# Termodinâmica

SEM5936 - Fundamentos da mecânica do contínuo aplicada a sólidos

November 2020

## 1 Introdução

Na resolução de problemas de mecânica do contínuo como na dedução de leis constitutivas deve-se obedecer aos princípios físicos de conservação de massa, conservação do momento linear, conservação do momento angular, consevação de energia, primeira lei da termodinâmica e segunda lei da termodinâmica. Estes principios se aplicam a todos os materiasi e condições de carregamento e dão origem as euações de campo (leis fisicas aplicadas em um ponto do corpo) e leis de equilibrios (lei físicas aplicadas no volume do sólido) [1].

Para facilitar o desenvolvimento das equações define-se o teorema de transporte para derivadas temporais de uma certa uantia dentro do volume de um corpo.

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega}\phi dv = \int_{\Omega}\left(\dot{\phi} + \phi trac\boldsymbol{l}\right)dv \tag{1}$$

Na equação acima, $\phi(x,t)$ é qualquer campo espacial (Euleriano) $\Omega$ é o volume do corpo estudado no instante de tempo $t$ e $l$ é o gradiente do tensor espacial de velocidade. A equação acima pode ser escrita também como (utilizando as relações $v = JV$ e $\frac{Dj}{Dt} = \dot{j} = Jtrac\boldsymbol{l} = Jdiv(\boldsymbol{v})$):

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega}\phi dv = \int_{\Omega}\left(\dot{\phi} + \phi div\boldsymbol{v}\right)dv \tag{2}$$

### 1.1 Conservação da massa

A massa de um corpo pode ser entendida como sendo a soma das massas de todas as particulas que constituem tal corpo (Não está se considerando casos com variação de massa). Considere um corpo $\Omega$ no instante de tempo t e que não existe massa entrando ou saindo do corpo, portanto a taxa (derivada temporal) pode ser escrita como [1]:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega}\rho(\boldsymbol{x},t))dv = 0 \tag{3}$$

A mesma equação anterior expressa na descrição Langrangeana (referência ou descrição material).

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega_0} \rho_0(\boldsymbol{X},t))dV = 0 \tag{4}$$

Integrando as equações 3 e 4 resulta na massa total do corpo no instante t e no instante de referência. Essas equações são as equações de balanço de massa. Essas equações de balanço (governam um volume finito do corpo) podem ser convertidas para equações de campo (govvernam um ponto do corpo) que são válidas para cada ponto que compoem o corpo.

Considerando a condição de referência, a qual é independente do tempo, tem-se que essa relação é válida para todos os pontos do corpo, portanto pode-se escrever:

$$\int_{\Omega_0} \frac{D}{Dt}\rho_0(\boldsymbol{X},t))dV = \dot{\rho}_0(\boldsymbol{X},t) \tag{5}$$

Sendo a equação 5 a equação de campo da conservvação de massa na descrição Lagrangeana. Já para a equação de balanço na configuração corrente (Euleriana), procede-se de maneira semelhante, porém como o volume $\Omega$ muda com o tempo não se pode simplesmente colocar a derivada temporal dentro da integral, como foi realizado para o caso na descrição material.

Para esse caso, leva-se a equação 3 para a configuração de referência e fazendo uma mudança de variável $x = (\boldsymbol{X},t)$, pode-se passar para dentro da integral a derivada temporal.

$$\int_{\Omega_0} \frac{D}{Dt}[\rho(\chi(\boldsymbol{X},t))J)]dV = 0 \tag{6}$$

A equação 6 é válida para cada ponto do corpo, portanto pode-se escrever conforme mostrado pela equação 7:

$$\frac{D}{Dt}[\rho(\chi(\boldsymbol{X},t))J)]dV = 0 \tag{7}$$

Aplicando a regra da cadeia na equação 6 tem-se:

$$\int_{\Omega_0} [\dot{\rho}(\chi(\boldsymbol{X},t))J + \rho(\chi(\boldsymbol{X},t))\dot{J}]dV = 0 \tag{8}$$

Aplicando a relação reversa $\boldsymbol{X} = \chi(\boldsymbol{x},t)$ e lembrando que $dv = JdV$ chega-se a seguinte equação na configuração corrente.

$$\int_{\Omega_0} [\dot{\rho}((\boldsymbol{x},t)) + \rho((\boldsymbol{x},t))\frac{\dot{J}}{J}]dv = 0 \tag{9}$$

Como mencionado anteriormente a equação 9 é válida para cada ponto do domínio, e também lembrando que $\dot{J}/J = div\boldsymbol{v}$ chega-se a seguinte equação de campo para a descrição espacial.

$$\dot{\rho}((\boldsymbol{x},t)) + \rho((\boldsymbol{x},t))div\boldsymbol{v} = 0 \tag{10}$$

Uma das relações mais úteis para a conservação de massa, $\rho_0 = J\rho$ pode ser obtida utilizando as equações 6 e 5.

$$\int_{\Omega_0} \frac{D}{Dt} \left[\rho_0(\boldsymbol{X}, t)\right] dV = \int_{\Omega_0} \frac{D}{Dt} \left[\rho(\chi(\boldsymbol{X}, t))J\right] dV \tag{11}$$

Sendo a relação acima válida para qualquer ponto do contínuo, chega-se a $\rho_0 = J\rho$.

Uma outra forma para se chegar a esse mesmo resultado vem da interpretação da mudança de configuração de um sólido. Considere nesse caso uma base $e_i$, na condição de referência, então pode-se escrevevr os vetores em relação a essa base como $d\vec{A}^i = dA_i\vec{e_i}$.

Nesse caso o volume de um sólido formado por esses vetores pode ser dado pela relação apresentada na equação 12

$$dV_0 = (e_1 \times e_2) \cdot e_3 dA_1 dA_2 dA_3 = dA_1 dA_2 dA_3 \tag{12}$$

Considerando que esse corpo passe por uma mudança de configuração, pode-se escrever $da^i = F_{ij}dA_j$. Portanto na configuração corrente o volume é dado pela equação 13

$$\begin{aligned} dV = (e_1 \times e_2) \cdot e_3 da_1 da_2 da_3 = (Fe_1 \times Fe_2) \cdot Fe_3 dA_1 dA_2 dA_3 = \\ det(F) dA_1 dA_2 dA_3 = JdV_0 \end{aligned} \tag{13}$$

Utilizando o resultado da equação 13 e lembrando que a massa de um corpo é dado por $dm = \rho dV$, portanto segue que $dm_0 = dm$, e portanto $\rho_0 dV_0 = \rho dV$. Utilizando a relação obtida na equação 13, tem-se $\rho_0 dV_0 = \rho J dV_0$, e portanto $\rho_0 = J\rho$.

## 1.2 Conservação do momento linear

A segunda Lei de Newton temos que a *a somatória das forças de superfície e volumétricas é igual a derivada temporal do momento linear total que age sobre o corpo*. Matematicamente essa lei pode ser escrita como [1]:

$$\int_\Gamma \boldsymbol{t} ds + \int_\Omega \boldsymbol{b} dv = \frac{D}{Dt} \int_\Omega \boldsymbol{v} \rho dv \tag{14}$$

Onde $\boldsymbol{t}$ é o vetor de forças de Cauchy agindo sobre um elemento de área $ds$ na configuração corrente (Euleriana). $\Gamma$ é a superfície do corpo, $\boldsymbol{b}$ são as forças volumétricas que agem no volume $\Omega$.

Utilizando o teorema do divergente e recordando a fórmula de Cauchy ($\boldsymbol{t} = \boldsymbol{\sigma n}$) no termo de força na superfície da equação 14 tem-se que a mesma pode ser escrita para todo o dominio do corpo.

$$\int_\Omega div \boldsymbol{\sigma} dv + \int_\Omega \boldsymbol{b} dv = \frac{D}{Dt} \int_\Omega \boldsymbol{v} \rho dv \tag{15}$$

Por fim, considerando que a massa se conserva ($D\rho/Dt = 0$) a equação 15 pode ser escrita como:

$$\int_\Omega (div(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{b} - \dot{\boldsymbol{v}}\rho)\, dv = 0 \tag{16}$$

Como a equação 16 é válida para qualquer ponto do domínio, então é corrto afirmar que:

$$div(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{b} - \dot{\boldsymbol{v}}\rho = 0 \tag{17}$$

Deve-se lembrar que a equação 17 está escrito na configuração corrente, portanto é Euleriana. Pode-se proceder de maneira análoga e obter a equação de balanço do momento linear na configuração de referência (Lagrangeana).

$$div(\boldsymbol{P}) + \boldsymbol{B} - \dot{\boldsymbol{V}}\rho_0 = 0 \tag{18}$$

Onde $\boldsymbol{P}$ é o primeiro tensor de Piolla-Kirchoff.

## 1.3 Conservação do momento angular

O princípio da conservação do momento ângular versa que os momentos aplicados em um corpo é igual a derivada em relação ao tempo do momento ângular. A dedução desse princípio é similar ao da seção anterior.

$$\int_\Gamma \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{t} ds + \int_\Omega \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{b} dv = \frac{D}{Dt}\int_\Omega \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}\rho dv \tag{19}$$

Onde $\boldsymbol{r}$ é o vetor posição do ponto em questão a origem do sistema de referência adotado. Note que a dedução está sendo realizada na configuração corrente.

Novamente recordando a fórmula de Cauchy e aplicando o teorema do divergente na equação 19 obtem-se:

$$\int_\Omega div(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\sigma}) dv + \int_\Omega \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{b} dv = \frac{D}{Dt}\int_\Omega \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}\rho dv \tag{20}$$

O desenvolvimento dessa dedução fica mais fácil utilizando a notação indicial. A equação 20 reescrtia em notação indicial fica:

$$\int_\Omega \epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r_l}[r_j\sigma_{kl}]dv + \int_\Omega \epsilon_{ijk} r_j b_k dv = \frac{D}{Dt}\int_\Omega \epsilon_{ijk} r_j v_k \rho dv \tag{21}$$

Desenvolvendo a equação 21 e considerando que a massa se conserva temos a seguinte equação.

$$\int_\Omega [\epsilon_{ijk}\sigma_{kl} + \epsilon_{ijk} r_j \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial r_l}]dv + \int_\Omega \epsilon_{ijk} r_j b_k dv = \int_\Omega \epsilon_{ijk} r_j \dot{v}_k \rho dv \tag{22}$$

Rearranjando a equação 22.

$$\int_\Omega \left\{ \epsilon_{ijk}\sigma_{kl} + \epsilon_{ijk} r_j \left[ \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial r_l} + b_k - \dot{v}_k \right] \right\} dv = 0 \tag{23}$$

O termo entre colchetes na equação 23 é igual a zero (ver equação 17). Como a equação 23 é válida para qualquer ponto do domínio chega-se a conclusão que $\epsilon_{ijk}\sigma_{kl} = 0$, ou seja o tensor de tensões de Cauchy é simétrico $\sigma = \sigma^T$.

Essa mesma abordagem pode ser feita para a configuração de referência utilizando o primeiro tensor de tensão de Piolla Kirchoff ($P$), então obtem-se que $PF^T = P^T F$, onde $F$ é o tensor de mudança de configuração. Note que o primeiro tensor de tensão de Piolla Kirchoff não é simétrico.

## 1.4 Primeira lei da termodinâmica

O objeto no nosso estudo da primeira lei da termodinâmica é um sistema contínuo fechado que pode realizar trabalho e trocar calor com o ambiente que o envolve, mas não pode haver troca de massa. Portanto um sistema termodinâmico é composto por uma quantidade de matéria contínua e invariante. Considere que esse sistema possua energia interna ($\boldsymbol{u}$ por unidade de massa).

A esse sistema pode-se associar energia cinética e potencial. Pode ainda ocorrer geração interna de calor ($\boldsymbol{r}$), além de troca de calor pela superfície desse corpo ($\boldsymbol{q}$). Nesse corpo ainda podem agir forças de superfície ($\boldsymbol{t}$) e forças volumétricas ($\boldsymbol{b}$).

A primeira lei da termodinâmica estabelece o balanço entre a potencia mecânica e a taxa de calor com a variação da energia total do corpo.

De modo a facilitar o entendimento da teoria, primeiramente trataremos dos esforços mecânicos externos cuja potência ($P_{mec}$) é dado pela equação 24

$$P_{mec} = \int_\Omega \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} d\Omega + \int_\Gamma \boldsymbol{t} \cdot \boldsymbol{v} d\Gamma \tag{24}$$

Onde $\boldsymbol{v}$ é o vetor de velocidades do ponto em questão na configuração corrente (Formulação Eueleriana.

A equação 24 pode ser simplificada utilizando o teorema do divergente.

$$P_{mec} = \int_\Omega \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} d\Omega + \int_\Omega div(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v}) d\Omega = \int_\Omega [\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} + div(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v})] d\Omega \tag{25}$$

Fazendo o divergente do produto $div(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v})$ a equação 25 pode ser escrita como:

$$P_{mec} = \int_\Omega [\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} + div(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v})] d\Omega = \int_\Omega \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} + [div(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \boldsymbol{v} + grad(\boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] d\Omega \tag{26}$$

Ou em notação indicial:

$$P_{mec} = \int_\Omega b_i v_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} v_j + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \sigma_{ij} d\Omega \tag{27}$$

Rearranjando a equação 27.

$$P_{mec} = \int_\Omega (b_j + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j})v_j + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\sigma_{ij} d\Omega = \int_\Omega (\boldsymbol{b} + div\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\sigma} grad\boldsymbol{v}\, d\Omega \quad (28)$$

Vale mencionar que para o caso de pequenas deformações o gradiente do tensor de velocidades é semelhante a parte simétrica do tensor da taxa de deformação $\boldsymbol{\sigma} grad\boldsymbol{v} \simeq \boldsymbol{\sigma}\dot{\epsilon}$

A taxa de calor considera o calor transferido ao corpo através de sua superfície, assim como o calor gerado internamente ao corpo. Portanto pode-se escrever:

$$Q = -\int_\Gamma \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma + \int_\Omega \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{r} d\Omega \quad (29)$$

Na equação 29 o sinal negativo do primeiro termo a direita se refere a convenção que calor positivo é o adicionado ao sistema. Aplicando o teorema do divergente nessa equação, temos:

$$Q = -\int_\Omega div\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{r} d\Omega \quad (30)$$

Como mencionado anteriormente, a primeira lei da termodinâmica versa sobre o balanço de energia em um sistema termodinâmico. Portanto, matematicamente, a primeira lei da termodinâmica pode ser escrita como sendo:

$$P_{mec} + Q = \dot{E}_c + \dot{U} + \dot{E}_{pot} \quad (31)$$

Como a maioria dos processos estudados a mudança de cota praticamente inexiste, o termo da taxa de variação de energia potencial será desprezado, o que facilita o desenvolvimento matemático, porém a adição desse termo é consideravelemente fácil se assim for necessário.

A taxa da energia cinética é definida como sendo:

$$\dot{E}_c = \frac{d}{dt}\int_\Omega \frac{1}{2}\boldsymbol{\rho v} \cdot \boldsymbol{v} d\Omega \quad (32)$$

Por fim, a taxa de energia interna pode ser escrita como sendo:

$$\dot{U} = \frac{d}{dt}\int_\Omega \boldsymbol{\rho u} d\Omega \quad (33)$$

Uma vez definido todos os termos a primeira lei da termodinâmica é apresentada na equação 34.

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega \boldsymbol{\rho u} d\Omega + \frac{d}{dt}\int_\Omega \frac{1}{2}\boldsymbol{\rho v}\cdot\boldsymbol{v} d\Omega = -\int_\Omega div\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{r} d\Omega + \int_\Omega (\boldsymbol{b} + div\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\sigma} grad\boldsymbol{v} d\Omega \quad (34)$$

Recordando a equação de balanço de momento linear (ver equação 17) e aplicando esse resultado no termo relativo a potência mecânica, e também considerando que a equação 34 é valida para cada ponto do domínio, temos a seguinte relação:

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\rho u} + \frac{d}{dt}\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho v}\cdot\boldsymbol{v} = -div\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{r} + (\frac{d}{dt}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\sigma}grad\boldsymbol{v} \tag{35}$$

Trabalhando algebricamente a equação 35, e considerando o princípio da conservação de massa chegamos, finalmente, na primeira lei da termodinâmica.

$$\boldsymbol{\rho\dot{u}} = -div\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\sigma}grad\boldsymbol{v} \tag{36}$$

Para o caso de pequenas deformações, a primeira lei da termodinâmica é apresentada na equação 37.

$$\boldsymbol{\rho\dot{u}} = -div\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\sigma}\dot{\epsilon} \tag{37}$$

## 1.5 Segunda lei da termodinâmica

Como já mencionado anteriormente, a primeira lei da termodinâmica versa sobre o balanço de energia, porém não impõem nenhuma restrição sobre como que essa conversão de energia se dá. Para processos reversíveis essa ausência de restrição não possui nenhum problema. Por outro lado, para os processos ireversíveis há a necessidade de se fazer essa restrição em relação de como se dá esse balanço de energia.

A segunda lei da termodinâmica versa sobre as restrições ao balanço de energia tratando assim da reversibilidade e irreversibilidade dos processos termodinâmicos.

Para tal é introduzido o conceito de entropia na qual sua variação, em um sistema isolado, não pode ser negativa. Por entropia entende-se como o valor numérico que mostra que os processos físicos somente podem ir em uma dada direção em um dado intervalo de tempo. É também conhecida como a medida da desordem de um sistema que passa por um determinado processo.

Em um porcesso reversível a variação da entropia é igual a variação do calor transferida ao sistema. Por outro lado, para processos irreversíveis podem haver porcessos internos que podem levar a transformação de energia em calor adicional. Portanto a variação de entropia juntamente com o calor trasnferido ao sistema caracterizam a sua reversibilidade ou irreversibilidade.

Juntamente com o conceito de entropia, vem o conceito de temperatura de modo a associar a entropia de um sistema com a quantidade de calor do mesmo.

A entropia de um sistema fechado pode ser dada por:

$$S = \int_{\Omega} s\rho d\Omega \tag{38}$$

Onde $s$ é a entropia específica e $\rho$ é a densidade.

Tem-se que a segunda lei da termodinâmica a variação (taxa) total da entropia deve ser igual ou maior que a variação provocada pela transferência de calor ou calor gerado dentro do sistema. Matematicamente a segunda lei da termodinâmica é escrita como:

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} s\rho d\Omega \geq \int_{\Omega} \frac{r}{\theta}\rho d\Omega - \int_{\Gamma} \frac{\boldsymbol{q}}{\theta} \cdot \boldsymbol{n} d\Gamma \tag{39}$$

Onde $\theta$ é a temperatura. Na equação 39 a igualdade vale para os processos revesíveis. O sinal negativo no termo da transferência de calor pela superfície é para ajustar a convenção de que calor positivo é quando o mesmo é adicionado ao sistema.

Desse equação, para os processos irreversíveis, tem-se que a energia transferida ao sistema não fica armazenada unicamente como energia interna do sistema, mas acaba sendo empregada em algum outro fenômeno interno como, por exemplo, processo de danificação, plastificação, etc.

Aplicando o teorema do divergente no termo de transferência de calor na equação 39, tem-se a seguinte equação.

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} s\rho d\Omega \geq \int_{\Omega} \frac{r}{\theta}\rho d\Omega - \int_{\Omega} div\frac{\boldsymbol{q}}{\theta} d\Omega \tag{40}$$

Considerando que a equação acima é válida para cada ponto do domínio, e também considerando a invariabilidade da massa, por fim a segunda lei da termodinâmica pode ser escrita como apresentada na equação 41.

$$\rho\frac{ds}{dt} - \frac{r}{\theta}\rho + div\frac{\boldsymbol{q}}{\theta} \geq 0 \tag{41}$$

## 1.6 Desigualdade de Clausius-Duhem

Uma vez tendo em mãos as equações da primeira lei (equação 36) e da segunda lei (equação 41), pode-se combinar essas equações na forma de uma desigualdade que deve ser observada para que determinado processo seja termodinâmicamente admissível.

Primeiramente desenvolve-se o termo relativo a transferência de calor que aparece na equação da segunda lei.

$$div\frac{\boldsymbol{q}}{\theta} = \frac{1}{\theta}div\boldsymbol{q} - \frac{1}{\theta^2}grad\theta\boldsymbol{q} \tag{42}$$

Substituindo na equação da segunda lei, tem-se:

$$\rho\frac{ds}{dt} - \frac{r}{\theta}\rho + \frac{1}{\theta}div\boldsymbol{q} - \frac{1}{\theta^2}grad\theta\boldsymbol{q} \geq 0 \tag{43}$$

Isolando o divergente da troca de calor na primeira lei, substituindo na equação 43 e multiplicando ambos os lados por $\theta$ chega-se finalmente na desigualdade de Clausius-Duhem.

$$\rho\frac{ds}{dt}\theta - r\rho + \left(-\rho\frac{du}{dt} + \boldsymbol{\sigma} grad \boldsymbol{v}\right) - \frac{1}{\theta} grad\theta \boldsymbol{q} \geq 0 \tag{44}$$

## References


[1] Jorgen Bergstrom. *Mechanics of Solid Polymers*. William Andrew Publishing, 2015.