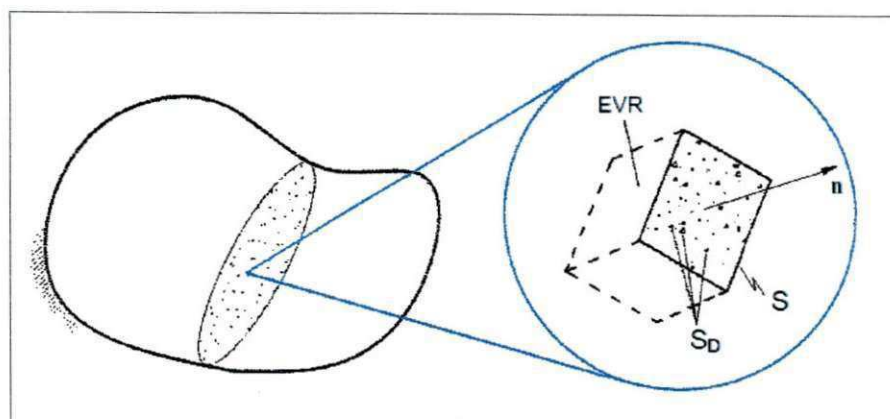


Figura 5.2. Elemento de volume representativo.

Apesar do mecanismo microscópico geral do dano ser o mesmo para os materiais, é possível definir em meso-escala as seguintes manifestações do dano, que dependem do tipo de material, carregamento e temperatura (LEMAITRE, 1992):

5.2.1 Dano frágil ou quase-frágil

O dano é considerado frágil quando uma trinca é iniciada na meso-escala com mínimo acúmulo de deformação plástica altamente localizada. Uma medida qualitativa para o dano frágil pode ser dada através da relação unidimensional entre as deformações elástica e plástica, isto é: $\varepsilon_p / \varepsilon_e < 1$.

5.2.2 Dano dúctil

O dano é considerado dúctil quando é associado a deformações plásticas maiores que certo valor limiar, que se originam a partir da nucleação de cavidades devido à decoesão entre inclusões e a matriz. O grau de distribuição do dano ao longo do volume de material é comparável àquele das deformações plásticas.

5.2.3 Dano por fluência

Quando o material é carregado em altas temperaturas (acima da temperatura de recristalização), a deformação envolve viscosidade, ou seja, o material se deforma mesmo sob tensão constante, havendo então o dano por fluência. Como no caso dúctil, o grau de distribuição do dano é comparável ao das deformações visco-plásticas.

5.2.4 Dano por fadiga de baixo ciclo

Ocorre quando o material é submetido a carregamentos cíclicos com valores elevados de tensão ou deformação. O grau de distribuição do dano chega a ser superior aos casos de dano dúctil e dano por fluência. Normalmente, apesar de não haver consenso na literatura, o número de ciclos de ruptura (NR) considerado no caso de fadiga de baixo ciclo é $NR < 10^4$.

5.2.5 Dano por fadiga de alto ciclo

Neste caso, os valores de tensão e deformação cíclicos são baixos, havendo deformação plástica altamente localizada, pouca ou desprezível (geralmente em entalhes, cantos-vivos, furos, etc.). Considera-se que o número de ciclos para a ruptura esteja na faixa $10^4 < NR < 10^7$.

5.3 Manifestações do Dano na Macro-escala

Os efeitos do dano em meso-escala podem ser verificados experimentalmente na macro-escala, através da observação das alterações das propriedades de resistência e de deformabilidade dos meios contínuos equivalentes. Elas também dependem do tipo de material, carregamentos aplicados e temperatura dos ensaios (PROENÇA, 2001a):

5.3.1 Manifestação do dano frágil

O gráfico da relação tensão-deformação do meio considerado contínuo, apresenta-se inicialmente linear-elástica, sendo interrompida por uma súbita perda total de resistência que corresponde à formação da trinca (Figura 5.3).

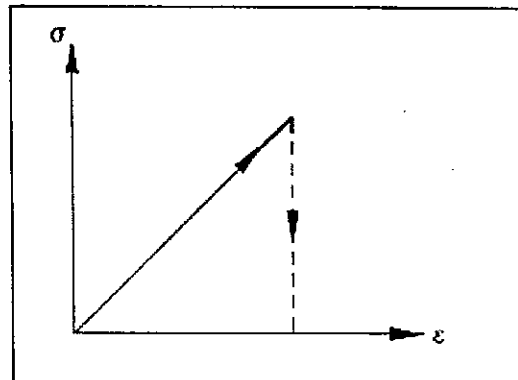


Figura 5.3. Resposta macroscópica frágil (Fonte: PROENÇA, 2001a).

5.3.2 Manifestação do dano dúctil

A formação da micro-trinca corresponde ao pico de tensão no diagrama tensão-deformação. O processo de crescimento e propagação da descontinuidade gera um decréscimo da resistência do meio contínuo, que continua até um nível de deformação onde ocorre a perda total de resistência, devido à ruptura associada com a sua instabilidade plástica (Figura 5.4).

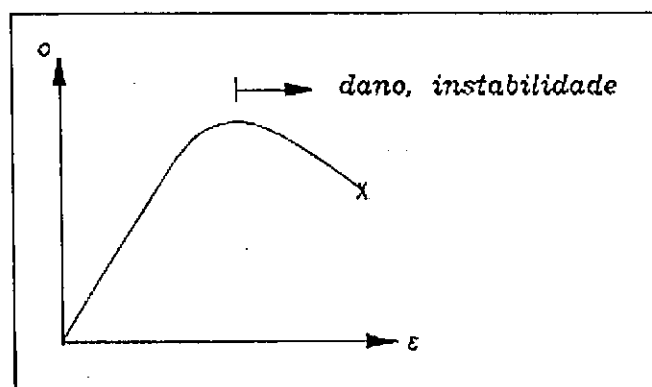


Figura 5.4. Resposta macroscópica dúctil (Fonte: PROENÇA, 2001a).

5.3.3 Manifestação do dano por fluência

Sob temperaturas altas, as deformações plásticas dos metais envolvem viscosidade. Quando a deformação é suficientemente grande aparecem, na micro-escala, quebras da coesão inter-granular que produzem o dano. Na macro-escala esse efeito se manifesta pelo aumento progressivo da taxa de deformação característica da terceira porção do diagrama de deformação do meio contínuo com o tempo (Figura 5.5).

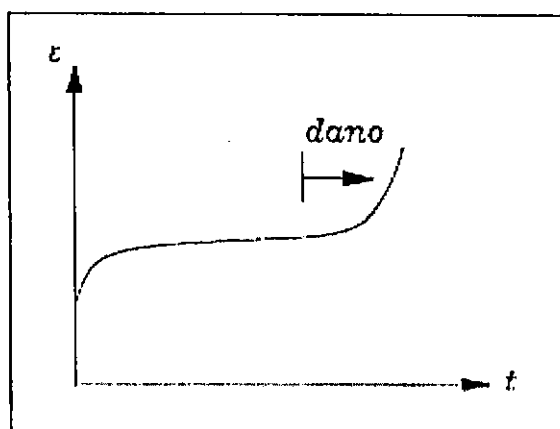


Figura 5.5. Manifestação macroscópica do dano por deformação lenta no meio contínuo (Fonte: PROENÇA, 2001a).

5.3.4 Manifestação do dano por fadiga de baixo ciclo

Sob um regime de elevadas solicitações cíclicas de tensão ou deformação impostas, o dano se desenvolve nos metais após um período de desenvolvimento de deformações permanentes com acúmulo de discordâncias. Na macro-escala, num regime de deformação imposta, por exemplo, observa-se uma fase de encruamento em correspondência ao processo de incubação das micro-trincas, seguida de um regime de resposta cíclica estável. Com o início e desenvolvimento da danificação manifesta-se uma progressiva diminuição da amplitude de tensão até a ruptura (Figura 5.6).

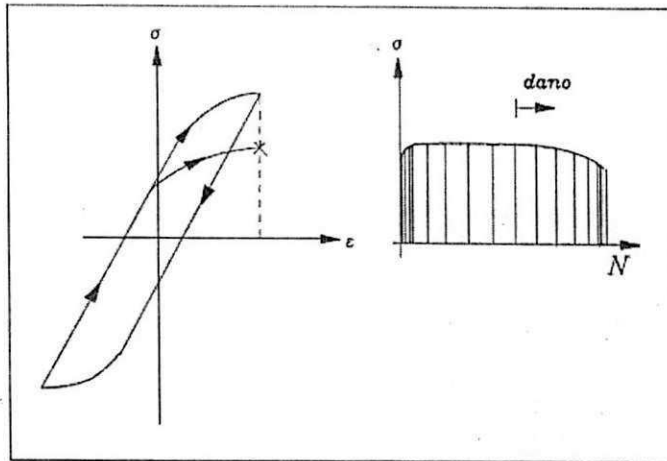


Figura 5.6. Manifestação do dano por fadiga de baixo ciclo no meio contínuo
(Fonte: PROENÇA, 2001a).

5.3.5 Manifestação do dano por fadiga de alto ciclo

Nesse caso as solicitações cíclicas produzem níveis de tensão menores do que a tensão de escoamento. No meio contínuo equivalente, num caso de deformação imposta, observa-se um longo trecho de estabilidade no qual o nível de tensão máxima se mantém constante, seguindo-se um regime de rápida redução de resistência que corresponde à manifestação da danificação, culminando com a ruptura (Figura 5.7).

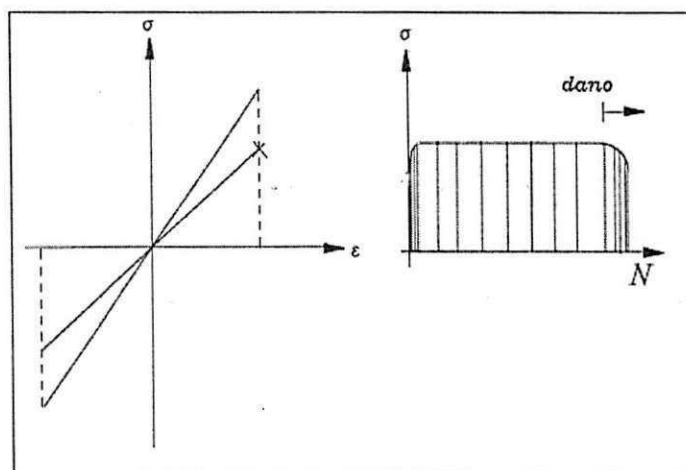


Figura 5.7. Manifestação do dano por fadiga de alto ciclo no meio contínuo
(Fonte: PROENÇA, 2001a).

5.4 Dano Isotrópico

Kachanov e Rabotnov introduziram o conceito de *dano* através de uma medida escalar, que caracteriza a intensidade do micro-trincamento, na tentativa de justificar a ruptura precoce observada na fluência de metais como uma consequência da existência de defeitos no material. Estudos posteriores levaram à proposição de quantidades tensoriais para descrever o dano mediante vetores e tensores de segunda, quarta ou oitava ordem (KACHANOV; KRAJCINOVIC; ORTIZ; CHABOCHE) *apud* (GONÇALVES, 2003). Estes modelos, denominados *anisotrópicos*, apresentam uma gama de aplicação muito extensa, porém com uma enorme complexidade na identificação dos parâmetros do modelo.

A maneira mais simples de descrever o dano é mediante uma única variável que afete a todos os termos do tensor constitutivo (BOLOTIN & SHIPKOV, 2001b; MAIMÍ, 2006). Em materiais inicialmente isotrópicos podem-se definir modelos de dano que descrevam a diminuição da rigidez mediante duas variáveis internas relacionadas com os dois parâmetros elásticos independentes. Estes modelos mantêm a isotropia inicial do material e são chamados genericamente de *modelos isotrópicos*, onde o *modelo escalar* é o caso mais simples. O uso de modelos escalares é muito comum na modelagem constitutiva devido a sua simplicidade; mesmo sem ser capazes de determinar a anisotropia gerada no elemento representativo de volume, podem representar a orientação de uma macro-trinca evoluindo na macro-escala.

O dano nos modelos escalares tem correspondência com uma situação em que os micro-defeitos apresentam uma distribuição mais ou menos uniforme no elemento representativo de volume, de modo que a medida de dano segundo qualquer plano resulta a mesma. Em outras palavras, um único valor da variável de dano é suficiente para caracterizar completamente o estado local de deterioração.

Os modelos de dano isotrópico apresentam uma limitação na descrição do dano que não é aceitável sob certas condições e casos de carregamentos complexos. Nesses casos, é requerida uma representação tensorial.

5.5 Dano Assistido pelo Hidrogênio

Um dos mais freqüentes danos assistidos pelo ambiente é causado pela interação do hidrogênio com metais e ligas metálicas. O hidrogênio livre e o quimicamente associado podem ser fontes da degradação das propriedades dos materiais, provocando falhas estruturais relacionadas com a corrosão sob tensão fraturante, a fadiga com corrosão e com a fragilização por hidrogênio. Aqui, o termo *fragilização por hidrogênio* é condicional e cobre um número de diferentes mecanismos associados com a difusão do hidrogênio em metais.

Adicionalmente às diminuições da tenacidade à fratura e da tensão de escoamento, que representam uma diminuição da ductilidade e são atribuídas à fragilização, ocorrem fenômenos de degradação resultantes da difusão do hidrogênio, como a nucleação de vazios e formação de bolhas, que podem ser qualificados como micro-danificação e, sob um ponto de vista fenomenológico, descritos como um dano produzido por ações puramente mecânicas.

Para modelar o processo de acumulação de dano em condições de assistência pelo ambiente, Bolotin (1999) utiliza o modelo escalar de dano mais simples de Kachanov e Rabotnov, que caracteriza o dano disperso através de um campo escalar $\omega = \omega(x,t)$ que é função das coordenadas, do tempo, do número de ciclos e de outras variáveis temporais. Ele é igual a zero no caso onde não existe dano e igual à unidade no caso onde o material se encontra completamente danificado.

Ao contrário de se utilizar uma quantificação simples para o dano escalar, nos trabalhos de Bolotin (1999) e Bolotin & Shipkov (2001a, 2001b), é introduzida uma medida especial para cada tipo de dano e a correspondente equação cinética que governa sua evolução no tempo. Mesmo quando somente ações mecânicas são consideradas, é realizada uma diferenciação das medidas do dano provocado pelos carregamentos estáticos do dano devido a outros carregamentos mecânicos, como os cíclicos. O dano provocado pela difusão de um agente ambiental na estrutura cristalina do material também é distinguido do dano produzido por um processo de corrosão. Portanto, o campo de dano introduzido simbolicamente por $\omega = \omega(x,t)$,

passou a ser representado por um conjunto de campos escalares de dano, $\omega_1(x,t), \dots, \omega_n(x,t)$.

O conjunto de equações de governo do modelo está formado por equações de acumulação de dano, condições da ponta da trinca e equações que descrevem o efeito do dano sobre as forças generalizadas, particularmente sobre o Trabalho Específico de Fratura (BOLOTIN,1999). Tanto o modelo linear-elástico quanto o modelo de uma zona plastificada fina podem ser usados. No primeiro caso se descrevem as condições da ponta pela evolução do seu raio efetivo ρ , que depende das taxas de crescimento da trinca e da acumulação de dano. A tensão σ , que corresponde a uma concentração de tensão elástica, é tratada como uma tensão representativa que, no caso da fragilização por hidrogênio pode ser interpretada como uma tensão de tração a uma distância λ_h à frente da trinca estudada, que é a espessura da região fragilizada. No segundo caso, λ_h inclui uma pequena porção do seu comprimento. Por simplicidade, uma aproximação linear da distribuição das tensões para $a \leq x \leq a + \lambda_h$ pode ser assumida para ambos os casos.

Em alguns aspectos, trabalhar com fragilização por hidrogênio é mais simples do que a modelagem da formação de filmes de óxido na corrosão; a razão é que a difusão nos metais transcorre muito mais rapidamente do que as taxas de crescimento das trincas. Nesses materiais, a espessura da capa danificada é da ordem de $10\mu\text{m}$ e o tempo característico de saturação usualmente é medido em minutos, existindo evidencia de que algumas propriedades do material, como o limite de escoamento e o módulo de Young atingem suas magnitudes regulares a aproximadamente $10\mu\text{m}$ na frente da trinca (BOLOTIN, 1999). Isto significa que se o processo de hidrogenação é o bastante rápido quando comparado com o do crescimento da trinca, se considera o dano por fragilização, ω_h , como um componente aditivo da medida do dano total, *que somente depende da concentração de hidrogênio na ponta*, e que pode ser representado por:

$$\omega_h(x,t) = \psi_h(t) \left(1 - \frac{x}{\lambda_h} \right) \quad (5.1)$$

onde $\xi = x - a$, $0 \leq \xi \leq \lambda_h$ e ψ_h é o dano da ponta da trinca provocado pela fragilização por hidrogênio; para $\xi > \lambda_h$, $\psi_h \equiv 0$.

O modelo assume que as equações cinéticas para as medidas particulares de dano sejam equações diferenciais de 1ª ordem. O caso especial dessas equações para o dano produzido por um carregamento estático, ω_s , no modo I de carregamento, é dado por:

$$\frac{\partial \omega_s}{\partial t} = \frac{1}{t_c} \left(\frac{\sigma - \sigma_{th}}{\sigma_s} \right)^{m_s} \quad (5.2)$$

onde σ é o valor médio da tensão de tração que atua num ponto material considerado. Esta expressão contém um número de parâmetros entre os quais estão σ_s , que caracteriza a resistência ao dano produzido pelo carregamento estático e σ_{th} , que é um parâmetro de resistência limiar. O expoente m_s é similar aos expoentes das equações das curvas de fadiga e taxa de crescimento da trinca que, sob certas condições, têm valores fechados (BOLOTIN, 1999); t_c é uma constante do tempo cuja magnitude pode depender do parâmetro σ_s , ou ser escolhida de forma arbitrária.

A evolução na ponta da trinca do dano representado nas Equações (5.1) e (5.2) pode ser expressa por (BOLOTIN, 1999; BOLOTIN & SHIPKOV, 2001a):

$$\frac{d\psi_h}{dt} = \frac{\psi_h^\infty}{c_h} \exp\left(-\frac{c_t}{c_h}\right) \quad (5.3)$$

$$\frac{d\psi_s}{dt} = \frac{1}{t_c} \left(\frac{\sigma - \sigma_{th}}{\sigma_s} \right)^{m_s} \quad (5.4)$$

onde ψ_h^∞ é a medida do dano na ponta da trinca correspondente à saturação; c_t é a evolução da concentração no tempo e c_h é a concentração estacionária do hidrogênio, atingida para uma trinca estacionária.

A concentração de tensão na ponta da trinca está relacionada com o raio efetivo de curvatura da ponta, ρ . Sua evolução é governada por vários processos, tais como o crescimento da trinca, a acumulação do dano mecânico

e o de fragilização. A equação diferencial para a evolução do raio efetivo da ponta de uma trinca plana com comprimento a , pode ser descrita por:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\rho_s - \rho}{\lambda_a} \frac{da}{dt} + (\rho_b - \rho) \frac{d\psi_s}{dt} + (\rho_h - \rho) \frac{d\psi_h}{dt} \quad (5.5)$$

O primeiro termo do lado direito da equação descreve o aguçamento da ponta devido ao crescimento da trinca com a taxa da/dt até a magnitude ρ_s , que é o raio de curvatura da ponta aguçada. O segundo e o terceiro descrevem o seu embotamento devido á acumulação do dano mecânico e do dano provocado pelo hidrogênio, até as magnitudes ρ_b e ρ_h . Usa-se a notação ψ_s e ψ_h para as magnitudes de ω_s e ω_h na ponta da trinca; λ_a é um parâmetro com dimensão de comprimento.

Para simplificar, os dois últimos termos da Equação (5.5) são unidos ajustando $\rho_b = \rho_h$, onde ρ_b é um raio efetivo comum; logo, é introduzida a soma da medida dos danos na ponta da trinca, $\psi = \psi_s + \psi_h$:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\rho_s - \rho}{\lambda_a} \frac{da}{dt} + (\rho_b - \rho) \frac{d(\psi_s + \psi_h)}{dt} \quad (5.6)$$

de acordo com esta nova equação, o embotamento da ponta da trinca até o raio efetivo ρ_b é controlado pela soma dos danos (Figura 5.8).

A última relação que fecha o conjunto de equações que governam o modelo, inter-relaciona as forças generalizadas de resistência com as medidas do dano na frente ponta da trinca. O Trabalho Específico de Fratura, que é igual à onergia por unidade do área que devo ser gasta para o avanço da trinca, é dado por:

$$\gamma = \gamma_0 [1 - \chi(\omega_s + \omega_h)^\alpha] \quad (5.7)$$

onde γ_0 é o Trabalho Específico de Fratura para um corpo não danificado, χ caracteriza a Tenacidade à Fratura Residual para o material danificado e α é um parâmetro material; portanto, $\gamma = \gamma_0(1 - \chi)$ caracteriza o Trabalho Específico de Fratura Residual para um material completamente danificado.

Em processos de fragilização por hidrogênio, $\alpha > 0$ e $\chi \geq 1$, e em processos de corrosão sob tensão fraturante, $\alpha \geq 1$ e $0 < \chi \leq 1$ (BOLOTIN, 1999, BOLOTIN & SHIPKOV, 2001a).

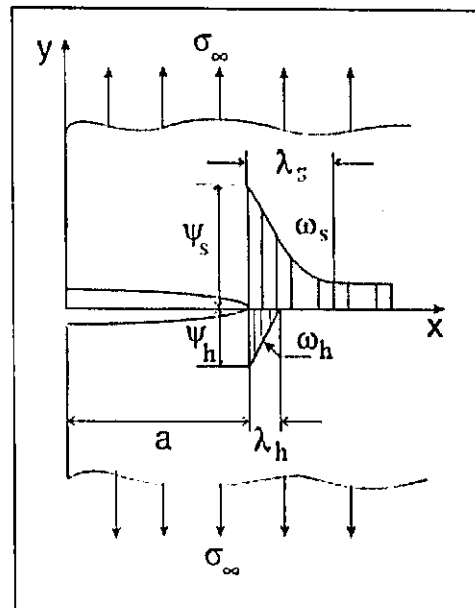


Figura 5.8. Distribuição dos danos mecânico e de fragilização numa trinca superficial no modo I (Fonte: adaptado de BOLOTIN & SHIPKOV, 2001a).

Na literatura pode ser encontrada evidência de que a tenacidade à fratura residual é muito menor do que a do material virgem; portanto, a magnitude do limite inferior de γ depende fortemente das composições químicas do material e do agente, da temperatura, da pressão, etc. Em qualquer caso, os diagramas da taxa de crescimento da trinca sob o efeito da fragilização por hidrogênio correspondem a baixas magnitudes do Fator de Intensidade de Tensões, por exemplo, entre 5 e 50 $\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$, enquanto que a tenacidade à fratura num ambiente neutro pode estar na ordem de 100 $\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$. A partir da Equação (5.7) e considerando $\Gamma_0 \equiv \gamma_0$, pode-se obter a força de resistência generalizada para uma trinca plana, que é dada por:

$$\Gamma = \Gamma_0 [1 - \chi(\psi_s + \psi_h)^\alpha] \quad (5.8)$$

5.6 Início e Crescimento de Trincas em Processos de Danificação Assistida pelo Hidrogênio

Apresentar-se-á o modelo de início e crescimento de trincas em ambientes agressivos, baseado numa síntese da Mecânica do Dano Contínuo e da Mecânica da Fratura, proposto por Bolotin & Shipkov (2001a). Nesse modelo, a propagação da trinca é considerada como o resultado das interações entre as condições de estabilidade do corpo trincado como um sistema mecânico e o processo de acumulação de dano.

O modelo inclui as equações cinéticas para a acumulação de cada tipo de dano, apresentadas anteriormente, a equação que descreve as condições para a evolução da ponta da trinca e uma equação de transferência de massa.

Será apresentada a teoria geral para a propagação de trincas de fadiga desenvolvida por Bolotin (1999), logo, considerado um modelo de transferência de massa. O seu acoplamento com as equações cinéticas de acumulação de dano, associado às condições de equilíbrio, estabilidade e propagação de trincas, possibilitam a modelagem do crescimento de uma trinca submetida a uma carga estática sob o efeito do hidrogênio.

5.6.1 Mecânica do crescimento das trincas

A interação entre o dano disperso e o equilíbrio das forças e energia no sistema corpo trincado-carregamentos é muito complexa porque tem muitas variáveis de entrada que produzem no corpo campos de tensões, deformações e de temperatura que podem ser tratados a nível macroscópico em termos da mecânica dos meios contínuos.

Um corpo trincado submetido a um carregamento e à ação do ambiente é um tipo especial de sistema mecânico, cujo estado corrente é descrito por um grupo de coordenadas-L (Lagrangianas) que descrevem o campo de deslocamentos no corpo e outro de coordenadas-G (Griffithianas) que descrevem o aguçamento, o tamanho e a posição das trincas. Por tal motivo, os problemas de fratura e fadiga são divididos em dois grupos: um dedicado à

avaliação dos campos de tensão, deformação e de deslocamento no corpo, e outro que somente trabalha com as coordenadas-G.

Quando se considera uma propagação quase-estática e é aplicada uma variação aproximada, os estados são comparados para verificar que todas as equações de equilíbrio, compatibilidade, etc. e as condições de contorno sejam satisfeitas. As coordenadas-G são as únicas sujeitas a variações, o que significa que ao estudar fratura e fadiga, pode-se trabalhar com sistemas mecânicos com restrições unilaterais desde que todos os requisitos de equilíbrio sejam satisfeitos. Como as trincas são irreversíveis, as coordenadas-G podem ser escolhidas de forma que suas variações se tornem não negativas.

O princípio dos trabalhos virtuais para sistemas com restrições unilaterais ideais, indica que um corpo trincado está num estado de equilíbrio se, e somente se, a soma dos trabalhos elementares de todas as forças ativas em todos os pequenos deslocamentos admissíveis é não positiva, e é dada por $\delta W \leq 0$. Relacionar as forças de resistência ao crescimento da trinca com as forças ativas, permite tratar as restrições num corpo trincado como se fossem ideais, logo, o trabalho virtual total pode ser definido por: $\delta W = \delta_L W + \delta_G W \leq 0$. As quantidades de trabalho produzido nas variações-L e nas variações-G, são $\delta_L W$ e $\delta_G W$ respectivamente. $\delta_G W$ corresponde aos dois estados de equilíbrio do corpo mostrados na Figura 5.9, que diferem nas dimensões da trinca.

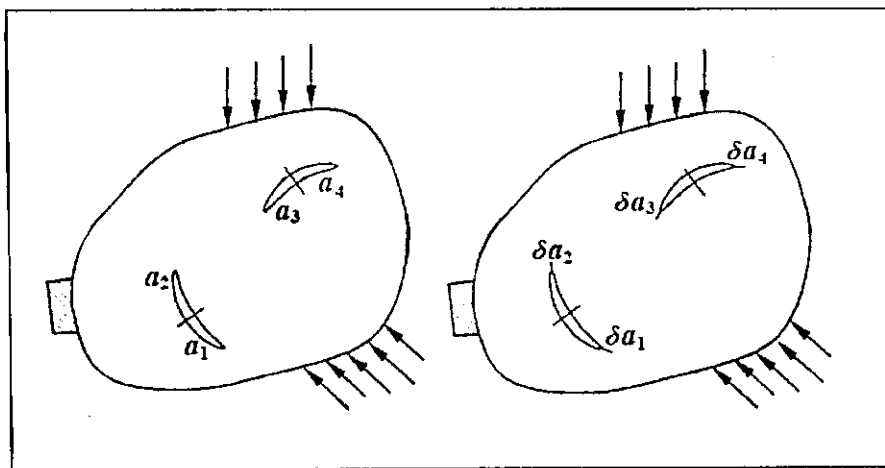


Figura 5.9. Definição das variações-G (Fonte: BOLOTIN & SHIPKOV, 2001).

Os estados do sistema *corpo-trincado-carregamentos* podem ser classificados com respeito ao equilíbrio e à estabilidade. Os estados em que o trabalho virtual é negativo para toda $\delta a_j > 0$, são chamados de *estados de sub-equilíbrio*. Os estados em que existem algumas variações-G onde o trabalho virtual é zero e nas restantes o trabalho virtual é negativo, são chamados de *estados de equilíbrio*; o estado de *sub-equilíbrio* é também um estado de equilíbrio desde o ponto de vista da mecânica clássica. Se pelo menos para uma das variações o trabalho virtual é positivo, se diz que o sistema está num *estado de não-equilíbrio* (Figura 5.10).

As condições de estabilidade também podem ser expressas em termos do trabalho virtual. Os *estados de sub-equilíbrio* evidentemente são estáveis, pois quantidades adicionais de energia são necessárias para mudar o estado do sistema para qualquer estado vizinho e não existem essas fontes de energia dentro do sistema. Os *estados de não-equilíbrio* não podem ser percebidos como unidades de equilíbrio e, portanto, são instáveis. Os *estados de equilíbrio* podem ser *estáveis, neutros o instáveis*.

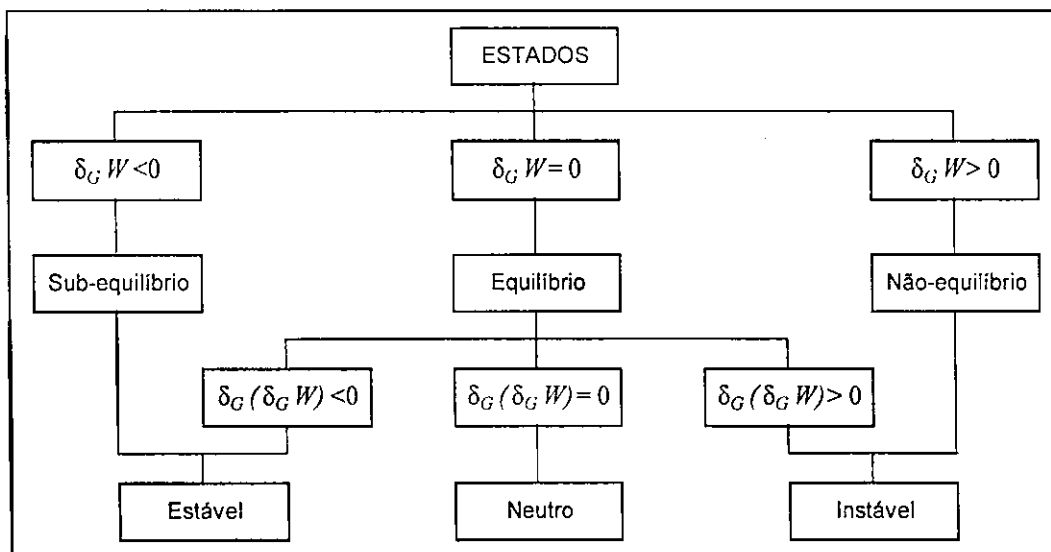


Figura 5.10. Classificação do estado dos corpos trincados, sob os pontos de vista do equilíbrio e da estabilidade (Fonte: BOLOTIN, 1999).

Num *estado de equilíbrio*, quando $\delta_G W \equiv 0$, o princípio dos trabalhos virtuais também requer que $\delta_G(\delta_G W) \leq 0$. Se todas as variações arbitrárias

presentes $\delta a_j (j = 1, \dots, m_1)$ satisfazem que $\delta_G(\delta_G W) < 0$, o estado do sistema é *estável*. Se existem variações para as que $\delta_G(\delta_G W) > 0$, o equilíbrio é *instável*. Quando existem variações nas que $\delta_G(\delta_G W) = 0$ e para as variações restantes $\delta_G(\delta_G W) < 0$, o estado do sistema é *neutro*.

O estado de *equilíbrio estável* é o mais importante na teoria da fratura e fadiga, pois é o caso típico da *propagação lenta e estável da trinca*. Uma trinca propagará de forma estável quando para alguma coordenada-G, $\delta_G W = 0$ e $\delta_G(\delta_G W) < 0$ e ainda, quando a condição $\delta_G W < 0$ seja satisfeita para as outras.

Em termos das forças generalizadas, o trabalho virtual das variações-G pode ser representado por:

$$\delta \mathcal{W} = \sum_{j=1}^m G_j \delta a_j - \sum_{j=1}^m \Gamma_j \delta a_j \quad (5.9)$$

onde δa_j são as variações-G. As forças generalizadas de propagação e de resistência são G_j e Γ_j respectivamente. As propriedades de equilíbrio de um sistema corpo trincado-carregamentos dependem das diferenças $G_j - \Gamma_j$ e não das forças G_j e Γ_j em forma separada. Logo, em termos das forças generalizadas, a trinca não crescerá quando a condição $G_j < \Gamma_j$ for cumprida. O início do seu crescimento se dará quando $G_j = \Gamma_j$, e se tornará instável quando para alguma δa_k , $G_k > \Gamma_k$, ocorrendo finalmente, a fratura do componente (BOLOTIN & SHIPKOV, 2001b). Estas condições são válidas para modelar o crescimento de uma trinca e da fratura final para um carregamento estático incluindo o efeito de um fenômeno ambiental, como a fragilização por hidrogênio.

5.6.2 Transporte de massa através das trincas

O conteúdo de um agente ambiental ativo na vizinhança da ponta de uma trinca, caracteriza-se com uma variável escalar que depende de um tempo físico (ou um número de ciclos) e é denotada por $c(t)$ ou $c(N)$; em casos

simples, como quando se faz referência à solução de uma substância ativa simples, esse conteúdo é precisamente a concentração dessa solução. Apesar de que ambientes como a água do mar ou o ar contêm mais de um componente agressivo e não podem ser caracterizados por uma simples variável, aqui se tratará com variáveis simples para condições ambientais específicas.

O crescimento da trinca e a sua trajetória podem ser considerados como condições de contorno para o movimento da trinca, que varia com o tempo devido à acumulação do dano, aguçamento e embotamento da ponta, formação passiva de filmes, etc. Quando o transporte do agente ocorre monotonamente, modelos quase-estacionários podem ser aceitos. Um desses modelos é dado por:

$$\frac{dc_t}{dt} = \frac{c_h - c_t}{\tau_D} + \frac{c_b - c_t}{\lambda_D} \frac{da}{dt} \quad (5.10)$$

onde o primeiro termo do lado direito representa o mecanismo de difusão e o segundo, o efeito da propagação da trinca. Alguns parâmetros de governo entram nessa equação, como o comprimento característico da zona de difusão λ_D e o tempo característico da difusão τ_D , dados por:

$$\tau_D = \frac{a^2}{D} \quad (5.11)$$

$$\lambda_D \approx D/k_0 \quad (5.12)$$

D é o coeficiente de difusão e k_0 é um parâmetro de transferência de massa.

A concentração na ponta da trinca, $c(t)$, geralmente não é a mesma do que na sua boca, denotada por $c_e(t)$ (Figura 5.11), devido ao transporte do agente através dela que pode ser descrito por uma equação, assumida unidimensional. O terceiro parâmetro, c_h , que caracteriza a concentração estacionária atingida para uma trinca estacionária num tempo $t \gg \tau_D$, e depende da concentração de entrada e do comprimento da trinca, é dado por:

$$c_h = c_e \left(1 + \frac{a}{a_\infty} \right)^{-n_a} \quad (5.13)$$

onde $a_\infty > 0$ e $n_a \geq 0$ são constantes que dependem das propriedades do material e do ambiente. O quarto parâmetro na Equação (5.10), c_b , é uma concentração característica para o rápido crescimento da trinca, que junto ao comprimento λ_D , é conectado com a transferência de massa.

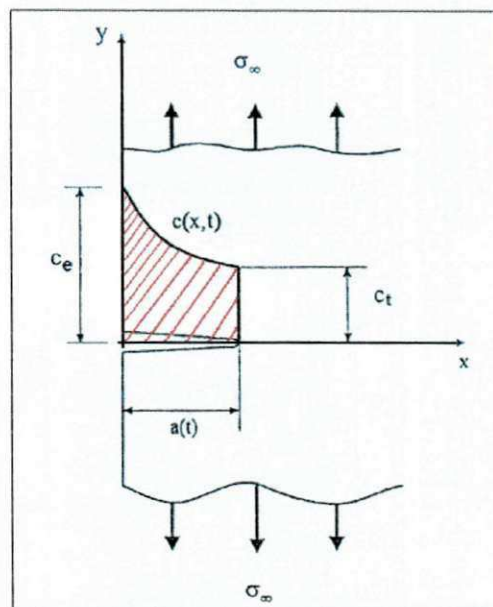


Figura 5.11. Distribuição do agente ativo dentro de uma trinca (Fonte: BOLOTIN, 1999).

As equações (5.10) e (5.13) apresentam um esquema sensível de transporte durante o crescimento da trinca, sob a condição de que λ_D e τ_D dependam da temperatura, de parâmetros do agente, do potencial eletroquímico no sistema agente-metal, etc. Quando a ponta da trinca está fixa e a condição inicial é $c_f(0) = c_e$, a Equação (5.10) descreve a evolução da concentração na ponta por:

$$c_f(t) = c_h + (c_e - c_h) \exp\left(-\frac{t}{\tau_D}\right) \quad (5.14)$$

para $c_i(0) = 0$, quando a ponta da trinca está inicialmente “seca”, se tem que:

$$c_i(t) = c_h + \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_D}\right) \right] \quad (5.15)$$

6. METODOLOGIA COMPUTACIONAL

No desenvolvimento do trabalho foi utilizada a infra-estrutura do Laboratório de Modelagem e Simulação Computacional do Departamento de Engenharia Mecânica da UFCG. Para realizar as simulações foram utilizados o software comercial ANSYS® V 8.0 e o software MATLAB 7.0.

A simulação numérica da propagação de uma trinca imersa num corpo material de aço de alta resistência, submetida a um carregamento mecânico e à ação do hidrogênio, é o objetivo do presente trabalho de pesquisa. De acordo com esse objetivo, considerou-se a aplicação da Mecânica da Fratura Linear Elástica para a determinação dos parâmetros de fratura de uma trinca imersa num material hidrogenado via simulação numérica. Para a simulação do processo de degradação do material na frente da ponta da trinca e do seu crescimento e propagação, considerou-se a aplicação de um modelo escalar fundamentado numa síntese da Mecânica do Dano Contínuo e da Mecânica da Fratura.

6.2 Formulação Numérica

6.1.1 Problema da mecânica da fratura linear elástica - cálculo do fator de intensidade de tensões

O propósito do presente problema é calcular o fator de intensidade de tensões de uma trinca passante de borda no modo I de carregamento e em estado de plano de deformação, num corpo material de aço de alta resistência com átomos de hidrogênio como soluto em solução sólida. Na seção 4.2 do capítulo 4 foram descritos três métodos para o cálculo numérico do fator de intensidade de tensões. Neste trabalho é utilizada a Técnica de Correlação dos Deslocamentos, já implementada no software comercial ANSYS®.

O algoritmo utilizado na solução deste problema está mostrado no fluxograma da Figura 6.1.

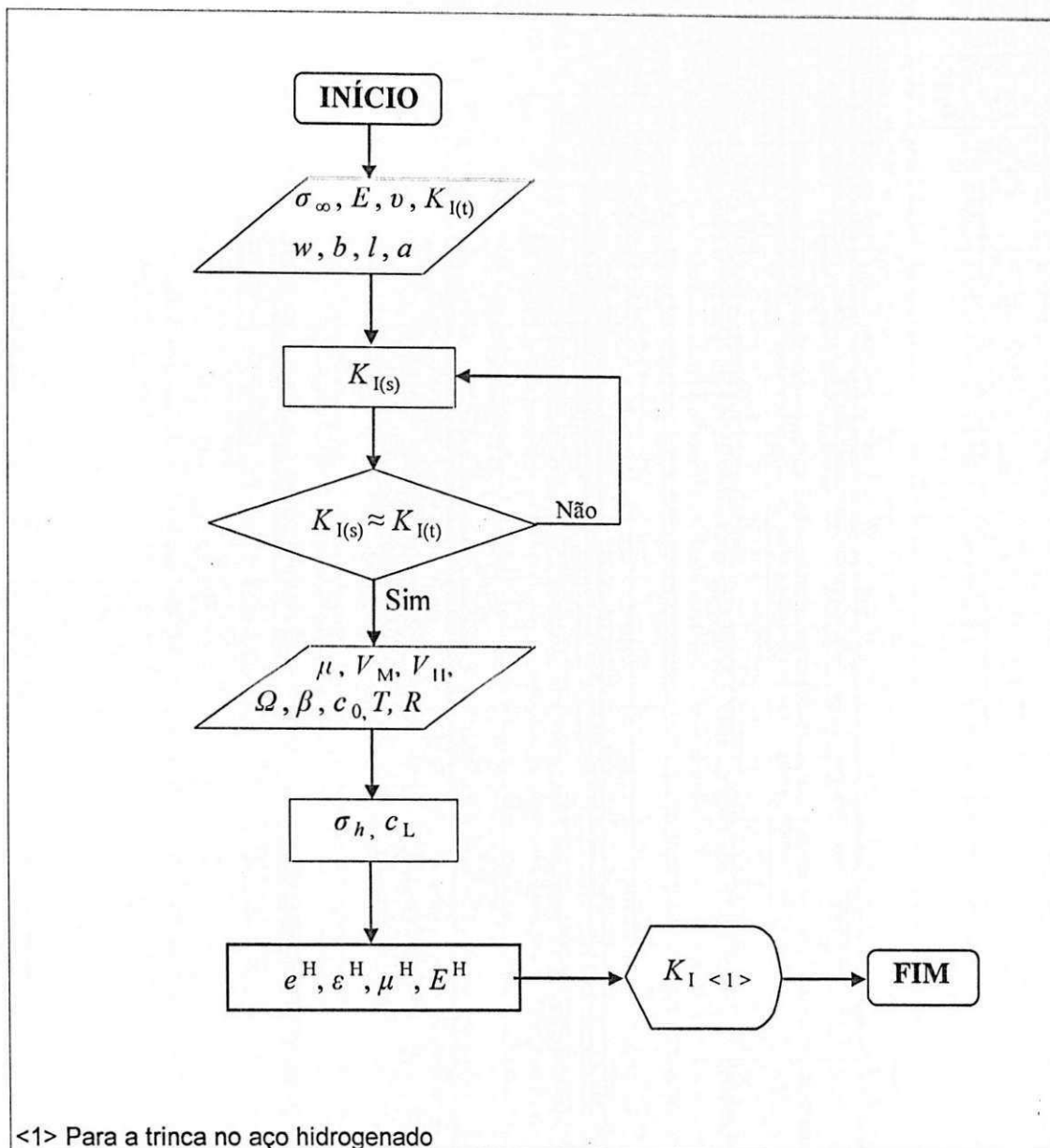


Figura 6.1. Fluxograma do algoritmo utilizado na solução do problema do cálculo do fator de intensidade de tensões.

O cálculo da concentração do hidrogênio, que é acoplado à tensão hidrostática local, é realizado simultaneamente. A atenção é focalizada numa zona de escala muito pequena de material rico em hidrogênio, que é confinado a uma região muito perto da ponta da trinca, cujo tamanho é desprezível comparado com as dimensões do corpo material. Devido ao enriquecimento local de hidrogênio, a dilatação induzida por ele dentro da zona é muito maior que a dilatação correspondente fora dela (Figura 6.2).

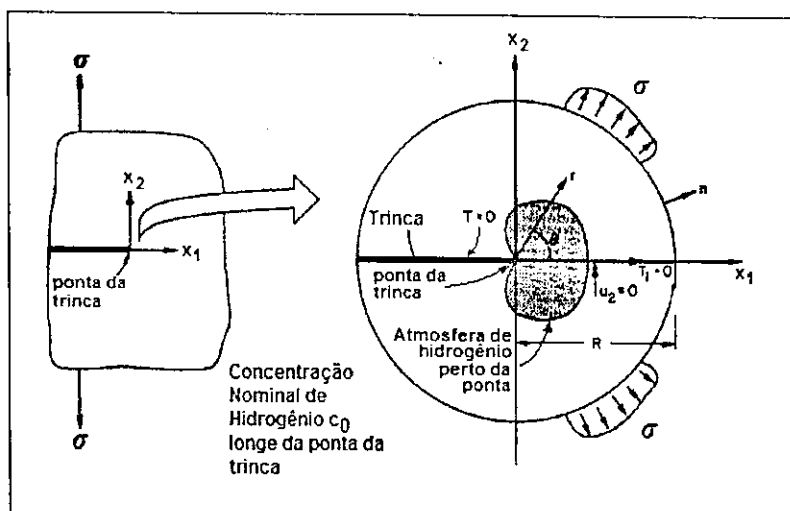


Figura 6.2. Concentração de hidrogênio ao redor da ponta de uma trinca superficial no modo I de carregamento (Fonte: adaptado de LUFRANO & SOFRONIS, 1995).

Em conseqüência, o problema pode ser estudado pela imposição de tensões numa fronteira circular distante da ponta, de acordo com a Equação (4.1). O equilíbrio mecânico no plano pode ser estabelecido pelo princípio dos trabalhos virtuais na ausência de forças de corpo, por:

$$\int_A \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dA = \int_S P_i \delta u_i dS \quad (6.1)$$

onde A é a área e S o contorno do domínio. P_i é a componente das forças aplicadas sobre S e u_i é a componente do deslocamento em A . A deformação dilatacional local devida ao hidrogênio governada pela Equação (3.5) é não linear, dado que é dependente da concentração de hidrogênio, que por sua vez, depende da tensão hidrostática local.

Assume-se que o material é homogêneo e isotrópico, de resposta elástico-linear e que trabalha sob um regime de pequenas deformações num processo quase estático de carregamento. Não é considerado o transporte do hidrogênio pelas discordâncias nem o seu aprisionamento nos defeitos microestruturais, e considera-se a distribuição inicial do hidrogênio uniforme através de toda a estrutura.

A geometria do corpo material utilizado na simulação está mostrada na Figura 6.3, e a da trinca imersa na sua superfície, na Figura 6.4. Todas as dimensões adotadas guardam as relações necessárias para garantir que seja cumprida a condição da abordagem do problema em Estado Plano de Deformação: $(a; b; w - a) \geq 2,5 (K_{IC} / \sigma_e)^2$ (ASTM 1820/2003).

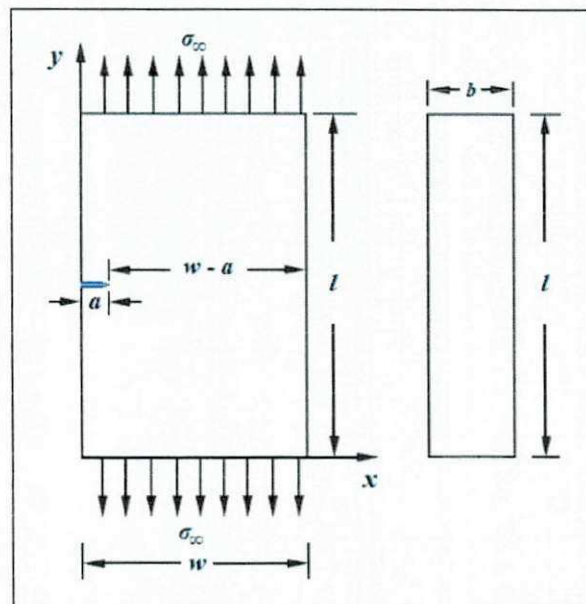


Figura 6.3. Geometria do corpo material utilizado na simulação.

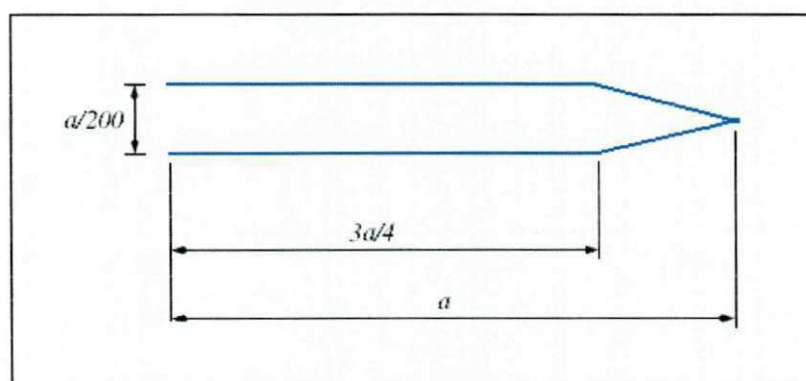


Figura 6.4. Geometria da trinca presente no corpo material utilizado na simulação.

6.1.1.1 Formulação com elementos finitos

O método dos elementos finitos foi usado para resolver o problema definido anteriormente. Fazendo $\{U\}$ denotar o conjunto de deslocamentos nodais e usando as matrizes padrão de interpolação $[N]$ para os deslocamentos, $[B]$ para as deformações e $[E]$ para as propriedades constitutivas de um material isotrópico, pode-se re-escrever a Equação (6.1) na forma matricial (LUFRAÑO & SOFRONIS, 1996):

$$[K]\{U\} = \{r_e\} \quad (6.2)$$

onde $\{r_e\}$ representa o vetor de todos os carregamentos internos e externos aplicados na estrutura, que é dado por:

$$\{r_e\} = \{F\} + \{F'\} \quad (6.3)$$

onde $\{F\}$ é o vetor dos carregamentos externos aplicados e $\{F'\}$ o das forças internas geradas pela introdução do hidrogênio no reticulado. Da definição do método dos elementos finitos, tem-se:

$$[K] = \int_A [B]^T [E] [B] dA \quad (6.4)$$

$$\{F\} = [N]^T \{P\} dS \quad (6.5)$$

$$\{F'\} = [B]^T [E] \{\varepsilon^h\} dA \quad (6.6)$$

$$\{\varepsilon^h\}^T = [\varepsilon_{11}^H \quad \varepsilon_{22}^H \quad \varepsilon_{33}^H \quad 0] \quad (6.7)$$

$\{\varepsilon^h\}$ é o vetor das deformações na estrutura provocadas pelos átomos do hidrogênio. Logo, a Equação (6.2) na forma extendida, fica:

$$\int_A [B]^T [E] [B] dA \{U\} = \int_S [N]^T \{P\} dS + \int_A [B]^T [E] \{\varepsilon^h\} dA \quad (6.8)$$

A concentração de equilíbrio, c_L , que depende da concentração inicial c_0 e da tensão hidrostática local, é calculada através das Equações (3.9) e (3.10) e é dada por:

$$c_L = \frac{c_0 \beta K_L}{\beta + c_0 (K_L - 1)} \quad (6.9)$$

O módulo de Young do material hidrogenado, que varia pontualmente de acordo à concentração local de equilíbrio, c_L , é obtido a partir da Equação (3.8); com a consideração da sua relação com o módulo de cisalhamento, é dado por:

$$E^H = 2\mu(1+\nu)(1-0,08c_L) \quad (6.10)$$

na forma matricial, as Equações (6.9) e (6.10) ficam:

$$[c_L] = \frac{c_0 \beta \exp\left(\frac{V_H}{3RT} [\sigma_{kk}]\right)}{\beta + c_0 \exp\left(\frac{V_H}{3RT} [\sigma_{kk}]\right)} \quad (6.11)$$

$$[E^H] = 2\mu(1+\nu)(1-0,08[c_L]) \quad (6.12)$$

onde $[c_L]$ é a matriz das concentrações distribuídas na estrutura, $[\sigma_{kk}]$ das tensões locais e $[E^H]$ a matriz das propriedades constitutivas modificadas pelo hidrogênio.

Finalmente, o efeito mecânico do hidrogênio é modelado por uma deformação dilatacional cujos componentes variam pontualmente e cuja magnitude também depende da concentração local de hidrogênio, de acordo com a Equação (3.5), que na forma matricial, fica:

$$\varepsilon_{ij}^H = \frac{1}{\gamma} \frac{V_H}{N_A \Omega} [c_L] \delta_{ij} \quad (6.13)$$

A malha de elementos finitos foi composta de 796 nós e 263 elementos quadrangulares isoparamétricos de oito nós. A roseta utilizada, mostrada na Figura 6.5, foi construída com doze elementos quadrangulares *quarter-point* de oito nós a 30°. A sua escolha esteve condicionada ao grau de precisão requerido no cálculo do Fator de Intensidade de Tensões, e de acordo com os resultados obtidos por Araújo *et al.* (2000).

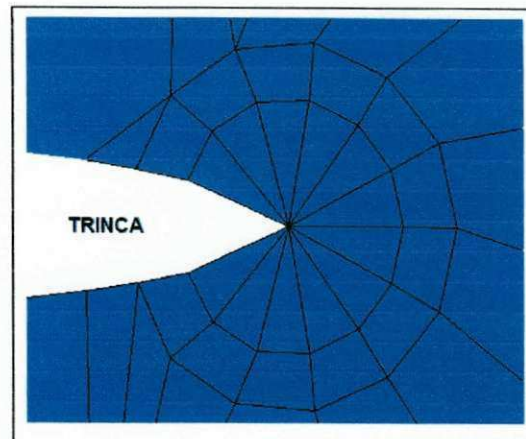


Figura 6.5. Roseta de elementos *quarter-point* utilizada na simulação.

6.1.2 Problema da mecânica do dano - propagação de uma trinca sob efeitos de um carregamento mecânico estático e do hidrogênio

O propósito na formulação deste problema é o de avaliar o caso da propagação da trinca estudada no problema anterior, utilizando o modelo matemático de Bolotin & Shipkov (2001) descrito no capítulo 5. A evolução das variáveis do dano, do raio e do comprimento da trinca formam um sistema de equações diferenciais de 1ª ordem que é resolvido através do método de Runge-Kutta de 4ª ordem. O Fator de Intensidade de Tensões nas proximidades da ponta da trinca calculado no problema da mecânica da fratura é utilizado neste problema como variável inicial. O algoritmo utilizado está mostrado no fluxograma da Figura 6.6.

Para considerar a acumulação de dano e a propagação da trinca submetida a um carregamento estático e a uma ação ambiental, deixa-se a superfície de uma trinca plana no modo I em contato com um ambiente hidrogenado. A concentração normalizada na boca da trinca, c_e , é constante e o carregamento mecânico estático é dado pela tensão aplicada σ_∞ . O material é elástico-linear em toda a estrutura, exceto em pequenas zonas de processo nas faces da trinca. O corpo está em estado plano de deformação. O comprimento da trinca é apenas uma coordenada-G. Logo, pode-se usar a Equação (4.4) para calcular a força generalizada de propagação, G_I .

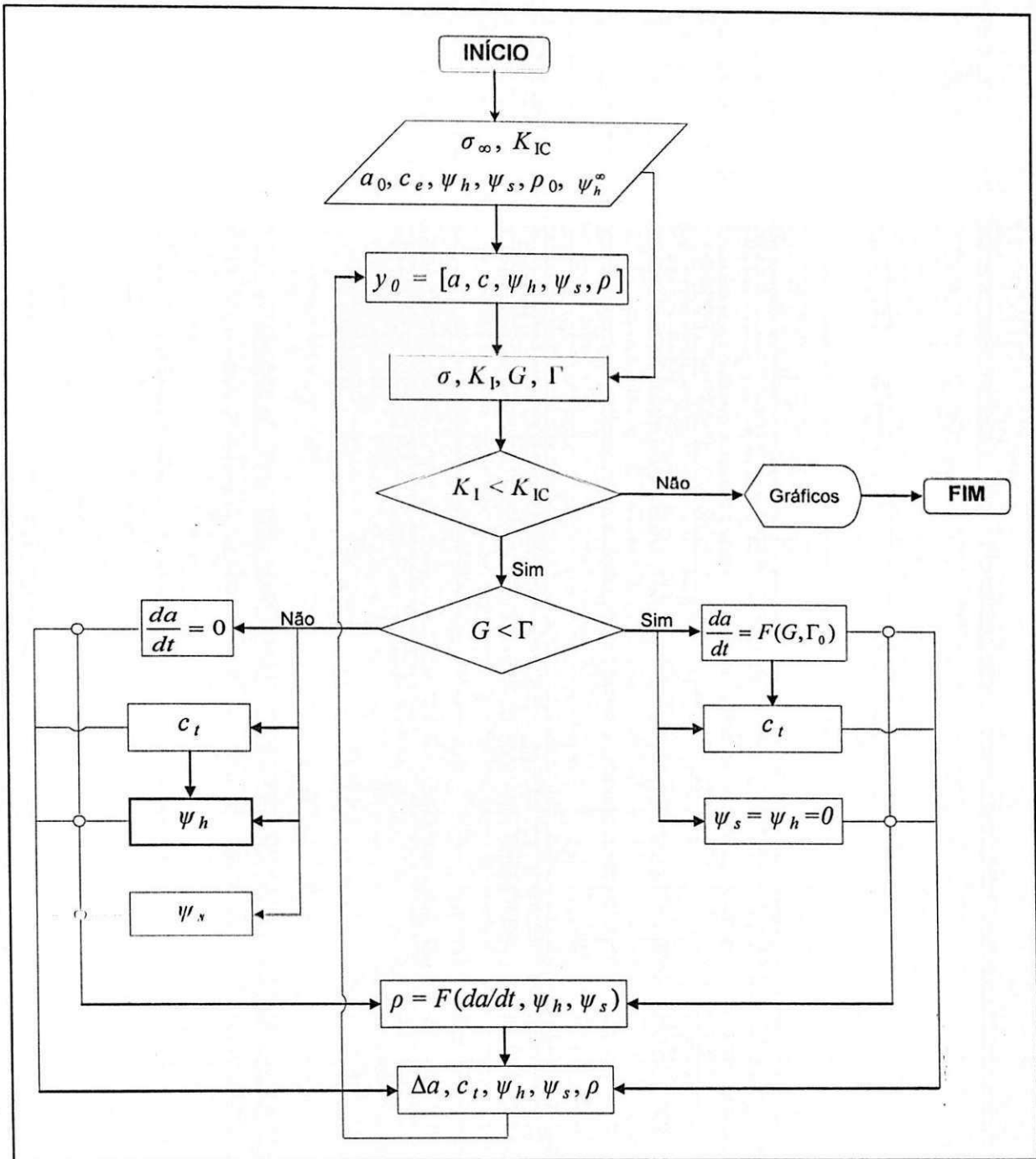


Figura 6.6. Fluxograma do algoritmo utilizado para a resolução do problema de propagação da trinca.

Numa aproximação quase-estacionária estima-se a taxa de crescimento da trinca da/dt dentro de um intervalo de tempo pequeno o suficiente para que as outras variáveis variem muito lentamente, como se estivessem congeladas. Em outras palavras, tratando-as como constantes nesse intervalo.

Se λ é o tamanho característico da zona de processo, e $\lambda = \max\{\lambda_s, \lambda_h\}$, onde λ_s é o tamanho da zona de processo associado com o carregamento estático e λ_h o tamanho associado com os efeitos do hidrogênio, o tempo característico para o crescimento da trinca é dado por $\Delta t \approx \lambda(da/dt)^{-1}$. Para se estabelecer que a aproximação quase-estacionária é aplicável, este parâmetro deve ser comparado com outros tempos característicos, a fim de verificar que a condição $\Delta t \ll \min(\tau_D, \tau_s, \tau_h, \tau_p)$ seja cumprida. τ_D é o tempo característico para o transporte do agente, τ_s , e τ_h são tempos característicos para os processos de acumulação de dano devido ao carregamento estático e à ação do hidrogênio; τ_p é o tempo característico para a mudança do raio efetivo da ponta da trinca. Considerando um avanço da trinca durante esse pequeno intervalo Δt , pode-se desprezar a derivada parcial com respeito ao tempo na fórmula para a derivada material da medida do dano expressa pelas Equações (5.1) e (5.2), logo:

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial\omega}{\partial t} + \frac{\partial\omega}{\partial x} \frac{da}{dt} \approx \frac{\partial\omega}{\partial x} \frac{da}{dt} \quad (6.14)$$

onde,

$$\frac{\partial\omega_s}{\partial x} = \frac{\psi_s}{\lambda_s} \quad ; \quad \frac{\partial\omega_h}{\partial x} = \frac{\psi_h}{\lambda_h} \quad (6.15)$$

onde ψ_s e ψ_h são as medidas do dano na ponta da trinca provocado pelo carregamento estático e pelo hidrogênio. Logo, as equações (5.3) e (5.4) ficam:

$$\psi_h = \lambda_h \left(\frac{da}{dt} \right)^{-1} \frac{\psi_h^\infty}{c_h} \exp\left(-\frac{c_l}{c_h} \right) \quad (6.16)$$

$$\psi_s = \frac{\lambda_s}{t_c} \left(\frac{da}{dt} \right)^{-1} \left(\frac{\sigma_l - \sigma_{th}}{\sigma_s} \right)^{m_s} \quad (6.17)$$

onde os valores representativos de σ_l e c_l são dados na ponta da trinca. Adicionalmente, a condição de equilíbrio dada na Equação (5.8) com $\chi = 1$ e $\Gamma = G$, proporciona:

$$\psi_s + \psi_h = \left(1 - \frac{G}{\Gamma_0}\right)^{1/\alpha} \quad (6.18)$$

Logo,

$$\frac{da}{dt} = \frac{\lambda_s \left(\frac{\sigma_t - \sigma_{th}}{\sigma_s} \right)^{m_s} + \lambda_h \frac{\psi_h^\infty}{c_h} \exp\left(\frac{c_t}{c_h} \right)}{\left(1 - \frac{G}{\Gamma_0}\right)^{1/\alpha}} \quad (6.19)$$

Esta equação é, em alguns aspectos, uma generalização da obtida por Bolotin. A primeira vista, ela aparece como uma modificação do enfoque da superposição que é melhorada com a adição de um denominador no lado direito. Quando $G \ll \gamma_0$, a equação realmente mostra um resultado do enfoque dessa superposição. A concentração do agente na ponta da trinca, c_t , e a tensão de abertura, σ , dependem das magnitudes correntes do comprimento da trinca $a(t)$ e do raio efetivo da sua ponta $\rho(t)$. Isto indica que ela deverá ser utilizada junto à Equação (5.10) para o processo de transporte e com a Equação (5.6) para a evolução do raio da ponta durante o processo de crescimento da trinca. As vantagens desta formulação são a simplicidade e a transparência, pois a equação mostra explicitamente a contribuição de cada tipo de dano, bem como a tendência à instabilidade com o incremento da força de propagação (BOLOTIN, 1999).

Para avaliar o dano mecânico, os campos de tensão-deformação e de concentração no corpo durante todo o processo considerado devem ser conhecidos, o que exige a aplicação de métodos numéricos. Como alternativa podem ser utilizadas algumas aproximações para a o fator de concentração de tensões na ponta de uma trinca plana no modo I e para a distribuição da tensão normal na frente da trinca (Figura 6.7), que podem ser calculados por:

$$K_I = 1 + 2Y \left(\frac{a}{\rho} \right)^{1/2} \quad (6.20)$$

$$\sigma = K_t \sigma_\infty \left[1 + \frac{4(x-a)}{\rho} \right]^{-1/2} \quad (6.21)$$

A Equação (6.20) é apenas uma extensão da conhecida formula de Neuber, que calcula o fator de concentração de tensões levando em consideração o fator de forma Y . A Equação (6.21) é a mais simples das equações empíricas de Shin, onde:

$$\xi = x - a = 10\rho \quad (6.22)$$

essa aproximação para a coordenada medida à frente da ponta da trinca proporciona bons resultados em problemas planos, pois essa distância usualmente é suficiente para estimar o campo do dano, especialmente quando os componentes distantes do campo podem ser desprezados (BOLOTIN, 1999).

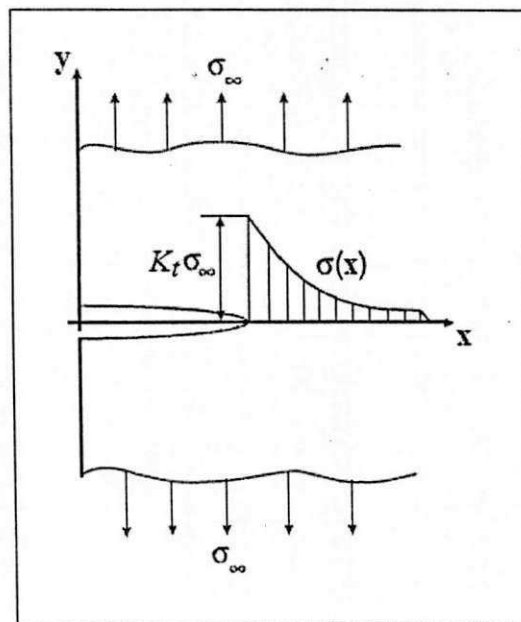


Figura 6.7. Distribuição das tensões na frente de uma trinca superficial no modo I de carregamento (Fonte: adaptado de BOLOTIN & SHIVKOV, 2001a).

7. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a avaliação da aplicabilidade dos modelos nas condições de estudo discutidas anteriormente, foi escolhido um aço de alta resistência classe MARAGING T-250, cuja composição química é mostrada na Tabela 7.1. Informações mais específicas, podem ser encontradas na ficha técnica do fabricante (ALLVAC, 2000).

Tabela 7.1. Composição química do aço MARAGING T-250 (Fonte: ALLVAC, 2000).

Elemento	Ni	Mo	Co	Ti	C	Fe
Composição (%)	18,50	3,00	0,00	1,40	0,03	77,07

Os parâmetros adotados para efetuar as simulações, de acordo ao seu uso nos dois problemas propostos, foram divididos em: (a) parâmetros básicos, que correspondem às propriedades físicas e mecânicas do aço e às dimensões prescritas para o corpo material, empregados na solução dos dois problemas e, (b) parâmetros materiais adotados de acordo aos requerimentos do modelo matemático utilizado para a solução de cada problema em forma particular. Os parâmetros básicos estão resumidos nas Tabelas 7.2 e 7.3; os parâmetros materiais são apresentados no item correspondente à solução de cada problema.

Tabela 7.2. Propriedades físicas e mecânicas do aço MARAGING T-250 (Fonte: ALLVAC, 2000).

σ_r (Pa)	σ_e (Pa)	E (Pa)	μ (Pa)	ν (adim.)	K_{IC} (Pa·m ^{1/2})
1,79E+09	1,76E+09	1,86E+11	7,16E+10	0,30	9,81E+07

Tabela 7.3. Dimensões do corpo material mostrado na Figura 6.2.

w (mm)	b (mm)	l (mm)	a (mm)	ρ_0 (μm)
80,0	20,0	120,0	8,0	50,0

7.1 Solução do Problema do Cálculo do Fator de Intensidade de Tensões

A solução com elementos finitos foi obtida para o corpo material apresentado na Figura 6.3, submetido a uma tensão normal $\sigma_\infty = 100 \times 10^6$ Pa à temperatura de 300°K, assumido-se que a estrutura cristalina expande isotropicamente com o ingresso dos átomos de hidrogênio. A dilatação local provocada pelo hidrogênio, dada pela Equação (3.6), ficou igual a $0,281c_L$; o módulo de Young do material hydrogenado, E^H , e a concentração de equilíbrio, c_L , foram calculados a partir das Equações (6.10) e (6.11), respectivamente.

Os parâmetros materiais utilizados se encontram na Tabela 7.4. O parâmetro β , considerado igual a 1, corresponde à máxima concentração nos NLS de um átomo de hidrogênio por átomo do reticulado cristalino (LUFRANO & SOFRONIS, 1998; TAHA & SOFRONIS, 2001).

Tabela 7.4. Parâmetros materiais (Fonte: HIRTH, 1980; TAHA & SOFRONIS, 2001).

Ω (m^3)	V_H (m^3/mol)	V_M (m^3/mol)	β (adim.)
1,182E-29	2,00E-06	7,12E-06	1,0

As primeiras simulações foram realizadas para calcular o fator de intensidade de tensões no material livre de hidrogênio, para diferentes magnitudes da tensão aplicada, a fim de validar a precisão da malha e da roseta empregados e para ter uma base referencial. Na Tabela 7.5 mostram-se

os valores teóricos, obtidos a partir da aplicação da Equação (4.2) com $Y \approx 1,18$, e os obtidos via simulação. Em todos os casos o erro relativo esteve em torno de 0,025%, considerado aceitável para os fins do presente trabalho.

Tabela 7.5. Fatores de intensidade de tensões teórico e simulado para diferentes carregamentos aplicados.

σ_{∞} (MPa)	K_I (MPa \sqrt{m})		
	Teórico	Simulado	Erro Relativo
80,0	15,015	15,011	0,027%
100,0	18,769	18,764	0,025%
120,0	22,523	22,517	0,024%
150,0	28,153	28,146	0,025%

Na Figura 7.1 mostra-se o corpo material modelado com elementos finitos sob os efeitos do carregamento de tração e a distribuição das tensões na sua estrutura em diversas escalas de cores. A cor vermelha intensa mostra a região da estrutura sob o efeito das tensões mais elevadas, que como era esperado, é a região que se encontra na frente da ponta da trinca.

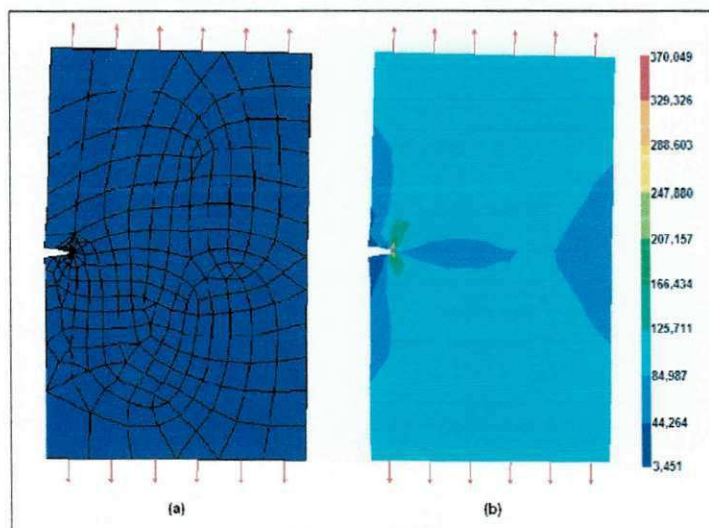


Figura 7.1. (a) Corpo material submetido a um esforço de tração;
(b) distribuição de tensões na estrutura (MPa).

O interesse particular deste trabalho está nessa pequena região à frente da ponta da trinca, mostrada na Figura 7.1b e ampliada na Figura 7.2, onde ocorrem as tensões mais elevadas. É precisamente nessa região onde ocorrerá a maior concentração dos átomos de hidrogênio, transportados de outras regiões da mesma, através de um mecanismo de difusão intersticial ativado pela formação de gradientes de tensões e de potencial químico.

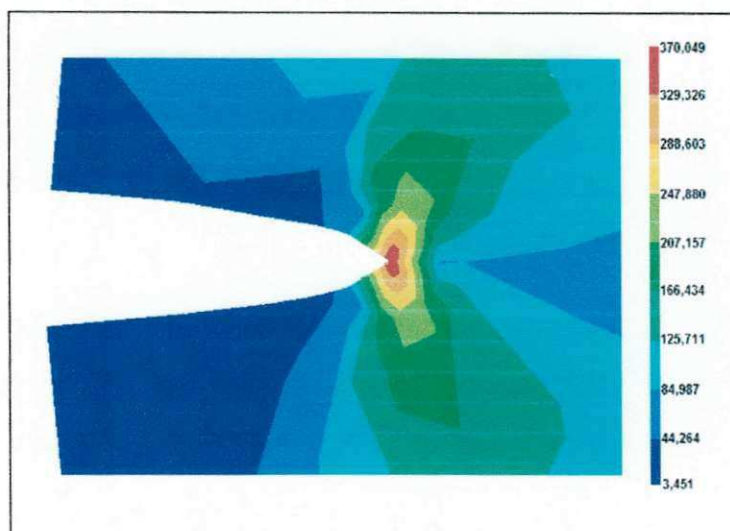


Figura 7.2. Distribuição de tensões na frente da ponta da trinca (MPa).

Foi realizada uma segunda série de simulações para calcular o fator de intensidade de tensões para diferentes carregamentos aplicados e, desta vez, com átomos de hidrogênio em solução sólida no metal. Em cada uma delas, a tensão aplicada permaneceu constante, utilizando-se quatro diferentes valores da concentração inicial (10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} e 10^{-2} átomos H/átomo Fe) e incluindo-se as equações que descrevem os dois efeitos do hidrogênio sobre o material.

Os resultados obtidos, mostrados na Tabela 7.6, revelam que os fatores de intensidade de tensões sofreram uma variação positiva com respeito aos calculados no material livre de hidrogênio, e que essa diferença é maior na medida em que a concentração cresce. Na mesma tabela mostram-se também, as tensões aplicadas, as tensões hidrostáticas geradas na frente da ponta da trinca, as concentrações de equilíbrio e a magnitude dos módulos de Young do material hidrogenado.

Tabela 7.6. Fator de intensidade de tensões para diferentes concentrações de hidrogênio, considerando o efeito no módulo de Young.

σ_{∞} (MPa)	σ_h (MPa)	C_0 (átomos H/átomo Fe)	C_L (átomos H/átomo Fe)	E^H (MPa)	K_I (MPa \sqrt{m})
80,0	427,9	1,0E-05	1,40952536E-05	1,8599979E+05	15,0110
		1,0E-04	1,40947341E-04	1,8599790E+05	15,0120
		1,0E-03	1,40895412E-03	1,8597903E+05	15,0180
		1,0E-02	1,40378221E-02	1,8579112E+05	15,0810
100,0	534,8	1,0E-05	1,53581733E-05	1,8599977E+05	18,7640
		1,0E-04	1,53574327E-04	1,8599771E+05	18,7650
		1,0E-03	1,53500306E-03	1,8597716E+05	18,7710
		1,0E-02	1,52764007E-02	1,8577269E+05	18,8340
120,0	641,8	1,0E-05	1,67342920E-05	1,8599975E+05	22,5170
		1,0E-04	1,67332778E-04	1,8599751E+05	22,5170
		1,0E-03	1,67231427E-03	1,8597512E+05	22,5230
		1,0E-02	1,66224623E-02	1,8575266E+05	22,5810

Finalmente, foi realizada uma última série de simulações, nas mesmas condições de carregamento e concentração adotadas nas anteriores, e sem a inclusão do efeito do hidrogênio no módulo de Young do material. Os resultados mostrados na Tabela 7.7, foram idênticos aos obtidos para o material livre de hidrogênio (ver Tabela 7.5).

Tabela 7.7. Fator de Intensidade de tensões para diferentes concentrações de hidrogênio, sem considerar o efeito no módulo de Young.

σ_{∞} (MPa)	σ_h (MPa)	C_0 (átomos H/átomo Fe)	C_L (átomos H/átomo Fe)	E (MPa)	K_I (MPa \sqrt{m})
80,0	427,9	1,0E-05	1,4095254E-05	1,86E+05	15,0110
		1,0E-04	1,4094734E-04	1,86E+05	15,0110
		1,0E-03	1,4089541E-03	1,86E+05	15,0110
		1,0E-02	1,4037822E-02	1,86E+05	15,0110
100,0	534,8	1,0E-05	1,5358173E-05	1,86E+05	18,7640
		1,0E-04	1,5357433E-04	1,86E+05	18,7640
		1,0E-03	1,5350031E-03	1,86E+05	18,7640
		1,0E-02	1,5276401E-02	1,86E+05	18,7640
120,0	641,8	1,0E-05	1,6734292E-05	1,86E+05	22,5170
		1,0E-04	1,6733278E-04	1,86E+05	22,5170
		1,0E-03	1,6723143E-03	1,86E+05	22,5170
		1,0E-02	1,6622462E-02	1,86E+05	22,5170

Os resultados das Tabelas 7.6 e 7.7 mostram que os valores do fator de intensidade de tensões no material hidrogenado são diferentes daqueles obtidos para o material livre de hidrogênio, apenas quando é incluído o seu efeito no módulo de Young. A existência de uma relação de proporcionalidade entre o fator de intensidade de tensões e o módulo de Young ($K_I \propto \sqrt{E}$) permite explicar essa diferença. Tal situação, dentro das hipóteses adotadas neste trabalho, mostra que a existência de uma zona de material saturado de hidrogênio afeta o campo de tensões na ponta da trinca e por sua vez, a resistência à fratura do material.

7.2 Solução do Problema do Crescimento e Propagação da Trinca

O problema da propagação da trinca foi resolvido mediante a solução do sistema formado pelas equações de acumulação de dano, de variação do raio efetivo da ponta da trinca e de transporte de massa, fortemente acopladas entre si, mediante a aplicação do método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Os parâmetros materiais adotados para a simulação e solução deste problema, estão mostrados na Tabela 7.8.

Tabela 7.8. Parâmetros materiais (Fonte: BOLOTIN, 1999; TAHA & SOFRONIS, 2001).

c_h (adim.)	c_b (adim.)	τ_D (s)	τ_c (s)	σ_s (Pa)	σ_{th} (Pa)	ρ_s (μm)	ρ_b (μm)
1,0	0,5	100,0	1·E3	5·E9	250·E6	10,0	100,0

λ_D (mm)	λ_a (μm)	λ_h (μm)	λ_s (μm)	χ (adim.)	γ_0 (kJ/m ²)	m_s (adim.)	ψ_h^∞ (adim.)	D (m ² /s)	k_0 (m/s)
12,7	100,0	10,0	100,0	1,0	20,0	4,0	0,5	1,27·E-8	1·E-6

Os resultados obtidos a partir da aplicação do modelo são mostrados nos gráficos a seguir:

A Figura 7.3 mostra duas curvas que descrevem as soluções numéricas do problema de transporte de massa até a ponta de uma trinca, dado pela Equação (5.10), para as condições iniciais $c_i(0) = 0$ (trinca “seca”) e $c_i(0) = 1$ (trinca “molhada”). Na obtenção dessas soluções foi assumido que a trinca propaga com uma taxa constante, desprezando-se a absorção nas suas faces. As duas curvas tendem a convergir rapidamente para uma concentração estacionária, c_h , sendo o tempo característico para essa convergência, de aproximadamente 400s. Como era de se esperar, a concentração estacionária é atingida com mais rapidez quando a trinca é “molhada”, dada a facilidade para a difusão proporcionada pela geração de um gradiente de concentrações.

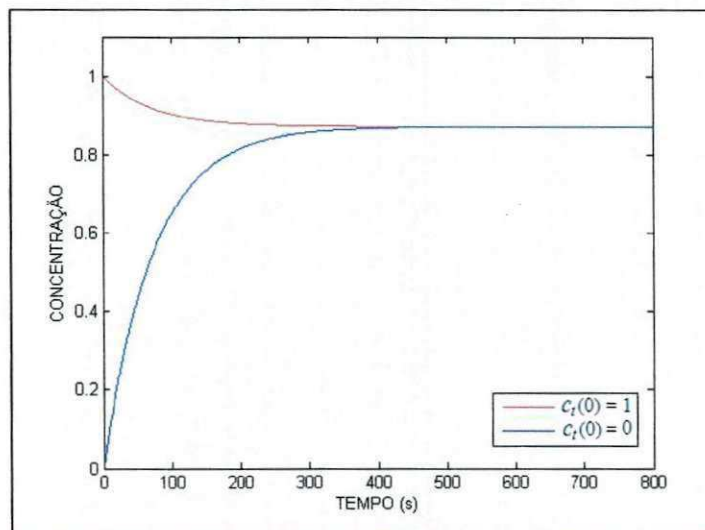


Figura 7.3. Transporte de hidrogênio na ponta da trinca. Solução da equação de transporte de massa.

A Figura 7.4 mostra a evolução da concentração do hidrogênio na ponta da trinca logo da aplicação do modelo completo, que inclui transferência de massa, acumulação de dano e crescimento da trinca. Foi assumido que o dano inicial é nulo e que a trinca é inicialmente “seca”. A tensão aplicada de 100 MPa foi mantida constante durante toda a evolução da trinca.

Na curva gerada pode-se observar que o transporte do agente na etapa inicial do processo é bastante rápido, respondendo à velocidade de difusão do hidrogênio no metal. A segunda etapa, onde é atingida uma concentração

estável, corresponde a um valor crítico dessa concentração e ao início de propagação da trinca. Quando o crescimento fica mais intenso, o transporte do hidrogênio para a ponta de trinca é dificultado, o que provoca a diminuição da sua concentração, observada no declínio brusco da curva na terceira etapa.

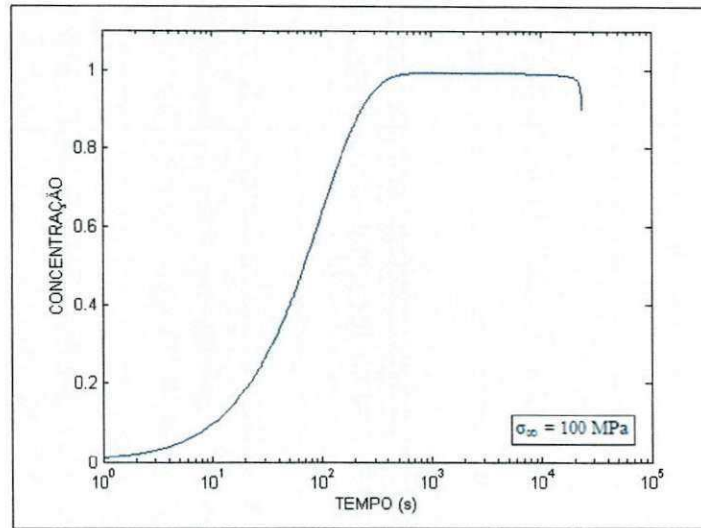


Figura 7.4. Evolução da concentração do agente na ponta da trinca. Aplicação do modelo completo.

Nas Figuras 7.5 e 7.6 mostram-se os processos de evolução do dano na ponta da trinca provocados individualmente pelo hidrogênio e pelo carregamento estático. O comportamento observado, onde predomina o dano por fragilização, é o resultado das condições iniciais de concentração e carregamento adotadas.

Na curva da Figura 7.5 observa-se que o dano por fragilização segue o efeito quase instantâneo da difusão do hidrogênio na pequena zona de processo à frente da ponta da trinca. O processo é essencialmente rápido, condicionado unicamente pela concentração do agente na ponta, o que o distingue de um processo corrosivo, que é muito mais lento e que está condicionado por outros fatores, como parâmetros de resistência limiar, resistência do material à corrosão e tempos característicos de processo. O início do crescimento da trinca corresponde ao instante em que a curva começa sua declinação, e a sua propagação, quando ela atinge a magnitude zero.

O resultado obtido na simulação mostra uma correspondência muito interessante com os efeitos do fenômeno da fragilização por hidrogênio, observados macroscopicamente, descritos como eventos muito rápidos que acontecem de forma inesperada, inclusive após muitos anos sob serviço, e sem qualquer sintoma da existência de problemas de deterioração da estrutura.

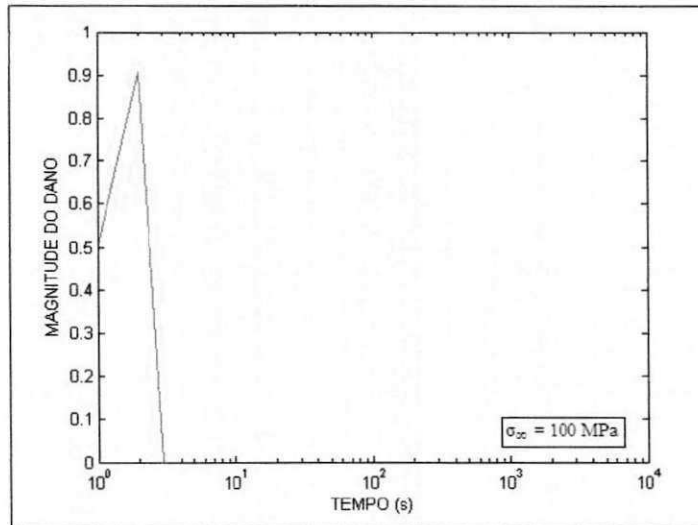


Figura 7.5. Evolução do dano na ponta da trinca devido à ação do hidrogênio.

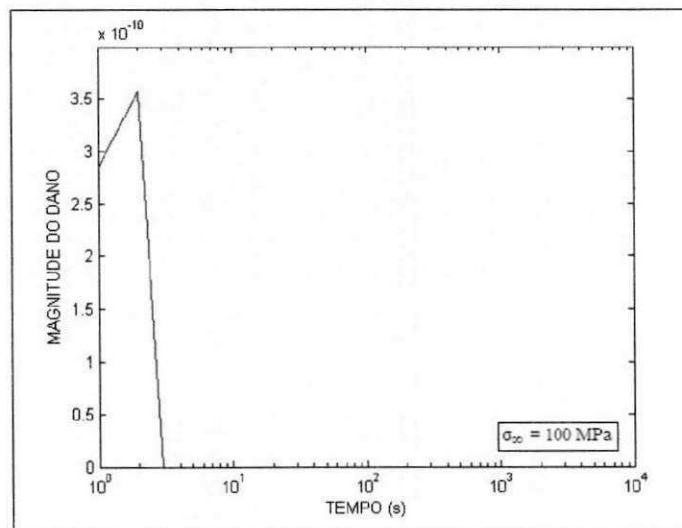


Figura 7.6. Evolução do dano na ponta da trinca devido ao carregamento mecânico.

Na curva da Figura 7.6 é mostrada a evolução do dano provocado pelo carregamento mecânico fortemente influenciado pela difusão do hidrogênio que, ao afetar a distribuição da tensão σ na frente da trinca por contribuir à variação da magnitude do raio efetivo da sua ponta, também apresenta uma influencia muito importante no comportamento da evolução do dano provocado pelo carregamento mecânico. Esse é o motivo pelo que o comportamento desta curva-solução seja similar ao comportamento da curva que mostra a evolução do dano por fragilização.

A evolução do crescimento da trinca mostrada na Figura 7.7 encontra-se condicionada pela ação do carregamento estático e do hidrogênio. Nela se observa que a evolução inicial é muito lenta e que quase não sofre alterações com o tempo; somente após ter transcorrido um determinado tempo é que se verifica que a trinca cresce com velocidade cada vez maior. A inclinação mais acentuada da curva mostra que esse crescimento tornou-se descontrolado e instável. O seu ponto mais alto representa a fratura do componente.

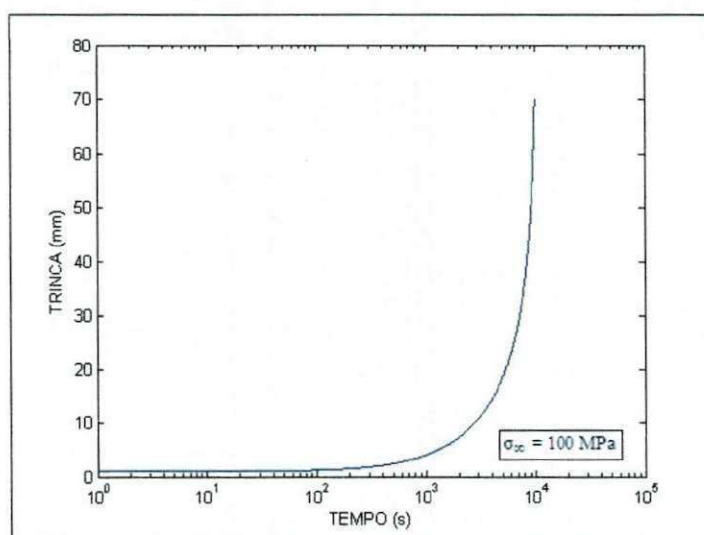


Figura 7.7. Evolução do crescimento da trinca.

O gráfico da Figura 7.8 mostra a evolução do raio efetivo da ponta da trinca e ilustra fenômenos que são difíceis de serem observados diretamente. A parte crescente da curva representa o embotamento da ponta da trinca

devido ao processo de acumulação de dano, cujo embotamento da ponta da trinca é praticamente instantâneo, condicionado pela acumulação de dano que, por sua vez, está condicionada à rápida difusão do hidrogênio. O início do crescimento da trinca está representado pela pequena mudança de inclinação da porção crescente da curva.

Quando o processo de embotamento da ponta da trinca é finalizado, dá-se início ao processo do seu aguçamento, que também corresponde ao início da propagação da trinca.

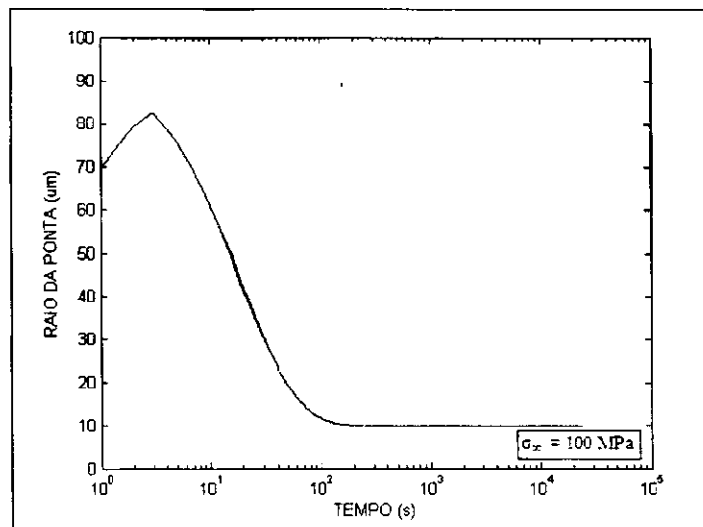


Figura 7.8 – Evolução do raio efetivo da ponta da trinca.

Na Figura 7.9 é mostrado o gráfico da evolução do fator de intensidade de tensões com o tempo, provocada pelo crescimento da trinca. Nesta simulação é apresentada uma curva gerada até o tempo de 50.000s, na seqüência (linha tracejada) é mostrada sua tendência de comportamento, que é a de crescer até atingir o valor da tenacidade à fratura do material (representado pela linha vermelha), momento em que ocorrerá o colapso da estrutura. Essa tendência é consistente com as das curvas obtidas a partir de resultados experimentais e permite visualizar o processo da propagação de trincas subcríticas quando submetidas a um carregamento mecânico e a uma ação não mecânica, caracterizada pela difusão do hidrogênio através da estrutura cristalina do material.

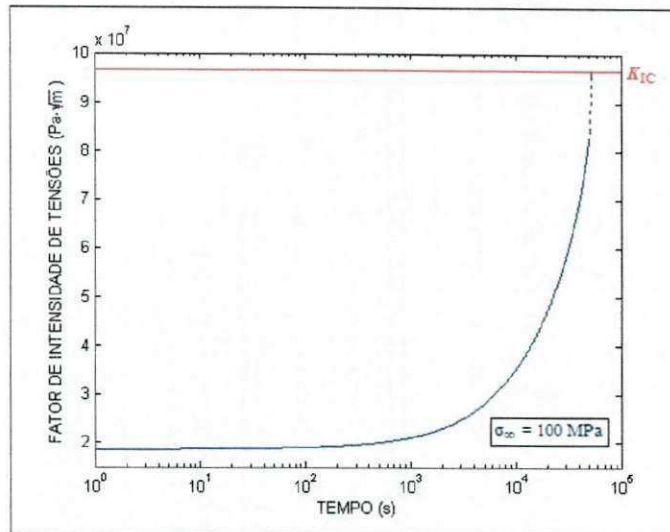


Figura 7.9. Evolução do fator de intensidade de tensões.

Finalmente e a título de ilustração, foi simulada a propagação da trinca nas mesmas condições iniciais, submetida a um carregamento mecânico estático, e desta vez, sob à ação de um agente corrosivo. O propósito foi o de estabelecer as diferenças mais importantes entre *fragilização por hidrogênio* e *corrosão sob tensão fraturante* (Stress Corrosion Cracking - SCC).

Na Figura 7.10 mostra-se a curva de evolução do dano provocado pelo agente corrosivo, e na Figura 7.11, a evolução do dano provocado pelo carregamento mecânico. As duas crescem de forma muito lenta até atingir um ponto máximo, que representa o início do crescimento da trinca. A sua propagação ocorre em forma praticamente simultânea, representada pelo ponto onde o dano atinge o valor zero. Da mesma forma do ocorrido na fragilização, a evolução do dano mecânico é fortemente influenciada pela ação do agente corrosivo, motivo pelo que o comportamento da curva que o descreve é similar ao comportamento da curva de evolução do dano por corrosão.

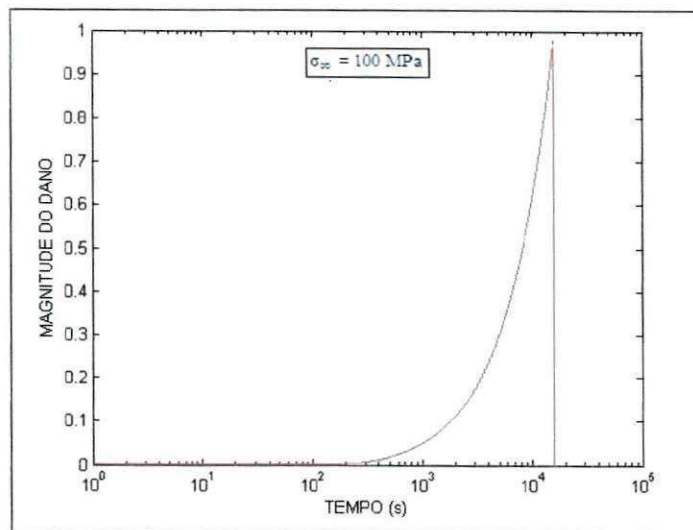


Figura 7.10. Evolução do dano na ponta da trinca devido à corrosão em SCC.

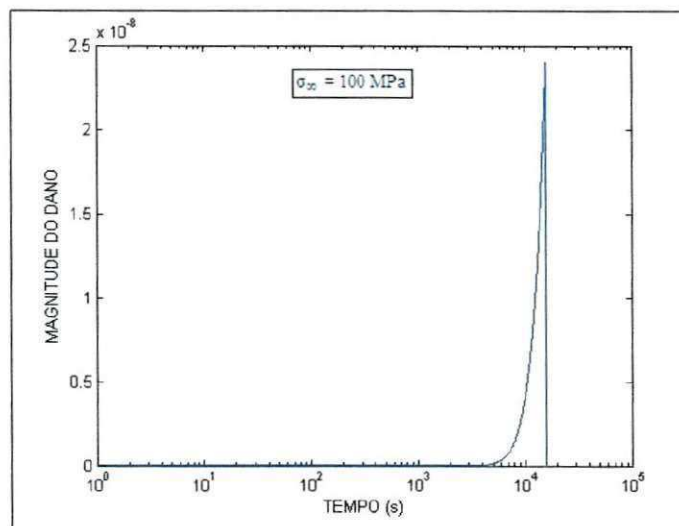


Figura 7.11. Evolução do dano na ponta da trinca devido ao carregamento mecânico em SCC.

O processo de danificação em ambos os casos é muito lento, ao contrário do observado na fragilização, e está condicionado pela lenta degradação do material e pela sua resistência à ação de deterioração.

A Figura 7.12 mostra o comportamento da curva de evolução do raio da ponta trinca em corrosão sob tensão fraturante, onde nota-se que esta é diferente do seu comportamento num processo de fragilização. Condicionado pela acumulação de dano, o raio da ponta da trinca apresenta um comportamento

até atingir um ponto máximo, ou raio máximo da ponta embotada, que corresponde ao início do processo de aguçamento da sua ponta e ao início do crescimento e propagação da trinca.

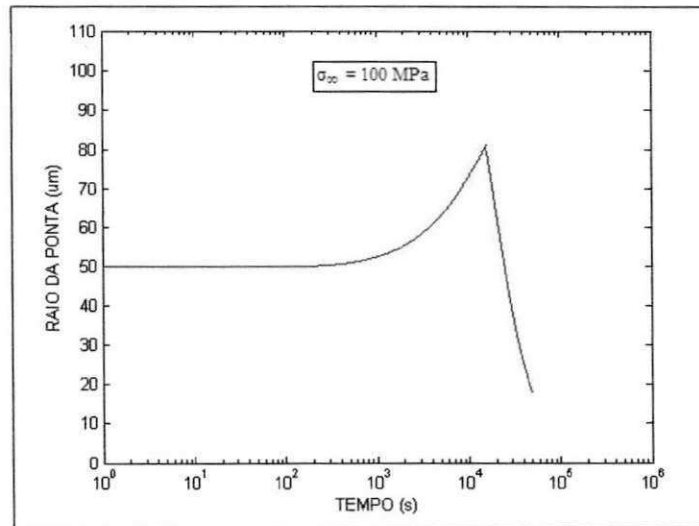


Figura 7.12. Evolução do raio efetivo da ponta da trinca em SCC.

8. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Após as análises dos resultados obtidos das simulações, pode-se concluir em relação aos objetivos traçados o que segue:

1- Foi adotado um modelo de transporte de hidrogênio para a simulação numérica de problemas de fragilização por hidrogênio em materiais metálicos que mostrou boa flexibilidade ao acoplamento de equações que não formam parte dele, mas que descrevem os mesmos comportamentos mecânicos e físicos dos materiais em estudo.

Os resultados obtidos logo da sua aplicação mostraram consistência com observações macroscópicas dos problemas estudados. Melhores aproximações poderão ser obtidas com a aplicação do modelo completo, que inclui equações adicionais de equilíbrio nos aprisionadores e nos NISL, de transporte de massa e de deformação.

2- Foi estudada a influência do hidrogênio nos módulos elásticos, incorporando no modelo uma formulação empírica que descreve esse efeito. O comportamento resultante, obtido após a simulação, está totalmente condicionado à equação que descreve a relação entre a concentração e a variação do módulo utilizada, que depende das propriedades específicas do material. Formulações diferentes proporcionarão resultados diferentes.

3- O modelo da Mecânica do Dano adotado mostrou boa flexibilidade ao acoplamento com modelos estudados na Mecânica da Fratura, dado que também utiliza parâmetros empregados por ela, tais como a taxa de energia de deformação elástica, o fator de intensidade de tensões e o raio efetivo da ponta da trinca. Os resultados obtidos mostraram uma boa correlação e consistência com os fenômenos estudados, permitindo um melhor entendimento do processo de início e propagação das trincas.

4- Após o cálculo dos fatores de intensidade de tensões com a presença de hidrogênio na estrutura do material, foi observado que eles variam somente

quando é considerado o efeito nos seus módulos elásticos. Quando esse efeito não foi considerado, esses parâmetros permaneceram invariáveis, mesmo para diferentes concentrações, e iguais aos calculados para o material livre de hidrogênio.

5- O comportamento da curva de variação do fator de intensidade de tensões com o tempo, que mostra um comportamento similar ao encontrado na literatura, demonstra a validade do modelo de início e crescimento de trincas adotado.

6- O estudo do crescimento da trinca como resultado do processo de deterioração do material devido à aplicação de um carregamento mecânico estático e à ação do hidrogênio, mostrou que o tempo de início e crescimento das trincas diminui dramaticamente, o que é consistente com observações macroscópicas do fenômeno da fragilização por hidrogênio.

Para futuros trabalhos, são recomendadas as seguintes ações:

1- Aprofundar o estudo dos modelos empregados para aplicá-los na sua real potencialidade, incluindo nas simulações condições que permitam aproximá-las tanto quanto possível de situações reais, tais como aprisionamento, transporte do hidrogênio pelas discordâncias e mecanismos de fragilização que consideram plasticidade, como o HELP.

2- Utilizar estes e outros modelos para estudar o fenômeno da fratura assistida pelo ambiente lançando mão dos recursos da Mecânica da Fratura Elasto-Plástica e da Mecânica do Dano Contínuo.

3- Aumentar a complexidade do modelo bi-dimensional para 3D, caso típico de corpos-de-prova reais. Neste caso, seria necessária a utilização de elementos finitos que permitam uma melhor modelagem das estruturas em estudo e uma

melhor aproximação dos resultados quando comparados com aqueles obtidos em experimentos de laboratório.

4- Obter experimentalmente parâmetros de fratura para os materiais sob o efeito do hidrogênio, que são objeto de estudo nas simulações, a fim de representar mais fielmente os fenômenos e lograr resultados mais próximos da realidade.

5- Verificar experimentalmente a aplicabilidade dos modelos a partir de curvas e comportamentos macroscópicos, via técnicas de identificação paramétrica (mínimos quadrados, inversa generalizada, redes neurais artificiais, etc.).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALLVAC, TECHNICAL DATA SHEET. Vascomax Nickel Maraging Alloys, 2000. Disponível em: <<http://www.allvac.com>>. Acesso em: 20/03/2007.

ARAGÓN, A.; ALEGRE, J.M.; GUTIÉRREZ-SOLANA F. Cálculo de los Factores de Intensidad de Tensiones en Fisuras Iniciadas en los Bordos de Taladros de Chapas Sometidas a Tracción. **Anales de Mecánica de la Fractura**, v. 20, p. 29-34, 2003.

ARAUJO T.D. *et al.* Numerical Estimation of Fracture Parameters in Elastic and Elastic-Plastic Analysis. **European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering**, 2000.

BANERJEE, K.; CHATTERJEE, U.K. Hydrogen Permeation and Hydrogen Content under Cathodic Charging in HSLA 80 and HSLA 100 Steels, **Scripta Mater.**, v. 44, p. 213-216, 2001.

BARBOSA, J.M.A. **Análise do Acoplamento Termomecânico em Barras Elasto-viscoplásticas com Dano**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio, Rio de Janeiro, 1998.

BARBOSA, J.M.A.; SOUZA, A.C.; GUIMARÃES, L.J.; DUDA, F.P. Simulação da Evolução de Dano em Materiais Elásticos com Acoplamento de Deformação-Difusão. In: 8º CONGRESO IBEROAMERICANO DE INGENIERÍA MECÁNICA, CIBIM 8, 2007, Cusco - Peru.

BALANÇO ENERGÉTICO NACIONAL 2003 - BEN: Ano base 2002. Ministério de Minas e Energia, Brasília, 2003.

BALANÇO ENERGÉTICO NACIONAL 2007 - BEN: Ano base 2006: Resultados Preliminares. Ministério de Minas e Energia, Empresa de Pesquisa Energética, Rio de Janeiro, 2007.

BIRNBAUM, H.K.; SOFRONIS, P. Hydrogen Enhanced Localized Plasticity - A Mechanism for Hydrogen Related Fracture. **Materials Science and Engineering**, v. A176, p. 191-202, 1994.

BOLOTIN, V.V.; SHIPKOV, A.A. A Model of the Environmentally Affected Growth of Fatigue Cracks. **J. Appl. Maths. Mechs.**, v. 62, n. 2, p. 289-296, 1998.

BOLOTIN, V.V. **Mechanics of Fatigue**. Boca Ratón: CRC Press, 1999. 463p.

BOLOTIN, V.V.; SHIPKOV, A.A. Mechanical Aspects of Corrosion Fatigue and Stress Corrosion Cracking. **International Journal of Solids and Structures**, v. 38, p. 7297 - 7318, 2001a.

BOLOTIN, V.V.; SHIPKOV, A.A. Prediction of the Growth of Fatigue Cracks Taking Environmental Factors into Account. **J. Appl. Maths. Mechs.**, v. 65, n. 6, p. 1001-1010, 2001b.

CARRASCO, J.P.; SANTOS, N.C.; SILVA, A.A. Numerical Simulation of the Hydrogen Effect on the Deformations of Test Body Models Loaded Under Tensile Stress. **International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry**, v.1, n. 1, p. 55-62, 2007.

CABRAL, H.D. **Desenvolvimento de Ferramentas Computacionais para Modelagem e Análise Automática de Defeitos de Corrosão em Dutos**. 140 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2007.

CAYÓN, A.; ÁLVAREZ, J.A.; GUTIÉRREZ-SOLANA, F. Influencia de la Microestructura y de los Estados Triaxiales de Tensiones en Fenómenos de Fisuración Inducida por Ambiente. **Anales de Mecánica de la Fractura**, v. 20, p. 273-278, 2003.

CELENTANO, D.; CHABOCHE, J.L. Experimental and Numerical Characterization of Damage Evolution in Steels. **Int. J. Plasticity**, doi:10.1016/j.ijplas.2007.03.008, 2007.

CHARCA, S. **Study of Hydrogen Permeation and Diffusion in Steels: Predictive Model for Determination of Desorbed Hydrogen Concentration**. 87 f. Tese (Mestrado em Engenharia Mecânica) - University of Puerto Rico, Mayagüez, 2005.

CHATEAU, J.P.; DELAFOSSE, D.; MAGNIN, T. Numerical Simulations of Hydrogen-Dislocation Interactions in FCC Stainless Steels. Part I: Hydrogen-Dislocation Interactions in Bulk Crystals. **Acta Materialia**, v. 50, p. 1507-1522, 2002.

DUDA, F.P.; BARBOSA, J.M.A.; GUIMARÃES, L.J.; SOUZA A.C. Modeling of Coupled Deformation-Diffusion-Damage in Elastic Solids. **International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry**, v.1, n. 1, p. 85-93, 2007a.

DUDA, F.P.; SOUZA A.C.; GUIMARÃES, L.J.; BARBOSA, J.M.A. An One Dimensional Coupled Model for Deformation, Degradation and Solute Diffusion in Elastic Solids. **Mechanics of Solids in Brazil 2007**, v 1, p. 199-213, 2007b.

ELIAZ, N. *et al.* Characteristics of Hydrogen Embrittlement, Stress Corrosion Cracking and Tempered Martensite Embrittlement in High-Strength Steels. **Engineering Failure Analysis**, v. 9, p. 167-184, 2002.

FERNANDES, J.C. **Aplicação dos Elementos Singulares Híbridos na Mecânica da Fratura Linear Elástica Bidimensional**. 107 f. Tese (Mestrado

em Engenharia Aeronáutica) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 2002.

FERREIRA, W.G. **Desenvolvimento de Ferramentas Computacionais para Análise Estrutural em Fadiga e Geração de Malhas de elementos Finitos**. 193 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

GANGLOFF, R.P. Hydrogen Assisted Cracking of High Strength Alloys. **Comprehensive Structural Integrity**, v. 6, Elsevier Science, New York, 2003.

GAVRILJUK, V.G; SHIVANYUK, V.N.; SHANINA, B.D. Change in the Electron Structure Caused by C, N and H Atoms in Iron and its Effect on Their interaction with Dislocations. **Acta Materialia**, v. 53, p. 5017–5024, 2005.

GONÇALVES, R. **Análise de Propagação de Fissuras por Fadiga em Concreto pelo MEF Mediante a Mecânica do Dano Contínuo**. 103 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Estruturas) - Escola de Engenharia de São Carlos, São Carlos, 2003.

HARDIE, D.; CHARLES, E.A.; LOPEZ, A.H. Hydrogen Embrittlement of High Strength Pipeline Steels, **Corrosion Science**, v. 48, p. 4378–4385, 2006.

HIPPERT Jr. E. **Investigação Experimental do Comportamento Dúctil de Aços API-X70 e Aplicação de Curvas de Resistência J- Δa para a Previsão de Colapso em Dutos**. 143 f. Tese (Doutorado em Engenharia) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2004.

HIRTH, J.P. Effects of Hydrogen on the Properties of Iron and Steel. **Metall. Trans. A**, v.11A, p. 861-890, 1980.

KARPINSKII, D.N.; SANNIKOV, S.V. Calculation of the Stress Intensity Factor for a Hydrogenated Plastic Crystal with a Crack. **Technical Physics Letters**, v. 29, n. 10, p. 843–845, 2003.

KO, C.R.; SAIAMA, K.; ROBERTS, J.M. Effect of Hydrogen on the Elastic Moduli of Vanadium. In: **1979 Ultrasonics Symposium**, 1979, p. 466-470.

KROM, A.H.M. **Numerical Modelling of Hydrogen Transport in Steel**. 105 f. Tese (Doutorado) - Technische Universiteit Delft, Delf, Holanda, 1998.

KROM, A.H.M.; KOERS, R.W.J.; BAKKER, A. Hydrogen Transport near a Blunting Crack Tip. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 47, p. 071-072, 1999.

LEMAITRE, J. **A Course on Damage Mechanics**. Berlin: Springer-Verlag Press, 1992. 210p.

LIANG, Y.; SOFRONIS, P.; ARAVAS, N. On the Effect of Hydrogen on Plastic Instabilities in Metals. **Acta Materialia**, v. 51, p. 2717–2730, 2003.

LUFRANO, J.; SOFRONIS, P. Numerical Analysis of the Interaction of Solute Hydrogen Atoms with the Stress Field of a Crack. **Int. J. Solid Structures**, v. 33, N° 12, p. 1709-1723, 1996.

LUFRANO, J.; SOFRONIS, P. Enhanced Hydrogen Concentrations Ahead of Rounded Notches and Cracks – Competition between Plastic Strain and Hydrostatic Stress. **Acta Materialia**, v. 46, n. 5, p. 1519-1526, 1998.

LUNARSKA, E.; ZIELINSKI, A.; SMIALOWSKI, M. Effect of Hydrogen on Shear Modulus of Polycrystalline α -Iron. **Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences**, Warsaw, Poland, 1976.

MAIMÍ, V.P. **Modelización Constitutiva y Computacional del Daño y la Fractura en Materiales Compuestos**. 270 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Universitat de Girona, Girona, 2006.

MARROW, T.J. Measurement of Crack Bridging Stresses in Environment Assisted Cracking of Duplex Stainless by Synchrotron Diffraction. **Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.**, v. 29, p. 464-471, 2006.

MAZZOLAI, F.M.; BIRNBAUM, H.K. Elastic Constants and Ultrasonic Attenuation of the α - α' Phase of the Nb-H(D) System. I: Results. **J. Phys. F: Met. Phys.** v. 15, p. 507-523, 1985a.

MAZZOLAI, F.M.; BIRNBAUM, H.K. Elastic Constants and Ultrasonic Attenuation of the α - α Phase of the Nb-H(D) System. II: Interpretation of Results. **J. Phys. F: Met. Phys.** v. 15, p. 525-542, 1985b.

MIRANDA, A.C.O. **Propagação de Trincas por Fadiga em Geometrias 2D Complexas sob Cargas Cíclicas Variáveis**. 106 f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.

NATALINI, R. *et al.* A Numerical Study of a Nonlocal Model of Damage Propagation under Chemical Agression. **European Journal of Applied Mathematics**, v. 14, p. 447-464, 2003.

NATIONAL ENERGY BOARD - OFFICE NATIONAL DE L'ENERGIE. Report of the Inquiry: Stress Corrosion Cracking on Canadian Oil and Gas Pipelines, Canadá, 1996.

NIBUR, K.A.; BAHR, D.F.; SOMERDAY, B.P. Hydrogen Effects on Dislocation Activity in Austenitic Stainless Steel. **Acta Materialia**, v. 54, p. 2677–2684, 2006.

OLIVEIRA, S.P.; MIRANDA, P.E.V. Concentração Crítica de Hidrogênio para a Fragilização por Hidrogênio em Aços. **COPPE/UFRJ - PEMM - Laboratório de Hidrogênio**, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2001.

ORIANI, R.A. The Physical and Metallurgical Aspects of Hydrogen in Metals. in: Fourth International Conference on Cold Fusion, Palo Alto, CA, 1993.

ORTIZ, M.; OVEJERO-GARCIA, J. Effect of Hydrogen on Young's Modulus of AISI 1005 and 1070 steels. **Journal of Materials Science**, v. 27 N° 4, p. 6777-6781, 1992.

PACHECO, P.M.C.L. Análise do Acoplamento Termomecânico em Materiais Elasto-viscoplásticos. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio, Rio de Janeiro, 1994.

PITUBA, J.C.; PROENÇA, S.P.B. **Estudo e Aplicação de Modelos Constitutivos para o Concreto Fundamentados na Mecânica do Dano Contínuo**. Cadernos de Engenharia de Estruturas, São Carlos, v. 7, n.23, p. 33-60, 2005.

PLANO ESTRATÉGICO PETROBRAS 2020, 2007, disponível em: <http://www.acionista.com.br/home/petrobras/140807_plano_estrategico>. Acesso em: 15/01/2008.

PROENÇA, S.P.B. **Fundamentos dos Mecanismos Físicos de Deformação e Ruptura**. São Carlos, 2001a.

PROENÇA, S.P.B. **Elementos de Mecânica de Dano em Meios Contínuos**. São Carlos, 2001b.

PUNDT, A.; KIRCHHEIM, R. Hydrogen in Metals: Microstructural Aspects. **Annu. Rev. Mater. Res.**, v. 36, p. 555-608, 2006.

ROBERTSON, I.M. The Effect of Hydrogen on Dislocation Dynamics. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 68, p. 671-692, 2001.

SELVARAJ, V. **Environment Assisted Cracking of Target Structural Materials under Different Loading Conditions**. 73 f. Tese (Mestrado em Engenharia Mecânica) - University of Nevada, Las Vegas, 2002.

SENKOV, O.N.; DUBOIS, M.; JONAS, J.J. Elastic Moduli of Titanium-Hydrogen Alloys in the Temperature Range 20°C to 1100°C. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 27A, p. 3963 - 3970, 1996.

SEREBRINSKY, S.; CARTER, E.A.; ORTIZ, M. A Quantum-mechanically Informed Continuum Model of Hydrogen Embrittlement. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 52, p. 2403 - 2430, 2004.

SÁ, J.C. de; GUEDES, C.M.; PIRES, F.M.A. **Computational Model for Failure of Ductile Materials at large Strains using Generalized Finite Element Approaches - Abstract**. Projetos de Investigação Científica e de Desenvolvimento Tecnológico em Todos os Domínios Científicos - Concurso 2006, Fundação para a Ciência e a Tecnologia - FCT, Ministério da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior, Portugal, 2007.

SMITH, R.W. Computer Simulation of Intergranular Stress Corrosion Cracking via Hydrogen Embrittlement. **Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.**, v. 8, p. 629-648, 2000.

SOFRONIS, P.; McMEEKING, R.M. Numerical Analysis of Hydrogen Transport Near a Blunting Crack Tip. **Journal of Mechanics and Physics of Solids**, v. 37, p. 317-350, 1989.

SOFRONIS, P.; BIRNBAUM, H.K. Mechanics of The Hydrogen-Dislocation-Impurity Interactions. I - Increasing Shear Modulus. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 43, n. 1, p. 49-90, 1995.

SOFRONIS, P. The Influence o Mobility of Dissolved Hydrogen on the Elastic Response of a Metal. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 43 n. 9, p. 1385-1407, 1995.

SOFRONIS, P.; LIANG, Y.; ARAVAS, N. Hydrogen Induced Shear Localization of the Plastic Flow in Metals and Alloys. **Eur. J. Mech. A/Solids**, v. 20, p. 857-872, 2001.

SONG, R.G. *et al.* Stress Corrosion Cracking and Hydrogen Embrittlement of an Al-Zn-Mg-Cu Alloy. **Acta Materialia**, v. 52, p. 4727-4743, 2004.

STROE M.E., **Hydrogen Embrittlement of Ferrous Materials**. 236 f.. Tese (Ph.D. em Ciências Aplicadas) - Université Libre de Bruxelles, Bélgica, 2006.

STROHAECKER, T.R. **Mecânica da Fratura**. Laboratório de Metalurgia Física, Escola de Engenharia, UFRGS, Porto Alegre. Disponível em: <www.lamef.demet.ufrgs.br>. Acesso em 19 Outubro 2006.

TAHA, A.; SOFRONIS, P. A Micromechanics Approach to the Study of Hydrogen Transport and Embrittlement. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 68, p. 803-837, 2001.

TELITCHEV, I.Y.; VINOGRADOV, O. Numerical Tensile Tests of BCC Iron Crystal with Various Amounts of Hydrogen near the Crack Tip. **Computational Materials Science**, v. 36, p. 272-280, 2006.

TIWARI, G.P. *et al.* A Study of Internal Hydrogen Embrittlement of Steels. **Materials Science and Engineering A**, v. 286, p. 269-281, 2000.

TORIBIO, J. *et al.* An integrated Approach to the Modelling of Hydrogen Assisted Failure in 316L Steel. **Fusion Engineering and Design**, v. 41, p. 91–96, 1998.

TORIBIO, J.; OVEJERO, E. Hydrogen Assisted Cracking in Progressively Drawn Pearlitic Steel. **Corrosion Science**, doi: 10.1016/j.corsci.2007.03.016, 2007.

WEBER, U. *et al.* Influence of Hydrogen on the Deformation Behaviour of a Ferritic Fine-Grained Low Alloy Steel. **Computational Materials Science**, v. 32, p. 577–587, 2005.

YAJIANG, L. *et al.* Finite Element Modeling of Hydrogen Diffusion in Fusion Zone of HQ130 High Strength Steel. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 161, p. 423–429, 2005.

ZHANG, Y.P. *et al.* Hydrogen Assisted Cracking of Maraging T-250 Steel. **Materials Science and Engineering A**, v. 471, p. 34-37, 2007.

ZOLTOWSKI P. A Study of Transport of Hydrogen in Self-Stressed Metals by a One-Port Transfer Function. **Journal of Electroanalytical Chemistry**, v. 536, p. 55-62, 2002.