

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Guilherme José Muzel Tavares

**MODELAGEM CONSTITUTIVA E ANÁLISE
EXPERIMENTAL DO COMPORTAMENTO MECÂNICO
DO POLI (ÉTER ÉTER CETONA) SOB COMPRESSÃO
UNIAXIAL**

Florianópolis
2018

Guilherme José Muzel Tavares

**MODELAGEM CONSTITUTIVA E ANÁLISE
EXPERIMENTAL DO COMPORTAMENTO MECÂNICO
DO POLI (ÉTER ÉTER CETONA) SOB COMPRESSÃO
UNIAXIAL**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Eduardo Alberto Fancello,
D.Sc.

Florianópolis
2018

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Tavares, Guilherme José Muzel
MODELAGEM CONSTITUTIVA E ANÁLISE EXPERIMENTAL DO
COMPORTAMENTO MECÂNICO DO POLI (ÉTER ÉTER CETONA) SOB
COMPRESSÃO UNIAXIAL / Guilherme José Muzel Tavares
; orientador, Eduardo Alberto Fancelllo, 2018.
171 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós
Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2018.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. PEEK. 3. Comportamento
mecânico. 4. Atualização constitutiva variacional. 5.
Deformações finitas. I. Alberto Fancelllo, Eduardo.
II. Universidade Federal de Santa Catarina.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III.
Título.

Guilherme José Muzel Tavares

**MODELAGEM CONSTITUTIVA E ANÁLISE
EXPERIMENTAL DO COMPORTAMENTO MECÂNICO
DO POLI (ÉTER ÉTER CETONA) SOB COMPRESSÃO
UNIAXIAL**

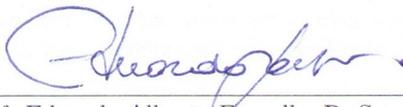
Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de “Mestre em Engenharia Mecânica” e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 24 de Outubro de 2018.



Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr. Eng.
Coordenador do Curso

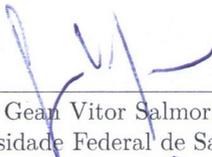
Banca Examinadora:



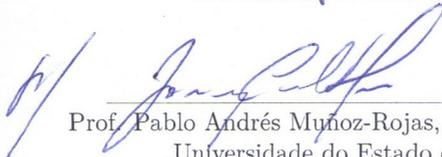
Prof. Eduardo Alberto Fancello, D. Sc.
Orientador
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Paulo de Tarso Rocha de Mendonça, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Gean Vitor Salmoria, Dr. Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Pablo Andrés Muñoz-Rojas, D. Eng. (videoconferência)
Universidade do Estado de Santa Catarina

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, por terem me concebido, por me amarem e me apoiarem sempre. Agradeço aos meus colegas pela companhia e ajuda. Agradeço ao meu orientador, pela paciência e pelos ensinamentos.

RESUMO

O poli (éter éter cetona), ou PEEK, é um polímero semicristalino que já vem recebendo muita atenção na área de biomecânica por várias décadas, devido à sua resistência mecânica, resistência ao desgaste, inércia e biocompatibilidade. As aplicações de componentes com PEEK, como por exemplo componentes de substituição de articulações, fixação da coluna vertebral e fixação de fraturas ósseas, estão sujeitas a cargas mecânicas que atuam em diferentes períodos de tempo. No entanto, poucos modelos constitutivos disponíveis em softwares de elementos finitos comerciais são adequados para capturar adequadamente o comportamento mecânico viscoelástico do PEEK. Motivado por este fato, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um modelo constitutivo viscoelástico de deformações finitas para o PEEK em uma estrutura de atualização constitutiva variacional. Para verificar as capacidades preditivas do modelo proposto, os parâmetros constitutivos são calibrados usando dados experimentais obtidos a partir de testes compressivos monotônicos realizados com espécimes de PEEK sob diferentes taxas de deformação.

Palavras-chave: PEEK, Comportamento mecânico, Deformações finitas, Atualização constitutiva variacional

ABSTRACT

Poly (ether ether ketone), or PEEK, is a glassy polymer that has received much attention in biomechanics for several decades due to its strength, wear properties, inertness and general biocompatibility. Applications of PEEK components such as joint replacement, spinal fusion and bone fracture fixation are all subjected to mechanical loads that vary over both short and long time periods. However, few of the available constitutive models in commercial finite element codes are equipped to adequately capture the time and rate-dependent response of PEEK. Motivated by this fact, this work presents the development of a finite strain viscoelastic constitutive model for PEEK in a variational constitutive update framework. To verify the predictive capabilities of the proposed model, the constitutive parameters are calibrated using experimental data obtained from monotonic compressive tests performed with PEEK specimens at different strain-rates.

Keywords: PEEK, Mechanical Behavior, Finite strain, Variational constitutive update.

LISTA DE FIGURAS

2.1	PEEK puro, em formato comerciais como em barras, grãos e pó. Imagem obtida do livro <i>PEEK Biomaterials Handbook Kurtz (2012)</i>	35
2.2	Engrenagem fabricada a partir de PEEK, com anel metálico interno. Figura retirada do site https://www.victrex.com/en/automotive	37
2.3	Componentes de PEEK utilizados na indústria aeroespacial. https://www.victrex.com/en/aerospace	38
2.4	Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento de distúrbios na coluna. (a) Dispositivo intersomático; (b) hastes para estabilização de coluna; (c) placa cervical; (d) Prótese de disco, para artroplastia de articulação espinhal. Adaptado de https://invibio.com/spine	39
2.5	Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento de trauma. (a) Placas de fixação, (b) Haste e parafuso intramedular. Adaptado de https://invibio.com/trauma	40
2.6	Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento na área de ortopedia. (a) Inseto articular de prótese de joelho; (b) Inseto articular de prótese de quadril; (c) âncora em artroscopia de ombro; (d) e de joelho. Adaptado de https://invibio.com/ortho	40
2.7	Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento na área de odontologia. (a) Implante dentário; (b) Tampa de cicatrização; (c) pilar intermediário. Adaptado de https://invibio.com/dental	41
2.8	Unidade repetida do PEEK. Adaptado de (Kurtz, 2012)	42
2.9	Diferentes estágios de uma curva de tensão por deformação, típica de um material polimérico semicristalino submetido à compressão abaixo da temperatura de transição vítrea. Figura de autoria própria.	45
2.10	Curvas típicas de um elastômero (C), plástico (B) e polímero frágil (A). Adaptado de Callister (2008)	46
2.11	Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob compressão à uma taxa de 10^{-1} /s. Obtido por El-Qoubaa <i>et al</i> El-Qoubaa e Othman (2016).	47

2.12	Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob tração à uma taxa de 10^{-3} /s. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).	48
2.13	Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob compressão à uma taxa de 10^{-3} /s. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).	49
2.14	Comportamento do PEEK 150G sob compressão em taxas de (a) 2000/s, (b)1000/s, (c) 500/s, (d) 7/s, (e) 0.001/s. Obtido do trabalho de Hamdan e Swallowe (1996).	50
2.15	Comportamento do PEEK 450G para várias taxas de deformações, sob compressão em temperatura ambiente. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).	51
2.16	Comportamento do PEEK 450G para várias taxas, sob compressão em temperatura ambiente. Obtido por <i>El-Qoubaa e Othman (2015a)</i>	52
2.17	Comportamento do PEEK 450G para várias taxas, sob tração em temperatura ambiente. Obtido por <i>El-Qoubaa e Othman (2015b)</i>	52
4.1	Representação reológica do modelo de Farias. Figura de autoria própria.	67
5.1	Representação reológica Three Network Model. Figura de autoria própria.	77
6.1	Um dos tarugos de PEEK disponibilizados para testes nesse trabalho (ao lado, um paquímetro de 20cm para compreensão da escala da imagem). Fonte: fotografia realizada pelo autor.	83
6.2	Dispositivo de ensaio de compressão uniaxial utilizado. Fotografia realizada pelo autor.	85
6.3	Componentes do dispositivo de compressão. Adaptado de <i>Sonnenhohl (2015)</i>	87
6.4	Desenho e dimensões do punção de compressão. Adaptado de <i>Sonnenhohl (2015)</i>	87
6.5	Exemplo de um corpo de prova utilizado.	90
6.6	Esboço da seção do tarugo, com indicação dos corpos de prova a serem usinados. Para usinagem destes, foi efetuado um corte em “X” na seção, seguido por um processo de torneamento. Adaptado de <i>Sonnenhohl (2015)</i>	91
6.7	Curva do deslocamento do atuador da EMIC pelo tempo, para o caso de um deslocamento sob velocidade de $0,006\text{mm s}^{-1}$	93

6.8	Célula de carga utilizada para efetuar a medição de força durante os ensaios de compressão.	94
6.9	Montagem do LVDT no dispositivo de ensaio.	95
6.10	Desenho com as dimensões da chapa utilizada para fabricar o clip gage de medição diametral após o corte, juntamente com uma ilustração do clip gage após o dobramento e pronto para utilização. Desenho elaborado pelo autor.	96
6.11	Clip gage utilizado para medir a variação do diâmetro do corpo de prova. Fotografia realizada pelo autor. . .	97
6.12	Exemplo de utilização das ferramentas de detecção de perfis do matlab. Imagen adaptada da documentação do Matlab 2013a.	97
6.13	Configuração da câmera, tripé e Emic utilizada. Fotografia realizada pelo autor.	99
6.14	Imagem obtida pela câmera durante o ensaio (a) sem tratamento e (b) após a utilização da detecção de perfis.	100
6.15	Imagem do corpo de prova com as linhas azuis representando o limite superior, inferior e os limites laterais em uma das imagens.	102
6.16	Caso 1 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0, atrito igual a 0, deslocamento de 3 mm. . . .	104
6.17	Curva de variação de volume para o caso 1.	104
6.18	Caso 2 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0,4999, atrito igual a 0,17, deslocamento de 2,45 mm.	105
6.19	Curva de variação de volume para o caso 2.	105
6.20	Caso 3 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0,4999, atrito igual a 2,5, deslocamento de 2,45 mm.	106
6.21	Curva de variação de volume para o caso 3.	106
6.22	Área de detecção de perfis, e curvas quadráticas interpoladas para aproximação do perfil lateral do corpo de prova no último frame do caso 3.	107
7.1	Curvas de tensão real por deformação logarítmica para diferentes taxas de deformação.	110
7.2	Variação de volume para o CP 33, taxa de deformação aproximadamente 10^{-4} (1/s).	112
7.3	Variação de volume para o CP 35, taxa de deformação aproximadamente 10^{-3} (1/s).	113

7.4	Variação de volume para o CP 36, taxa de deformação aproximadamente 10^{-2} (1/s).	113
7.5	Curvas ajustadas para taxa de 10^{-2} (1/s) e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 36.	114
7.6	Curvas ajustadas para taxa de 10^{-3} (1/s) e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 35.	114
7.7	Curvas ajustadas para taxa de 10^{-4} (1/s) e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 33.	115
H.1	Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmara, para taxa de 10^{-4} .	164
H.2	Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmara, para taxa de 10^{-3} .	165
H.3	Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmara, para taxa de 10^{-2} .	166
H.4	Curvas de variação de volume por deformação (logarítmica, medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-4} .	167
H.5	Curvas de variação de volume por deformação (logarítmica, medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-3} .	168
H.6	Curvas de variação de volume por deformação (logarítmica, medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-2} .	169
H.7	Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-4} .	170
H.8	Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-3} .	171
H.9	Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-2} .	171

LISTA DE TABELAS

1	Nomenclatura e propriedades das principais categorias de PEEK disponíveis comercialmente.	43
2	Restrições suficientes para admissibilidade termodinâmica do potencial de dissipação.	69
3	Descrição dos corpos de prova utilizados, com a descrição das dimensões medidas logoantes do ensaio mecânico. . .	109
4	Valores máximos de tensão verificados para os ensaios em cada taxa de deformação.	110
5	Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-4} (1/s).	111
6	Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-3} (1/s).	111
7	Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-2} (1/s).	111
8	Comparação dos resultados médios de inclinação da curva de tensão por deformação para duas taxas, com os estimados a partir dos resultados de outros trabalhos da literatura.	112
9	Parâmetros do modelo de Farias.	115
10	Parâmetros do modelo TNM.	116

LISTA DE SÍMBOLOS

Variáveis

α	Conjunto de variáveis internas
β	Força termodinâmica conjugada às variáveis internas
β_d	Força termodinâmica dissipativa
σ	Tensor tensão de Cauchy
ε	Deformação logarítmica
\mathbf{X}	Vetor posição na configuração de referência
\mathbf{x}	Vetor posição na configuração de referência
λ	Multiplicador de Lagrange
\mathbb{E}	Tensor derivada exponencial
\mathbb{I}_{sym}	Tensor identidade de quarta ordem simétrico
\mathbf{b}	Tensor esquerdo de Cauchy-Green
\mathbf{C}	Tensor direito de Cauchy-Green
\mathbf{D}	Tensor taxa de deformação
\mathbf{d}	Taxa de deformação
\mathbf{E}	Deformação de Green-Lagrange
\mathbf{F}	Gradiente de deformação
\mathbf{g}	Gradiente de temperatura
\mathbf{I}	Tensor identidade de segunda ordem
\mathbf{l}	Gradiente de velocidade
\mathbf{M}	Tensor tensão de Mandel
\mathbf{N}	Direção do fluxo inelástico
\mathbf{N}	Tensor direção do fluxo inelástico
\mathbf{P}	Primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff

\mathbf{P}_c	Tensor tensão conservativa de Piola-Kirchhoff
\mathbf{P}_d	Tensor tensão dissipativa de Piola-Kirchhoff
\mathbf{q}	Fluxo de Calor
\mathbf{R}^3	Espaço Euclidiano Tridimensional
\mathbf{u}	Deslocamento
\mathbf{W}	Tensor spin
\mathcal{D}	Dissipação
\mathcal{D}_{mec}	Parcela puramente mecânica da dissipação
\mathcal{D}_{term}	Parcela puramente térmica da dissipação
\mathcal{E}	Variáveis de estado
\mathcal{L}	Funcional Lagrangiano
\mathcal{P}	Potencial em taxas
\mathcal{P}_{inc}	Potencial incremental
Ω	Domínio de um corpo material
Ψ	Energia livre de Helmholtz por unidade de volume
ψ	Energia livre de Helmholtz por unidade de massa
θ	Temperatura
Υ	Potencial de dissipação total
ϑ	Parâmetro de integração do método de Euler
H	Potencial de Hencky
J	Jacobiano volumétrico
L	Potencial de Gent
P	Conjunto de pontos do domínio
r	Deformação viscosa acumulada
S	Superfície de um corpo material
s	Entropia
t	Tempo

T_g	Temperatura de fusão cristalina
T_g	Temperatura de transição vítrea
U	Potencial Volumétrico
V	Domínio de um corpo material

Operadores

:	Contração dupla
∇	Gradiente
\boxtimes	Produto quadrado
Δ	Incremento
$(\dot{\cdot})$	Derivada temporal (taxa)
$(\cdot)^{-1}$	Inversa
$(\cdot)^T$	Transposta
$(\overset{\circ}{\cdot})$	Aproximação discreta da derivada temporal
arg	Argumento
det(\cdot)	Determinante
d	Derivada total
inf	Ínfimo
skew(\cdot)	Parte antisimétrica
stat	Estacionário
sym(\cdot)	Parte simétrica
tr(\cdot)	Traço
∂	Derivada parcial
\otimes	Produto bola
EXP	Exponencial tensorial

Sobrescritos e Subscritos

$(\cdot)^*$	Referente ao estado efetivo
-------------	-----------------------------

$(\cdot)^e$	Referente à parte elástica
$(\cdot)^{\text{inc}}$	Referente à formulação incremental
$(\cdot)^i$	Referente à parte inelastica
$(\cdot)^{\text{pre}}$	Referente ao estado preditor
$(\cdot)_{n+1}$	Variável no incremento atual
$(\cdot)_n$	Variável no incremento convergido
$(\cdot)_c$	Referente à parte conservativa
$(\cdot)_d$	Referente à parte dissipativa

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	31
1.1	Contexto e motivação	31
1.2	Proposta	32
1.3	Fundo teórico matemático e notação	32
1.4	Organização do Documento	33
2	Fundamentação teórica - materiais poliméricos	35
2.1	Introdução ao PEEK	35
2.1.1	Aplicações	36
2.1.2	Estrutura molecular do PEEK	42
2.1.3	Histórico e nomenclatura	42
2.1.4	Comportamento mecânico	43
2.1.5	Dados da literatura	46
3	Fundamentação teórica para modelagem constitutiva	53
3.1	Cinemática	53
3.1.1	Fundamentos e definições	53
3.2	Fundamentos e hipóteses termodinâmicas	56
3.2.1	Potenciais de dissipação	61
3.2.2	Princípio variacional	62
3.2.3	O princípio variacional incremental	63
4	Desenvolvimento do modelo proposto por Farias	65
4.1	Hipóteses cinemáticas	65
4.2	Definições termodinâmicas	66
4.3	Representação reológica	67
4.4	Considerações quanto ao potencial de dissipação	68
4.5	Solução via atualização variacional incremental	68
4.5.1	Particularização do princípio variacional para o modelo proposto	69
4.5.2	Particularização do princípio variacional incremental	71
4.5.3	Condição de otimalidade	71
4.5.4	O estado preditor	72
4.5.5	Equação da direção do fluxo inelástico	73
4.5.6	Equação da amplitude do fluxo inelástico	74
4.5.7	Método de Newton para solução de \dot{r}	74

4.5.8	Atualização do estado de tensão no instante t^{n+1}	75
5	Desenvolvimento teórico do modelo proposto por Bergström	76
5.1	Representação reológica	76
5.2	Cinemática do <i>Three Network Model</i>	77
5.3	Variáveis internas e sua evolução	78
5.4	Tensão para o <i>Three Network Model</i>	79
5.5	Proposta de solução incremental	81
6	Desenvolvimento experimental	83
6.1	Materiais	83
6.2	Especificações de ensaio	84
6.2.1	Metodologia de ensaio	84
6.2.2	Dispositivo de ensaio	85
6.2.3	Corpo de prova	88
6.2.4	Lubrificação	91
6.2.5	Parâmetros de ensaio	92
6.3	Medição	93
6.4	Pós processamento	99
6.4.1	Interpolação	99
6.4.2	Calculo de área e volume	100
6.4.3	Verificação da técnica de cálculo de volume . . .	103
6.4.4	Metodologia de ajuste de parâmetros para os modelos propostos	107
7	Resultados	109
7.1	Resultados experimentais	109
7.2	Resultados do ajuste de parâmetros	113
8	Conclusões	116
8.1	Atividades realizadas	116
8.2	Comportamento mecânico - tensão e deformação	117
8.3	Comportamento mecânico - variação volumétrica	118
8.4	Comportamento do modelo e ajuste de parâmetros . . .	119
	APÊNDICES	126
A	Condições de otimalidade do problema incremental variacional	126
A.1	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}}$	126
A.1.1	Avaliação de $\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{N}}$	126

A.1.2	Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N}]$	127
A.1.3	Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_N (\mathbf{N} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2})]$	128
A.1.4	Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N}]$	128
A.1.5	Resultado para $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}}$	128
A.2	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{r}}$	129
A.3	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{\text{tr}}}$	130
A.4	Cômputo de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_N}$	131
A.5	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}}$	131
B	Solução dos multiplicadores de Lagrange	131
B.1	Solução de $\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$	132
B.2	Solução de λ_{tr}	132
B.3	Solução de λ_N	133
B.4	Equação da direção do fluxo	133
C	Avaliação de $\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}$	134
C.1	Avaliação de $\frac{\partial H(\mathbf{F}^{n+1}, \hat{r})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}$	135
C.1.1	Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}}$	135
C.1.2	Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}}$	136
C.1.3	Avaliação de $\frac{\partial (\mathbf{X} : \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}}$	136
C.1.4	Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i}$	136
C.1.5	Avaliação de $\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e}$	137
C.1.6	Resultado para $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}_i}$	139
D	Propriedade anuladora da derivada do tensor exponencial \mathbb{E}	140
E	Proposições de mecânica do contínuo - potencial de Hencky	143
F	Desenvolvimento do problema incremental considerando o potencial de Hencky e o mapeamento exponencial	153
F.1	Desenvolvimento da expressão para direção do fluxo inelástico	153
F.2	Desenvolvimento da equação da amplitude do fluxo inelástico	155
F.2.1	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}}$	156
F.2.2	Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}}$	156

F.2.3	Resultado considerando $\alpha = 0$	156
G	Derivação dos potenciais energéticos	157
G.1	Cálculos preliminares	157
G.1.1	Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I})$	157
G.1.2	Cômputo de $\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}}$	158
G.2	Cômputo de $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{F}}$	159
G.3	Cômputo de $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}}$	160
G.4	Cômputo de $\frac{\partial U}{\partial \mathbf{F}}$	162
H	Resultados experimentais	163
H.1	Deformação por tempo	164
H.2	Razão de volume por deformação	167
H.3	Tensão por deformação	170

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contexto e motivação

A necessidade de alternativas menos agressivas ao corpo humano no que se refere ao uso de próteses e implantes tem estimulado o desenvolvimento de novas alternativas aos materiais de engenharia normalmente utilizados na área médica. Polímeros biocompatíveis vem sendo cada vez mais empregados em aplicações de alta performance, como por exemplo na medicina regenerativa, em particular na fabricação de componentes de próteses mecânicas e implantes. Isso se deve, em grande parte, ao fato de que é possível obter materiais poliméricos cuja rigidez é similar à de tecidos duros, como ossos e cartilagens, em contraste com seus equivalentes metálicos que apresentam rigidez excessiva em relação aos tecidos biológicos. Implantes metálicos frequentemente absorvem grande parte dos carregamentos mecânicos e ocasionam o fenômeno de *stress-shielding* (Skinner, 1988), favorecendo a reabsorção e perda de massa óssea em torno do implante. Nesse contexto, o poli(eter eter cetona), referido comumente como PEEK, vêm sendo cada vez mais utilizado na fabricação de implantes ortopédicos, traumatológicos e espinhais. O PEEK é um polímero termoplástico membro da família dos poli(aryl eter cetonas) (PAEKs) cuja biocompatibilidade foi verificada em diversos trabalhos, como nos de Williams et al. (1987) e Brown et al. (1990), tem um módulo de elasticidade variando na faixa de 3 a 4 GPa, mas é possível preparar compostos reforçados com por exemplo fibra de carbono, de comprimento e orientação variando de acordo com a necessidade, o que permite obter rigidez similar à materiais como osso cortical (18 GPa) e ligas de titânio (110 GPa) (Kurtz, 2012).

Este trabalho tem como objetivo dar continuidade à um projeto de estudo do comportamento mecânico de polímeros com aplicações em biomecânica, fruto da colaboração entre o Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE) da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) com o Laboratório de Biomecânica do Hospital Universitário da UFSC (LEBm/HU). Em particular, deseja-se complementar o trabalho de tese de doutorado do aluno Jan Michel de Farias, do GRANTE, levantando dados experimentais que possam ser utilizados para testar e calibrar o modelo constitutivo proposto no seu trabalho. Por outro lado, o resultado de um estudo do comportamento mecânico com PEEK disponível comercialmente no Brasil, e da sua adequação à modelos considerados o estado da arte na modelagem de polímeros poderá

contribuir para o desenvolvimento nacional de novas técnicas e procedimentos cirúrgicos na área biomédica, assim como para a criação de implantes com melhor custo-benefício, facilitando projeto de produtos mais duráveis e confiáveis, e diminuindo o custo de tratamentos médicos em hospitais.

1.2 Proposta

Nesse trabalho, propõe-se realizar uma série de testes mecânicos com um polímero denominado poli(éter éter cetona), ou PEEK. Em particular, deseja-se estudar a resposta do material quando sob compressão uniaxial, em diferentes taxas de deformação, em temperatura ambiente, realizando medições de força aplicada e de deslocamento axial e longitudinal. Desta forma, como primeira etapa de trabalho, é desenvolvida uma metodologia de ensaios e de medições experimentais visando obter dados do comportamento mecânico do material.

Como segunda etapa do trabalho, é feita a implementação computacional do modelo constitutivo proposto por Farias et al. (2017) considerando caso de deformação homogênea. Os dados experimentais obtidos são utilizados para calibrar os parâmetros do modelo, por meio de um algoritmo de parâmetros, para prever o comportamento do PEEK sob as condições de ensaio propostas. Para avaliar a capacidade do modelo de Farias em prever o comportamento do PEEK, os resultados obtidos são comparados com os obtidos a partir de um processo de ajuste de parâmetros de um modelo constitutivo já utilizado para prever o comportamento mecânico do PEEK, o *Three Network Model*, proposto por Bergström (2015). As atividades de implementação e de ajuste de parâmetros para o modelo de Bergström (2015) também são incluídas nesta etapa.

1.3 Fundo teórico matemático e notação

Apesar de uma breve revisão de alguns dos conceitos principais ser apresentada neste trabalho, de forma a tornar o documento relativamente auto-suficiente, assume-se que leitor tenha familiaridade com conceitos básicos de mecânica do contínuo (Neto et al., 2009; Jog, 2015; Holzapfel, 2000; Gurtin et al., 2010). Devido à grande variedade de notações existentes em diferentes obras da literatura para operações e álgebra tensorial, propõe-se neste trabalho seguir unicamente a notação proposta por C. S. Jog na obra *Foundations and Applications of*

Mechanics Volume I: Continuum mechanics. Dessa forma, caso ocorra quaisquer dúvidas quanto à natureza das operações matemáticas realizadas nesse trabalho, o leitor é convidado a verificar as definições e a notação do trabalho de Jog (2015).

1.4 Organização do Documento

A seguir, é feita uma descrição das próximas seções na ordem em que são postas nesse documento, e um resumo do conteúdo e finalidade de cada seção é apresentado.

Capítulo 2 - Fundamentação teórica: materiais poliméricos. Nesta seção, primeiramente é feita uma revisão de aspectos essenciais para o entendimento do comportamento mecânico dos materiais poliméricos. Em seguida, é dado um enfoque ao PEEK, apresentando suas características moleculares e termomecânicas. Por fim, é feita uma revisão dos principais trabalhos encontrados relacionados à avaliação do comportamento mecânico deste material.

Capítulo 3 - Fundamentação teórica: modelagem constitutiva. Nessa seção, são apresentados de forma breve alguns conceitos fundamentais de mecânica do contínuo e da termodinâmica de variáveis internas, visando formar um embasamento teórico para a apresentação dos modelos constitutivos utilizados nesse trabalho.

Capítulo 4 - Desenvolvimento teórico do modelo proposto por Farias. Nessa seção a formulação do modelo constitutivo proposto por Farias et al. (2017) é apresentada em detalhes. A seguir, o método de atualização variacional incremental é empregado para obtenção de um algoritmo de solução para o problema constitutivo.

Capítulo 5 - Desenvolvimento teórico do modelo proposto por Bergström. Nessa seção a formulação do modelo constitutivo o “*Three Network Model*”, proposto por Bergström (2015) é apresentada. Não sendo este modelo o objeto de estudo desse trabalho, mas sim uma referência para a comparação com outro modelo, os conceitos são apresentados de forma breve e resumida, sem uma discussão mais profunda sobre a origem das hipóteses e das equações postas. A seguir, o método

de integração de Euler é empregado para obtenção de um algoritmo de solução para o problema constitutivo.

Capítulo 6 - Desenvolvimento experimental. Pretende-se aqui apresentar nessa seção todos os aspectos o procedimento utilizado para realização de testes mecânicos com o PEEK, começando com a obtenção do material para ensaio, motivação da escolha da geometria do corpo de prova escolhido, e apresentação e justificativa para os dispositivos de ensaio e medição empregados. Finalmente, é feita a apresentação das técnicas de medição utilizadas, assim como os procedimentos de pós processamento dos dados obtidos nos ensaios mecânicos.

Capítulo 7 - Resultados. Essa seção é dividida em duas partes. Na primeira parte, os resultados obtidos nos ensaios experimentais são apresentados. Dois tipos de resultados são apresentados: primeiramente os resultados diretos das medições de força e deslocamento, na forma de curvas que mostram sua evolução com o tempo e de imagens obtidas durante o ensaio. A seguir, resultados de medição indireta, como curvas de tensão por deformação real, e variação volumétrica são apresentados. Finalmente, é feita uma discussão dos resultados, incluindo análise das capacidades dos dispositivos de medição utilizados, validade dos resultados e principalmente a análise do comportamento mecânico observado.

Na segunda parte, o procedimento de ajuste de parâmetros para os dois modelos constitutivos propostos é apresentado, e a seguir é feita uma comparação das capacidades preditivas observadas, com ênfase na análise dos resultados obtidos pelo modelo proposto por Farias.

Capítulo 8 - Conclusões. Um resumo dos principais resultados obtidos no desenvolvimento do trabalho de dissertação assim como sugestões para trabalhos futuros são apresentados. É feito também um levantamento das atividades realizadas e neste trabalho.

Apêndices. Os apêndices A até G mostram, de forma detalhada, aspectos técnicos da formulação do modelo de Farias, como deduções, provas de proposições feitas e avaliação de derivadas tensoriais.

2 Fundamentação teórica - materiais poliméricos

Nesta seção, descreve-se brevemente diversos aspectos essenciais para o entendimento do comportamento dos materiais poliméricos. Em essência, segue-se aqui o textos de Sperling (2006), Halary et al. (2011), Ward e Sweeney (2012), e Callister (2008).

2.1 Introdução ao PEEK

O poli(éter éter cetona), ou PEEK (do inglês *poly(etheretherketone)*), é um polímero semicristalino, cuja estrutura molecular confere estabilidade à altas temperaturas, alta resistência à dano químico e de radiação e desgaste, compatibilidade com diversos agentes de reforço (como por exemplo fibras de vidro e de carbono), rigidez comparável à de diversos metais, e biocompatibilidade, o que o torna um material atrativo em diversas aplicações de alta performance. O PEEK “puro”, sem enchimento, tem uma coloração marrom, e é frequentemente comercializado em formato de barras estrudadas, grãos ou pó (figura 2.1). Quando o PEEK é “carregado” com fibra de carbono, o material resultante tem uma coloração tipicamente preta.

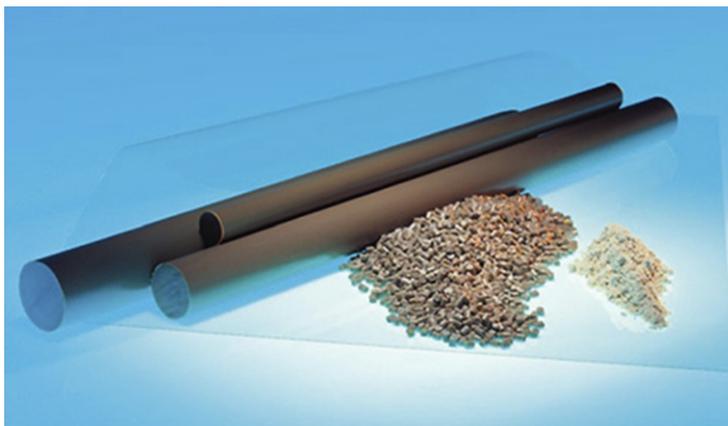


Figura 2.1: PEEK puro, em formato comerciais como em barras, grãos e pó. Imagem obtida do livro *PEEK Biomaterials Handbook Kurtz (2012)*.

O PEEK é um termoplástico, de forma que abaixo da temperatura de transição vítrea, que é de cerca de 143°C , as cadeias poliméricas tem pouca energia térmica disponível para que ocorra ruptura de ligações secundárias e deslizamento de uma cadeia em relação à outra, e o PEEK se comporta como uma estrutura rígida, apesar de nesse estado ainda ser capaz de responder com deformações trativas de até 60% (Kurtz, 2012, pg. 4). Acima da temperatura de transição vítrea, a região amorfa da microestrutura têm maior mobilidade, e macroscopicamente, o material apresenta um comportamento similar ao de uma borracha. Essa fase persiste até cerca de 343°C , a temperatura de fusão cristalina do material onde ocorre a degradação dos cristais. Finalmente, à cerca de 390°C , ocorre a fusão do PEEK (Kurtz, 2012).

2.1.1 Aplicações

O PEEK é considerado um polímero de alta performance, devido ao fato suas propriedades mecânicas, resistência química e térmica serem superiores a maioria dos outros polímeros de engenharia. Devido à sua robustez, o PEEK é usado para fabricar componentes usados em aplicações exigentes, incluindo rolamentos, peças de pistão, bombas, colunas de cromatografia líquida de alta eficiência, válvulas de compressores e isolamento de cabos elétricos. É um dos poucos plásticos compatíveis com aplicações de ultra-alto vácuo. Áreas de aplicação incluem:

- Setor automotivo: A indústria automotiva se desenvolve constantemente no sentido de aumentar o nível de desempenho e minimizar o peso dos componentes dos motores. Portanto, existe uma tendência no sentido de utilizar materiais poliméricos para substituir partes do motor que são tradicionalmente construídas a partir de metais. O PEEK, com e sem preenchimento, é o principal termoplástico de alto desempenho para aplicações automotivas: arruelas de pressão e vedações para transmissões de potência, braços do rotor, engrenagens e tubos são alguns dos componentes típicos em que se faz uso do PEEK, principalmente devido a capacidade de operar em altas temperaturas (tipicamente acima de 120° em aplicações da indústria automobilística) mantendo boa performance mecânica, excelente resistência química contra fluidos automotivos, capacidade de acompanhar a expansão térmica de metais, resistência à fadiga, e baixo ruído quando utilizado como matéria prima em engrenagens (2.2), em

comparação à engrenagens de metal. Além disso, o PEEK preenchido com carbono fornece propriedades excepcionais de atrito e desgaste em uma ampla faixa de temperatura.



Figura 2.2: Engrenagem fabricada a partir de PEEK, com anel metálico interno. Figura retirada do site <https://www.victrex.com/en/automotive>.

- Setor aeroespacial: Na indústria aeroespacial, o peso dos componentes é um fator ainda mais crítico, visto que custos de combustível representam mais de 35% do custo de companhias aéreas. O alto custo, juntamente com os combustíveis fósseis sendo um recurso natural limitado, colocam pressão adicional sobre os fabricantes de aeronaves para oferecer novos níveis de eficiência com relação ao uso de combustível, e a substituição de partes metálicas representa um aspecto crítico. O PEEK vem sendo usado como matéria prima para fabricação de componentes menores como braçadeiras, espaçadores, porcas, suportes estruturais, filmes para isolamento acústica térmica, sistemas de tubulação, fixadores e conectores (2.3).
- Energia: O PEEK providencia soluções no setor de energia, em particular óleo e gás, fornecendo desempenho estável em temperaturas que variam de -196°C (até -321°F) até 260°C (500°F) com a capacidade de suportar pressões de até 207 MPa (30.000



Figura 2.3: Componentes de PEEK utilizados na indústria aeroespacial.
<https://www.victrex.com/en/aerospace>.

psi). Na exploração de reservas não convencionais, as condições de operação para ferramentas de furos estão se tornando mais extremas. Peças feitas em PEEK apresentam durabilidade mesmo quando operam em elementos corrosivos, como hidrocarbonetos, água do mar e gases agressivos. Além da resistência química, o material apresenta excelente à fluência e pressão.

- **Elétrica / Eletrônica:** O polímero PEEK é um termoplástico de alto desempenho cuja combinação única de propriedades pode ser personalizada para atender às crescentes demandas da indústria de eletrônicos. O material tem sido utilizado para substituição de pequenas partes metálicas no setor de telefonia móvel, impressoras à laser e dispositivos de som. Esses componentes são obrigados a ter excelente resistência ao calor, pois uma alta porcentagem de energia elétrica fornecida ao dispositivo eletrônico é dissipada na forma de calor. O PEEK tem uma alta temperatura de fusão e uma temperatura de operação, de até 260 ° C (500 ° F). A resistência a altas temperaturas e resistência mecânica do polímero permite que os componentes suportem solicitações significativas. O PEEK em filme pode ser usado para proporcionar um melhor desempenho acústico.
- **Indústria médica:** A comprovada biocompatibilidade do PEEK (Kurtz e Devine, 2007), a rigidez comparável ao da rigidez do

osso humano, o comportamento radiopaco e as excelentes propriedades mecânicas (resistência ao desgaste, corrosão, fadiga, etc) tornam o PEEK um dos materiais mais bem sucedidos em aplicações na indústria de implantes. Em particular, nas áreas de expertise de desordens na coluna, trauma, ortopedia e odontologia. No tratamento de desordens na coluna, o PEEK é utilizado como matéria prima para dispositivos intersomáticos, hastes de estabilização, placas cervicais e dispositivos de artroplastia espinal (2.4).

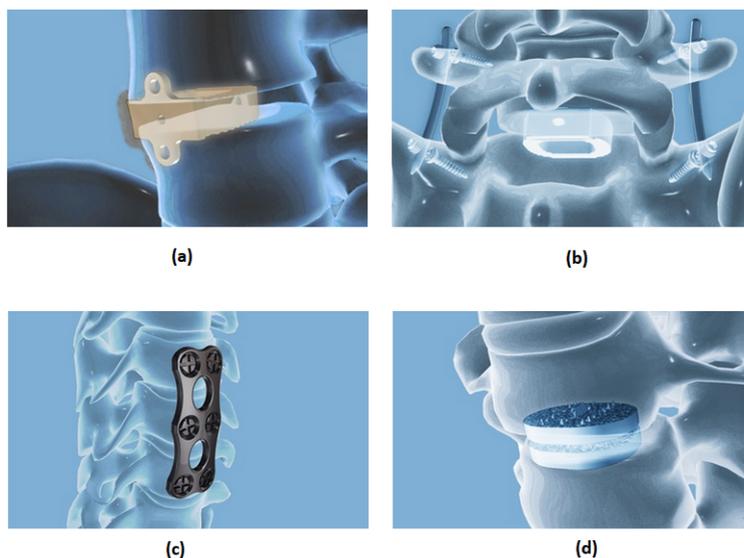


Figura 2.4: Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento de desordens na coluna. (a) Dispositivo intersomático; (b) hastes para estabilização de coluna; (c) placa cervical; (d) Prótese de disco, para artroplastia de articulação espinal. Adaptado de <https://invibio.com/spine>.

Na área de trauma, ou seja, fixação de fraturas, o PEEK é utilizado como matéria prima principalmente para fabricação de placas de fixação de fratura e pregos intramedulares (2.5).

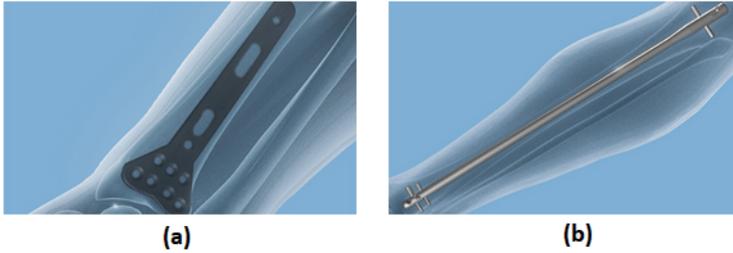


Figura 2.5: Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento de trauma. (a) Placas de fixação, (b) Haste e parafuso intramedular. Adaptado de <https://invivio.com/trauma>

Na área de ortopedia, o PEEK é utilizado como matéria prima principalmente para fabricação de componentes articulares de próteses de artroplastia de quadril e joelho, e na fabricação de âncoras para procedimento de artroscopia (2.6).

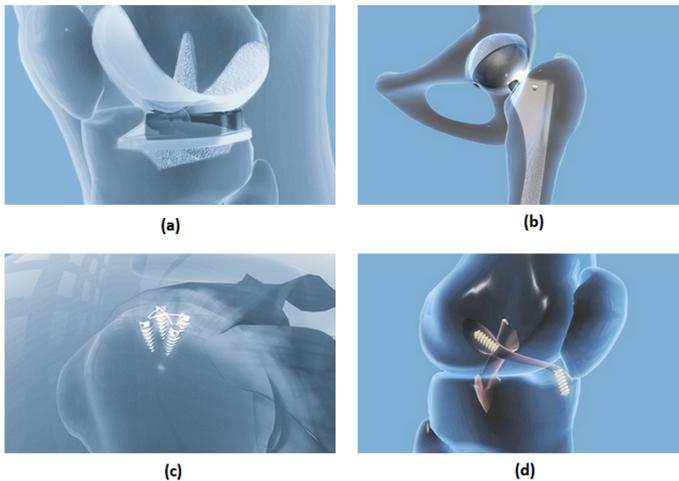


Figura 2.6: Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento na área de ortopedia. (a) Inserto articular de prótese de joelho; (b) Inserto articular de prótese de quadril; (c) âncora em artroscopia de ombro; (d) e de joelho. Adaptado de <https://invivio.com/ortho>

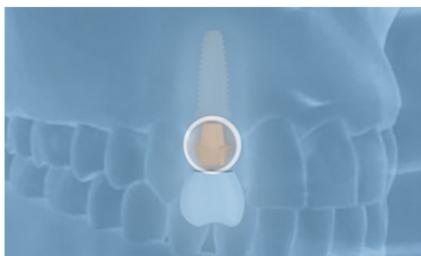
Na área de odontologia, o PEEK é utilizado como matéria prima principalmente para fabricação de implantes dentários, pilares intermediários e tampas de cicatrização. (2.6).



(a)



(b)



(c)

Figura 2.7: Exemplos de dispositivos utilizados para tratamento na área de odontologia. (a) Implante dentário; (b) Tampa de cicatrização; (c) pilar intermediário. Adaptado de <https://invivio.com/dental>

2.1.2 Estrutura molecular do PEEK

Uma macromolécula de PEEK consiste de uma cadeia aromática interconectada pelos grupos funcionais cetona ($-\text{CO}-$) e éter ($-\text{O}-$) formando uma unidade repetida como ilustrado na figura 2.8. O resultado é uma macromolécula na qual as unidades repetidas estão ligadas entre si pelas suas extremidades em uma única cadeia, o que o define como pertencendo à categoria de homopolímeros lineares, não havendo ramificações ou ligações cruzadas entre as cadeias (Kurtz, 2012).

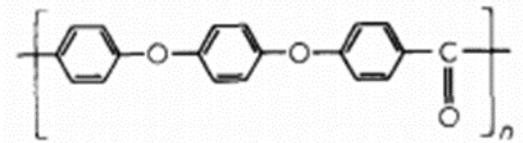


Figura 2.8: Unidade repetida do PEEK. Adaptado de (Kurtz, 2012)

A macromolécula é relativamente rígida devido aos anéis aromáticos (benzeno) na unidade repetida. Apesar disso, a molécula é livre para rotacionar axialmente em torno das conexões cetona ($-\text{CO}-$) e éter ($-\text{O}-$), e quando é resfriada a partir do estado fundido, a cadeia pode rotacionar em torno de si mesma formando estruturas dobradas denominadas cristais. Esses cristais estão inseridos em uma matriz amorfa de macromoléculas (CITAR), e devido à essa estrutura bifásica o PEEK se enquadra na categoria de polímeros semicristalinos. A proporção de cada uma dessas fases na microestrutura depende da forma em que foi processado, sendo que em implantes a fase cristalina constitui tipicamente de 30% a 35% do material (Green e Schlegel, 2001).

2.1.3 Histórico e nomenclatura

O processo de sintetização do PEEK foi patenteado em 1977 pela ICI (*Imperial Chemical Industries* - Reino Unido), e o material foi disponibilizado comercialmente sob o nome Victrex PEEKTM em 1987, e uma nomenclatura foi adotada para diferenciar as diferentes categorias (*grades*) de PEEK, de acordo com o peso molecular e a viscosidade no ponto de fusão cristalina. A Victrex foi vendida pela ICI em 1993, e em

1998 a Victrex lançou o PEEK-OPTIMA™, uma categoria de PEEK destinada à aplicações médicas. Apesar de atualmente o PEEK ser comercializado por outros fabricantes, como exemplo DuPont e Solvay, como verificado pelo autor, a grande maioria dos artigos científicos que lidam com o estudo do comportamento mecânico do PEEK trabalham com materiais das categorias Victrex-PEEK™ e PEEK-OPTIMA™, e portanto é importante diferenciar essas categorias quanto às suas diferentes propriedades. A tabela 1 mostra os diferentes *grades* de PEEK juntamente com os valores de peso molecular e a viscosidade associados.

Propriedade	Grade Padrão	Medium-Flow Grade	Easy-Flow Grade
Nomenclatura Victrex (Tradicional)	450	381	150
Nomenclatura Invibio (Contemporânea)	OPTIMA LT1	OPTIMA LT2	OPTIMA LT3
Índice de fluxo de material fundido	3.4	4.5	36.4
Peso molecular (M_n)	115,000	108,000	83,000

Tabela 1: Nomenclatura e propriedades das principais categorias de PEEK disponíveis comercialmente.

O *grade* Padrão é o mais comumente utilizado em aplicações em geral, já o *medium-flow* e o *high-flow* grades com propriedades otimizadas para processos de fabricação como por exemplo *tubing*, e a injeção de peças com espessuras muito finas, que necessitam de um maior nível de escoabilidade do material. Essas categorias também são designadas como PF (pó fino), P (pó) e G (granulado), de forma que por exemplo, PEEK 450G é um material de *grade padrão* comercializado em forma de grãos.

2.1.4 Comportamento mecânico

O PEEK apresenta, em temperaturas abaixo da temperatura transição vítrea, um comportamento inelástico/elastoplástico, típico de polímeros semicristalinos. Considerando a resposta um material inelástico/elastoplástico em teste de compressão uniaxial, é possível distinguir três estágios em uma curva de tensão por deformação, como mostrado na figura (2.9). Esses três estágios são descritos a seguir:

1. Estágio no qual o material se comporta de forma aproximadamente elástica linear. Um comportamento elástico linear é ca-

racterizado por uma relação de dependência linear entre tensão e deformação, e pela ausência de efeitos dissipativos¹ durante um ciclo de carregamento/descarregamento. Um comportamento elástico linear pode ser descrito pela lei de Hooke, onde a tensão e a deformação são relacionadas por uma constante de proporcionalidade, denominada módulo de Young.

2. Estágio no qual o material se comporta de forma elástica não linear. Nessa região a dependência entre tensão e deformação não é linear, e efeitos dissipativos como viscoelasticidade podem se manifestar. Deformações residuais após o descarregamento são desprezíveis, de forma que o material tende a recuperar o seu estado inicial após um ciclo de carregamento. Ou seja, nesse estágio efeitos de plasticidade são aproximadamente desprezíveis.
3. Estágio no qual o material se comporta de forma plástica. Um comportamento plástico é não linear, e é caracterizado pela presença de deformações permanentes do material após um ciclo de carregamento.

¹No caso de ausência de efeitos dissipativos, todo e qualquer processo que ocorre no material é reversível, e o estado do material em um instante qualquer pode ser caracterizado pela deformação e temperatura do material nesse instante. Efeitos dissipativos serão discutidos em mais detalhe na seção (3.2).

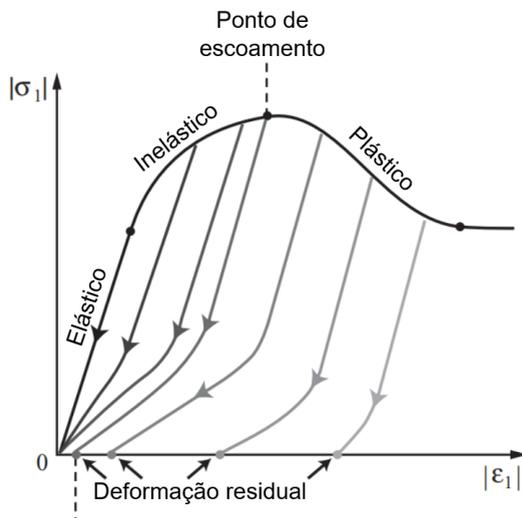


Figura 2.9: Diferentes estágios de uma curva de tensão por deformação, típica de um material polimérico semicristalino submetido à compressão abaixo da temperatura de transição vítrea. Figura de autoria própria.

Note que, em geral, não é trivial identificar o ponto de início de escoamento, onde termina o segundo estágio e começa o terceiro. Não obstante, é prática comum na literatura identificar o valor máximo de tensão da curva (na região onde ocorre queda drástica na rigidez do material) como uma aproximação do ponto de início de escoamento, como mostrado na figura (2.9). Como exemplos, citamos os trabalhos de Mulliken e Boyce (2006), Lu e Ravi-Chandar (1999), Miehe et al. (2009) e *El-Qoubaa e Othman (2016, 2015a)*. É importante ressaltar que, apesar de ser uma medida útil da capacidade de resistência do objeto sendo testado, esse valor de tensão de escoamento não é uma propriedade intrínseca do material, e sim do corpo, pois como resalta Lu e Ravi-Chandar (1999), há influências não só do material como da geometria, e fatores como presença de defeitos e vazios podem ter influência nesse valor de tensão. Dessa forma, o termo “tensão de escoamento”, ao ser utilizado neste trabalho desse ponto em diante, se refere a esse valor aproximado, e não ao ponto exato de início de escoamento, a não ser que mencionado o contrário.

É importante ressaltar que essa tendência de comportamento descrita na figura (2.9) não é absoluta, e que dependendo das condições em que é testado, o PEEK pode apresentar um comportamento completamente diferente. Como será mostrado a seguir, em temperaturas muito altas o PEEK pode se comportar como um elastômero (como mostra a curva C da figura 2.10) e em altas taxas de deformação o PEEK pode se comportar como um polímero frágil (curva A da figura 2.10). De fato, como enfatizado por Ward e Sweeney (2012), não só o PEEK mas os polímeros semicristalinos em geral podem se comportar tanto de forma frágil, dúctil ou como um elastômero, dependendo das condições em que é testado. Essa mudança de comportamento frente à diferentes condições torna difícil classificar materiais poliméricos de acordo com o seu comportamento mecânico.

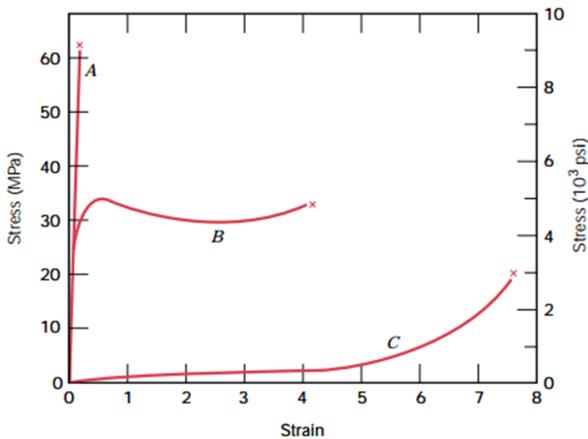


Figura 2.10: Curvas típicas de um elastômero (C), plástico (B) e polímero frágil (A). Adaptado de Callister (2008)

2.1.5 Dados da literatura

Alguns dos trabalhos da literatura identificam o pico de tensão entre a primeira e a segunda região como sendo o valor de tensão de escoamento do material. Apesar disso, o PEEK não apresenta um ponto claro de início de escoamento, e é observado que antes de atingir esse

valor máximo, já ocorre deformação plástica do material (El-Qoubaa e Othman, 2016). Dessa forma, no caso do PEEK, o termo tensão de escoamento deve ser entendido como o valor de tensão de pico, que ocorre quando há perda de rigidez do material após o estágio em que se comporta de forma aproximadamente linear (estágio 1).

Com relação aos efeitos da temperatura no comportamento mecânico do PEEK, Hamdan e Swallowe (1996), estudando o caso de compressão, observou para o PEEK *grade* 150G que até a temperatura de transição vítrea ($T_G = 143^\circ\text{C}$), a capacidade de resistir carga é inversamente proporcional à temperatura em que ocorre o ensaio. Para baixas taxas de deformação (0.001/s) essa tendência não muda, porém para taxas elevadas (maior que 7/s) o efeito do aumento de temperatura é invertido acima de T_G até 200°C , de modo que ocorre um aumento da capacidade de suportar carga.

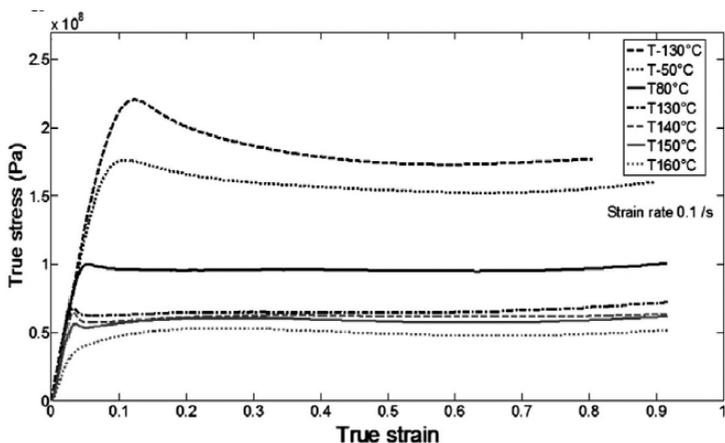


Figura 2.11: Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob compressão à uma taxa de $10^{-1}/\text{s}$. Obtido por El-Qoubaa *et al* El-Qoubaa e Othman (2016).

O autor atribuiu esse efeito ao aumento do grau de cristalinidade que ocorre acima de T_G . Rae et al. (2007) e El-Qoubaa e Othman (2016) observaram, para o PEEK 450G, uma diminuição da capacidade do material de resistir carga, tanto em tração quanto compressão, com o aumento da temperatura, como mostram as figuras 2.11, 2.12 e

2.13. Como o estudo não levou em analisou condições de ensaio com temperatura acima da T_G em altas taxas de deformação, o efeito de aumento de resistência em altas temperaturas não foi verificado.

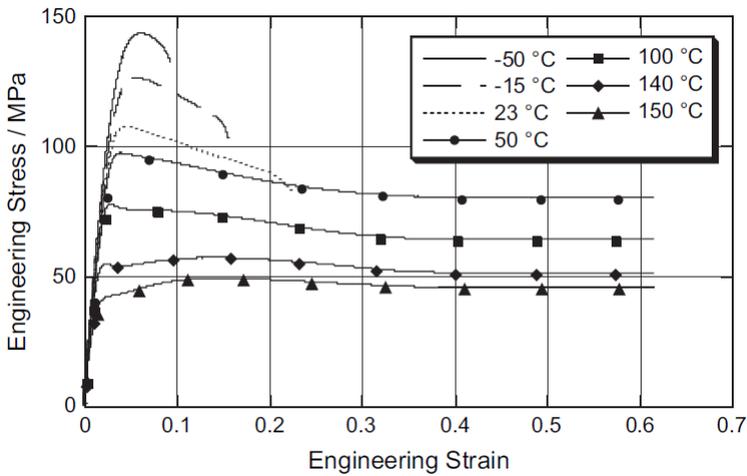


Figura 2.12: Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob tração à uma taxa de 10^{-3} /s. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).

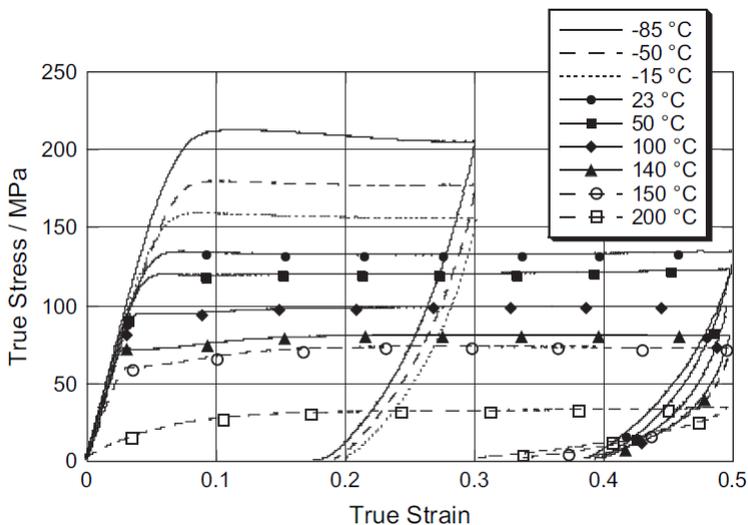


Figura 2.13: Comportamento do PEEK 450G para várias temperaturas, sob compressão à uma taxa de 10^{-3} /s. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).

A influência da taxa de deformação no comportamento mecânico do PEEK também é bastante relevante: os valores máximos de tensão aumentam de forma proporcional à taxa, e esse comportamento foi observado para diferentes *grades* de PEEK, tanto em tração quanto em compressão, por vários autores (Walley e Field, 1994) (Hamdan e Swallowe, 1996) (Mélé e Albérola, 1996) (Rae et al., 2007) (Berer et al., 2014) (El-Qoubaa e Othman, 2015a) (El-Qoubaa e Othman, 2015b) (El-Qoubaa e Othman, 2016). No estágio 2 em particular, o comportamento é variado:

- Walley e Field (1994) observaram, para PEEK de *grade* não especificado sob compressão uniaxial, que após atingir um limite superior pode ocorrer tanto um efeito de endurecimento quanto de amolecimento, e o mesmo comportamento foi observado por Hamdan e Swallowe (1996) para o PEEK *grade* 150G (figura 2.14).

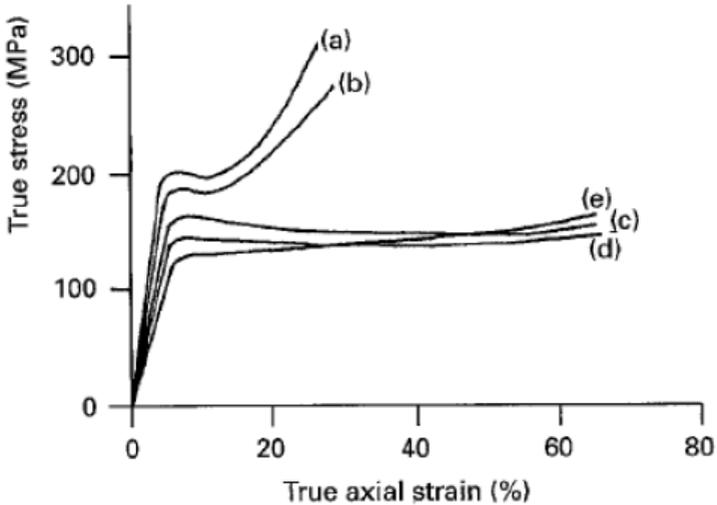


Figura 2.14: Comportamento do PEEK 150G sob compressão em taxas de (a) 2000/s, (b) 1000/s, (c) 500/s, (d) 7/s, (e) 0.001/s. Obtido do trabalho de Hamdan e Swallowe (1996).

- Rae et al. (2007) verificou, para PEEK 450G sob compressão uniaxial, que em alguns casos dependendo da taxa de deformação imposta, a tensão se mantém praticamente constante no estágio 2. Em outros casos, o efeito de *strain softening* foi observado.

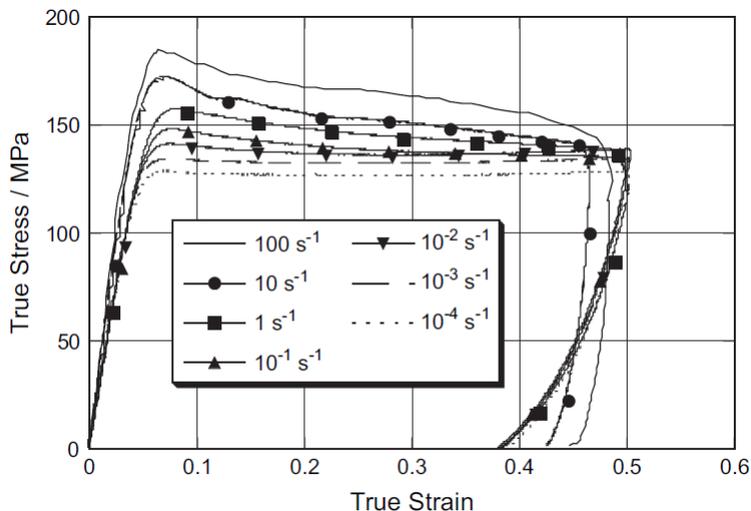


Figura 2.15: Comportamento do PEEK 450G para várias taxas de deformações, sob compressão em temperatura ambiente. Obtido do trabalho de Rae et al. (2007).

- *El-Qoubaa e Othman (2015a)* notam, para PEEK 450G sob compressão, a mesma tendência: um rápido aumento de tensão numa região aproximadamente linear até o escoamento, seguido de uma evolução de deformação com pouca mudança na tensão, como mostrado na figura 2.16. Além disso, em outro trabalho o mesmo autor observou que a taxa de deformação influencia pouco na variação de volume do PEEK, que aumenta em média 3,3, 6,2, e 16,2% quando deformado em 10, 20 e 40% respectivamente (*El-Qoubaa e Othman, 2014*). Já para tração (*El-Qoubaa e Othman, 2015b*), foi observado um rápido aumento de tensão numa região aproximadamente linear, seguido de *strain hardening* (figura 2.17).

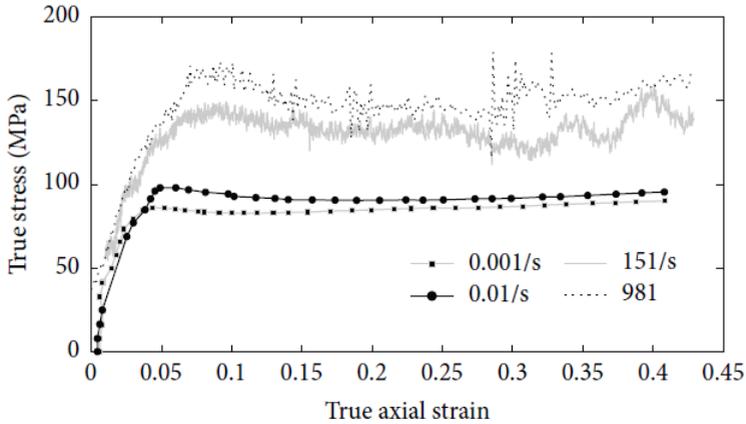


Figura 2.16: Comportamento do PEEK 450G para várias taxas, sob compressão em temperatura ambiente. Obtido por *El-Qoubaa e Othman (2015a)*.

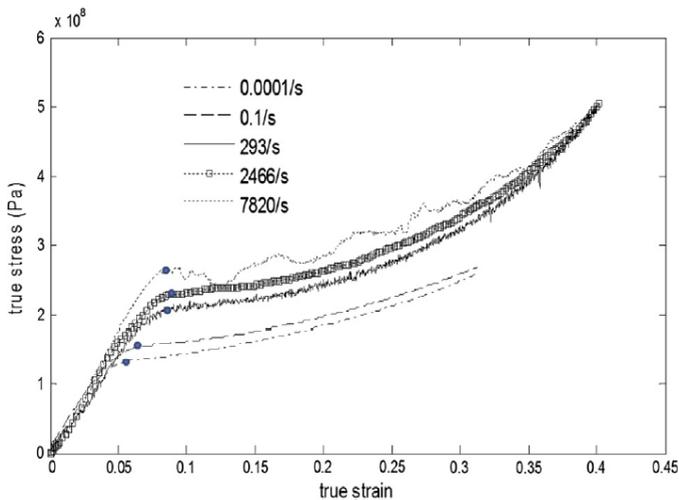


Figura 2.17: Comportamento do PEEK 450G para várias taxas, sob tração em temperatura ambiente. Obtido por *El-Qoubaa e Othman (2015b)*

3 Fundamentação teórica para modelagem constitutiva

Nessa seção, pretende-se apresentar os principais conceitos e hipóteses necessárias para a proposição de um modelo constitutivo que será utilizado para modelar o comportamento mecânico do PEEK.

3.1 Cinemática

3.1.1 Fundamentos e definições

Consideremos um corpo sólido qualquer, definido por um conjunto contínuo de pontos P ocupando um domínio V delimitado por uma superfície S , dentro de um espaço euclidiano tridimensional \mathbb{R}^3 . Esse corpo sólido pode ser descrito na configuração de referência - também chamada de configuração Lagrangiana - que é definida pela posição \mathbf{X} do conjunto de pontos $P_0 \in V_0$ em um instante de tempo $t = t_0$, i.e.,

$$\mathbf{X} = X_J \mathbf{E}_J, \quad J = 1, 2, 3 \quad (3.1)$$

em termos de uma base cartesiana $\{\mathbf{E}\}_J$, $J = 1, 2, 3$, definida pelas operações

$$\mathbf{E}_J \cdot \mathbf{E}_J = \delta_{IJ} \quad \text{e} \quad \mathbf{E}_I \times \mathbf{E}_J = \epsilon_{IJK} \mathbf{E}_K \quad (3.2)$$

onde o símbolo δ (delta de Kronecker) e o símbolo ϵ são definidos por:

$$\delta_{IJ} = \begin{cases} 0, & \text{se } I \neq J \\ 1, & \text{se } I = J \end{cases} \quad \epsilon_{IJK} = \begin{cases} 0, & \text{se dois índices são iguais} \\ 1, & \text{para } \epsilon_{123}, \epsilon_{231}, \epsilon_{312} \\ -1, & \text{para } \epsilon_{132}, \epsilon_{213}, \epsilon_{321} \end{cases} \quad (3.3)$$

Esse mesmo corpo sólido pode ser descrito na configuração espacial - também chamada de configuração Euleriana -, que é definida pela posição \mathbf{x} de um conjunto contínuo de pontos P_t ocupando um domínio $V_t \in \mathbb{R}^3$ em um instante de tempo t , i.e.,

$$\mathbf{x} = x_j \mathbf{e}_j, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.4)$$

onde $\{\mathbf{e}_j\}$, $j = 1, 2, 3$ são bases cartesianas da configuração espacial.

O deslocamento (do termo inglês *motion*) do corpo V é descrito pelo mapeamento um-a-um dos pontos $P_0 \in V_0$ em V_t . Denotando essa operação de transformação pelo símbolo φ , temos que:

$$\varphi : V_0 \mapsto V_t \quad (3.5)$$

Essa transformação mapeia, em um instante de tempo fixo $t \in \mathbb{R}_+$, um ponto $\mathbf{X} \in V_0$ da configuração de referência para pontos $\mathbf{x} \in V$, ou seja, $\varphi(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}$. Assume-se que essa operação é reversível, ou seja, $\varphi^{-1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{X}$.

Fundamentando-se nesses conceitos, podemos definir:

- O gradiente de deformação \mathbf{F} , como sendo o gradiente de φ em relação à configuração material (operação representada pelo símbolo $\nabla_{\mathbf{X}}$):

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \nabla_{\mathbf{X}}\varphi = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = F_{iJ} \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{E}_J \quad (3.6)$$

- A inversa do gradiente de deformação \mathbf{F} , em relação à configuração espacial (operação representada pelo símbolo $\nabla_{\mathbf{x}}$):

$$\mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x}, t) = \nabla_{\mathbf{x}}\varphi^{-1} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = F_{iJ}^{-1} \mathbf{E}_J \otimes \mathbf{e}_j \quad (3.7)$$

- Decomposição multiplicativa do gradiente de deformação em uma parte isocórica \mathbf{F}_{iso} e uma parte volumétrica \mathbf{F}_{vol} :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{iso} \mathbf{F}_{vol} \quad (3.8)$$

onde

$$\mathbf{F}_{iso} = J^{-1/3} \mathbf{F} \quad (3.9)$$

$$\mathbf{F}_{vol} = J^{1/3} \mathbf{I} \quad (3.10)$$

$$J = \det(\mathbf{F}) \quad (3.11)$$

- Decomposição multiplicativa da parte isocórica do gradiente de deformação em uma parte elástica e uma parte inelástica:

$$\mathbf{F}_{iso} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_i \quad (3.12)$$

Note que \mathbf{F}_e e \mathbf{F}_i são ambos isocóricos por definição.

- Tensor deformação de Cauchy-Green à esquerda

$$\mathbf{b} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T \quad (3.13)$$

- Tensor deformação de Cauchy-Green à esquerda isocórico

$$\mathbf{b}_{iso} = \mathbf{F}_{iso}\mathbf{F}_{iso}^T \quad (3.14)$$

- Tensor deformação de Cauchy-Green à direita

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} \quad (3.15)$$

- Tensor deformação de Cauchy-Green à direita isocorico

$$\mathbf{C}_{iso} = \mathbf{F}_{iso}^T\mathbf{F}_{iso} \quad (3.16)$$

- Tensor de deformação de Cauchy à direita elástico

$$\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T\mathbf{F}_e \quad (3.17)$$

- Deformação logarítmica

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}\ln\mathbf{C} \quad (3.18)$$

- Deformação elástica logarítmica

$$\boldsymbol{\varepsilon}_e = \frac{1}{2}\ln\mathbf{C}_e \quad (3.19)$$

- Gradiente de velocidade

$$\mathbf{l} = \nabla_x \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \nabla_x \mathbf{v} \quad (3.20)$$

- Taxa do gradiente de deformação isocórico

$$\dot{\mathbf{F}}_{iso} = \mathbf{l}\mathbf{F}_{iso} \quad (3.21)$$

- Taxa do gradiente de deformação inelástico

$$\dot{\mathbf{F}}_i = \mathbf{l}_i\mathbf{F}_i \quad (3.22)$$

- Decomposição do gradiente de velocidade inelástico

$$\mathbf{l}_i = \mathbf{D}_i + \mathbf{W}_i \quad (3.23)$$

onde

$$\mathbf{D}_i = \text{sym}(\mathbf{l}_i) \quad (3.24)$$

$$\mathbf{W}_i = \text{skw}(\mathbf{l}_i) \quad (3.25)$$

3.2 Fundamentos e hipóteses termodinâmicas

Nessa subseção, pretende-se expor as definições e fundamentos termodinâmicos necessários para o desenvolvimento teórico desse trabalho. Como ponto de partida, são introduzidas algumas hipóteses iniciais.

Hipótese 3.1: O estado atual de um corpo qualquer pode ser unicamente caracterizado por um conjunto de variáveis denominadas variáveis de estado. Essas variáveis são independentes, ou seja, uma não pode ser descrita em função das outras. Qualquer função que dependa dessas variáveis fundamentais são denominadas funções de estado. Serão considerados materiais cujo estado pode ser caracterizado pelo seguinte conjunto de variáveis em particular:

$$\text{variáveis de estado} : \{\mathbf{F}, \theta, \mathbf{g}, \boldsymbol{\alpha}\} \quad (3.26)$$

e pelas suas taxas:

$$\text{taxas} : \{\dot{\mathbf{F}}, \dot{\theta}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}\} \quad (3.27)$$

Onde \mathbf{F} é o tensor gradiente de deformação, θ é a temperatura absoluta, \mathbf{g} é o gradiente da temperatura absoluta $\text{grad}_x \theta$, e $\boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$ representa um conjunto de variáveis podendo ser de natureza escalar, vetorial ou tensorial. Note que $\{\mathbf{F}, \theta, \mathbf{g}\}$ são variáveis observáveis, enquanto $\boldsymbol{\alpha}$ são variáveis que não podem ser observadas diretamente, chamadas de variáveis internas, e são utilizadas para definir um estado termodinâmico de não equilíbrio (Holzapfel, 2000, pg. 278).

A termodinâmica estabelece um conjunto de leis e princípios, os quais devem ser obedecidos por qualquer tipo de processo de transferência de massa e energia. Em particular, temos que o princípio de conservação de massa, balanço de momento, primeira e segunda leis da termodinâmica devem ser satisfeitos em qualquer tipo de processo termodinâmico. Esse conjunto de regras pode ser apresentado de várias maneiras. Neste trabalho, as leis fundamentais da termodinâmica serão apresentadas como relações matemáticas, que devem ser satisfeitas em cada ponto do domínio de um corpo.

Hipótese 3.2: A distribuição das variáveis de estado em um

corpo se dá de forma suficientemente regular, ou seja, qualquer tipo de descontinuidade será desconsiderada nessa abordagem. Assume-se um corpo como sendo um sistema fechado, onde não há transferência de massa ou mudança de fase.

Considerando um sólido qualquer ocupando um domínio V delimitado por uma superfície S , a termodinâmica requer que sejam satisfeitas as seguintes relações, em qualquer ponto do domínio.

Conservação de massa:

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div}_x \tilde{\mathbf{u}} = 0 \quad (3.28)$$

Balanço de momento:

$$\operatorname{div}_x \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \text{ em } V \quad (3.29)$$

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \text{ em } S \quad (3.30)$$

Primeira lei da termodinâmica

$$\rho \dot{e} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \rho j - \operatorname{div}_x \mathbf{q} \quad (3.31)$$

Segunda lei da termodinâmica

$$\rho \dot{s} + \operatorname{div}_x \left(\frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) - \frac{\rho j}{\theta} \geq 0 \quad (3.32)$$

Onde ρ é a densidade, \mathbf{u} é o vetor deslocamento, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de Cauchy, \mathbf{f} representa forças externas agindo em V , \mathbf{t} representa forças externas agindo na superfície S , \mathbf{n} é o vetor normal à S , e representa a energia interna por unidade de volume, \mathbf{D} é a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade, j é a quantidade de calor gerado internamente por unidade de volume, \mathbf{q} é o fluxo de calor (quantidade de calor por unidade de tempo e por unidade de área), s é a entropia e θ é a temperatura absoluta. Note que essas relações estão definidas na configuração observada (ou deformada), mas relações equivalentes podem ser obtidas para a configuração de referência.

Combinando a primeira e a segunda lei, e introduzindo a função de energia livre de Helmholtz

$$\psi = e - \theta s \quad (3.33)$$

é possível, após algumas manipulações algébricas, obter a relação ma-

temática conhecida como desigualdade de Clausius-Duhem:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \rho (\dot{\psi} + s\dot{\theta}) - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0. \quad (3.34)$$

Na configuração de referência a desigualdade de Clausius-Duhem é dada por:

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 (\dot{\psi} + s\dot{\theta}) - \frac{J}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0, \text{ onde } J = \det \mathbf{F} \text{ e } \rho_0 = J\rho \quad (3.35)$$

onde \mathbf{P} é o tensor de Piola-Kirchhoff, definido como:

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad (3.36)$$

Hipótese 3.3: \mathbf{P} , Ψ , se \mathbf{q} são funções de estado, e tem as seguintes relações de dependência com as variáveis de estado:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\mathbf{C}}, \dot{\theta}, \mathbf{g}) \quad (3.37)$$

$$\psi = \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha}) \quad (3.38)$$

$$s = s(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha}) \quad (3.39)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{g}) \quad (3.40)$$

Utilizando a regra da cadeia, diferenciamos a equação (3.38) em relação ao tempo para obter:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta} : \dot{\theta} + \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \quad (3.41)$$

onde o símbolo \cdot representa uma operação de produto escalar adequada à natureza de cada variável interna α_n . Substituindo a equação (3.41) em (3.35) obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{P} - \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}} \right) : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \\ - \left(s + \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{J}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

A soma dos termos à esquerda da inequação 3.42 é denominada dissipação \mathcal{D} :

$$\mathcal{D} \equiv \left(\mathbf{P} - \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}} \right) : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \left(s + \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{J}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \quad (3.43)$$

A inequação de Clausius-Duhem pode ser entendida como uma lei que estabelece que a dissipação de energia interna em um corpo qualquer deve ser sempre maior ou igual à zero, ou seja, $\mathcal{D} \geq 0$.

Consideramos agora um caso em que não há deformação nem mudança nas variáveis internas, em que a temperatura varia no tempo mas permanece constante no espaço, ou seja, não há gradiente de temperatura. Nesse caso, o primeiro, o segundo e o quarto termo da equação 3.42 são nulos, restando:

$$\left(s + \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} \geq 0 \quad (3.44)$$

que deve ser não negativa, independente do sinal de $\dot{\theta}$. Isso implica a relação

$$s = -\rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta} \quad (3.45)$$

que deve ser válida para qualquer tipo de processo. Note que a equação (3.45) fornece uma relação entre a entropia s e as variáveis de estado, por meio da derivada da função de estado $\psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})$ em relação à θ . Desta maneira, 3.45 define uma equação de estado, isto é, uma relação entre variáveis de estado. A energia livre de Helmholtz é considerado um potencial termodinâmico na medida que uma variável de estado (entropia) pode ser obtida a partir da variação do potencial em relação a um dos seus argumentos (temperatura)..

Nesse ponto, é conveniente definirmos:

- Energia livre de Helmholtz, por unidade de volume

$$\Psi = \rho_0 \psi \quad (3.46)$$

- Tensão conservativa \mathbf{P}_c

$$\mathbf{P}_c = \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}} \quad (3.47)$$

- Forças termodinâmicas conservativas conjugadas às variáveis internas

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \quad (3.48)$$

Substituindo as definições dadas pelas equações (3.47) e (3.48) na equação (3.45), podemos reescrever a desigualdade de Clausius-Duhem de forma mais simplificada como se segue:

$$\mathcal{D} \equiv (\mathbf{P} - \mathbf{P}_c) : \dot{\mathbf{F}} - \boldsymbol{\beta} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{J}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0 \quad (3.49)$$

O último termo da equação 3.49 compõe a chamada dissipação térmica, associada a gradientes de temperatura. Os dois primeiros termos compõem a chamada dissipação interna \mathcal{D}_{int} , associada a fenômenos mecânicos (viscosidade, plasticidade, dano, fraturas) e outros. O caso particular em que $\mathcal{D} = 0$ representa a situação na qual o processo termodinâmico ocorrido é reversível, e quando $\mathcal{D} > 0$ o processo ocorrido é irreversível.

A condição dada pela equação (3.49) é comumente substituída por uma condição mais forte, que estabelece que tanto a dissipação interna quanto a térmica devem ser não negativas (Truesdell et al., 1966):

$$\mathcal{D}_{int} \equiv (\mathbf{P} - \mathbf{P}_c) : \dot{\mathbf{F}} - \boldsymbol{\beta} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \geq 0 \quad (3.50)$$

$$\mathcal{D}_{term} \equiv -\frac{J}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0 \quad (3.51)$$

Nesse ponto, limitaremos a formulação à teoria puramente mecânica, que representa o caso em que a dissipação térmica é nula, ou seja, consideramos $\mathcal{D}_{term} = 0$.

Para determinar completamente o estado termodinâmico do material, é necessário obter um conjunto de variáveis de estado que satisfaça a desigualdade de Clausius-Duhem. O primeiro passo é propor uma expressão para \mathcal{D} e Ψ que resulte em uma resposta representativa do comportamento do material. Seguindo o procedimento apresentado por Jirasek et al Jirasek e Bazant (2001, pg. 436) assumimos que \mathcal{D} admite uma decomposição aditiva, de forma que a dependência das taxas fica desacoplada:

$$\mathcal{D}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta) \equiv \mathbf{P}_d(\dot{\mathbf{F}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta) : \dot{\mathbf{F}} + \boldsymbol{\beta}_d(\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta) \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \quad (3.52)$$

\mathbf{P}_d é chamada tensão dissipativa, e $\boldsymbol{\beta}_d = \{\beta_{d,1}, \dots, \beta_{d,m}\}$ são

chamadas forças termodinâmicas dissipativas conjugadas às variáveis internas $\boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_1, \dots, \alpha_m\}$.

Lembrando que a dissipação deve ser não nula, devemos propor expressões para \mathbf{P}_d e β_d de modo a satisfazer $\mathcal{D} \geq 0$. Nesse ponto, particularizamos a formulação para a classe de modelos que satisfaz a seguinte hipótese:

Hipótese 3.4: o potencial de dissipação é uma função independente de $\dot{\mathbf{F}}$ e θ . Nesse caso particular temos $\mathcal{D} = \mathcal{D}(\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$, $\beta_d = \beta_d(\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$, $\mathbf{P}_d : \dot{\mathbf{F}} = 0$.

3.2.1 Potenciais de dissipação

Uma forma de garantir que a desigualdade de Clausius-Duhem seja sempre satisfeita, considerando o caso puramente mecânico, é utilizar o conceito de potenciais de dissipação. Podemos assumir a existência de uma função $\Upsilon = \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta)$ chamada potencial de dissipação e postular:

$$\beta_d = \frac{\partial \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta)}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} \quad (3.53)$$

$$\mathbf{P}_d = \frac{\partial \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}, \theta)}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \quad (3.54)$$

Se Υ possuir as seguintes propriedades:

- Convexidade em relação a $\dot{\mathbf{F}}$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$
- Ser não negativo
- Nulo na origem

então há garantia de que a desigualdade de Clausius-Duhem é satisfeita. A prova dessa afirmação é apresentada por Jirasek e Bazant (2001, pg. 442) e será omitida neste texto.

Tendo em mãos uma expressão para a dissipação dada pela equação (3.52), onde β_d e \mathbf{P}_d são dados pelas equações (3.53) e 3.54, e comparando com a expressão para a dissipação considerando a teoria puramente mecânica (equação 3.50), temos que:

$$\beta_d \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathbf{P}_d : \dot{\mathbf{F}} = (\mathbf{P} - \mathbf{P}_c) : \dot{\mathbf{F}} - \boldsymbol{\beta} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \quad (3.55)$$

o que implica:.

$$(\mathbf{P} - \mathbf{P}_c - \mathbf{P}_d) : \dot{\mathbf{F}} - (\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}_d) \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} = 0 \quad (3.56)$$

Para que essa relação seja satisfeita para qualquer processo termodinâmico, podemos impor as seguintes condições, que são suficientes, mas não necessárias:

$$\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\beta}_d \quad (3.57)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_c + \mathbf{P}_d \quad (3.58)$$

Substituindo a equação 3.53 e utilizando a definição de $\boldsymbol{\beta}$ (equação (3.48)) em (3.57) obtemos:

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} + \frac{\partial \Upsilon(\dot{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} = 0 \quad (3.59)$$

Note que a equação (3.58) juntamente com a equação (3.59), formam um conjunto de restrições que, se satisfeito, é suficiente para garantir a não negatividade da dissipação. Podemos interpretar a equação 3.59 como um balanço interno de forças. Note que as equações (3.58) e (3.59) podem ser utilizadas para determinar completamente o estado termodinâmico de um material dentro das condições estipuladas. Para isso resta postular expressões para as os potenciais termodinâmicos $\Psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})$ e $\Upsilon(\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$.

3.2.2 Princípio variacional

Seja \mathcal{P} um funcional definido da seguinte forma

$$\mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) = \frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) + \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})$$

O princípio variacional postula que, para um dado estado termodinâmico $\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}_i, r\}$, dentre todos os processos internos admissíveis, o processo interno efetivo $\dot{\boldsymbol{\xi}}_i^*$ será aquele descrito pelo conjunto de variáveis internas que minimizam o funcional \mathcal{P} , ou seja

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}^* = \underset{\dot{\boldsymbol{\alpha}}}{\operatorname{arg\,inf}} \mathcal{P} \quad (3.60)$$

Essa afirmação pode ser verificada avaliando a condição de es-

tacionariedade de \mathcal{P} em relação à variável $\dot{\alpha}$, que impõe a seguinte condição no diferencial de \mathcal{P} :

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{P} &= 0 \\
 \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\alpha}} d\dot{\alpha} &= 0 \\
 \left(\frac{\partial \dot{\Psi}}{\partial \dot{\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\alpha}} \right) d\dot{\alpha} &= 0 \\
 \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\alpha}} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \cdot \dot{\alpha} \right] + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\alpha}} \right) d\dot{\alpha} &= 0 \\
 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\alpha}} \right) d\dot{\alpha} &= 0
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Para que a equação 3.61 seja satisfeita para qualquer $d\dot{\alpha}$, é necessário que o termo entre parênteses seja nulo. Dessa forma, a condição de estacionariedade implica a seguinte relação:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\alpha}} = 0 \tag{3.62}$$

Portanto, tem-se que o princípio de mínimo retoma a expressão da restrição termodinâmica de equilíbrio, equação (3.59), e a solução do problema de mínimo da equação (3.60) corresponde ao processo termodinâmico efetivo. É importante notar também a seguinte propriedade do funcional \mathcal{P} :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} &= \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \cdot \dot{\alpha} \right) + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \\
 &= \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{\mathbf{F}}}
 \end{aligned} \tag{3.63}$$

Comparando com a relação termodinâmica da equação (3.58), temos que

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \tag{3.64}$$

3.2.3 O princípio variacional incremental

O procedimento de atualização variacional incremental é um método de solução de um problema constitutivo incremental. O princípio

variacional incremental é discutido em detalhes no trabalho de Ortiz e Stainier (1999) e pode ser descrito da seguinte maneira: dado um estado termodinâmico \mathcal{E}_n conhecido em um instante t_n e um gradiente de deformação \mathbf{F}_{n+1} conhecido em um instante t_{n+1} , entre todos os estados termodinâmicos \mathcal{E}_{n+1} admissíveis, o estado termodinâmico efetivo será aquele descrito pelas variáveis internas que minimizam um funcional incremental \mathcal{P}_{inc} , ou seja:

$$\boldsymbol{\alpha}^{n+1*} = \inf_{\boldsymbol{\alpha}^{n+1}} \mathcal{P}_{inc} \quad (3.65)$$

onde \mathcal{P}_{inc} é definido como:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{inc}(\mathbf{F}^{n+1}, \boldsymbol{\alpha}^{n+1}) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) dt \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) + \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \right] dt \\ &= \Psi^{n+1} - \Psi^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) dt. \end{aligned} \quad (3.66)$$

4 Desenvolvimento do modelo proposto por Farias

Nessa seção pretende-se apresentar os conceitos que definem o modelo proposto por Farias et al. (2017), assim como o desenvolvimento e implementação do modelo.

4.1 Hipóteses cinemáticas

Hipótese 4.1: o gradiente de velocidade inelástico é irrotacional (Boyce et al., 1989)

$$\mathbf{W}_i = 0 \quad (4.1)$$

Hipótese 4.2: parametrização de \mathbf{D}_i , em termos de uma amplitude e uma direção (Ortiz e Stainier, 1999)

$$\mathbf{D}_i = \dot{r}\mathbf{N} \quad (4.2)$$

onde \dot{r} é a taxa da deformação viscosa acumulada r definida na equação (4.3)

$$r = \int_0^t \sqrt{2} \|\mathbf{D}_i\| dt \quad (4.3)$$

Note que, por definição, a deformação viscosa acumulada é sempre maior ou igual à zero. Já o parâmetro \mathbf{N} carrega a informação da direção do fluxo inelástico, e pertence a um espaço com as seguintes restrições: $\mathbf{N} \in \mathcal{N} = \left\{ \mathbf{A} \in Sym \mid \text{tr}\mathbf{A} = 0 \text{ e } \|\mathbf{A}\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \right\}$. Note que a restrição quanto ao espaço de \mathbf{N} resulta em um tensor \mathbf{D}_i com traço nulo e, conseqüentemente, em um tensor $\dot{\mathbf{F}}_i$ isocórico

$$\det \dot{\mathbf{F}}_i = 1 \quad (4.4)$$

o que vai de acordo com a hipótese proposta por Boyce et al. (1988) para materiais poliméricos cristalinos.

As hipóteses 4.1 e 4.2 podem utilizadas para reescrever a equação 3.22 no formato conhecido como lei de fluxo

$$\dot{\mathbf{F}}_i = \dot{r}\mathbf{N}\mathbf{F}_i. \quad (4.5)$$

Adotando a lei de fluxo, as restrições necessárias para que o modelo proposto satisfaça as hipóteses 1 e 2 se limitam à restrição quanto ao espaço de \mathbf{N} .

4.2 Definições termodinâmicas

Chamamos de modelagem constitutiva o estudo e proposição de expressões para os potenciais termodinâmicos $\Psi(\mathbf{C}, \theta, \boldsymbol{\alpha})$ e $\phi(\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$, que sejam capazes de representar o comportamento de um dado material. No presente trabalho, propõe-se estudar o modelo proposto por Farias et al. (2017), que é baseado nas seguintes definições termodinâmicas:

- Potencial de energia livre de Helmholtz

$$\Psi = L(\mathbf{C}_{iso}) + H(\boldsymbol{\varepsilon}_e) + U(J) \quad (4.6)$$

onde L é o potencial de Gent

$$L = -\frac{\lambda\mu}{2} \left[\frac{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})}{\lambda} \right]. \quad (4.7)$$

, H é o potencial de Hencky

$$H = G \|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\|^2 \quad (4.8)$$

e U representa a contribuição da deformação volumétrica

$$U = \frac{\kappa}{2} (\ln J)^2. \quad (4.9)$$

- Potencial de dissipação

$$\mathcal{Y} = \mathcal{Y}(r, \dot{r}) = \frac{s(r)}{m+1} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^{m+1} \quad (4.10)$$

onde

$$s(r) = s_\infty + e^{-\zeta r} [(s_0 - s_\infty) \cosh(\beta r) + \gamma \sinh(\beta r)]. \quad (4.11)$$

Considerando as hipóteses cinemáticas e termodinâmicas apresentadas até esse ponto, temos o seguinte conjunto de variáveis para esse modelo:

- variáveis de estado

$$\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}_i, r\} \quad (4.12)$$

- variáveis internas

$$\boldsymbol{\alpha} = \{\mathbf{F}_i, r\} \quad (4.13)$$

- vaxas (processo)

$$\dot{\mathcal{E}} = \{\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{F}}_i, \dot{r}\} \quad (4.14)$$

- processo interno

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \{\dot{\mathbf{F}}_i, \dot{r}\}. \quad (4.15)$$

4.3 Representação reológica

A representação reológica de um modelo de material inelástico é um método de representação visual que visa facilitar a compreensão do modelo. Em modelos de viscoelasticidade, normalmente são utilizados molas e amortecedores, que se ligam em série ou em paralelo, dependendo de como a deformação é decomposta no modelo. O modelo de Farias pode ser representado pelo seguinte arranjo reológico:

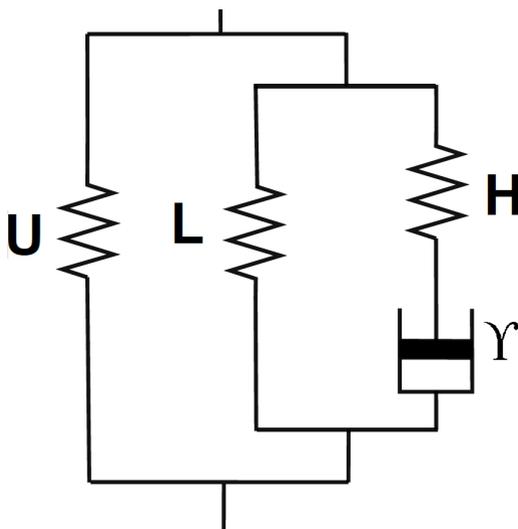


Figura 4.1: Representação reológica do modelo de Farias. Figura de autoria própria.

4.4 Considerações quanto ao potencial de dissipação

Como discutido na seção 3.2.1, como condição suficiente para a satisfação da equação de Clausius-Duhem o potencial de dissipação deve ser convexo em relação aos seus argumentos, não negativo e nulo na origem. No caso particular do potencial de dissipação dado pelas equações (4.10) e (4.11), a imposição dessas condições têm implicações nos valores admissíveis para os parâmetros r_0 , s_∞ , ζ , s_0 , β , e γ .

Primeiramente note que, como definida na equação 4.3, por ser uma integral de uma norma ao longo do tempo o valor da deformação viscosa acumulada r é sempre maior ou igual à zero. Além disso o seu valor pode apenas aumentar ou se manter, o que implica que a taxa \dot{r} é sempre maior ou igual a zero. Dessa forma, temos que o potencial $\Upsilon(r, \dot{r})$ está definido apenas para $\{r, \dot{r}\} \in \mathbb{R}_+$. Como condição suficiente para convexidade do potencial de dissipação em relação aos seus argumentos, basta impor que $m \geq 0$.

A condição de não negatividade do potencial de dissipação requer que o parâmetro r_0 seja maior que zero, e que a função $s(r)$ seja sempre maior que zero. A restrição de não-negatividade de $s(r)$ é satisfeita caso

1. O parâmetro s_∞ seja maior ou igual a zero.
2. O parâmetro s_0 seja maior ou igual à s_∞ .
3. O parâmetro γ seja maior ou igual a zero.
4. O parâmetro β seja maior ou igual a zero.

Em suma, as seguintes restrições devem ser obedecidas:

4.5 Solução via atualização variacional incremental

Nessa subseção é apresentado o procedimento de solução para o problema constitutivo como proposto por Farias, baseado no conceito de atualizações variacionais incrementais, que resulta em um problema de determinação de $\mathcal{E}(t_{n+1})$, denominado problema constitutivo incremental

Restrições dos parâmetros do potencial de dissipação $\mathcal{Y}(r, \dot{r})$ (equação 4.10)
$r_0 \in \mathbb{R}_+$
$s_\infty \in \mathbb{R}_+$
$s_0 \in \mathbb{R}_+$
$s_0 \geq s_\infty$
$\gamma \in \mathbb{R}_+$
$\beta \in \mathbb{R}_+$
$\zeta \in \mathbb{R}$

Tabela 2: Restrições suficientes para admissibilidade termodinâmica do potencial de dissipação.

4.5.1 Particularização do princípio variacional para o modelo proposto

Primeiramente, definimos o conjunto de variáveis de estado $\mathcal{E}(t_n)$ para o caso particular que satisfaz as hipóteses cinemáticas e termodinâmicas apresentadas para o modelo proposto, em um instante t_n conhecido:

$$\mathcal{E}(t_n) = \{\mathbf{F}^n, \mathbf{F}_i^n, r^n\} \quad (4.16)$$

Admite-se que o estado termodinâmico no instante t_n está completamente definido, ou seja, $\mathcal{E}(t_n)$ é conhecido. Definimos agora, nas mesmas condições, o conjunto de variáveis de estado em um instante t_{n+1} :

$$\mathcal{E}(t_{n+1}) = \{\mathbf{F}^{n+1}, \mathbf{F}_i^{n+1}, r^{n+1}\} \quad (4.17)$$

Admite-se que o estado termodinâmico no instante t_{n+1} não é conhecido. As taxas $\dot{\mathcal{E}}$ podem ser aproximadas de uma forma incremental conveniente para obter a regra de atualização para as variáveis $\mathcal{E}(t_{n+1})$. Por exemplo, podemos aproximar a taxa \dot{r} da seguinte maneira:

$$\dot{r} \approx \hat{r} = \frac{\Delta r}{\Delta t}, \text{ onde } \Delta r = r^{n+1} - r^n \text{ e } \Delta t = t^{n+1} - t^n \quad (4.18)$$

o que implica a seguinte relação de atualização

$$r^{n+1} = r^n + \Delta t \hat{r} \quad (4.19)$$

Utilizamos como regra de atualização para a variável \mathbf{F}_i^{n+1} o mapeamento exponencial (Neto et al., 2009, pg. 474) para a lei de

fluxo (equação 4.5):

$$\mathbf{F}_i^{n+1} = \text{EXP} [\Delta t \dot{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n \quad (4.20)$$

O funcional incremental \mathcal{P}_{inc} pode ser obtido a partir da equação 3.66 utilizando a seguinte técnica de integração:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{inc}(\mathbf{F}^{n+1}, \boldsymbol{\alpha}^{n+1}) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) dt \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) + \mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \right] dt \\ &= \Psi(\mathbf{F}^{n+1}, \boldsymbol{\alpha}^{n+1}) - \Psi(\mathbf{F}^n, \boldsymbol{\alpha}^n) + \Delta t \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \dot{r}) \\ &= \Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \dot{r}) \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde o termo $\Delta t \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \dot{r})$ representa uma aproximação numérica para $\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) dt$, e $r^{n+\alpha}$ representa o valor da variável r avaliada em um instante $t_{n+\alpha}$ intermediário entre t_n e t_{n+1} :

$$r^{n+\alpha} = (1 - \alpha) r^n + \alpha r^{n+1}. \quad (4.22)$$

Substituindo a equação 4.19 na equação 4.22 obtemos uma regra alternativa mais conveniente para $r^{n+\alpha}$ em termos de \dot{r} :

$$r^{n+\alpha} = r^n + \alpha \Delta t \dot{r} \quad (4.23)$$

O funcional \mathcal{P}_{inc} possui a importante propriedade:

$$\mathbf{P}^{n+1} = \frac{\partial \mathcal{P}_{inc}}{\partial \mathbf{F}^{n+1}} \quad (4.24)$$

onde $\mathbf{P}^{n+1} = \mathbf{P}(t_{n+1})$.

Na formulação em taxas (contínua), as variáveis internas são dadas pelo conjunto $\boldsymbol{\alpha} = \{\mathbf{F}_i, r\}$ (eq. 4.13). Já no caso incremental deve-se notar que há mais de uma opção para o conjunto de variáveis internas. A escolha mais óbvia seria o conjunto de variáveis $\boldsymbol{\alpha}_{inc} = \{\mathbf{F}_i^{n+1}, r^{n+1}\}$, já que \mathbf{F}_i^{n+1} e r^{n+1} são os análogos discretos das variáveis internas do caso contínuo. Porém as equações (4.19) e (4.20) permitem realizar uma substituição de variáveis, de forma que os conjuntos $\{\mathbf{N}, r^{n+1}\}$, $\{\mathbf{N}, \Delta r\}$ e $\{\mathbf{N}, \dot{r}\}$ são todos candidatos válidos para o conjunto de variáveis internas. Nessa formulação definimos

$$\boldsymbol{\alpha}_{inc} = \{\mathbf{N}, \hat{r}\} \quad (4.25)$$

4.5.2 Particularização do princípio variacional incremental

Uma das vantagens do princípio variacional é a possibilidade de incorporação de restrições ao problema, definindo uma função lagrangiana e multiplicadores de Lagrange para restringir a minimização de \mathcal{P} . Dessa forma, podemos impôr as restrições cinemáticas desse modelo, que conforme discutido na seção 4.1 se limitam a $\mathbf{N} \in \mathcal{N} = \left\{ \mathbf{A} \in Sym \mid \text{tr} \mathbf{A} = 0 \text{ e } \|\mathbf{A}\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \right\}$, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \Psi(\mathbf{F}^{n+1}, \boldsymbol{\alpha}^{n+1}) - \Psi(\mathbf{F}^n, \boldsymbol{\alpha}^n) + \Delta t \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \hat{r}) \\ & + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} + \lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} \cdot \text{skw} \mathbf{N} \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^* = \underset{\mathbf{N}, \hat{r}, \lambda_{\text{tr}}, \lambda_N, \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}}{\text{inf}} \mathcal{L} \quad (4.27)$$

Note que é necessário que os multiplicadores de Lagrange tenham a mesma natureza dos termos que eles multiplicam. Dessa forma λ_{tr} e λ_N são grandezas escalares e $\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$ é um tensor de segunda ordem antissimétrico. A equação (4.27) pode ser solucionada de diversas formas. Neste trabalho será proposto uma avaliação analítica das condições de otimalidade de modo a obter um sistema de equações a ser resolvido.

4.5.3 Condição de otimalidade

A condição de otimalidade do problema variacional incremental (equação (4.27)) requer que $d\mathcal{L} = 0$. Podemos avaliar a condição de otimalidade abrindo o diferencial $d\mathcal{L}$ em termos das derivadas parciais dos argumentos de \mathcal{L} :

$$d\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}} d\mathbf{N} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{r}} d\hat{r} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{\text{tr}}} d\lambda_{\text{tr}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_N} d\lambda_N + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} d\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} = 0 \quad (4.28)$$

Note que a condição de otimalidade só será satisfeita se cada uma das derivadas parciais da equação (4.28) for nula. Utilizando os resultados do apêndice A temos um conjunto de 5 equações:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}} = 0 \Rightarrow \Delta t \overset{\circ}{r} \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} + \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} + 2\lambda_N \mathbf{N} + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} = 0 \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \overset{\circ}{r}} = 0 \Rightarrow \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \overset{\circ}{r}} = 0 \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{\text{tr}}} = 0 \Rightarrow \text{tr} \mathbf{N} = 0 \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_N} = 0 \Rightarrow \mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} = 0 \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} = 0 \Rightarrow \text{skw} \mathbf{N} = 0 \quad (4.33)$$

Como explicitado no apêndice B, os multiplicadores de Lagrange podem ser solucionados analiticamente, e o conjunto de cinco equações acima pode ser reduzido para um conjunto de apenas duas:

$$\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \overset{\circ}{r}} = 0 \quad (4.34)$$

$$\mathbf{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} \right) \right\|} \quad (4.35)$$

Dessa forma, a solução do problema incremental depende da solução das equações 4.34 e 4.35.

4.5.4 O estado preditor

Nessa subseção serão introduzidas definições que serão utilizadas para obter versões simplificadas das equações 4.34 e 4.35.

Definição 6.1: Tensor de Mandel elástico incremental:

$$\mathbf{M}_e^{n+1} = -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} \quad (4.36)$$

Utilizando o resultado obtido no apêndice C, temos que o tensor \mathbf{M}_e^{n+1} pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e^{n+1} &= -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} \\ &= 2G \operatorname{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} \\ &= 2G \operatorname{dev} \left(\frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_e^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Definição 6.2: Gradiente de deformação predictor \mathbf{F}_{pre}^{n+1}

$$\mathbf{F}_{pre}^{n+1} = \mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^n)^{-1} \quad (4.38)$$

Definição 6.3: Tensor predictor de Cauchy \mathbf{C}_{pre}^{n+1}

$$\mathbf{C}_{pre}^{n+1} = (\mathbf{F}_{pre}^{n+1})^T \mathbf{F}_{pre}^{n+1} \quad (4.39)$$

Definição 6.4: Tensor predictor de deformação logarítmica $\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} = \frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \quad (4.40)$$

Definição 6.5: Tensor de Mandel predictor

$$\mathbf{M}_{pre}^{n+1} = \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1}} (\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}) \quad (4.41)$$

4.5.5 Equação da direção do fluxo inelástico

No apêndice F, é mostrado que, ao utilizar um mapeamento exponencial como regra de atualização para a variável \mathbf{F}_i^{n+1} , e considerando um potencial de Helmholtz dado pela equação 4.6, a equação

4.35 pode ser reescrita como:

$$\mathbf{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{dev}(\varepsilon_{pre}^{n+1})}{\|\text{dev}(\varepsilon_{pre}^{n+1})\|} \quad (4.42)$$

Portanto, para esse caso específico a direção de fluxo \mathbf{N} tem solução fechada, e a solução do problema variacional incremental depende apenas da solução da equação 4.34.

4.5.6 Equação da amplitude do fluxo inelástico

No apêndice F, é mostrado que, ao utilizar um mapeamento exponencial como regra de atualização para a variável \mathbf{F}_i^{n+1} , e considerando um potencial de Helmholtz dado pela equação 4.6 e um potencial de dissipação dado pela equação 4.10, a equação 4.34 pode ser reescrita como

$$\mp \sqrt{2}G \|\varepsilon_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t \dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^m + \alpha \frac{\partial s(r^{n+\alpha})}{\partial r^{n+\alpha}} \frac{\dot{r}^m}{m+1} = 0 \quad (4.43)$$

Escolhendo como valor do parâmetro de integração $\alpha = 0$, a equação 4.43 pode ser reescrita como:

$$\mp \sqrt{2}G \|\varepsilon_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t \dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^m = 0 \quad (4.44)$$

Como discutido na seção 4.4, a função $s(r)$, o parâmetro r_0 e a variável \dot{r} são sempre não negativos, o que implica que o segundo e o terceiro termos da equação 4.44 também são sempre não negativos. Nesse caso temos que a equação 4.44 não tem solução caso o primeiro termo tenha sinal positivo. Portanto, consideramos o caso negativo apenas:

$$- \sqrt{2}G \|\varepsilon_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t \dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^m = 0 \quad (4.45)$$

4.5.7 Método de Newton para solução de \dot{r}

A equação 4.45 é não linear, e pode ser resolvida para \dot{r} utilizando o método de Newton. Seja $R(\dot{r})$ função resíduo definida da seguinte

forma:

$$\mathbf{R}(\dot{r}) = -\sqrt{2}G \|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t\dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^m \quad (4.46)$$

A derivada $\mathbf{R}'(\dot{r})$ é dada por

$$\mathbf{R}'(\dot{r}) = G\Delta t + m \frac{s(r^n)}{(r_0)^2} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^{m-1} \quad (4.47)$$

Sendo \dot{r}_k um valor de tentativa anterior de solução do problema, um novo valor \dot{r}_{k+1} pode ser calculado pelo método iterativo de Newton como se segue:

$$\dot{r}_{k+1} = \dot{r}_k - \frac{\mathbf{R}(\dot{r}_k)}{\mathbf{R}'(\dot{r}_k)} \quad (4.48)$$

4.5.8 Atualização do estado de tensão no instante t^{n+1}

Seja \dot{r} a solução obtida de acordo com o método iterativo descrito na seção 4.5.7 e \mathbf{N} avaliado utilizando a equação 4.42. Avaliamos \mathbf{F}_i^{n+1} por meio do mapeamento exponencial (equação 4.20), de forma que o estado $n + 1$ fica completamente definido. A tensão no instante t^{n+1} pode ser obtida utilizando a equação 4.24. Para o caso de uma função de energia livre de Helmholtz Ψ^{n+1} dada pela equação 4.6, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{n+1} &= \frac{\partial \mathcal{P}_{inc}}{\partial \mathbf{F}^{n+1}} \\ &= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}^{n+1}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}^{n+1}} \left[-\frac{\lambda\mu}{2} \left(\frac{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso}^{n+1})}{\lambda} \right) + G \left\| \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} \right\|^2 + \frac{\kappa}{2} (\ln J)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.49)$$

Utilizando os resultados obtidos no apêndice G, onde são avaliadas as derivadas da equação (4.49), temos

$$\mathbf{P}^{n+1} = \lambda\mu \left(\frac{\text{dev}(\mathbf{b}_{iso})\mathbf{F}^{-T}}{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})} \right) + 2G \left[(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{F}_i^{-T} \right] + \kappa \ln J \mathbf{F}^{-T} \quad (4.50)$$

5 Desenvolvimento teórico do modelo proposto por Bergström

Bergström (2015) apresenta em sua obra o modelo intitulado pelo autor como *Three Network Model* ou TNM, e juntamente com a apresentação do modelo o autor mostra a utilização deste para modelar o comportamento de diversos polímeros termoplásticos, incluindo o PEEK, com bons resultados. Nesta seção pretende-se apresentar os conceitos que definem o modelo proposto por Bergström, intitulado pelo autor como *Three Network Model* ou TNM, assim como o desenvolvimento e implementação do modelo. Diferentemente da forma como foi apresentado o modelo de Farias, que é objeto de estudo desse trabalho, o *Three Network Model* será apresentado de forma mais breve, mostrando apenas os conceitos principais. Para mais detalhes sobre a formulação desse modelo, verificar a obra *Mechanics of Solid Polymers - Theory and Computational Modeling* (Bergström, 2015).

5.1 Representação reológica

O *Three Network Model* pode ser representado como um arranjo reológico composto por três braços: dois contendo uma mola em série com um amortecedor (braço A e B da figura 5.1), e mais uma mola em paralelo (braço C da figura 5.1).

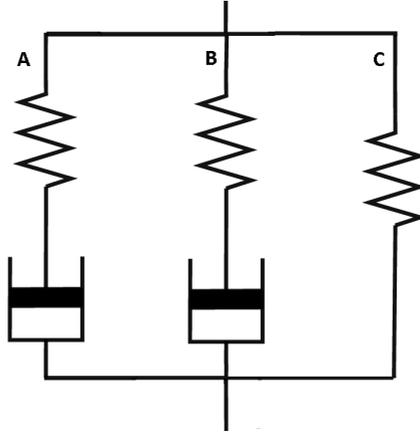


Figura 5.1: Representação reológica *Three Network Model*. Figura de autoria própria.

5.2 Cinemática do *Three Network Model*

A cinemática do *Three Network Model* baseia-se nos conceitos fundamentais apresentados na seção 3.1, exceto pela decomposição multiplicativa do tensor \mathbf{F} . Para esse modelo tem-se, primeiramente para o braço A, uma decomposição entre uma parcela viscosa e uma parcela elástica:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_A^e \mathbf{F}_A^v \quad (5.1)$$

De forma similar tem-se para o braço B:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_B^e \mathbf{F}_B^v \quad (5.2)$$

E finalmente, para o braço C, que possui apenas um componente tipo mola:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_C \quad (5.3)$$

5.3 Variáveis internas e sua evolução

O *Three Network Model* é baseado na teoria da termodinâmica de variáveis internas. Temos o seguinte conjunto de variáveis para esse modelo:

- Variáveis de estado

$$\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}_A^v, \mathbf{F}_B^v, \mu_B\} \quad (5.4)$$

- Variáveis internas

$$\boldsymbol{\alpha} = \{\mathbf{F}_A^v, \mathbf{F}_B^v, \mu_B\} \quad (5.5)$$

- Taxas

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \{\dot{\mathbf{F}}_A^v, \dot{\mathbf{F}}_B^v, \dot{\mu}_B\} \quad (5.6)$$

É importante ressaltar a presença da variável interna μ_B , que pode ser interpretada como um parâmetro de amortecimento viscoso relacionado ao amortecedor do braço B, que varia de acordo com uma lei de evolução, ao contrário de um amortecedor simples com coeficiente de amortecimento viscoso constante. O modelo é apresentado como um conjunto de leis que estabelecem a evolução das variáveis internas. Desta forma, a lei de evolução para \mathbf{F}_A^v é dada pela seguinte equação diferencial:

$$\dot{\mathbf{F}}_A^v = \dot{\gamma}_A \mathbf{F}_A^{e-1} \mathbf{N}_A^v \mathbf{F}_A^e \mathbf{F}_A^v \quad (5.7)$$

onde

$$\dot{\gamma}_A = \left(\frac{\tau_A}{\hat{\tau}_A + aR(p_A)} \right)^{m_A} \quad (5.8)$$

$$\mathbf{N}_A^v = \frac{dev(\boldsymbol{\sigma}_A)}{\|dev(\boldsymbol{\sigma}_A)\|} \quad (5.9)$$

$$\tau_A = \sqrt{dev(\boldsymbol{\sigma}_A) : dev(\boldsymbol{\sigma}_A)}$$

e $\boldsymbol{\sigma}_A$ é um tensor que representa a contribuição do braço A para a tensão de Cauchy. O conjunto $\{\hat{\tau}_A, a, m_A\}$ são parâmetros do modelo. A função $R(x)$ é uma função do tipo rampa, definida como $R(x) = (x + |x|)/2$, e p_A é pressão hidrostática referente à contribuição de tensão do braço A, definida como $p_A = -\text{tr}(\boldsymbol{\sigma}_A)/3$.

De forma similar, a lei de evolução para \mathbf{F}_B^v é dada por:

$$\dot{\mathbf{F}}_B^v = \dot{\gamma}_B \mathbf{F}_B^{e-1} \mathbf{N}_B^v \mathbf{F}_B^e \mathbf{F}_B^v \quad (5.10)$$

onde

$$\dot{\gamma}_B = \left(\frac{\tau_B}{\hat{\tau}_B + aR(p_B)} \right)^{m_B} \quad (5.11)$$

$$\mathbf{N}_B^v = \frac{dev(\boldsymbol{\sigma}_B)}{\|dev(\boldsymbol{\sigma}_B)\|} \quad (5.12)$$

$$\tau_B = \sqrt{dev(\boldsymbol{\sigma}_B) : dev(\boldsymbol{\sigma}_B)}$$

e o conjunto $\{\hat{\tau}_B, a, m_B\}$ são parâmetros do modelo.

A lei de evolução para μ_B é dada por

$$\dot{\mu}_B = -\beta (\mu_B - \mu_{Bf}) \dot{\gamma}_A; \quad \mu_B(0) = \mu_{Bi} \quad (5.13)$$

sendo o conjunto $\{\mu_{Bf}, \mu_{Bi},\}$ parâmetros do modelo

5.4 Tensão para o *Three Network Model*

A tensão para esse modelo é dada pela soma das contribuições individuais de cada braço do arranjo reológico. Em termos de tensão de Cauchy, temos:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_A + \boldsymbol{\sigma}_B + \boldsymbol{\sigma}_C \quad (5.14)$$

A expressão para tensão em cada um dos braços do arranjo reológico é baseada no modelo hiperelástico proposto por Arruda e Boyce (1993), denominado *Eight-chain Model*. Para o braço A temos:

$$\boldsymbol{\sigma}_A = \frac{\mu_A}{\lambda_A^e J_A^e} \frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_A^e / \lambda_{lock})}{\mathcal{L}^{-1}(1 / \lambda_{lock})} dev(\bar{\mathbf{b}}_A^e) + \kappa (J_A^e - 1) \mathbf{I} \quad (5.15)$$

onde

$$\lambda_A^e = \sqrt{\frac{\text{tr}(\bar{\mathbf{b}}_A^e)}{3}} \quad (5.16)$$

μ_A , λ_{lock} e κ são parâmetros do modelo, J_A^e é o determinante de \mathbf{F}_A^e , e \mathcal{L}^{-1} representa a inversa da função de Langevin, que é definida como

$$\mathcal{L}(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \quad (5.17)$$

Uma expressão analítica para a função inversa \mathcal{L}^{-1} não existe até o momento, porém diversas propostas de fórmulas de aproximação para essa função existem na literatura. Motivado pelas conclusões do trabalho de Jedynak (2015), que realizou uma comparação entre diversas fórmulas de aproximação existentes, utiliza-se aqui a fórmula NPA (abreviação do termo em inglês *N-point Padé approximation*):

$$\mathcal{L}^{-1}(x) \simeq x \frac{2,99942 - 2,57332x + 0,654805x^2}{1 - 0,894936x - 0,105064x^2} \quad (5.18)$$

A contribuição do braço C é dada por uma expressão equivalente à equação 5.15:

$$\boldsymbol{\sigma}_C = \frac{\mu_C}{\lambda_C^e J_C^e} \frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_C^e / \lambda_{lock})}{\mathcal{L}^{-1}(1/\lambda_{lock})} \text{dev}(\bar{\mathbf{b}}_C^e) + \kappa (J_C^e - 1) \mathbf{I} \quad (5.19)$$

onde

$$\lambda_C^e = \sqrt{\frac{\text{tr}(\bar{\mathbf{b}}_C^e)}{3}} \quad (5.20)$$

μ_C é um parâmetro do modelo, e J_C^e é o determinante de \mathbf{F}_C^e . A expressão para o braço B é dada por:

$$\boldsymbol{\sigma}_B = \frac{\mu_B(t)}{\lambda_B^e J_B^e} \frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_B^e / \lambda_{lock})}{\mathcal{L}^{-1}(1/\lambda_{lock})} \text{dev}(\bar{\mathbf{b}}_C^e) + \kappa (J_C^e - 1) \mathbf{I} \quad (5.21)$$

onde

$$\lambda_B^e = \sqrt{\frac{\text{tr}(\bar{\mathbf{b}}_B^e)}{3}} \quad (5.22)$$

e J_B^e é o determinante de \mathbf{F}_B^e . Note que essa expressão é similar às duas mostradas anteriormente, mas com uma diferença importante: enquanto que nas outras expressões os termos μ_A e μ_C eram parâmetros do modelo (que podem ser relacionados à rigidez das molas dos braços A e C do arranjo reológico respectivamente) no caso do braço B tem-se que o termo μ_B não é um parâmetro do modelo, e sim uma variável interna, que evolui de acordo com a lei descrita na seção 5.3.

5.5 Proposta de solução incremental

Note que as equações de evolução para \mathbf{F}_A^v e \mathbf{F}_B^v (eq. 5.7 e 5.10 respectivamente) tem uma forma genérica do tipo:

$$\dot{A}(t) = X(t)A(t) \quad (5.23)$$

No trabalho de (Bergström, 2015) apenas a formulação contínua do modelo é apresentada, como descrito nas subseções anteriores, porém o autor não apresenta nenhuma proposta de solução para o conjunto de equações diferenciais que definem o modelo. Propõe-se aqui, de forma independente, um método de solução conveniente para o contexto deste trabalho, visando uma implementação algorítmica para ajuste de parâmetros utilizando dados experimentais considerando a hipótese de campo de deformações homogêneo uniaxial. Uma solução aproximada para uma equação diferencial desse tipo pode ser obtida de forma incremental, utilizando o mapeamento exponencial (Neto et al., 2009), de acordo com a seguinte expressão:

$$A_{n+\theta} = \exp(X(t_{n+\theta})\Delta t) A_n \quad (5.24)$$

Onde para $\theta = 0$ a solução é denominada mapeamento exponencial explícito e para $\theta = 1$ a solução é denominada mapeamento exponencial implícito. Utilizando mapeamento exponencial explícito, podem ser obtidas soluções aproximadas para as equações 5.7 e 5.10 de forma incremental. Primeiramente, para \mathbf{F}_A^v :

$$\mathbf{F}_{A,n+1}^v = \text{EXP} \left(\overset{\circ}{\gamma}_{A,n} \mathbf{F}_{A,n}^{e-1} \mathbf{N}_{A,n}^v \mathbf{F}_{A,n}^e \right) \mathbf{F}_{A,n}^v \quad \mathbf{F}_{A,n=0}^v = \mathbf{I} \quad (5.25)$$

onde

$$\mathbf{N}_{A,n}^v = \frac{dev(\boldsymbol{\sigma}_A(t_n))}{\|dev(\boldsymbol{\sigma}_A(t_n))\|} \quad (5.26)$$

$$\dot{\gamma}_{A,n} = \left(\frac{\tau_A(t_n)}{\hat{\tau}_A + aR(p_A(t_n))} \right)^{m_A} \left(\frac{\theta(t_n)}{\theta_0} \right)^n \quad (5.27)$$

e para \mathbf{F}_B^v tem-se

$$\mathbf{F}_{B,n+1}^v = \text{EXP} \left(\dot{\gamma}_{B,n} \mathbf{F}_{B,n}^{e-1} \mathbf{N}_{B,n}^v \mathbf{F}_{A,n}^e \right) \mathbf{F}_{B,n}^v \quad \mathbf{F}_{B,n=0}^v = \mathbf{I} \quad (5.28)$$

onde

$$\mathbf{N}_{B,n}^v = \frac{dev(\boldsymbol{\sigma}_B(t_n))}{\|dev(\boldsymbol{\sigma}_B(t_n))\|} \quad (5.29)$$

$$\dot{\gamma}_{B,n} = \left(\frac{\tau_B(t_n)}{\hat{\tau}_B + aR(p_B(t_n))} \right)^{m_B} \left(\frac{\theta(t_n)}{\theta_0} \right)^n \quad (5.30)$$

Para o cálculo da função exponencial, propõe-se utilizar uma aproximação: o método de Padé modificado, como descrito por Higham (2005). Uma solução aproximada para a equação de evolução restante (equação 5.13), pode ser encontrada utilizando o método de Euler explícito, resultando na seguinte expressão:

$$\mu_{B,n+1} = -\beta(\mu_{B,n} - \mu_{Bf})\dot{\gamma}_{A,n} \quad \mu_{B,n=0} = \mu_{Bi} \quad (5.31)$$

Dessa forma, conhecendo as variáveis de estado no instante t_n , as equações 5.25, 5.28 e 5.31 podem ser utilizadas para determinar o valor das variáveis de estado no instante t_{n+1} . Conhecido o estado no instante t_{n+1} , as equações descritas na subseção 5.4 podem ser utilizadas para avaliar a tensão nesse instante.

6 Desenvolvimento experimental

Nessa seção, pretende-se apresentar o procedimento utilizado para realização de testes mecânicos com o PEEK, detalhar técnicas de medição, equipamento utilizado, etc.

6.1 Materiais

Tarugos de PEEK OPTIMA *LT1*TM, de um metro de comprimento por 20 mm de diâmetro (figura 6.1) foram disponibilizados pelo Laboratório de Biomecânica do Hospital Universitário da Univeridade Federal de Santa Catarina (LEBm-HU/UFSC). Equipamentos de ensaio e de medição foram disponibilizados pelo LEBm-HU/UFSC e pelo Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE) da Univeridade Federal de Santa Catarina.



Figura 6.1: Um dos tarugos de PEEK disponibilizados para testes nesse trabalho (ao lado, um paquímetro de 20cm para compreensão da escala da imagem). Fonte: fotografia realizada pelo autor. .

6.2 Especificações de ensaio

A proposta do trabalho envolve a realização de ensaios de compressão com o PEEK. De modo a definir os parâmetros de ensaio, como taxa de deformação, geometria do corpo de prova foi feita uma pesquisa na literatura disponível e nas normas técnicas. Em particular, o trabalho descrito na dissertação de mestrado de Sonnenhohl (2015) é utilizado como referência para definição da metodologia de ensaio.

6.2.1 Metodologia de ensaio

Nesse trabalho, foi definida uma metodologia para ensaios mecânicos com polímeros termoplásticos, de modo a caracterizar propriedades sob tração e compressão uniaxial, e compressão biaxial. Foi feito estudo de caso do polietileno de ultra alto peso molecular, ou UHMWPE (do inglês *ultra high molecular weight polyethylene*). O material testado, produzido pelo fabricante Orthoplastics - Reino Unido, foi recebido em forma de uma barra circular com diâmetro de 65 mm e comprimento 400 mm. Os corpos de prova foram usinados a partir da barra, e em seguida polidos por lixamento de modo a minimizar o atrito do espécime com o dispositivo de ensaio. Todos os ensaios desse trabalho foram realizados em uma sala em temperatura de 23,5°C, com uso de uma máquina universal de ensaio da fabricante Emic, modelo DL3000, com capacidade de 3.000kg, equipadas com dispositivos de alinhamento e fixação de corpos de prova projetados pelo autor. Para análise da força, nos ensaios de compressão uniaxial e tração uniaxial, foi utilizada uma célula de carga da marca Emic, modelo CCE5kN de 500 kg de capacidade e resolução de 0,01kgf.

A medição de deformação e área de secção transversal foi feita, nos casos de tração e compressão uniaxial, utilizando a técnica de correlação de imagens digitais (DIC). Para utilizar o DIC, o autor informa utilização de câmera modelo Flea3-SW-14S3C-C, da marca Point Grey, e de um algoritmo de correlação próprio. Para compressão uniaxial, foram utilizados corpos de prova cilíndricos de 6 mm de diâmetro e 10 mm de altura. O autor apresenta os resultados em forma de curvas de tensão por deformação de engenharia e verdadeiros, para taxas de deformação de $0,001s^{-1}$ / $0,01s^{-1}$ / $0,1s^{-1}$. Foram ensaiadas 10 amostras para cada nível de taxa de deformação.

6.2.2 Dispositivo de ensaio

Dando continuidade aos trabalhos de Sonnenhohl (2015) com polímeros termoplásticos, propõe-se utilizar o mesmo aparato de ensaio. Portanto, todos os testes serão feitos em uma máquina universal de ensaio da fabricante Emic, modelo DL3000, com capacidade de 3.000 kg,. O dispositivo universal para ensaios de cargas compressivas utilizado no trabalho de Sonnenhohl é utilizado.



Figura 6.2: Dispositivo de ensaio de compressão uniaxial utilizado. Fotografia realizada pelo autor.

Esse dispositivo é composto pelas seguintes peças:

1. Punção superior - Em uma das extremidades possui um fuso de fixação com o mesmo padrão de rosca da célula de carga e na outra, um formato esférico para transmitir o carregamento à haste;

2. Haste - Haste cilíndrica móvel com 30 mm de diâmetro, posicionada no interior da rótula esférica. Sua superfície superior é plana e pressionada pelo contato com a punção superior. Na superfície inferior, possui um furo central com rosca, possibilitando o uso de várias geometrias de punção, fazendo com que todo o aparato permita a execução de diversos tipos de ensaios com cargas compressivas.
3. Rolamento linear – Permite o livre movimento axial da haste de compressão, restringindo qualquer outro movimento como flexão, deslocamento axial, etc.
4. Punção de contato - Geometria de compressão que entra em contato com o corpo de prova. Pode ser substituído para permitir diferentes geometrias de corpo de prova para compressão uniaxial ou para ensaios com outros carregamentos. No presente trabalho, é utilizado um punção com uma superfície de contato de 13mm.
5. Copo principal - Estrutura robusta cilíndrica, onde são acomodadas todas as outras peças, garantindo o alinhamento do ensaio. Possui uma janela para facilitar a troca de amostras e também permitir o uso de instrumentos de medida de deformação com e sem contato;
6. Conexão inferior - Tampa inferior com fuso de fixação com a base de máquina de ensaio.

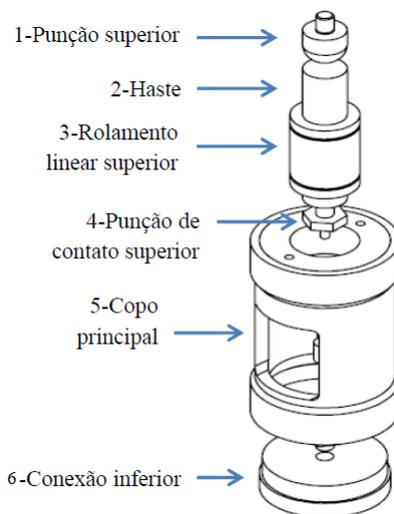


Figura 6.3: Componentes do dispositivo de compressão. Adaptado de Sonnenhohl (2015).

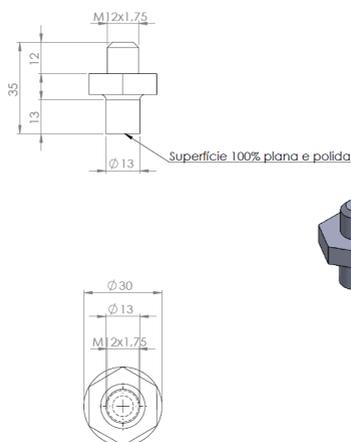


Figura 6.4: Desenho e dimensões do punção de compressão. Adaptado de Sonnenhohl (2015).

6.2.3 Corpo de prova

Para determinação da geometria dos corpos de prova, foram levados em conta os seguintes fatores:

- Dimensões do tarugo disponibilizado para extração dos corpos de prova.
- Normas técnicas de ensaios de compressão.
- Artigos de trabalhos anteriores envolvendo ensaios de compressão com o PEEK.
- Disponibilidade de equipamentos de ensaio capazes de realizar o teste com o corpo de prova proposto.

Diferentes geometrias de corpos de prova para ensaios de compressão com PEEK são encontrados na literatura. Corpos de prova cilíndricos são a norma, porém a razão altura/diâmetro varia. Hamdan e Swallowe (1996) utilizam corpos de prova cilíndricos de 7mm de diâmetro e 3,5 mm de altura (razão 0,5). Walley e Field (1994) utilizam corpos de prova cilíndricos de 5mm de diâmetro e 2mm de altura, e para altas taxas de deformação utiliza espécimes de 2,5mm de diâmetro e 1mm de altura, mantendo assim a razão altura/diâmetro igual à 0,4. Rae et al. (2007) reporta utilização de corpo de prova cilíndrico de 6,375 mm de diâmetro e 6,375 mm de comprimento, numa razão 1/1.

Mais recentemente, El-Qoubaa e Othman (2014) apresentam um estudo dos efeitos da razão de altura/diâmetro em ensaios de compressão com corpos de prova cilíndricos de PEEK, para temperaturas de -130°C a 160°C , e taxas de 0,0001/s até 3000/s. Ao fixar o diâmetro em 6mm, assumindo que o comportamento do PEEK sob compressão é isocórico (comportamento verificado em trabalhos anteriores), e testando espécimes com razão altura/diâmetro de 4/1, 2/1, 1/1 e 2/3, os autores chegaram a conclusão de que razões de 4/1 e 2/3 levam a erros maiores (comportamento não homogêneo) e que corpos de prova de razão de 2/1 e 1/1 se mostraram mais apropriados. Em um trabalho sucedente (El-Qoubaa e Othman, 2016) com enfoque nos efeitos de taxa de deformação e temperatura no limite de escoamento do PEEK, os autores tomam como padrão um corpo de prova de razão altura/diâmetro 1/1, com 6mm de diâmetro.

Note que há uma tendência na utilização de corpos de prova cilíndricos, consequência da tentativa de manutenção de um estado uniaxial

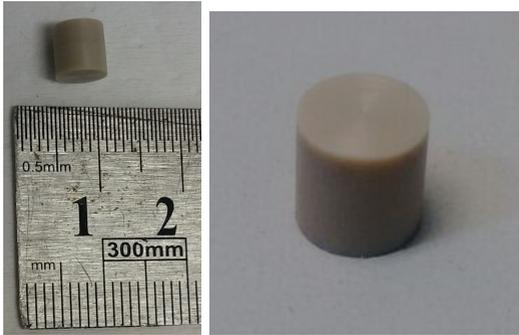
de tensões no espécime durante o ensaio. Embora há normas que pevejam a utilização de corpos de prova com outras geometrias, a hipótese de estado de tensões uniaxial é prejudicada caso haja efeitos concentradores de tensão no corpo de prova, como arestas ou variações bruscas, o que torna a geometria cilíndrica a mais adequada devido à sua seção transversal circular. Além disso, com a escolha de um espécime cilíndrico há a possibilidade a utilização do aparato de ensaio utilizado por Sonnenhohl, o que evitaria a necessidade de projetos de dispositivos de ensaio para os experimentos a serem realizados nesse trabalho. Portanto, seguindo a tendência dos trabalhos encontrados na literatura e da metodologia proposta por Sonnenhohl, estabeleceu-se a geometria do corpo de prova como sendo cilíndrica.

Quanto às normas técnicas, foram encontradas duas que estabelecem padrões para testes de compressão em materiais poliméricos. Uma da Organização Internacional de Normalização (*International Organization for Standardization - ISO*), a ISO 604 (2003), e outra da ASTM International, a D695-15 (2015). As normas ISO 604 e a D695-15 recomendam que o corpo de prova tenha um formato de cilindro, prisma de seção transversal retangular, ou tubo. Limitando-se ao formato cilíndrico temos as seguintes recomendações:

- A norma D695-15 recomenda primeiramente corpos de prova de 12.7 mm de diâmetro por 25.4 mm de comprimento. Caso ocorra limitação geométrica ou em relação ao equipamento de ensaio, um corpo de prova prismático seção transversal retangular deve ser utilizado.
- A norma ISO 604 recomenda primeiramente corpos de prova de 4 mm de diâmetro por 10 mm de comprimento. Caso ocorra limitação geométrica ou em relação ao equipamento de ensaio, um corpo de prova de 3 mm de diâmetro por 6 mm de comprimento pode ser utilizado.

Levando todas essas informações em conta, tomou-se a decisão de utilizar um corpo de prova com dimensões de 6 milímetros de diâmetro, por 6 milímetros de comprimento (figura 6.5) assim como utilizado no trabalho de El-Qoubaa e Othman (2016). Considerou-se que ao utilizar um corpo de prova com as mesmas dimensões, haveria a possibilidade de comparação dos resultados obtidos nesse trabalho. Além disso, seria interessante verificar a hipótese de isocoricidade do material disponibilizado para este trabalho. A variação de volume do PEEK durante compressão já foi estudada no trabalho de El-Qoubaa e Othman (2014), de forma que há a possibilidade de comparação dos resultados de vari-

ação volumétrica a serem obtidos no presente trabalho.



(a) Com escala para referência. Fotografia realizada pelo autor. (b) Imagem aproximada. Fotografia realizada pelo autor.

Figura 6.5: Exemplo de um corpo de prova utilizado.

As amostras foram extraídas de um tarugo de PEEK por um processo de corte longitudinal, dividindo a barra em quatro segmentos iguais. Cada segmento foi cortado em secções e os espécimes foram extraídos de cada secção por um processo de torneamento. A dimensão de todos os espécimes foram medidos com o uso de um micrômetro com capacidade de 0,001mm. Verificou-se um erro de $\pm 0,01$ mm nas dimensões dos corpos de prova.

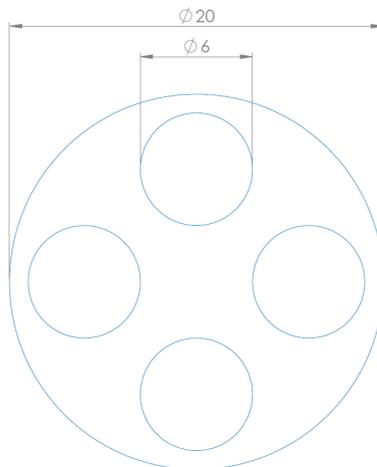


Figura 6.6: Esboço da seção do tarugo, com indicação dos corpos de prova a serem usinados. Para usinagem destes, foi efetuado um corte em “X” na seção, seguido por um processo de torneamento. Adaptado de Sonnenhohl (2015)

6.2.4 Lubrificação

Idealmente, deseja-se que em um ensaio de compressão uniaxial exista no corpo de prova somente a tensão normal de compressão, e que o corpo se deforme de maneira uniforme, mantendo o aspecto cilíndrico. Porém no teste de compressão o corpo de prova cilíndrico tem seu comprimento reduzido e conseqüentemente aumentadas as dimensões da seção transversal. A carga compressiva é transmitida através do contato do corpo de prova com a superfície dos cabeçotes da máquina de ensaio. Portanto nas superfícies de contato o aumento da seção transversal do corpo de prova fica parcialmente restrito pelo efeito do atrito. Este atrito gera tensões na superfície de contato, impedindo o movimento da parte do corpo de prova situada nesta superfície, e provocando a alteração do formato original cilíndrico do corpo de prova durante o processo, que adquire uma forma similar à de um barril. Este é o abaulamento ou em inglês *barreling effect*.

O abaulamento pode ser evitado ou minimizado pelo uso de lu-

brificação nas superfícies de contato. (Walley e Field, 1994) reporta, em um estudo de compressão uniaxial com PEEK, a utilização de gelatina de petróleo (vaselina) para lubrificação durante o ensaio, visto de acordo com o autor esse lubrificante mostrou melhores resultados. Neste trabalho, foram testados vaselina sólida (gelatina), vaselina líquida, e teflon em filme. A utilização do teflon não se mostrou um procedimento viável, visto que em todos os testes ocorreu um deslizamento do corpo de prova, escapando do contato dos cabeçotes de ensaio. Em outros testes, a vaselina sólida se mostrou o melhor candidato, confirmando a conclusão de Walley. Dessa forma, todos os ensaios cujos resultados são aqui mostrados foram feitos utilizando vaselina sólida como lubrificante.

6.2.5 Parâmetros de ensaio

O ensaio é feito por meio da aplicação de força com a Emic, por meio de controle de deslocamento. Propõe-se realizar um ensaio monotônico, com carregamento e descarregamento, em três taxas de deformação: $0,0001\text{s}^{-1}$; $0,001\text{s}^{-1}$; $0,01\text{s}^{-1}$. É importante notar que essas são taxas de deformação de engenharia, e não de deformação real (logarítmica), e são obtidas mantendo a velocidade do atuador constante. Para obter essas taxas, são empregadas velocidades de $0,0006\text{mm s}^{-1}$; $0,006\text{mm s}^{-1}$; $0,06\text{mm s}^{-1}$. Essas velocidades são mantidas até um deslocamento total de 2,45 milímetros, o que corresponde à um valor de deformação real (logarítmica) de 0,5 mm/mm, e após esse ponto, ocorre um retorno do atuador da Emic sob à mesma velocidade. A escolha desse valor de 2,45 mm foi feita considerando outros ensaios da literatura (Rae et al., 2007)(El-Qoubaa e Othman, 2016), de forma a possibilitar a comparação dos resultados obtidos.

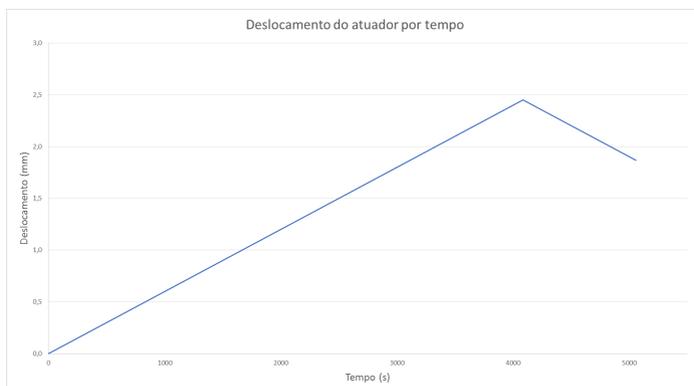


Figura 6.7: Curva do deslocamento do atuador da EMIC pelo tempo, para o caso de um deslocamento sob velocidade de $0,006\text{mm s}^{-1}$.

6.3 Medição

Propõe-se realizar três medições:

1. Força aplicada pela máquina de ensaio.
2. Deslocamento na direção da aplicação da carga (axial).
3. Variação do diâmetro do corpo de prova, necessária para o cálculo de tensão real.

A medição de força foi feita utilizando um transdutor de força tipo célula de carga, da marca Emic, com 5.000 kg de capacidade e resolução de 0.1kgf. A célula de carga é ligada axialmente ao componente móvel da máquina de ensaio por uma extremidade, e pela outra extremidade, é conectado um punção cuja função é transmitir a força da máquina ao dispositivo de ensaio (fig. 6.8).



Figura 6.8: Célula de carga utilizada para efetuar a medição de força durante os ensaios de compressão.

O deslocamento axial é medido utilizando um transformador linear diferencial variável, ou LVDT (do inglês *linear variable differential transformer*), um dispositivo que efetua medição de deslocamento linear por contato. O LVDT utilizado é da marca Omega, modelo GP911-5-S, e foi montado no dispositivo de ensaio de modo a medir o deslocamento relativo entre a superfície superior do copo principal e o punção superior (fig. 6.9). Para aquisição dos dados, o LVDT é ligado à um sistema universal de aquisição de dados da marca HBM, modelo QuantumX MX840B. A calibração do LVDT foi feita com o mesmo montado no dispositivo de ensaio utilizando blocos de calibração padrão disponibilizados pelo GRANTE.



Figura 6.9: Montagem do LVDT no dispositivo de ensaio.

Para medição do diâmetro do corpo de prova, foram propostos dois métodos: o primeiro utilizado um clip gage, e o segundo utilizando medição óptica.

O clip gage, um extensômetro de contato, foi fabricado a partir de uma chapa de latão, cortada de modo a obter as dimensões indicadas na figura 6.10. Um extensômetro em configuração de ponte completa e colado na região anterior da chapa, e aquisição de dados é feita utilizando o mesmo sistema universal de aquisição de dados utilizado com o LVDT.

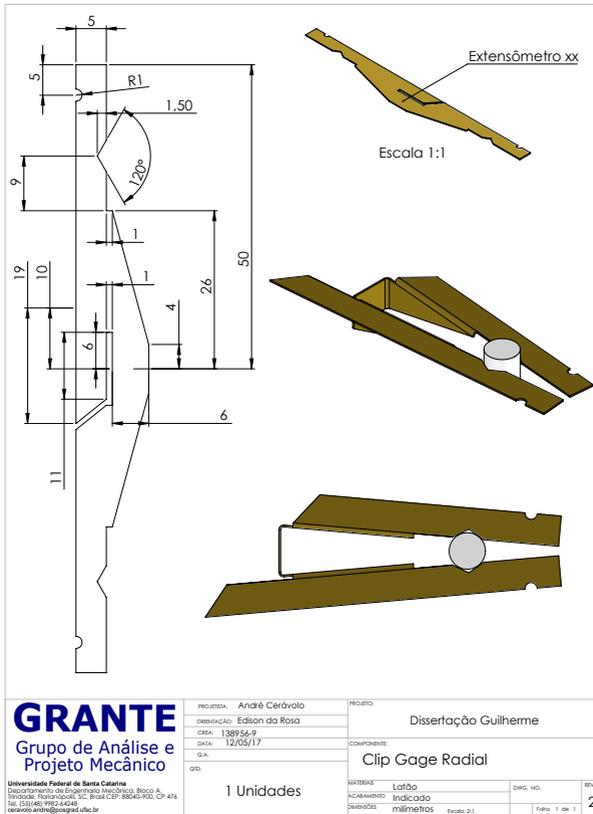


Figura 6.10: Desenho com as dimensões da chapa utilizada para fabricar o clip gage de medição diametral após o corte, juntamente com uma ilustração do clip gage após o dobramento e pronto para utilização. Desenho elaborado pelo autor.

O clip gage é fixado ao corpo de prova por dois braços que acompanham o movimento lateral (fig. 6.11), possibilitando uma medição da variação do diâmetro do corpo de prova. O dispositivo se mostrou de difícil utilização, apresentando problemas de movimentação durante a realização de ensaios experimentais. Devido à inconsistência dos resultados obtidos por este método, melhor discutida na seção de conclusões, os resultados obtidos por esse método de medição não são considera-

dos, porém a experiência obtida com a construção e utilização deste dispositivo permitem concluir que para esta aplicação, métodos de medição de deslocamento sem contato são mais adequados, o que motivou a proposição de um método de medição óptico.

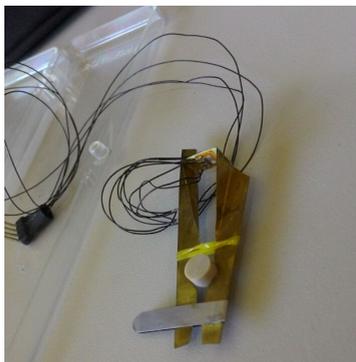


Figura 6.11: Clip gage utilizado para medir a variação do diâmetro do corpo de prova. Fotografia realizada pelo autor.

A medição óptica é feita utilizando um algoritmo de detecção de perfis em imagens digitais disponível nas ferramentas de processamento de imagens (*Image Processing Toolbox*) do MATLAB. A aquisição de imagens foi feita utilizando uma câmera modelo Flea3-SW-14S3C-C, da marca Point Grey, que filma o corpo de prova durante o ensaio mecânico.



Figura 6.12: Exemplo de utilização das ferramentas de detecção de perfis do matlab. Imagem adaptada da documentação do Matlab 2013a.

Neste trabalho, foi proposta a detecção de perfis para calcular uma distância média entre as bordas do corpo de prova durante o ensaio. A razão entre esse valor médio e o diâmetro inicial do corpo de prova fornece um valor de deformação diametral em cada instante, o que possibilita a avaliação do diâmetro do corpo de prova em cada imagem adquirida durante o ensaio. Esse método é baseado nas seguintes hipóteses:

- Supõe-se um alinhamento horizontal entre a câmera e o corpo de prova. Esse alinhamento foi verificado utilizando um tripé profissional da marca Manfrotto com níveis posicionados para avaliar o alinhamento horizontal 6.13.
- Assume-se que o corpo de prova se deforma de tal forma que a sua seção transversal permanece circular durante o ensaio. Dessa forma o ângulo entre o corpo de prova e a câmera (na direção horizontal) não influencia o resultado.



Figura 6.13: Configuração da câmera, tripé e Emic utilizada. Fotografia realizada pelo autor.

6.4 Pós processamento

6.4.1 Interpolação

Após a obtenção dos dados das medições, é necessário realizar uma sincronização destes dados, pois estes provêm de sistemas de aquisição diferentes: valores de força são adquiridos pelo software próprio da Emic, os dados do LVDT e clip gage são adquiridos pelo software do sistema de aquisição HBM, e a variação do diâmetro é obtida a partir das imagens registradas pela câmera. Essa sincronização foi feita utilizando pontos reconhecíveis nas curvas obtidas pelos sistemas de aquisição de dados: o ponto de início de movimento e o ponto de valor máximo do deslocamento. Tomando esses pontos como referência, foi

feita uma interpolação dos dados do HBM e das câmeras, em relação aos dados da Emic.

6.4.2 Cálculo de área e volume

A variação do volume, como descrito anteriormente, é obtida a partir da filmagem do ensaio e de um pós processamento envolvendo o método de detecção de perfis disponível no *Toolbox* do MATLAB. O primeiro passo nesse processo é a separação do arquivo de vídeo em um conjunto de imagens, uma para cada *frame* do vídeo. A seguir, um algoritmo do MATLAB realiza a detecção de perfis, imagem por imagem. Como resultado da detecção de perfis é obtido, para cada *frame* do vídeo, um arquivo de imagem em preto e branco, onde os pontos brancos indicam os perfis detectadas na imagem.

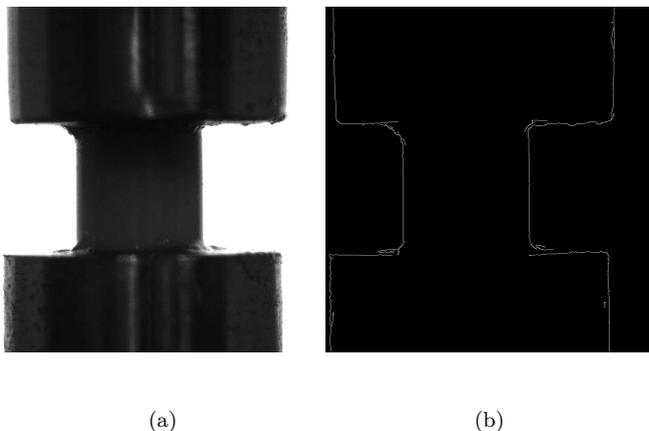


Figura 6.14: Imagem obtida pela câmera durante o ensaio (a) sem tratamento e (b) após a utilização da detecção de perfis.

As coordenadas em pixel desses pontos são utilizadas para estimar o diâmetro do corpo de prova. Esse cálculo é feito identificando as coordenadas dos pontos pertencentes à borda direita e esquerda do corpo de prova, e calculando um média das coordenadas desses pontos

na direção horizontal, para cada lado. Dessa forma é obtido um valor de coordenada média para cada borda lateral, e subtraindo-se esses valores é calculada uma estimativa do diâmetro do corpo de prova. Esse processo é realizado em cada imagem, de forma automática utilizando um algoritmo escrito em MATLAB.

Os dados do vídeo também são utilizados para estimar o volume do corpo de prova. Propõe-se aqui dois diferentes métodos de cálculo de volume. O primeiro método utiliza a estimativa do diâmetro calculada anteriormente para calcular um valor de área de seção transversal média (equação 6.1).

$$A_m = \frac{\pi d_m^2}{4} \quad (6.1)$$

Sendo L_0 o comprimento inicial do corpo de prova e ΔL_{lvdt} a medição de deslocamento do LVDT, uma primeira estimativa do volume do corpo de prova pode ser obtida a partir da equação 6.2.

$$V_1 = A_m (L_0 - \Delta L_{lvdt}) \quad (6.2)$$

Esse método fundamenta-se na hipótese de que o corpo de prova se deforma de forma homogênea, e na situação ideal em que o corpo de prova mantém um perfil cilíndrico durante o ensaio único erro imbutido no resultado é o próprio erro de medição. Conforme ele se deforma mais, os efeitos de atrito entre a superfície de contato entre o corpo de prova e o dispositivo de ensaio começam a se tornar relevantes causando o efeito de abarrilamento, de forma que o resultado obtido pode não representar com exatidão a variação de volume durante o ensaio. De qualquer forma, o resultado obtido pode ser interpretado como uma estimativa, pois a partir de observações visuais do corpo de prova antes, durante, e depois do ensaio, assim como medições arbitrárias do diâmetro dos corpos de prova antes e depois do ensaio utilizando um paquímetro, julgou-se que, ao menos para os níveis de deformação alcançados nesse ensaio (aproximadamente 0,45 de deformação logarítmica), o corpo de prova mantém um perfil suficientemente cilíndrico para que o resultado obtido seja representativo.

Contudo, com os dados disponíveis uma possível melhor estimativa do volume poderia ser obtida considerando o efeito de abarrilamento do corpo de prova durante o ensaio. Dessa forma, um segundo método de cálculo de volume foi proposto. Nesse segundo método os pontos das bordas do corpo de prova são utilizados para interpolação

de duas curvas quadráticas que contornam (de forma aproximada) as bordas laterais do corpo de prova, em cada imagem. É definido um eixo central na imagem, a partir da coordenada média de todos os pontos das bordas laterais, e para cada curva é realizada uma integral de revolução, de modo que para cada curva interpolada é obtido um valor de volume de sólido de revolução (V_{re} sendo o valor da integral de revolução da borda esquerda e V_{rd} da borda direita). A borda do dispositivo de compressão é utilizada para estimar limites inferiores e superiores para a integral de revolução, utilizando o algoritmo de detecção de perfis para identificar as bordas nas regiões de contato entre o dispositivo de compressão e o corpo de prova.

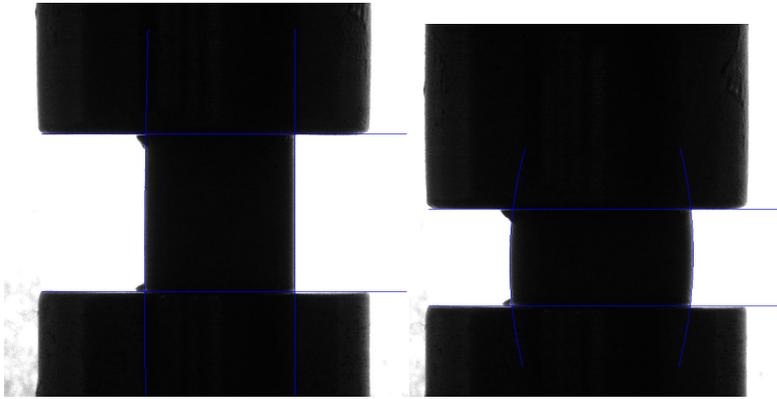


Figura 6.15: Imagem do corpo de prova com as linhas azuis representando o limite superior, inferior e os limites laterais em uma das imagens.

Esses dados são utilizados para obter uma estimativa do limite superior e inferior do corpo de prova em cada imagem, e são utilizados como limites de integração no cálculo do volume do sólido de revolução. Note que o resultado da integral de revolução já é por si só uma estimativa do volume do corpo de prova. Sua exatidão depende de uma condição de axisimetria do corpo de prova durante o ensaio, que é uma condição menos rígida do que a condição de deformação homogênea que é baseado o primeiro método. Um segundo ponto a ser levantado sobre esse resultado é que é necessário realizar identificação de perfis do dispositivo de ensaio, na região de contato com o corpo de prova.

Porém em todos os ensaios a câmera foi ajustada de forma que a sua distância focal priorize uma melhor nitidez nas bordas laterais do corpo de prova, priorizando a avaliação de área de secção transversal para o cálculo de tensão real da forma mais precisa possível. Dessa forma, a nitidez da imagem na região de contato do dispositivo de compressão com o corpo de prova não é a melhor possível, o que pode resultar em erros na identificação de perfis nessa região e consequentemente uma pior estimativa dos limites superiores e inferiores.

Numa tentativa de eliminar essa fonte de erro, foi proposta uma adaptação. Note que a integral de revolução só faz sentido se os limites de integração forem os limites superiores e inferiores do corpo de prova na imagem. Porém após o cálculo do volume do sólido de revolução, podemos definir um valor de área fictícia como sendo a média dos dois valores da integral de revolução realizadas (equação 6.3), dividido pela distância entre a borda superior dY_s e inferior dY_i do corpo de prova obtida anteriormente a partir da identificação das perfis (equação 6.4).

$$V_{rm} = \frac{V_{re} + V_{rd}}{2} \quad (6.3)$$

$$A_f = \frac{V_{rm}}{(dY_s - dY_i)} \quad (6.4)$$

Sendo L_0 o comprimento inicial do corpo de prova e ΔL_{lvdt} a medição de deslocamento do LVDT, uma segunda estimativa para o volume do corpo de prova pode ser obtida pela equação 6.5.

$$V_1 = A_f \cdot (L_0 - \Delta L_{lvdt}) \quad (6.5)$$

6.4.3 Verificação da técnica de cálculo de volume

Para verificação da efetividade técnica de cálculo de volume, propôs-se testar o algoritmo em videos obtidos por simulações numéricas. Dessa forma, foi criado um modelo do ensaio de compressão realizado, onde um cilindro de 6 mm de diâmetro e 6 mm de altura é comprimido entre duas superfícies rígidas e o atrito de contato entre esses corpos é controlado. O cilindro foi modelado como um material elástico linear, com módulo de elasticidade igual à 3000 MPa.

Primeiramente, foi contruído um caso simples em que não há atrito de contato entre as partes, o coeficiente de poisson é igual a 0,

e é aplicado um deslocamento de 3 mm, de forma que se espera que ocorra uma variação de 50% de volume (figura 6.16).

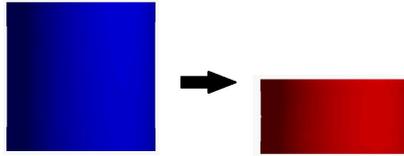


Figura 6.16: Caso 1 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0, atrito igual a 0, deslocamento de 3 mm.

Os resultados obtidos, mostrados na figura 6.17, mostram uma variação de volume linear com o tempo, e resultados praticamente iguais para os dois métodos. O volume varia 50,57%, valor muito próximo do resultado esperado de 50% de variação de volume.

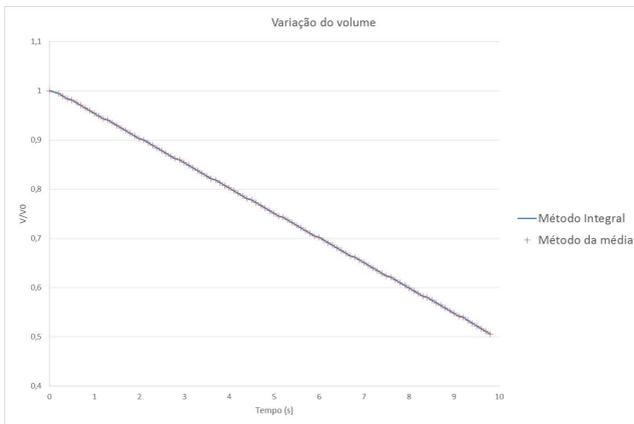


Figura 6.17: Curva de variação de volume para o caso 1.

Considerando agora um segundo caso, no qual o coeficiente de atrito entre as partes é igual à 0,17, e de forma a induzir um comportamento próximo do isocórico, o coeficiente de poisson foi definido

como 0,4999. É aplicado um deslocamento de 2,45 mm (figura 6.18), de forma a reproduzir o valor de deslocamento total aplicado nos ensaios experimentais.



Figura 6.18: Caso 2 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0,4999, atrito igual a 0,17, deslocamento de 2,45 mm.

A figura 6.19 mostra a curva de variação de volume por tempo para esse caso. O resultado obtido indica que o método detectou uma variação mínima de volume, como esperado pelos parâmetros de material definidos.

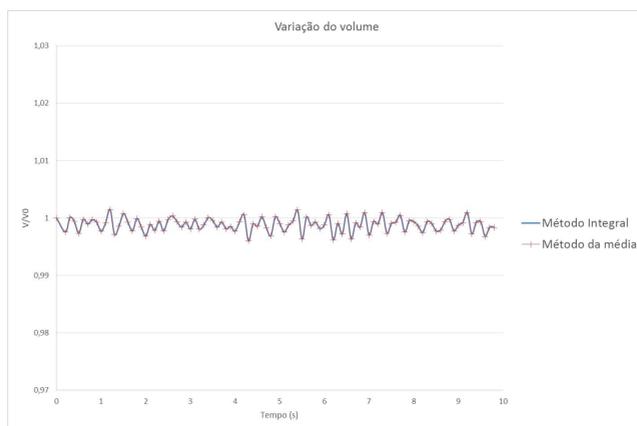


Figura 6.19: Curva de variação de volume para o caso 2.

Um terceiro caso foi testado visando verificar a precisão da medida de volume considerando uma situação de deformação altamente

não homogênea, e efeito de abarrilamento exagerado. De forma a induzir tal situação, foi definido um valor de coeficiente de atrito igual à 2,5 e coeficiente de poisson igual à 0,4999.



Figura 6.20: Caso 3 para verificação de volume - coeficiente de poisson igual a 0,4999, atrito igual a 2,5, deslocamento de 2,45 mm.

A figura 6.21 mostra a curva de variação de volume por tempo para esse caso. O resultado obtido indica que o método detectou uma variação positiva de volume de aproximadamente 1,25% para o método da integral de revolução e 0,75% para o método do volume médio.

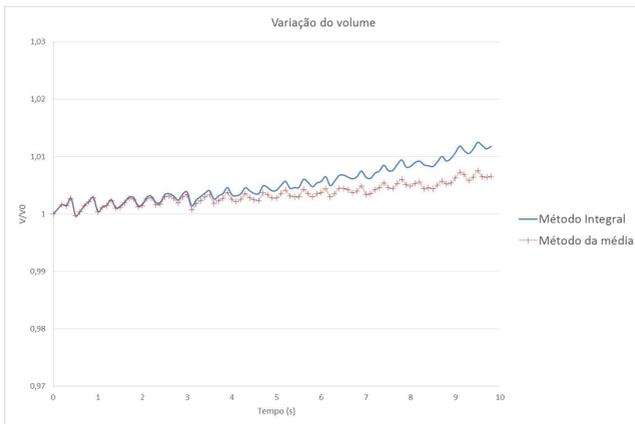


Figura 6.21: Curva de variação de volume para o caso 3.

Analisando o resultado obtido, pode-se dizer que ambas as técnicas tendem a obter resultados que mostram uma tendência de aumento

de volume. Mesmo assim, considerando o resultado correto o comportamento isocórico, a diferença verificada de 1,25% e 0,75% é tida como aceitável para os propósitos desse trabalho. Para trabalhos futuros sugere-se verificar a influência de alterações no método, como a utilização de funções mais complexas do que a equação de segundo grau utilizada para interpolação dos pontos das bordas laterais, o que permitiria em teoria uma melhor aproximação do perfil do corpo de prova quando deformado de forma a apresentar o aspecto típico de barril, pois como mostra a figura 6.22, é visível que a curva quadrática resulta numa pequena sobre estimativa do volume do corpo de prova devido à incapacidade de acompanhar as bordas nas regiões próximas à face de contato com atrito. De fato, essa verificação permite atribuir a tenência da técnica em prever um aumento de volume à esse efeito.



Figura 6.22: Área de detecção de perfis, e curvas quadráticas interpoladas para aproximação do perfil lateral do corpo de prova no último frame do caso 3.

É importante ressaltar que esses testes permitem realizar apenas uma verificação do método de cálculo, isolando os aspectos ópticos. Dessa forma, a diferença verificada aqui não representa uma estimativa de erro do método como um todo, visto que erros devidos à qualidade de imagem e de distorção de imagem não estão sendo verificados.

6.4.4 Metodologia de ajuste de parâmetros para os modelos propostos

O processo de otimização e ajuste de parâmetros é feito considerando a hipótese de campo de deformações e tensões uniforme e

uniaxial. As equações cujos parâmetros são ajustados são dadas pela expressão 4.50 referente ao modelo de Farias, e pela expressão 5.15, referente ao modelo de Bergström. Para ajuste de curva, propôs-se utilizar o método de otimização por enxame de partículas (em inglês: *particle swarm optimization* ou **PSO**), usando os parâmetros $C1 = C2 = 2$ (del Valle et al., 2008). Escapa do escopo desse trabalho explicar o funcionamento do método e a base teórica, dessa forma para detalhes sobre o PSO o leitor é convidado a verificar textos especializados como por exemplo o trabalho de del Valle et al. (2008). Para os fins aqui propostos, basta notar que pra esse ajuste foi definido uma função objetiva a ser minimizada utilizando o método PSO, como sendo a soma o quadrado da diferença entre o valor de tensão experimental e o valor de tensão fornecido pelo modelo, considerando os valores de tensão para três taxas ($\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$) avaliados desde instante inicial de carregamento até o instante final em intervalos iguais de deformação, como mostra a equação 6.6.

$$f_{obj} = \sum_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_f} \left[(\sigma_{exp}^1(\varepsilon) - \sigma_{modelo}^1(\varepsilon))^2 + (\sigma_{exp}^2(\varepsilon) - \sigma_{modelo}^1(\varepsilon))^2 + (\sigma_{exp}^3(\varepsilon) - \sigma_{modelo}^3(\varepsilon))^2 \right] \quad (6.6)$$

7 Resultados

Nessa seção, pretende-se apresentar os resultados obtidos dos ensaios experimentais, assim como o ajuste de parâmetros realizado com os modelos constitutivos propostos nesse trabalho e a discussão desses resultados.

7.1 Resultados experimentais

Foram realizados três ensaios de compressão monotônica para cada nível taxa de deformação como indicado na tabela 3, totalizando nove ensaios.

Identificação	Velocidade nominal (mm/s)	Comprimento/diâmetro inicial (mm)
CP 30	$v = 0,06$	6,056 / 5,973
CP 36	$v = 0,06$	6,011 / 5,966
CP 37	$v = 0,06$	5,949 / 5,964
CP 29	$v = 0,006$	6,025 / 5,964
CP34	$v = 0,006$	5,907 / 5,965
CP35	$v = 0,006$	6,021 / 5,973
CP 31	$v = 0,0006$	6,016 / 5,961
CP 32	$v = 0,0006$	6,014 / 6,017
CP 33	$v = 0,0006$	6,019 / 5,962

Tabela 3: Descrição dos corpos de prova utilizados, com a descrição das dimensões medidas logoantes do ensaio mecânico.

Para análise dos resultados em diferentes taxas de deformação, foram escolhidos três corpos de prova representativos, um para cada taxa de deformação: CP 33 como representante para taxa de deformação de $0,0001 (1/s)$, CP 35 como representante para taxa de deformação de $0,001 (1/s)$, CP 36 como representante para taxa de deformação de $0,01 (1/s)$. Nessa seção serão apresentados e analisados resultados obtidos destes três ensaios. O conjunto completo dos resultados obtidos é mostrado no apêndice.

Resultados de tensão por deformação são mostrados na figura 7.1.

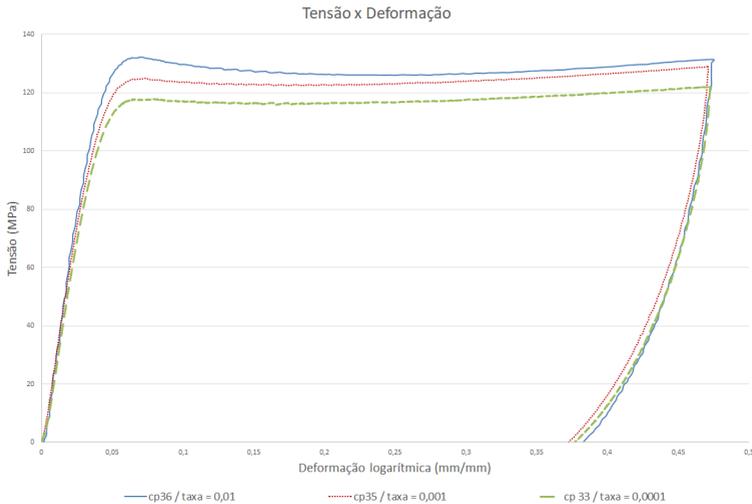


Figura 7.1: Curvas de tensão real por deformação logarítmica para diferentes taxas de deformação.

Uma diferença máxima de cerca de 10 MPa é observada entre os testes realizados com PEEK com duas décadas de diferença na taxa de deformação aplicada.

Taxa	Valor máximo de tensão
$10^{-2}(1/s)$	132,2 MPa
$10^{-3}(1/s)$	129,3 MPa
$10^{-4}(1/s)$	122,1 MPa

Tabela 4: Valores máximos de tensão verificados para os ensaios em cada taxa de deformação.

Para quantificar a inclinação da curva na região inicial, em que o material se comporta de forma aproximadamente linear, foi definido um

módulo de compressão como sendo a inclinação reta que melhor ajusta os dados obtidos até um valor tensão arbitrário no qual se observa que a curva tem um comportamento suficientemente linear. Considerando todas as curvas até um valor de 60 MPa, temos então os seguintes valores para o módulo de compressão E_c^{60} , para diferentes taxas:

$\dot{\epsilon} = 0,0001(1/s)$			
Corpo de prova	CP31	CP32	CP33
E_c^{60} (MPa)	3150,0	3169,9	2962,8
Média	3094, 2 \pm 93, 3		

Tabela 5: Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-4} (1/s).

$\dot{\epsilon} = 0,001(1/s)$			
Corpo de prova	CP29	CP34	CP35
E_c^{60} (MPa)	3064,8	3247,2	3136,3
Média	3149, 4 \pm 75, 0		

Tabela 6: Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-3} (1/s).

$\dot{\epsilon} = 0,01(1/s)$			
Corpo de prova	CP30	CP36	CP37
E_c^{60} (MPa)	3111,1	3151,7	3302,1
Média	3188, 3 \pm 82, 2		

Tabela 7: Módulo de compressão obtido para os ensaios realizados à uma taxa de deformação igual à 10^{-2} (1/s).

Para fins de comparação, são mostrados na tabela abaixo os valores obtidos nesse trabalho, em comparação com estimativas da inclinação das curvas de tensão por deformação reais obtidos por Rae

et al. (2007) e El-Qoubaa e Othman (2015a), para a mesma taxa de deformação e utilizando o método de quantificação da inclinação da curva descrito anteriormente, temos:

Trabalho	Rae et al	El-Qoubaa et al	Resultado 1	Resultado 2
Taxa	$10^{-3}(1/s)$	$1,7 \times 10^{-4}(1/s)$	$10^{-3}(1/s)$	$10^{-4}(1/s)$
E_c^{60} (MPa)	4172	3276,9	3149,4	3094,2

Tabela 8: Comparação dos resultados médios de inclinação da curva de tensão por deformação para duas taxas, com os estimados a partir dos resultados de outros trabalhos da literatura.

Resultados para variação de volume, medida utilizando os métodos apresentados na subseção 6.4, são mostrados abaixo para os CPs 33, 35 e 36, representativos de cada taxa de deformação testada. Os resultados são normalizados pelo valor do volume inicial de cada corpo de prova, calculado a partir de medições de altura e diâmetro realizadas com um micrômetro. Para cada corpo de prova, são mostrados as curvas de variação de volume pelo primeiro e segundo método, em função da deformação logarítmica.

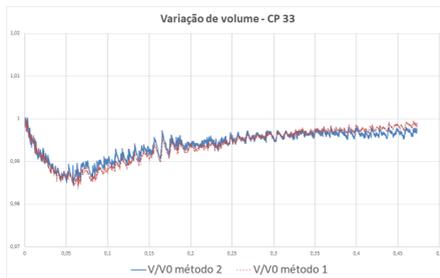


Figura 7.2: Variação de volume para o CP 33, taxa de deformação aproximadamente $10^{-4} (1/s)$.

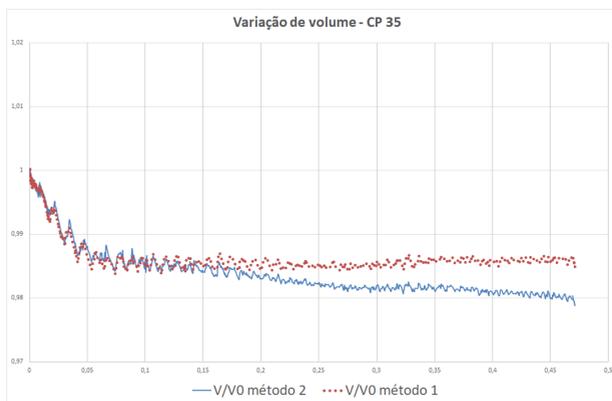


Figura 7.3: Variação de volume para o CP 35, taxa de deformação aproximadamente 10^{-3} ($1/s$).

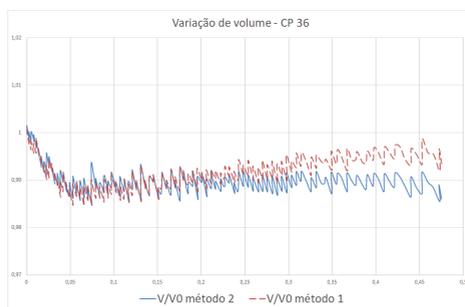


Figura 7.4: Variação de volume para o CP 36, taxa de deformação aproximadamente 10^{-2} ($1/s$).

7.2 Resultados do ajuste de parâmetros

Os resultados para o ajuste de parâmetros são mostrados em três gráficos de tensão por deformação (figuras 7.5, 7.6 e 7.7), um para cada taxa de deformação testada, sendo que em cada gráfico é mostrado uma curva experimental e duas curvas ajustadas, uma para cada modelo

proposto.

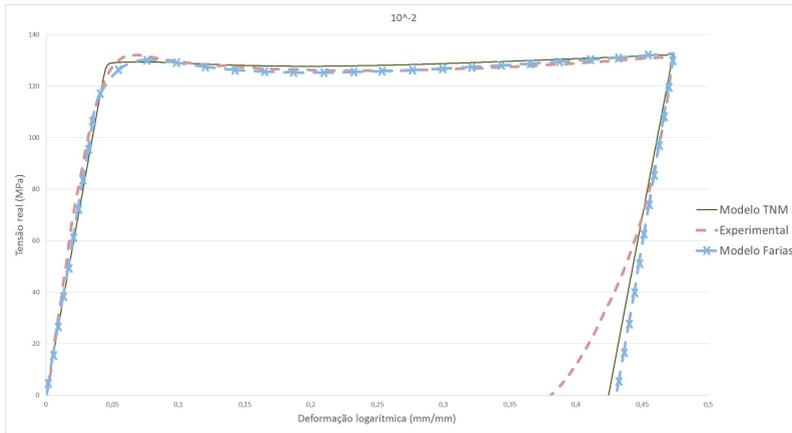


Figura 7.5: Curvas ajustadas para taxa de $10^{-2}(1/s)$ e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 36.

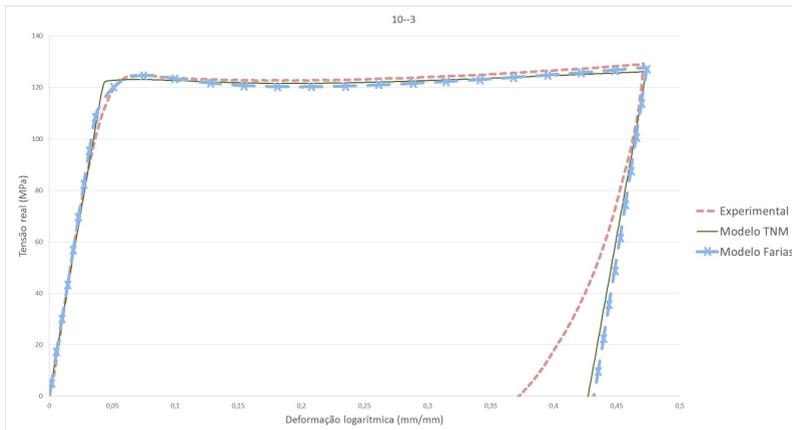


Figura 7.6: Curvas ajustadas para taxa de $10^{-3}(1/s)$ e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 35.

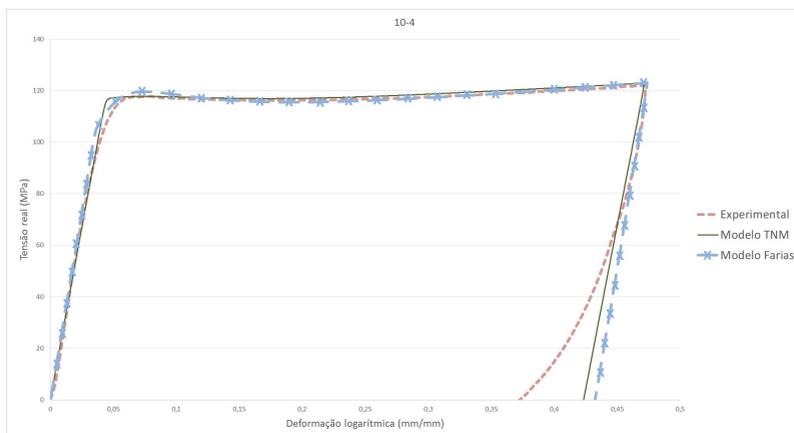


Figura 7.7: Curvas ajustadas para taxa de $10^{-4}(1/s)$ e dados experimentais obtidos a partir do ensaio do CP 33.

Os parâmetros ajustados para cada modelo são mostrados nas tabelas 9 e 10.

Parâmetro	Valor ajustado
G	1207,4
κ	1500
μ	25,6
λ	7.4
m	0.018
s_0	69.88
r_0	1
ζ	25.52
s_∞	69.88
β	18.08
γ	24.91

Tabela 9: Parâmetros do modelo de Farias.

Parâmetro	Valor ajustado
μ_A	973,8
λ_{lock}	24.72
κ	1435
$\hat{\tau}_A$	107.28
a	0.112
m_A	46.03
μ_{Bi}	55.73
μ_{Bf}	4.11
β	15.115
$\hat{\tau}_B$	84.6
m_B	75.65
μ_C	4.77

Tabela 10: Parâmetros do modelo TNM.

8 Conclusões

8.1 Atividades realizadas

Neste trabalho foi realizado uma série de atividades tanto no âmbito experimental quanto no âmbito numérico-matemático, para a obtenção dos resultados mostrados. Em ambos, certas atividades foram realizadas a partir de procedimentos e ideias desenvolvidas neste trabalho, e outras foram reproduzidas tomando como referência trabalhos anteriores. Pretende-se nesta subsecção realizar um sumário das atividades realizadas, clarificando os aspectos de novidade deste trabalho.

Primeiramente no âmbito experimental, o dispositivo de ensaio uniaxial utilizado foi proposto, projetado e validado no trabalho de Sonnenhohl (2015). Desta forma, as contribuições deste trabalho no âmbito experimental são dadas por:

- Proposição e verificação de metodologia de ensaio - definição de aparato, parâmetros e método de ensaio experimental.
- Proposição e verificação de técnicas de medição de deslocamentos: método de *clip-gage* para medição de diâmetro e método de medição de deslocamentos detecção de perfis em imagens digitais.

- Técnica de pós processamento dos dados experimentais.

No âmbito numérico-computacional, os modelos constitutivos, na forma de potenciais termodinâmicos, restrições cinemáticas, leis de evolução de variáveis internas e equações de tensão, foram desenvolvidos em trabalhos anteriores. Desta forma, as contribuições deste trabalho no âmbito numérico-computacional são dadas por:

- Proposição e verificação de metodologia de implementação numérica e de solução dos modelos proposto por Farias et al. (2017) e Bergström (2015).
- Proposição e verificação de metodologia de calibração de parâmetros de material dos modelos acima citados, para reproduzir o comportamento mecânico do PEEK.

8.2 Comportamento mecânico - tensão e deformação

É evidente a sensibilidade à taxa de deformação do PEEK, porém a sensibilidade verificada é menor do que a de outros polímeros de alto desempenho utilizados em aplicações biomédicas, como o UHMWPE (Sonnenhohl, 2015) e o PMMA (Moy et al., 2011). Esse comportamento é observado também nos resultados obtidos por Rae et al. (2007) para compressão de PEEK 450G com taxas de deformação variando na faixa de $10^{-2}(1/s)$. até $10^{-3}(1/s)$. Não foi possível a comparação da sensibilidade do PEEK 450G à taxa de deformação nessa faixa com outros trabalhos, pois em todos os estudos encontrados o material era testado em um caso quase estático em geral menor que 10^{-3}) em seguida eram analisados casos com taxas muito maiores, correspondendo à casos de carregamento dinâmico e impacto.

Para valores de tensão baixos, na região em que o material apresenta uma dependência linear da tensão e deformação, a influência da taxa de deformação é pouco perceptível. A inclinação das curvas de tensão por deformação obtidas nesse trabalho é similar à verificada por El-Qoubaa e Othman (2015a), porém cerca de 25% menor do que o valor verificado por Rae et al. (2007). Uma possível explicação para essa diferença de comportamento são as diferenças do arranjo molecular de cada material, visto que apesar dos dois trabalhos reportarem o uso de PEEK *grade* 450G (equivalente ao *grade* OPTIMA LT1, do material utilizado nesse trabalho), o nível de cristalinidade do material utilizados por El-Qoubaa e Othman (2015a) e por Rae et al. (2007) é

de 27,43% e 39% respectivamente. Dessa forma, os resultados obtidos nesse trabalho são um indicativo de um nível de cristalinidade mais próximo ao do material utilizado por El-Qoubaa e Othman (2015a).

Os valores máximos de tensão observados antes da quebra do início de fluência inelástica ocorrem em níveis comparáveis aos resultados verificados em outros trabalhos, em particular os trabalhos de El-Qoubaa e Othman (2015a) e Rae et al. (2007), que estudam PEEK de *grade* equivalente. Após o valor máximo de tensão e início de escoamento inelástico, observa-se uma manutenção do valor de tensão alcançado, sem encruamento ou amolecimento significativo do material. Resultados similares são verificados em outros trabalhos com PEEK em temperatura ambiente.

8.3 Comportamento mecânico - variação volumétrica

Quanto à variação de volume, os resultados indicam que o PEEK testado apresenta pouca variação de volume durante o ensaio. Considerando dois diferentes métodos de cálculo de volume, a maior variação observada foi de cerca de 2,1% em relação ao volume inicial. Além disso, não se nota uma mudança do comportamento das curvas de variação de volume ao se alterar a taxa de deformação, de forma que pode-se dizer que há uma mínima influência da taxa de deformação na variação de volume. Esses resultados são compatíveis com os apresentados por El-Qoubaa e Othman (2014), que estudou a variação de volume a PEEK 450G em diferentes taxas de deformação, e verificou baixos níveis de variação volumétrica e pouca sensibilidade à taxa de deformação. Observado as curvas levantadas, é conveniente mencionar dois comentários:

1. Há uma mudança de comportamento em relação a compressibilidade. As curvas indicam que o material se apresenta compressível na região de deformação entre $[0,0.06]$ que corresponde a parte "elástica". Após o início de escoamento, o material se apresenta com comportamento isocórico (manutenção de volume) ou mesmo com recuperação de volume.
2. A recuperação de volume após plastificação pode ser apenas aparente, e motivado pela tendência dos algoritmos estudados a fornecer um valor que sobrestima o volume para deformações apreciáveis, como mostrado na seção 6.4.3.

Isto pode motivar uma conclusão parcial: o material apresenta comportamento compressível na região elástica e isocórico em deformações inelásticas, consistente com as hipóteses do modelo. Como não foi feito um estudo de estimativa de erro, há espaço para contestação dos resultados obtidos. Não obstante, julgou-se que o método de validação da técnica de cálculo de volume apresentado na subseção 6.4.3 confere confiabilidade ao resultado obtido para este que possa ser utilizado como uma estimativa, e o alinhamento dos resultados obtidos em comparação à outros estudos serve como um reforço à essa conclusão.

De qualquer forma, pode-se concluir que a técnica de identificação de perfis se mostrou uma ferramenta flexível e promissora, pois permite realizar a medição de variação de comprimento e volume de forma simples, evitando problemas comuns em outras técnicas de medição como a correlação de imagens digitais (em inglês: *digital image correlation*, ou DIC), como problemas de iluminação durante o ensaio (comum por exemplo em casos de ensaio com corpos de prova pequenos, onde a sombra do dispositivo de ensaio pode prejudicar a medida), e tempo de pós processamento. Apesar do DIC ser capaz de obter um mapeamento de vários pontos em uma imagem, a técnica de identificação de perfis cumpre o que se propõe a fazer, é mais simples e evita alguns problemas comuns. Em trabalhos futuros, uma análise mais profunda da técnica, de erros de medição assim como uma validação desse método pode resultar no desenvolvimento de uma nova técnica de medição para o grupo de trabalho².

8.4 Comportamento do modelo e ajuste de parâmetros

Analisando as curvas mostradas nas figuras 7.5, 7.6 e 7.7 nota-se que, para o caso de compressão uniaxial, o modelo de Farias é capaz modelar de forma bastante satisfatória o comportamento mecânico observado no PEEK sob compressão uniaxial durante a etapa de carre-

²Foi feito uma pesquisa na literatura e, apesar de ter sido encontrados diversos trabalhos que reportavam a utilização de técnicas ópticas para medição de comprimento, não foram encontrados relatos especificando a utilização da técnica de identificação de perfis. Uma explicação plausível para esse fato é que a técnica foi considerada desvantajosa em relação à outras técnicas de medição ópticas pela comunidade científica. Porém, como não foi encontrado nenhum trabalho dedicado à estudar a eficiência da técnica de identificação de perfis em comparação com outros métodos ópticos, é mais plausível considerar que esse método ainda é muito pouco conhecido e estudado. Esse fato permite assumir que um trabalho mais aprofundado de estudo dessa tecnica teria um caráter de ineditismo.

gamento. Em comparação com o modelo TNM, o modelo de Farias se mostrou tão efetivo quanto, com a vantagem de ser capaz de reproduzir melhor o comportamento do PEEK na região da curva onde ocorre perda de rigidez e escoamento, pois verifica-se que tensão na curva obtida com o modelo TNM diminui de forma mais brusca em comparação à curva obtida com o modelo de Farias, que se mostra mais capaz de prever a perda de rigidez nessa região. Na etapa de descarregamento, os dois modelos se mostraram incapazes de prever um retorno não linear. Conclui-se que, ao menos para um caso de compressão uniaxial, não há desvantagens ao utilizar o modelo de Farias, e esse se mostrou mais eficaz em prever o comportamento complexo do PEEK na região de perda de rigidez.

Essa verificação é uma importante informação para o processo de validação do modelo proposto por Farias como um modelo capaz de prever o comportamento de polímeros termoplásticos como o PEEK. Uma segunda etapa desse estudo seria a realização de testes de tração e torção para ajuste de parâmetros considerando outros casos de carregamento, e fica como sugestão para trabalhos futuros. Outra possível linha de trabalho subsequente seria a utilização dos parâmetros ajustados nesse trabalho para o estudo da capacidade do modelo de Farias em prever o comportamento do PEEK em situações de carregamento tridimensional, comparando-o ao modelo TNM³.

³Foi considerado incluir a realização desse estudo nos objetivos desse trabalho, porem a implementação do modelo TNM para utilização conjunta com a técnica de elementos finitos para um estudo tridimensional se mostrou uma tarefa bastante complexa, e que poderia ser o objeto de um trabalho por si só. Devido à limitação de tempo, decidiu-se deixar um estudo desse tipo como sugestão para trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

- EN ISO 604. Plastics -Determination of compressive properties, 2003.
- D695-15. Test Method for Compressive Properties of Rigid Plastics., 2015.
- E. M. Arruda e M. C. Boyce. A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(2):389–412, 1993. ISSN 00225096. doi: 10.1016/0022-5096(93)90013-6.
- M. Berer, Z. Major, G. Pinter, D. M. Constantinescu, e L. Marsavina. Investigation of the dynamic mechanical behavior of polyetheretherketone (PEEK) in the high stress tensile regime. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 18(4):663–684, 2014. ISSN 13852000. doi: 10.1007/s11043-013-9211-7.
- J. S. Bergström. *Mechanics of Solid Polymers - Theory and Computational Modeling*. Elsevier, Chadds Ford, PA, USA, 1 edition, 2015.
- M. C. Boyce, D. M. Parks, e A. S. Argon. Large inelastic deformation of glassy polymers. part I: rate dependent constitutive model. *Mechanics of Materials*, 7(1):15–33, 1988. ISSN 01676636. doi: 10.1016/0167-6636(88)90003-8.
- M. C. Boyce, G. G. Weber, e D. M. Parks. On the kinematics of finite strain plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 37(5):647–665, 1989. ISSN 00225096. doi: 10.1016/0022-5096(89)90033-1.
- S. A. Brown, R. S. Hastings, J. J. Mason, e A. Moet. Characterization of short-fibre reinforced thermoplastics for fracture fixation devices. *Biomaterials*, 11(8):541–547, 1990. ISSN 01429612. doi: 10.1016/0142-9612(90)90075-2.
- W. D. Callister. *Ciência e Engenharia de Materiais - Uma Introdução*. LTC, Rio de Janeiro, 7 edition, 2008. ISBN 047139551X. URL <http://books.google.com/books?id=OTfIngEACAAJ&pgis=1>.
- Y. del Valle, G. Venayagamoorthy, S. Mohagheghi, J.-C. Hernandez, e R. Harley. Particle Swarm Optimization: Basic Concepts, Variants

- and Applications in Power Systems. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 12(2):171–195, 2008. ISSN 1941-0026. doi: 10.1109/TEVC.2007.896686. URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/4358769/>.
- Z. El-Qoubaa e R. Othman. Volume change in polyetheretherketone under compression loads over wide ranges of strain rate and temperature. *Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 49(5):315–324, 2014. ISSN 03093247. doi: 10.1177/0309324713515464. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84903829114&partnerID=40&md5=1724ab56c9baa5d3d59662bfade67c18>.
- Z. El-Qoubaa e R. Othman. Characterization and modeling of the strain rate sensitivity of polyetheretherketone’s compressive yield stress. *Materials and Design*, 66(PA):336–345, 2015a. ISSN 18734197. doi: 10.1016/j.matdes.2014.10.080. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2014.10.080>.
- Z. El-Qoubaa e R. Othman. Tensile Behavior of Polyetheretherketone over a Wide Range of Strain Rates. *International Journal of Polymer Science*, 2015, 2015b. ISSN 16879430. doi: 10.1155/2015/275937.
- Z. El-Qoubaa e R. Othman. Strain rate sensitivity of polyetheretherketone’s compressive yield stress at low and high temperatures. *Mechanics of Materials*, 95:15–27, 2016. ISSN 01676636. doi: 10.1016/j.mechmat.2015.12.008. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechmat.2015.12.008>.
- J. C. Farias, L. Stainier, e E. A. Fancello. A Variational Visco-Hyperelastic Constitutive Model for Glassy Polymers. 2017.
- S. Green e J. Schlegel. A polyaryletherketone biomaterial for use in medical implant applications. *Polymers for the Medical Industry, Proceedings of a Conference held in Brussels*, pages 1–7, 2001.
- M. Gurtin, E. Fried, e L. Anand. *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*. Cambridge University Press, 2010. ISBN 9788578110796. doi: 10.1017/CBO9781107415324.004.
- J.-L. Halary, F. Lauprêtre, e L. Monnerie. *Polymer Materials - Macroscopic Properties and Molecular Interpretations*. 2011. ISBN 9780470616192.

- S. Hamdan e G. Swallowe. The strain-rate and temperature dependence of the mechanical properties of polyetherketone and polyetheretherketone. *Journal of Materials Science*, 31:1415–1423, 1996. ISSN 0022-2461. doi: 10.1007/BF00357847. URL <http://link.springer.com/10.1007/BF00357847>.
- N. J. Higham. The Scaling and Squaring Method for the Matrix Exponential Revisited. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 26(4):1179–1193, 2005. ISSN 0895-4798. doi: 10.1137/04061101X. URL <http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/04061101X>.
- G. Holzapfel. *Nonlinear solid mechanics: A continuum approach for engineering*, volume First Edit. 2000. ISBN 0471823198. doi: 10.1023/A:1020843529530. URL <http://www.citeulike.org/group/2006/article/1044720>.
- R. Jedynek. Approximation of the inverse langevin function revisited. *Rheologica Acta*, 54(1):29–39, 2015. ISSN 00354511. doi: 10.1007/s00397-014-0802-2.
- M. Jirasek e Z. P. Bazant. Inelastic Analysis of Structures,. *Aerospace*, (January 2002):760, 2001. ISSN 1615-147X. doi: 10.1007/s00158-002-0217-z.
- C. S. Jog. *Continuum mechanics*, volume 1. Cambridge University Press, 2015.
- S. M. Kurtz. *PEEK Biomaterials Handbook*. Elsevier, 1 edition, 2012. ISBN 9781437744637. doi: 10.1016/B978-1-4377-4463-7.10001-6.
- S. M. Kurtz e J. N. Devine. PEEK biomaterials in trauma, orthopedic, and spinal implants, 2007. ISSN 01429612.
- J. Lu e K. Ravi-Chandar. Inelastic deformation and localization in polycarbonate under tension. *International Journal of Solids and Structures*, 36(3):391–425, 1999. ISSN 0020-7683. doi: 10.1016/S0020-7683(98)00004-3. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768398000043>
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768398000043/pdf?md5=16e612772a9eca937a5557a25eeaeef9&pid=1-s2.0-S0020768398000043-main.pdf>.
- P. Mélé e N. D. Albérola. Tensile Mechanical Properties of PEEK Films Over a Wide Range of Strain Rates . II. pages 1053–1059, 1996.

- C. Miehe, S. Göktepe, e J. Méndez Diez. Finite viscoplasticity of amorphous glassy polymers in the logarithmic strain space. *International Journal of Solids and Structures*, 46(1):181–202, 2009. ISSN 00207683. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2008.08.029. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2008.08.029>.
- P. Moy, C. A. Gunnarsson, T. Weerasooriya, e W. Chen. Stress-Strain Response of PMMA as a Function of Strain-Rate and Temperature. *Dynamic Behavior of Materials*, 1:125–133, 2011. ISSN 21915644. doi: 10.1007/978-3-319-00771-7. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84892622822&partnerID=tZ0tx3y1>.
- A. D. Mulliken e M. C. Boyce. Mechanics of the rate-dependent elastic-plastic deformation of glassy polymers from low to high strain rates. *International Journal of Solids and Structures*, 43(5):1331–1356, 2006. ISSN 00207683. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2005.04.016.
- E. A. d. S. Neto, D. Peric, e D. R. J. Owen. *Computational Methods for Plasticity: Theory and Applications*. 2009. ISBN 0470694521. doi: 10.1002/9780470694626.
- M. Ortiz e L. Stainier. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 171(3-4):419–444, 1999. ISSN 00457825. doi: 10.1016/S0045-7825(98)00219-9.
- P. J. Rae, E. N. Brown, e E. B. Orler. The mechanical properties of poly(ether-ether-ketone) (PEEK) with emphasis on the large compressive strain response. *Polymer*, 48(2):598–615, 2007. ISSN 00323861. doi: 10.1016/j.polymer.2006.11.032.
- H. Skinner. Composite technology for total hip arthroplasty. *Clinical Orthopaedics and Related Research*, 235:224–236, 1988. ISSN 0009-921X.
- A. Sonnenhohl. *Desenvolvimento e implementação de procedimentos experimentais para caracterização mecânica de polímeros termoplásticos. Estudo de Caso: UHMWPE*. PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2015.
- L. H. Sperling. *Introduction to Physical Polymer Science*, volume 78. 2006. ISBN 9780471706069. doi: 10.1021/ed078p1469.1. URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed078p1469.1>.

C. Truesdell, W. Noll, e A. C. Pipkin. The Non-Linear Field Theories of Mechanics. *Journal of Applied Mechanics*, 33(4):958, 1966. ISSN 00218936. doi: 10.1115/1.3625229. URL <http://appliedmechanics.asmedigitalcollection.asme.org/article.aspx?articleid=1398030>.

S. Walley e J. Field. Strain rate sensitivity of polymers in compression from low to high rates. *DYMAT Journal*, 1(3):211–227, 1994.

I. M. Ward e J. Sweeney. *Mechanical properties of solid polymers*. 2012. ISBN 97811119967125. doi: 10.1002/97811119967125. URL <http://doi.wiley.com/10.1002/97811119967125>.

D. F. Williams, A. McNamara, e R. M. Turner. Potential of polyetheretherketone (PEEK) and carbon-fibre-reinforced PEEK in medical applications. *Journal of Materials Science Letters*, 6(2):188–190, 1987. ISSN 02618028. doi: 10.1007/BF01728981.

APÊNDICES

A Condições de otimalidade do problema incremental variacional

A.1 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \left[\Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \mathcal{Y} \right. \\ &\quad \left. + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} + \lambda_N \left(\mathbf{N} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Note que os termos $\frac{\partial \Psi^n}{\partial \mathbf{N}}$ e $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \mathbf{N}}$ são nulos, portanto temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}} &= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{N}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N}] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \left[\lambda_N \left(\mathbf{N} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N}] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

A.1.1 Avaliação de $\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{N}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{N}} &= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \frac{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}{\partial \mathbf{N}} \\ &= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

mas note que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n] : \mathbf{W} &= \left(\frac{\partial \text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]}{\partial \mathbf{N}} : \mathbf{W} \right) [\mathbf{F}_i^n] \\ &= \Delta t \hat{r} (\mathbb{E} : \mathbf{W}) [\mathbf{F}_i^n] \\ &= \Delta t \hat{r} \mathbb{E} (\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^n) : \mathbf{W} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

o que implica o resultado

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\text{EXP} [\Delta t \dot{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n] = \Delta t \dot{r} \mathbb{E} (\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^n) \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\mathbb{E} = \frac{\partial \text{EXP} [\Delta t \dot{r} \mathbf{N}]}{\partial (\Delta t \dot{r} \mathbf{N})} \quad (\text{A.6})$$

Substituindo o resultado da equação A.5 na equação A.3, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{N}} &= \Delta t \dot{r} \left(\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \mathbb{E} (\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^n) \right) \\ &= \Delta t \dot{r} \left([\mathbb{E} (\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^n)]^T : \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \right) \\ &= \Delta t \dot{r} \left(\alpha \Delta t [(\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^{nT}) \mathbb{E}^T] : \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \right) \\ &= \Delta t \dot{r} \left((\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{F}_i^{nT}) \left[\mathbb{E}^T : \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \right] \right) \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} = -\text{skw} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] \\ &= \Delta t \dot{r} \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

A.1.2 Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N}]$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N}] : \mathbf{W} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\lambda_{\text{tr}} \mathbf{N} : \mathbf{I}] : \mathbf{W} \\ &= \lambda_{\text{tr}} \left[\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{N}} : \mathbf{W} \right] : \mathbf{I} \\ &= \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} : \mathbf{W} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

A.1.3 Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \left[\lambda_N (\mathbf{N} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2}) \right]$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \left[\lambda_N \left(\mathbf{N} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) \right] : \mathbf{W} &= \lambda_N \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} (\mathbf{N} : \mathbf{N}) : \mathbf{W} \\
 &= \lambda_N \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{N}} : \mathbf{W} \right) : \mathbf{N} + \lambda_N \mathbf{N} : \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{N}} : \mathbf{W} \right) \\
 &= 2\lambda_N \mathbf{N} : \mathbf{W} \quad (\text{A.9})
 \end{aligned}$$

A.1.4 Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw}\mathbf{N}]$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw}\mathbf{N}] : \mathbf{W} &= \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} (\text{skw}\mathbf{N}) : \mathbf{W} \\
 &= \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \left(\frac{\mathbf{N} - \mathbf{N}^T}{2} \right) : \mathbf{W} \\
 &= \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \mathbb{I}_{\text{skw}} : \mathbf{W} \\
 &= \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \mathbf{W} \quad (\text{A.10})
 \end{aligned}$$

A.1.5 Resultado para $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}}$

Substituindo as equações A.7, A.8, A.9 e A.10 na equação A.2, obtemos como resultado

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{N}} = \Delta t \dot{r} \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} \right) + \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} + 2\lambda_N \mathbf{N} + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} \quad (\text{A.11})$$

A.2 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{r}}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{r}} &= \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \mathbb{E}^T \mathbf{G} \left[\Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \mathcal{Y} + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} \right. \\
&\quad \left. + \lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} \cdot \text{skw} \mathbf{N} \right] \\
&= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \frac{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}{\partial \hat{r}} + 0 + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} + 0 + 0 + 0 \\
&= \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \frac{\partial}{\partial \hat{r}} (\text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n) + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

Note que, utilizando a definição da equação A.6, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \hat{r}} (\text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n) &= \left(\frac{\partial}{\partial \hat{r}} \text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}] \right) \mathbf{F}_i^n \\
&= \left(\frac{\partial \text{EXP} \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} : \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \hat{r}} \right) \mathbf{F}_i^n \\
&= \Delta t \mathbb{E} \mathbf{N} \mathbf{F}_i^n \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

que implica

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{r}} &= \Delta t \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \mathbb{E} \mathbf{N} \mathbf{F}_i^n + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} \\
&= \Delta t \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} : \mathbb{E} \mathbf{N} \mathbf{F}_i^n + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} \\
&= \Delta t \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} : \mathbb{E} \mathbf{N} + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} \\
&= \Delta t \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} : \mathbf{N} + \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} \quad (\text{A.14})
\end{aligned}$$

A derivada parcial acima representa uma derivação da função \mathcal{L} com respeito à \hat{r} considerando $\{\mathbf{N}, \lambda_{\text{tr}}, \lambda_N, \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}\}$ constantes. Como resultado da integração feita na equação 4.21, $\mathcal{Y} = \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \hat{r})$, e de acordo com a equação 4.23, $r^{n+\alpha}$ depende de \hat{r} . Dessa forma $\mathcal{Y} =$

$\Upsilon(r^{n+\alpha}(\mathring{r}), \mathring{r})$ e podemos escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Upsilon}{\partial \mathring{r}} &= \frac{\partial^\circ \Upsilon}{\partial r^{n+\alpha}} \frac{\partial r^{n+\alpha}}{\partial \mathring{r}} + \frac{\partial^* \Upsilon}{\partial \mathring{r}} \\ &= \alpha \Delta t \frac{\partial^\circ \Upsilon}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial^* \Upsilon}{\partial \mathring{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

A avaliação de cada uma dessas derivadas parciais é mostrada no apêndice A

Na equação A.15, o símbolo ∂° representa uma operação de derivação considerando $r^{n+\alpha}(\mathring{r})$, e o símbolo ∂^* representa uma operação de derivação considerando $r^{n+\alpha}$ constante. Essa notação é introduzida para não haver confusão com relação à operação realizada, na equação A.15. Ao substituir a equação A.15 em A.12 essa notação se torna desnecessária, e podemos escrever o resultado da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathring{r}} = \Delta t \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t^2 \frac{\partial \Upsilon}{\partial r^{n+\alpha}} + \Delta t \frac{\partial \Upsilon}{\partial \mathring{r}} \quad (\text{A.16})$$

A.3 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{\text{tr}}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{\text{tr}}} &= \frac{\partial}{\partial \lambda_{\text{tr}}} \left[\Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \Upsilon \right. \\ &\quad \left. + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} + \lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \lambda_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N} \right] \\ &= \frac{\partial (\lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N})}{\partial \lambda_{\text{tr}}} \\ &= \text{tr} \mathbf{N} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

A.4 Cômputo de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_N}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_N} &= \frac{\partial}{\partial \lambda_N} \left[\Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \mathcal{Y} \right. \\
 &\quad \left. + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} + \lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N} \right] \\
 &= \frac{\partial \left[\lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) \right]}{\partial \lambda_N} \\
 &= \mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

A.5 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} \left[\Psi^{n+1} - \Psi^n + \Delta t \mathcal{Y} \right. \\
 &\quad \left. + \lambda_{\text{tr}} \text{tr} \mathbf{N} + \lambda_N \left(\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} \right) + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N} \right] \\
 &= \frac{\partial (\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N})}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}}
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

Note que

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial (\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} : \text{skw} \mathbf{N})}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} : \mathbf{W} &= \left(\frac{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} : \mathbf{W} \right) : \text{skw} \mathbf{N} \\
 &= \dot{\boldsymbol{\lambda}}_{\text{skw}} : \mathbf{W}
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

Portanto

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}} = \text{skw} \mathbf{N} \tag{A.21}$$

B Solução dos multiplicadores de Lagrange

Consideramos o conjunto de equações obtido como resultado da avaliação das condições de otimalidade da função lagrangiana:

$$\Delta t \hat{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G} + \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} + 2\lambda_N \mathbf{N} + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbb{E}^T \mathbf{G} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \hat{r}^2} = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\text{tr} \mathbf{N} = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{N} : \mathbf{N} - \frac{1}{2} = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\text{skw} \mathbf{N} = 0 \quad (\text{B.5})$$

Onde representamos, por simplicidade de notação $\mathbf{G} = \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT}$. O objetivo a seguir é solucionar analiticamente os multiplicadores de Lagrange, de forma a se obter um conjunto de apenas duas equações.

B.1 Solução de $\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$

Tomamos a parte antissimétrica da equação B.1:

$$\begin{aligned} \text{skw} [\Delta t \hat{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G} + \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} + 2\lambda_N \mathbf{N} + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] &= 0 \\ \text{skw} [\Delta t \hat{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + \text{skw} [\lambda_{\text{tr}} \mathbf{I}] + \text{skw} [2\lambda_N \mathbf{N}] + \text{skw} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] &= 0 \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

Note que o segundo termo da equação B.6 é nulo devido à simetria do tensor identidade. O tensor $\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$ é antissimétrico, pois deve ter a mesma natureza do termo que multiplica na função lagrangiana \mathcal{L} , e dessa forma $\text{skw} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] = \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$. Substituindo a equação B.5 em B.6 obtemos:

$$\begin{aligned} \text{skw} [\Delta t \hat{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + 0 + 0 + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} &= 0 \\ \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}} &= -\text{skw} [\Delta t \hat{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$

B.2 Solução de λ_{tr}

Tomamos o traço da equação B.1

$$\begin{aligned} \text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G} + \lambda_{\text{tr}} \mathbf{I} + 2\lambda_N \mathbf{N} + \boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] &= 0 \\ \text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + \text{tr} [\lambda_{\text{tr}} \mathbf{I}] + \text{tr} [2\lambda_N \mathbf{N}] + \text{tr} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] &= 0 \quad (\text{B.8}) \end{aligned}$$

Note que como $\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}$ é antissimétrico, $\text{tr} [\boldsymbol{\lambda}_{\text{skw}}] = 0$. Substituindo a equação B.3 em B.6 obtemos:

portanto

$$\begin{aligned} \text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + \text{tr} [\lambda_{\text{tr}} \mathbf{I}] + 0 + 0 &= 0 \\ 3\lambda_{\text{tr}} &= -\text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] \\ \lambda_{\text{tr}} &= -\frac{1}{3} \text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

B.3 Solução de λ_N

Substituimos B.7 e B.9 em B.1.

$$\begin{aligned} \Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G} + -\frac{1}{3} \text{tr} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] \mathbf{I} - \text{skw} [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + 2\lambda_N \mathbf{N} &= 0 \\ \text{sym}_0 [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] + 2\lambda_N \mathbf{N} &= 0 \quad (\text{B.10}) \end{aligned}$$

Fazemos o produto interno dos termos da equação B.10 com o tensor \mathbf{N} e utilizamos a equação B.4:

$$\begin{aligned} \text{sym}_0 [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] : \mathbf{N} + 2\lambda_N \mathbf{N} : \mathbf{N} &= 0 \\ \text{sym}_0 [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] : \mathbf{N} + \lambda_N &= 0 \\ \lambda_N &= -\text{sym}_0 [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}] : \mathbf{N} \quad (\text{B.11}) \end{aligned}$$

B.4 Equação da direção do fluxo

Substituindo a equação B.11 em B.10, e denotando $\bar{\mathbf{G}} = \text{sym}_0 [\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \mathbf{G}]$ temos que:

$$\bar{\mathbf{G}} - 2 (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{N}) \mathbf{N} = 0 \quad (\text{B.12})$$

Fazendo o produto interno dos termos da equação B.12 com $\bar{\mathbf{G}}$

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{G}} : \bar{\mathbf{G}} - 2 (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{N}) \mathbf{N} : \bar{\mathbf{G}} &= 0 \\
 \|\bar{\mathbf{G}}\|^2 - 2 (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{N})^2 &= 0 \\
 \|\bar{\mathbf{G}}\| &= \sqrt{2} (\bar{\mathbf{G}} : \mathbf{N}) \\
 \bar{\mathbf{G}} : \mathbf{N} &= \frac{\|\bar{\mathbf{G}}\|}{\sqrt{2}}
 \end{aligned} \tag{B.13}$$

Substituindo B.13 em B.12

$$\bar{\mathbf{G}} - \frac{2}{\sqrt{2}} \|\bar{\mathbf{G}}\| \mathbf{N} = 0 \tag{B.14}$$

Isolando $\bar{\mathbf{G}}$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{N} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\bar{\mathbf{G}}}{\|\bar{\mathbf{G}}\|} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\Delta t \dot{r} \mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{nT} \right) \right\|}
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

C Avaliação de $\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}$

Consideramos um potencial incremental Ψ^{n+1} do tipo

$$\begin{aligned}
 \Psi^{n+1} &= \Psi^{n+1} (\mathbf{F}^{n+1}, \dot{r}) \\
 &= GM (\mathbf{F}^{n+1}) + H (\mathbf{F}^{n+1}, \dot{r}) + U (\mathbf{F}^{n+1})
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

O que implica

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} &= \frac{\partial GM(\mathbf{F}^{n+1})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} + \frac{\partial H(\mathbf{F}^{n+1}, \mathring{r})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} + \frac{\partial U(\mathbf{F}^{n+1})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \\
&= \frac{\partial H(\mathbf{F}^{n+1}, \mathring{r})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}
\end{aligned} \tag{C.2}$$

C.1 Avaliação de $\frac{\partial H(\mathbf{F}^{n+1}, \mathring{r})}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}}$

A avaliação dessa derivada depende primeiramente de um conjunto de resultados, que são obtidos a seguir:

C.1.1 Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} &= \frac{\partial (\mathbf{X}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \\
&= \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) \mathbf{X}^{-1} + \mathbf{X} \left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) : \mathbf{W} \\
&= \mathbf{W}\mathbf{X}^{-1} + \mathbf{X} \left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) = 0
\end{aligned} \tag{C.3}$$

isolando $\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W}$, obtemos

$$\left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) = -\mathbf{X}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{X}^{-1} \tag{C.4}$$

o que implica o resultado

$$\frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-1} \boxtimes \mathbf{X}^{-T} \tag{C.5}$$

C.1.2 Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} &= \frac{\partial (\mathbf{X}^T \mathbf{X}^{-T})}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{X}^T}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) \mathbf{X}^{-T} + \mathbf{X}^T \left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}} \right) : \mathbf{W} \\ &= \mathbf{W}^T \mathbf{X}^{-T} + \mathbf{X}^T \left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) = -\mathbf{X}^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{X}^{-T} \quad (\text{C.7})$$

considerando o caso em que \mathbf{X} é simétrico, existe a restrição $\mathbf{W} = \mathbf{W}^T$ e temos o resultado

$$\frac{\partial \mathbf{X}^{-T}}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-T} \boxtimes \mathbf{X}^{-1} \quad (\text{C.8})$$

C.1.3 Avaliação de $\frac{\partial (\mathbf{X} : \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X} : \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} &= \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) : \mathbf{X} + \mathbf{X} : \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} : \mathbf{W} \right) \\ &= \mathbb{I} : \mathbf{W} : \mathbf{X} + \mathbf{X} : \mathbb{I} : \mathbf{W} = 2\mathbf{X} : \mathbf{W} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

isso implica o resultado

$$\frac{\partial (\mathbf{X} : \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{X} \quad (\text{C.10})$$

C.1.4 Avaliação de $\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i}$

Note que $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{F}_{iso}^T \mathbf{F}_{iso} \mathbf{F}_i^{-1} = \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{C}_{iso} \mathbf{F}_i^{-1}$. Utilizando derivada direcional e a regra da cadeia obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} &= \frac{\partial \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{C}_{iso} \mathbf{F}_i^{-1}}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \\
&= \left(\frac{\partial \mathbf{F}_i^{-T}}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \right) \mathbf{C}_{iso} \mathbf{F}_i^{-1} + \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{C}_{iso} \left(\frac{\partial \mathbf{F}_i^{-1}}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \right)
\end{aligned} \tag{C.11}$$

utilizando as relações das equações (C.4), (C.7) e a simetria de \mathbf{C}_e obtemos

$$\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} = - \left(\mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{F}_i^{-T} \right) \mathbf{C}_{iso} \mathbf{F}_i^{-1} - \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{C}_{iso} \left(\mathbf{F}_i^{-1} \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} \right) \tag{C.12}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} &= -\mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{C}_e - \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} \\
&= -2 \left(\frac{(\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1})^T + \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1}}{2} \right)
\end{aligned} \tag{C.13}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} &= -2 \left(\frac{(\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1})^T + \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1}}{2} \right) \\
&= -2 \text{sym} (\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1}) \\
&= -2 \mathbb{I}_{sym} : \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} \\
&= -2 \mathbb{I}_{sym} : \left(\mathbf{C}_e \boxtimes \mathbf{F}_i^{-T} \right) : \mathbf{W}
\end{aligned} \tag{C.14}$$

portanto temos

$$\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} = -2 \mathbb{I}_{sym} : \left(\mathbf{C}_e \boxtimes \mathbf{F}_i^{-T} \right) \tag{C.15}$$

C.1.5 Avaliação de $\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e}$

Usamos a definição do potencial de Henky e a regra da cadeia

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} &= \frac{\partial \left(G \|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\| \frac{\partial (\|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\|)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \\
&= 2G \|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\| \frac{\partial (\sqrt{\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \\
&= 2G \|\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e\| \left(\frac{1}{2} [\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e]^{-\frac{1}{2}} \right) \frac{\partial (\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \\
&= G \frac{\partial (\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \\
&= G \frac{\partial (\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e)}{\partial \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \tag{C.16}
\end{aligned}$$

Usamos o resultado da equação (C.10) para obter

$$\frac{\partial (\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e)}{\partial \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2 \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \tag{C.17}$$

Substituindo a equação C.17 na equação C.16, obtemos

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \frac{\partial \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_e - \frac{1}{3} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{I} \right) \tag{C.18}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbb{P} \tag{C.19}$$

Notar que a operação de \mathbb{P} , chamado tensor projeção deviatórico, em um tensor deviatórico tem como o resultado o próprio tensor, como mostrado abaixo:

$$\begin{aligned}
\text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) &= \left(\boldsymbol{\varepsilon}_e - \frac{1}{3} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{I} \right) : \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) \\
&= \boldsymbol{\varepsilon}_e - \frac{1}{3} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{I} - \frac{1}{3} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{I} + \frac{1}{9} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e (\mathbf{I} : \mathbf{I}) \mathbf{I} \\
&= \boldsymbol{\varepsilon}_e - \frac{2}{3} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{I} + \frac{1}{9} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e 3 \mathbf{I} = \boldsymbol{\varepsilon}_e - \frac{1}{3} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{I} \\
&= \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \tag{C.20}
\end{aligned}$$

Dessa forma obtemos o resultado

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \quad (\text{C.21})$$

C.1.6 Resultado para $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}_i}$

Para calcular essa derivada assumimos que os tensores \mathbf{C}_e , \mathbf{C}_e^{-1} e $\ln(\mathbf{C}_e)$ são colineares e portanto comutam entre si. A prova dessa afirmação pode ser feita utilizando decomposição espectral, e nesse trabalho será omitida.

Utilizando o conceito de derivada direcional, e regra da cadeia, temos:

$$\frac{\partial H(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} = \frac{\partial H(\mathcal{E})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial (\frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_e)}{\partial \mathbf{C}_e} : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \quad (\text{C.22})$$

$$= \left[\frac{1}{2} \frac{\partial H(\mathcal{E})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial (\ln \mathbf{C}_e)}{\partial \mathbf{C}_e} \right] : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \quad (\text{C.23})$$

Para avaliar o termo entre parênteses utilizamos a identidade fornecida por Souza Neto Neto et al. (2009, pg. 529). De acordo com Souza Neto, sendo o potencial H isotrópico, é válida a seguinte relação

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial (\ln \mathbf{C}_e)}{\partial \mathbf{C}_e} \right] \mathbf{C}_e = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \quad (\text{C.24})$$

o que implica

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial (\ln \mathbf{C}_e)}{\partial \mathbf{C}_e} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \mathbf{C}_e^{-1} \quad (\text{C.25})$$

substituindo a equação C.25 juntamente com o resultado do

apêndice C, equação C.14, na equação C.22 obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} &= \frac{1}{2} \frac{\partial H(\mathcal{E})}{\partial \varepsilon_e} \mathbf{C}_e^{-1} : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}_i} : \mathbf{W} \\
&= G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} : [-2 \text{sym}(\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1})] \\
&= -2G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} : \left[\frac{\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} + (\mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1})^T}{2} \right] \\
&= -G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} : \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} - G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} : \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{C}_e^T \\
&= -G \mathbf{C}_e^{-1} \text{dev} \varepsilon_e : \mathbf{C}_e \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} - G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} : \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{C}_e^T \\
&= -G \mathbf{C}_e \mathbf{C}_e^{-1} \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} - G \mathbf{F}_i^{-1} \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{C}_e^{-1} \mathbf{C}_e^T \mathbf{W} : \mathbf{I} \\
&= -G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} - G \mathbf{F}_i^{-1} \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{W} : \mathbf{I} \\
&= -G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} - G \mathbf{W} : \mathbf{F}_i^{-T} \text{dev} \varepsilon_e^T \\
&= -2G \text{dev} \varepsilon_e \mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} \tag{C.26}
\end{aligned}$$

D Propriedade anuladora da derivada do tensor exponencial \mathbb{E}

Seja \mathbf{X} um tensor de segunda ordem simétrico com a decomposição espectral

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{P}_i \tag{D.1}$$

Proposição D.1: Sendo \mathbf{X} um tensor de segunda ordem simétrico com a decomposição espectral

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{P}_i \tag{D.2}$$

, a seguinte relação é válida :

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X}}^T \mathbf{A} \text{EXP}[\mathbf{X}]^{-T} = \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \tag{D.3}$$

onde

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } x_i = x_j \\ \frac{e^{x_i - x_j} - 1}{x_i - x_j}, & \text{se } x_i \neq x_j \end{cases} \tag{D.4}$$

Prova da proposição D.1: de acordo com Jog Jog (2015, pg. 118), o tensor derivada exponencial \mathbb{E}_X pode ser escrito como

$$\mathbb{E}_X := \frac{\partial \text{EXP}[\mathbf{X}]}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{i,j=1}^3 \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \boxtimes \mathbf{P}_j \quad (\text{D.5})$$

onde

$$\epsilon_{ij} = \begin{cases} e^{x_i}, & \text{se } x_i = x_j \\ \frac{e^{x_i} - e^{x_j}}{x_i - x_j}, & \text{se } x_i \neq x_j \end{cases} \quad (\text{D.6})$$

Dessa forma, utilizando as decomposições das equações D.1 e D.5 temos que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_X^T \mathbf{A} \text{EXP}[\mathbf{X}]^{-T} &= \left(\sum_{i,j=1}^3 \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \boxtimes \mathbf{P}_j \right) \mathbf{A} \text{EXP} \left[\sum_{k=1}^3 x_k \mathbf{P}_k \right]^{-T} \\ &= \left(\sum_{i,j=1}^3 \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \boxtimes \mathbf{P}_j \right) \mathbf{A} \sum_{k=1}^3 e^{-x_k} \mathbf{P}_k \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 e^{-x_k} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_k \mathbf{P}_j \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 e^{-x_k} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_k) (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 e^{-x_k} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_j) (\mathbf{e}_k : \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 e^{-x_k} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_j) \delta_{kj} \\ &= \sum_{i,j=1}^3 e^{-x_j} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 e^{-x_j} \epsilon_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

note que, de acordo com o definido nas equações D.4 e D.6, temos que:

$$e^{-x_j} \epsilon_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } x_i = x_j \\ \frac{e^{x_i - x_j} - 1}{x_i - x_j}, & \text{se } x_i \neq x_j \end{cases} \\ = \alpha_{ij} \quad (\text{D.8})$$

Proposição D.2: Seja \mathbf{X} um tensor simétrico, e \mathbf{A} um tensor qualquer coaxial a \mathbf{X} . A seguinte propriedade é válida:

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X}}^T \mathbf{A} \text{EXP}[\mathbf{X}]^{-T} = \mathbf{A} \quad (\text{D.9})$$

Prova da proposição D.2: Seja a decomposição espectral de \mathbf{X} dada pela equação D.2. Como \mathbf{X} e \mathbf{A} são coaxiais podemos escrever

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{P}_i \quad (\text{D.10})$$

Substituindo a equação D.10 na equação D.3, temos

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_X^T \mathbf{A} \text{EXP} [\mathbf{X}]^{-T} &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \\
&= \sum_{i,j,k=1}^3 \alpha_{ij} a_k \mathbf{P}_i \mathbf{P}_k \mathbf{P}_j \\
&= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} a_j \mathbf{P}_i (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_j) \delta_{kj} \\
&= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} a_j \mathbf{P}_i \mathbf{P}_j \\
&= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} a_j (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \delta_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^3 \alpha_{ii} a_i \mathbf{P}_i \\
&= \sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{P}_i \\
&= \mathbf{A}
\end{aligned} \tag{D.11}$$

E Proposições de mecânica do contínuo - potencial de Hencky

As proposições mostradas a seguir são consequência direta de uma energia livre de Helmholtz Ψ^{n+1} dada pela equação 4.6, em particular da contribuição do potencial de Hencky $H(\boldsymbol{\varepsilon}_e)$, e são necessárias para o desenvolvimento das equações da direção e amplitude do fluxo inelástico do apêndice F.

Proposição E.1 : Os tensores \mathbf{M}_e^{n+1} e \mathbf{C}_e^{n+1} são coaxiais, ou seja, possuem as mesmas autoprojeções.

Prova de E.1: Utilizando o conceito de decomposição espectral:

$\mathbf{C}_e^{n+1} = \sum_{i=1}^3 c_{e,i} \mathbf{P}_i$. Reescrevemos então a equação 4.37 como

$$\mathbf{M}_e^{n+1} = G \text{dev} \left(\sum_{i=1}^3 \ln(c_{e,i}) \mathbf{P}_i \right) \quad (\text{E.1})$$

Note que, sendo \mathbf{A} um tensor simétrico qualquer que admite decomposição espectral: $\mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{N}_i$, temos que $\text{dev} \mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 (a_i - \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{A}) \mathbf{N}_i$ e portanto \mathbf{A} e $\text{dev} \mathbf{A}$ são coaxiais. Utilizando essa propriedade obtemos para a equação acima:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e^{n+1} &= G \sum_{i=1}^3 \left(\ln(c_{e,i}) - \frac{1}{3} \text{tr}(\ln \mathbf{C}_e) \right) \mathbf{P}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \alpha_i \mathbf{P}_i \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Dessa forma, fica claro que o tensor \mathbf{M}_e^{n+1} pode ser escrito em termos das autoprojeções de \mathbf{C}_e^{n+1} e portanto \mathbf{M}_e^{n+1} e \mathbf{C}_e^{n+1} são coaxiais.

Proposição E.2: Os tensores \mathbf{M}_e^{n+1} e \mathbf{N} são coaxiais, ou seja, possuem as mesmas autoprojeções.

Prova de E.2: De acordo com os resultados obtidos no apêndice B, temos que o tensor \mathbf{N} pode ser escrito como

$$\mathbf{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1} T \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1} T \right) \right\|} \quad (\text{E.3})$$

Utilizamos o resultado do apêndice C e o mapeamento exponen-

cial de \mathbf{F}_i^{n+1} para reescrever a equação E.3 como

$$\begin{aligned}
\mathbf{N} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} (\mathbf{F}_i^{n+1})^{-T} (\mathbf{F}_i^n)^T \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} (\mathbf{F}_i^{n+1})^{-T} (\mathbf{F}_i^n)^T \right) \right\|} \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} (\text{EXP} (\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N}) \mathbf{F}_i^n)^{-T} (\mathbf{F}_i^n)^T \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} (\text{EXP} (\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N}) \mathbf{F}_i^n)^{-T} (\mathbf{F}_i^n)^T \right) \right\|} \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} (\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})^{-T} \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} (\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})^{-T} \right) \right\|} \quad (\text{E.4})
\end{aligned}$$

Como \mathbf{N} é simétrica, podemos utilizar a proposição D.1 do apêndice D, e as substituições

$$\beta = \Delta t \dot{r}^{n+1} \quad (\text{E.5})$$

$$\gamma = -\frac{\sqrt{2}}{\beta} \left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} (\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})^{-T} \right) \right\| \quad (\text{E.6})$$

$$\mathbf{X} = \beta \mathbf{N} \quad (\text{E.7})$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{M}_e^{n+1} \quad (\text{E.8})$$

para reescrever E.4 como

$$\begin{aligned}
\gamma \mathbf{X} &= \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \mathbf{A} \text{EXP} (\mathbf{X})^{-T} \right) \\
&= \text{sym}_0 \left(\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j + \left(\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \right)^T \right] \\
&\quad - \frac{1}{3} \text{tr} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j \right] \mathbf{I} \quad (\text{E.9})
\end{aligned}$$

Onde α_{ij} é dado pela equação D.4.

Escrevemos agora a decomposição espectral de \mathbf{X}

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^3 x_i (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i) \quad (\text{E.10})$$

Note que podemos escrever $\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j$ em termos da base espectral de \mathbf{X} , como é mostrado a seguir

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{P}_i \mathbf{A} \mathbf{P}_j &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i) [\mathbf{A}_{rs} (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_s)] (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{rs} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_s) (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{rs} \delta_{ir} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_s) (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{is} \delta_{sj} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Substituindo as equações E.10 e E.11 em E.9 temos

$$\begin{aligned}
\gamma \sum_{i=1}^3 x_i (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i) &= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \right. \\
&+ \left. \left(\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \right)^T \right] - \frac{1}{3} \text{tr} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \right] \mathbf{I} \\
&= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) + \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i) \right] \\
&\quad - \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \alpha_{kk} \mathbf{A}_{kk} \mathbf{I} \\
&= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) + \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ji} \mathbf{A}_{ji} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \right] \\
&\quad - \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \mathbf{A}_{kk} \delta_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \\
&= \sum_{i,j=1}^3 \left[\frac{\alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} + \alpha_{ji} \mathbf{A}_{ji}}{2} - \frac{1}{3} \left(\sum_{k=1}^3 \mathbf{A}_{kk} \right) \delta_{ij} \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \quad (\text{E.12})
\end{aligned}$$

Note que, para que a igualdade da equação E.12 seja satisfeita, as seguintes condições são necessárias:

$$\gamma x_i = \mathbf{A}_{ii} - \frac{1}{3} \left(\sum_{k=1}^3 \mathbf{A}_{kk} \right) \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (\text{E.13})$$

$$0 = \alpha_{ij} \mathbf{A}_{ij} + \alpha_{ji} \mathbf{A}_{ji} \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (\text{E.14})$$

Considerando que o tensor \mathbf{A} é simétrico, $\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{A}_{ji}$ e nesse caso temos, da equação E.14 que

$$0 = (\alpha_{ij} + \alpha_{ji}) \mathbf{A}_{ij} \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (\text{E.15})$$

Da equação D.4 temos que $(\alpha_{ij} + \alpha_{ji}) > 0$. Dessa forma conclui-se que o tensor \mathbf{A} , quando escrito em termos da base espectral de \mathbf{X} , é

diagonal. Ou seja:

$$\mathbf{A}_{ij} = 0 \quad (\text{E.16})$$

Como a representação de \mathbf{A} na base espectral de \mathbf{X} é diagonal, podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_{i=1}^3 a_i (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i) \\ &= \sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{P}_i \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

e \mathbf{A} e \mathbf{X} possuem as mesmas autoprojções. Como $\mathbf{X} = \beta \mathbf{N}$ e $\mathbf{A} = \mathbf{M}_e^{n+1}$ e \mathbf{M}_e^{n+1} é um tensor simétrico, a prova da proposição 2 está completa.

Proposição E.3: Os tensores \mathbf{C}_e^{n+1} e \mathbf{C}_{pre}^{n+1} são coaxiais, ou seja, possuem as mesmas autoprojções.

Prova de E.3: Seja $\mathbf{C}_e^{n+1} = [\mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^{n+1})^{-1}]^T [\mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^{n+1})^{-1}]$ conforme definido na seção 3.1 e $\mathbf{C}_{pre}^{n+1} = [\mathbf{F}_{pre}^{n+1}]^T [\mathbf{F}_{pre}^{n+1}]$, onde $\mathbf{F}_{pre}^{n+1} = \mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^n)^{-1}$, conforme definido no apêndice 4.5.4. Utilizando o mapeamento exponencial para \mathbf{F}_i^{n+1} temos que \mathbf{C}_e^{n+1} pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_e^{n+1} &= [\mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N}) \mathbf{F}_i^n)^{-1}]^T [\mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N}) \mathbf{F}_i^n)^{-1}] \\ &= [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-T} (\mathbf{F}_i^n)^{-T} (\mathbf{F}_{iso}^{n+1})^T \mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^n)^{-1} [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-1} \\ &= [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-T} \mathbf{C}_{pre}^{n+1} [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-1} \\ &= \left([\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-T} \boxtimes [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-1} \right) \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \\ &= \mathbf{C}_{pre} \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \quad (\text{E.18}) \end{aligned}$$

Note que o tensor $[\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]$ e o seu transposto são coaxiais à \mathbf{N} . Essa afirmação pode ser provada diretamente da decomposição espectral desses dois termos e será omitida. De acordo com as proposições 1 e 2, concluímos que $[\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^{-T}$ e \mathbf{C}_e^{n+1} também são coaxiais. Isso implica que $[\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^T \mathbf{C}_e^{n+1} [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]$ e \mathbf{C}_e^{n+1} são coaxiais. Finalmente, isolando \mathbf{C}_{pre}^{n+1} na equação acima temos:

$$[\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})]^T \mathbf{C}_e^{n+1} [\text{EXP}(\Delta t \dot{r}^{n+1} \mathbf{N})] = \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \quad (\text{E.19})$$

Dessa forma, \mathbf{C}_e^{n+1} e \mathbf{C}_{pre}^{n+1} são coaxiais.

Proposição E.5: A condição de isocoricidade do fluxo inelástico $\det \mathbf{F}_i = 1$ e do gradiente de deformação isocórico resulta em uma deformação logarítmica preditora deviatórica. Ou seja

$$\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} = 0 \quad (\text{E.20})$$

Prova de E.5:

Como $\det \mathbf{F}_{iso}^{n+1} = 1$, $\det \mathbf{F}_i^n = 1$, temos que

$$\begin{aligned} \det \mathbf{F}_{pre}^{n+1} &= \det \left(\mathbf{F}_{iso}^{n+1} (\mathbf{F}_i^n)^{-1} \right) \\ &= (\det \mathbf{F}_{iso}^{n+1}) \left(\det (\mathbf{F}_i^n)^{-1} \right) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

portanto

$$\begin{aligned} \det \mathbf{C}_{pre}^{n+1} &= \det \left([\mathbf{F}_{pre}^{n+1}]^T [\mathbf{F}_{pre}^{n+1}] \right) = 1 \\ &= \left(\det [\mathbf{F}_{pre}^{n+1}]^T \right) \left(\det \mathbf{F}_{pre}^{n+1} \right) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Utilizando as propriedades logarítmicas temos que

$$\begin{aligned} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} &= \text{tr} \left(\frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \ln (c_{pre}^i) \\ &= \frac{1}{2} \ln (c_{pre}^1 c_{pre}^2 c_{pre}^3) \\ &= \frac{1}{2} \ln (\det \mathbf{C}_{pre}^{n+1}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

Proposição E.6: A condição de isocoricidade do fluxo inelástico $\det \mathbf{F}_i = 1$ e do gradiente de deformação isocórico resulta em uma deformação logarítmica elástica deviatórica. Ou seja

$$\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} = 0 \quad (\text{E.24})$$

Prova de E.6: A prova da proposição E.6 é análoga à prova da proposição E.5, não havendo necessidade de ser mostrada.

Proposição E.7: A seguinte relação é válida:

$$\mathbf{M}_e^{n+1} = \mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2G\Delta t \dot{\mathbf{r}} \mathbf{N} \quad (\text{E.25})$$

Prova de E.7: De acordo com as proposições 1, 2 e 3 os tensores \mathbf{N} , \mathbf{C}_e^{n+1} e \mathbf{C}_{pre}^{n+1} possuem as mesmas autoprojeções. Dessa forma podemos realizar a decomposição espectral desses tensores em termos das autoprojeções de \mathbf{C}_{pre}^{n+1} :

$$\mathbf{C}_{pre}^{n+1} = \sum_{i=1}^3 c_{e,i} \mathbf{P}_{pre,i} \quad (\text{E.26})$$

$$\mathbf{N} = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{P}_{pre,i} \quad (\text{E.27})$$

$$\mathbf{C}_e^{n+1} = \sum_{i=1}^3 c_{e,i} \mathbf{P}_{pre,i} \quad (\text{E.28})$$

Substituindo as equações E.26, E.27 e E.28 na equação E.19, obtemos

$$\begin{aligned} \left[\text{EXP} \left(\Delta t \dot{R} \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{P}_{pre,i} \right) \right]^T \sum_{i=1}^3 c_{e,i} \mathbf{P}_{pre,i} \left[\text{EXP} \left(\Delta t \dot{R} \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{P}_{pre,i} \right) \right] \\ = \sum_{i=1}^3 c_{pre,i} \mathbf{P}_{pre,i} \end{aligned} \quad (\text{E.29})$$

Colocando $\mathbf{P}_{pre,i}$ em evidência, podemos obter da equação E.29 a seguinte equação escalar

$$\sum_{i=1}^3 e^{2\Delta t \tilde{R}n_i} c_{e,i} = \sum_{i=1}^3 c_{pre,i} \quad (\text{E.30})$$

o que permite obter uma relação direta entre os autovalores de \mathbf{C}_{pre}^{n+1} , \mathbf{N}^{n+1} , \mathbf{C}_e^{n+1} :

$$c_{e,i} = e^{-2\Delta t \tilde{R}n_i} c_{pre,i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{E.31})$$

Agora, utilizando o resultado do apêndice C equação C.21, a proposição E.5 e a equação E.26 temos que o tensor preditor de Mandel \mathbf{M}_{pre}^{n+1} pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{pre}^{n+1} &= \left. \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1}} \right|_{\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}} \\ &= \left. \frac{\partial H^{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1}} \right|_{\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}} \\ &= 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} \\ &= 2G \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} \\ &= 2G \left(\frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_{pre}^{n+1} \right) \\ &= G \sum_{i=1}^3 \ln(c_{pre,i}) \mathbf{P}_{pre,i} \end{aligned} \quad (\text{E.32})$$

Agora, utilizando o resultado do apêndice C, equação C.26, a proposição E.6 e as equações E.27, E.28, E.31 e E.32, temos que o tensor de Mandel $\tilde{\mathbf{M}}_e^{n+1}$ pode ser reescrito como se segue

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_e^{n+1} &= -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} \\
&= 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} \\
&= 2G \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} \\
&= 2G \left(\frac{1}{2} \ln \mathbf{C}_e^{n+1} \right) \\
&= G \sum_{i=1}^3 \ln(c_{e,i}) \mathbf{P}_{pre,i} \\
&= \sum_{i=2G\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} \mathbf{1}}^3 \ln \left(e^{-2\Delta t \hat{R} n_i} c_{pre,i} \right) \mathbf{P}_{pre,i} \\
&= G \sum_{i=1}^3 \ln(c_{pre,i}) \mathbf{P}_{pre,i} + G \sum_{i=1}^3 \ln \left(e^{-2\Delta t \hat{R} n_i} \right) \mathbf{P}_{pre,i} \\
&= G \sum_{i=1}^3 \ln(c_{pre,i}) \mathbf{P}_{pre,i} - 2\Delta t \hat{r}^\circ G \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{P}_{pre,i} \\
&= \mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \hat{r}^\circ \mathbf{G} \mathbf{N}
\end{aligned} \tag{E.33}$$

Proposição E.8: A seguinte relação é válida:

$$\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} = -\mathbf{M}_e^{n+1} \tag{E.34}$$

Prova de E.8: Utilizamos a definição do tensor de Mandel, equação 4.36 e o mapeamento exponencial de \mathbf{F}_i^{n+1} :

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_e^{n+1} &= -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T} \\
&= -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} (\text{EXP} [\Delta t \hat{r}^\circ \mathbf{N}] \mathbf{F}_i^n)^T \\
&= -\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} (\mathbf{F}_i^n)^T \text{EXP} [\Delta t \hat{r}^\circ \mathbf{N}]^T
\end{aligned} \tag{E.35}$$

Isolando o termo $\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} (\mathbf{F}_i^n)^T$ temos:

$$\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} (\mathbf{F}_i^n)^T = -\mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]^{-T} \quad (\text{E.36})$$

O que implica

$$\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^n T = -\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]^{-T} \quad (\text{E.37})$$

onde $\mathbb{E} = \frac{\partial \text{EXP}[\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]}{\partial [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]}$. Como \mathbf{M}_e^{n+1} e \mathbf{N} são ambos simétricos e coaxiais (proposição 1 e 2, apêndice E), podemos utilizar a seguinte propriedade

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_X^T \mathbf{A} \text{EXP} [\mathbf{X}]^{-T} &= \left[\frac{\partial \text{EXP} [\mathbf{X}]}{\partial \mathbf{X}} \right]^T \mathbf{A} \text{EXP} [\mathbf{X}]^{-T} \\ &= \mathbf{A} \end{aligned} \quad (\text{E.38})$$

cuja prova é mostrada no apêndice D, para escrever

$$\mathbb{E}^T \mathbf{M}_e^{n+1} \text{EXP} [\Delta t \hat{r} \mathbf{N}]^{-T} = \mathbf{M}_e^{n+1} \quad (\text{E.39})$$

F Desenvolvimento do problema incremental considerando o potencial de Hencky e o mapeamento exponencial

F.1 Desenvolvimento da expressão para direção do fluxo inelástico

Retomamos a equação da direção do fluxo obtida na seção 4.5.2 e utilizamos a proposição E.8 para escrever:

$$\begin{aligned} \mathbf{N} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^n T \right)}{\left\| \text{sym}_0 \left(\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^n T \right) \right\|} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0 (\mathbf{M}_e^{n+1})}{\left\| \text{sym}_0 (\mathbf{M}_e^{n+1}) \right\|} \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

Como ε_e^{n+1} é simétrico por definição (equação 3.19) e deviatórico

(proposição E.6), utilizando o resultado obtido no apêndice C, equação C.26, temos que:

$$\begin{aligned}
 \text{sym}_0(\mathbf{M}_e^{n+1}) &= \text{sym}_0\left(\frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1 T}\right) \\
 &= \text{sym}_0(-2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1}) \\
 &= -2G \boldsymbol{\varepsilon}_e^{n+1} \\
 &= \mathbf{M}_e^{n+1}
 \end{aligned} \tag{F.2}$$

Utilizando as equações E.32, E.33 e F.2 em F.1

$$\begin{aligned}
 \mathbf{N} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\text{sym}_0(\mathbf{M}_e^{n+1})}{\|\text{sym}_0(\mathbf{M}_e^{n+1})\|} \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\mathbf{M}_e^{n+1}}{\|\mathbf{M}_e^{n+1}\|} \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \dot{\rho} \mathbf{GN})}{\|\mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \dot{\rho} \mathbf{GN}\|} \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(2G \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \dot{\rho} \mathbf{GN})}{\sqrt{2} \|2G \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \dot{\rho} \mathbf{GN}\|}
 \end{aligned} \tag{F.3}$$

Isolando \mathbf{N} na equação F.3

$$\begin{aligned}
 \mathbf{N} &= \frac{2G}{(\sqrt{2} \|2G \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} - 2\Delta t \dot{\rho} \mathbf{GN}\| - 2\Delta t \dot{\rho} G)} \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} \\
 &= \omega \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{F.4}$$

O que significa que os tensores \mathbf{N} e $\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}$ são proporcionais, o que nos permite escrever

$$\mathbf{N} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}}{\|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\|} \tag{F.5}$$

F.2 Desenvolvimento da equação da amplitude do fluxo inelástico

Retomamos a equação 4.34, resultado da minimização da função lagrangiana advinda do princípio variacional incremental, como discutido na seção 4.5.2

$$\mathbb{E}^T \frac{\partial \Psi^{n+1}}{\partial \mathbf{F}_i^{n+1}} \mathbf{F}_i^{n+1} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} = 0 \quad (\text{F.6})$$

Utilizando as proposições E.7 e E.8:

$$\begin{aligned} -\mathbf{M}_e^{n+1} : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} &= 0 \\ -(\mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2G\Delta t \hat{r} \mathbf{N}) : \mathbf{N} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

Note que, utilizando a restrição $\mathbf{N} : \mathbf{N} = \frac{1}{2}$ e as equações E.32 e F.5:

$$\begin{aligned} (\mathbf{M}_{pre}^{n+1} - 2G\Delta t \hat{r} \mathbf{N}) : \mathbf{N} &= \mathbf{M}_{pre}^{n+1} : \mathbf{N} - 2G\Delta t \hat{r} \mathbf{N} : \mathbf{N} \\ &= \pm \frac{2G}{\sqrt{2}} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1} : \boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}}{\|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\|} - G\Delta t \hat{r} \\ &= \pm \sqrt{2}G \|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\| - G\Delta t \hat{r} \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

Substituindo F.8 em F.7

$$\mp \sqrt{2}G \|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t \hat{r} + \alpha \Delta t \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} + \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}} = 0 \quad (\text{F.9})$$

Considerando $\mathcal{Y} = \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \hat{r})$ como definido na equação 4.10

$$\mathcal{Y} = \mathcal{Y}(r^{n+\alpha}, \hat{r}) = \frac{s(r^{n+\alpha})}{m+1} \left(\frac{\hat{r}}{r_0} \right)^{m+1} \quad (\text{F.10})$$

$$s(r^{n+\alpha}) = s_\infty + e^{-\zeta r^{n+\alpha}} [(s_0 - s_\infty) \cosh(\beta r^{n+\alpha}) + \gamma \sinh(\beta r^{n+\alpha})] \quad (\text{F.11})$$

resta avaliar os termos $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}}$ e $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \hat{r}}$

F.2.1 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial r^{n+\alpha}} &= \frac{\partial}{\partial r^{n+\alpha}} \left[\frac{s(r^{n+\alpha})}{m+1} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^{m+1} \right] \\ &= \frac{1}{m+1} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^{m+1} \frac{\partial s(r^{n+\alpha})}{\partial r^{n+\alpha}} \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

Note que

$$\begin{aligned} \frac{\partial s(r^{n+\alpha})}{\partial r^{n+\alpha}} &= \frac{\partial}{\partial r^{n+\alpha}} \left(s_\infty + e^{-\zeta r^{n+\alpha}} [(s_0 - s_\infty) \cosh(\beta r^{n+\alpha}) \right. \\ &\quad \left. + \gamma \sinh(\beta r^{n+\alpha})] \right) \\ &= -\zeta e^{-\zeta r^{n+\alpha}} [(s_0 - s_\infty) \cosh(\beta r^{n+\alpha}) + \gamma \sinh(\beta r^{n+\alpha})] + \\ &\quad e^{-\zeta r^{n+\alpha}} \beta [(s_0 - s_\infty) \sinh(\beta r^{n+\alpha}) + \gamma \cosh(\beta r^{n+\alpha})] \end{aligned} \quad (\text{F.13})$$

F.2.2 Avaliação de $\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{r}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial \dot{r}} &= \frac{\partial}{\partial \dot{r}} \left[\frac{s(r^{n+\alpha})}{m+1} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^{m+1} \right] \\ &= \frac{s(r^{n+\alpha})}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^m \end{aligned} \quad (\text{F.14})$$

F.2.3 Resultado considerando $\alpha = 0$

Considerando $\alpha = 0$, temos

$$\mp \sqrt{2}G \|\varepsilon_{pre}^{n+1}\| + G \Delta t \dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0} \right)^m = 0 \quad (\text{F.15})$$

Como discutido na subseção 4.4 a função $s(r)$ e o parâmetro r_0 são sempre não negativos. A variável \dot{r} também é não negativa por definição (equação 4.18), o que implica que o segundo e o terceiro termo da equação F.15 são sempre não negativos. Nesse caso temos que a equação F.15 não tem solução caso o primeiro termo tenha sinal

positivo. Portanto, consideramos o caso negativo apenas, e a equação F.15 pode ser reescrita como

$$-\sqrt{2}G \|\boldsymbol{\varepsilon}_{pre}^{n+1}\| + G\Delta t\dot{r} + \frac{s(r^n)}{r_0} \left(\frac{\dot{r}}{r_0}\right)^m = 0 \quad (\text{F.16})$$

G Derivação dos potenciais energéticos

G.1 Cálculos preliminares

O cômputo das derivadas dos potenciais energéticos requer primeiramente a avaliação de algumas derivadas tensoriais em particular. Nessa subsecção é mostrada a avaliação desses termos.

G.1.1 Avaliação de $\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I}) : \mathbf{W} &= \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{C}_{iso} : \mathbf{W} \right) : \mathbf{I} + \mathbf{C}_{iso} : \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{I} : \mathbf{W} \right) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \left[J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^T \mathbf{F} \right] : \mathbf{W} \right) : \mathbf{I} + 0 \\ &= \left(\left[\frac{\partial \left(J^{-\frac{2}{3}} \right)}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] \mathbf{F}^T \mathbf{F} + J^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] \mathbf{F} \right. \\ &\quad \left. + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^T \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] \right) : \mathbf{I} \\ &= \left(\left[-\frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \right] \mathbf{F}^T \mathbf{F} + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{W}^T \mathbf{F} + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \right) : \mathbf{I} \\ &= \left[-\frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \right] (\mathbf{F}^T \mathbf{F} : \mathbf{I}) + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F} : \mathbf{W} + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{W} : \mathbf{F} \\ &= -\frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \text{tr} (\mathbf{F}^T \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + 2J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F} : \mathbf{W} \\ &= 2J^{-\frac{2}{3}} \left(\mathbf{F} - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{F}^T \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \right) : \mathbf{W} \\ &= 2J^{-\frac{2}{3}} \left(\mathbf{F} \mathbf{F}^T - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{F}^T \mathbf{F}) \mathbf{I} \right) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \\ &= 2 \left(\mathbf{F}_{iso} \mathbf{F}_{iso}^T - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{F}_{iso}^T \mathbf{F}_{iso}) \mathbf{I} \right) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \\ &= 2 \text{dev} (\mathbf{b}_{iso}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \quad (\text{G.1}) \end{aligned}$$

portanto

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I}) = 2 \text{dev}(\mathbf{b}_{iso}) \mathbf{F}^{-T} \quad (\text{G.2})$$

G.1.2 Cômputo de $\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}}$

Note que $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e = J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1}$. Utilizando a regra da cadeia para calcular a derivada em uma direção arbitrária \mathbf{W} , temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= \frac{\partial \left(J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1} \right)}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \\ &= \left[\frac{\partial \left(J^{-\frac{2}{3}} \right)}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1} + J^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{\partial (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] \mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1} \\ &\quad + J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T \left[\frac{\partial (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right] \quad (\text{G.3}) \end{aligned}$$

Agora avaliamos cada termo entre chaves sepradamente. Começando com o primeiro termo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(J^{-\frac{2}{3}} \right)}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= -\frac{2}{3} J^{-\frac{5}{3}} \frac{\partial (\det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \\ &= -\frac{2}{3} J^{-\frac{5}{3}} (J \mathbf{F}^{-T}) : \mathbf{W} \\ &= -\frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \quad (\text{G.4}) \end{aligned}$$

Agora avaliamos o segundo termo entre chaves. Utilizando a regra da cadeia para calcular a derivada em uma direção arbitrária \mathbf{W} temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= \frac{\partial \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{F}^T}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} = \mathbf{F}_i^{-T} \left(\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right) \\ &= \mathbf{F}_i^{-T} (\mathbb{I}_T : \mathbf{W}) = \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \quad (\text{G.5}) \end{aligned}$$

Por último, avaliamos o terceiro termo entre chaves. De forma

semelhante ao cálculo efetuado anteriormente, temos

$$\frac{\partial (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} = \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \right) \mathbf{F}_i^{-1} = (\mathbb{I} : \mathbf{W}) \mathbf{F}_i^{-1} = \mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} \quad (\text{G.6})$$

Agora substituímos esses resultados na equação G.3. Note que $J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1} = \mathbf{C}_e$. Dessa forma temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= \left[-\frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \right] (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1} \\ &\quad + J^{-\frac{2}{3}} [\mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T] \mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1} + J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T [\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1}] \\ &= -\frac{2}{3} (\mathbf{C}_e \otimes \mathbf{F}^{-T}) : \mathbf{W} \\ &\quad + 2J^{-\frac{2}{3}} \mathbb{I}_s : [(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T \boxtimes \mathbf{F}_i^{-T}] : \mathbf{W} \end{aligned} \quad (\text{G.7})$$

o que implica

$$\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} = \left[-\frac{2}{3} \right] (\mathbf{C}_e \otimes \mathbf{F}^{-T}) + 2J^{-\frac{2}{3}} \mathbb{I}_s : [(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T \boxtimes \mathbf{F}_i^{-T}] \quad (\text{G.8})$$

G.2 Cômputo de $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{F}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{F}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \left(-\frac{\lambda\mu}{2} \ln \left(\frac{\lambda + 3 - \mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I}}{\lambda} \right) \right) \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})} \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \left(\frac{\lambda + 3 - \mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I}}{\lambda} \right) \\ &= \frac{\lambda^2\mu}{2} \left(\frac{1}{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})} \right) \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{C}_{iso} : \mathbf{I}) \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

Utilizando o resultado obtido no apêndice, subseção G.1.1, temos que

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \mathbf{F}} &= \frac{\lambda^2 \mu}{2} \left(\frac{1}{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})} \right) \frac{1}{\lambda} (2 \text{dev}(\mathbf{b}_{iso}) \mathbf{F}^{-T}) \\ &= \lambda \mu \left(\frac{\text{dev}(\mathbf{b}_{iso}) \mathbf{F}^{-T}}{\lambda + 3 - \text{tr}(\mathbf{C}_{iso})} \right)\end{aligned}\quad (\text{G.10})$$

G.3 Cômputo de $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}}$

Utilizamos a regra da cadeia para calcular a derivada em uma direção arbitrária \mathbf{W}

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{C}_e} : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \\ &= \left(\frac{1}{2} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial \ln \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{C}_e} \right) : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W}\end{aligned}\quad (\text{G.11})$$

Utilizamos a seguinte propriedade

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} : \frac{\partial \ln \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{C}_e} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \mathbf{C}_e^{-1} \quad (\text{G.12})$$

para obter

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} = \frac{1}{2} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} \mathbf{C}_e^{-1} : \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} \quad (\text{G.13})$$

Anteriormente, foi obtido o resultado para $\frac{\partial H}{\boldsymbol{\varepsilon}_e}$

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_e} = 2G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \quad (\text{G.14})$$

Utilizamos agora o resultado obtido para $\frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W}$ e substituímos na equação acima:

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= G \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{C}_e^{-1} : \left[\left[-\frac{2}{3} \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \right] \mathbf{C}_e \right. \\ &\quad \left. + J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}_i^{-T} \mathbf{W}^T \mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1} + J^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{F} \mathbf{F}_i^{-1})^T \mathbf{W} \mathbf{F}_i^{-1} \right]\end{aligned}\quad (\text{G.15})$$

Agora, utilizamos (sem prova) a propriedade de coaxialidade de $\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e$ e \mathbf{C}_e^{-1} , o que implica a comutatividade entre esses dois tensores, ou seja $\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{C}_e^{-1} = \mathbf{C}_e^{-1}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e$. Além disso, utilizamos a propriedade de produto interno $\mathbf{AB} : \mathbf{C} = \mathbf{A} : \mathbf{CB}^T = \mathbf{B} : \mathbf{A}^T\mathbf{C}$, para mover o tensor \mathbf{C}_e^{-1} para o lado direito do produto interno de forma conveniente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= G\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{C}_e^{-1} : \left[-\frac{2}{3}\mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \right] \mathbf{C}_e \\ &+ G\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{C}_e^{-1} : \left[J^{-\frac{2}{3}}\mathbf{F}_i^{-T}\mathbf{W}^T\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1} \right] + G\mathbf{C}_e^{-1}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \left[J^{-\frac{2}{3}}(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} \right] \\ &= G\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \left[-\frac{2}{3}(\mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W})\mathbf{I} + J^{-\frac{2}{3}}\mathbf{F}_i^{-T}\mathbf{W}^T\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1}\mathbf{C}_e^{-T} + \right. \\ &\quad \left. J^{-\frac{2}{3}}\mathbf{C}_e^{-T}(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} \right] \quad (\text{G.16}) \end{aligned}$$

Note que $\mathbf{C}_e^{-T} = \mathbf{C}_e^{-1} = \left[J^{-\frac{2}{3}}(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^T\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1} \right]^{-1}$. Substituindo na equação acima

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= G\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \left[-\frac{2}{3}(\mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W})\mathbf{I} + \mathbf{F}_i^{-T}\mathbf{W}^T(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-1}\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} \right] \\ &= J^{-\frac{2}{3}}G \left[-\frac{2}{3}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{I}(\mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W}) + \text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{F}_i^{-T}\mathbf{W}^T(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \right. \\ &\quad \left. - \text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-1}\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} \right] \quad (\text{G.17}) \end{aligned}$$

Agora, note que o segundo termo entre chaves pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{F}_i^{-T}\mathbf{W}^T(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} &= \mathbf{W} : (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{F}_i^{-T} \\ &= (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} \quad (\text{G.18}) \end{aligned}$$

E de forma semelhante, para o terceiro termo entre chaves

$$\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-1}\mathbf{W}\mathbf{F}_i^{-1} = (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T}\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e\mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} \quad (\text{G.19})$$

Por fim, note que $\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{I} = \text{tr}(\text{dev}\boldsymbol{\varepsilon}_e) = 0$

Dessa forma, podemos simplificar a expressão obtida para $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} :$

W

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{W} &= G \left[0 - 2 (\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{F}_i^{-T} : \mathbf{W} \right] \\ &= 2G \left[(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{F}_i^{-T} \right] : \mathbf{W} \end{aligned} \quad (\text{G.20})$$

O que implica

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{F}} = 2G \left[(\mathbf{F}\mathbf{F}_i^{-1})^{-T} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_e \mathbf{F}_i^{-T} \right] \quad (\text{G.21})$$

G.4 Cômputo de $\frac{\partial U}{\partial \mathbf{F}}$

note que

$$\frac{\partial U}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \left(\frac{\kappa}{2} (\ln J)^2 \right) = \kappa \ln J \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\ln (\det (\mathbf{F}))) \quad (\text{G.22})$$

dessa forma, devemos avaliar a derivada $\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\ln (\det (\mathbf{F})))$. Utilizando o conceito de derivada direcional, temos que

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\ln (\det (\mathbf{F}))) : \mathbf{W} = \left. \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\ln (\det (\mathbf{F} + \epsilon \mathbf{W}))) \right|_{\epsilon=0} \quad (\text{G.23})$$

Utiliza-se a propriedade do determinante da soma: $\det (\mathbf{T} + \mathbf{S}) =$

$$\det(\mathbf{S}) + \mathbf{T}^c : \mathbf{S} + \mathbf{S}^c : \mathbf{T} + \det(\mathbf{T})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\ln(\det(\mathbf{F}))) : \mathbf{W} &= \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\ln(\det(\mathbf{F} + \epsilon \mathbf{W}))) \\ &= \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\ln(\det(\mathbf{F}) + (\epsilon \mathbf{W})^c : \mathbf{F} + \mathbf{F}^c : (\epsilon \mathbf{W}) + \det(\epsilon \mathbf{W}))) \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\ln(\det(\mathbf{F}) + \epsilon^2 \det(\mathbf{W})(\mathbf{W})^{-T} : \mathbf{F} \\ &\quad + \epsilon \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + \epsilon^3 \det(\mathbf{W}))) \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{\frac{\partial}{\partial \epsilon} (\det(\mathbf{F}) + \epsilon^2 \det(\mathbf{W})(\mathbf{W})^{-T} : \mathbf{F} + \epsilon \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + \epsilon^3 \det(\mathbf{W}))}{\det(\mathbf{F}) + \epsilon^2 \det(\mathbf{W})(\mathbf{W})^{-T} : \mathbf{F} + \epsilon \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + \epsilon^3 \det(\mathbf{W})}} \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{2\epsilon \det(\mathbf{W})(\mathbf{W})^{-T} : \mathbf{F} + \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + 3\epsilon^2 \det(\mathbf{W})}{\det(\mathbf{F}) + \epsilon^2 \det(\mathbf{W})(\mathbf{W})^{-T} : \mathbf{F} + \epsilon \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} + \epsilon^3 \det(\mathbf{W})} \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \mathbf{F}^{-T} : \mathbf{W} \quad (\text{G.24}) \end{aligned}$$

dessa forma, temos que

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} (\ln(J)) = \mathbf{F}^{-T} \quad (\text{G.25})$$

$$\frac{\partial U}{\partial \mathbf{F}} = \kappa \ln J \mathbf{F}^{-T} \quad (\text{G.26})$$

H Resultados experimentais

No corpo do texto principal foram expostos apenas resultados representativos para cada taxa de deformação. O objetivo desse apêndice é mostrar o conjunto completo de resultados obtido.

H.1 Deformação por tempo

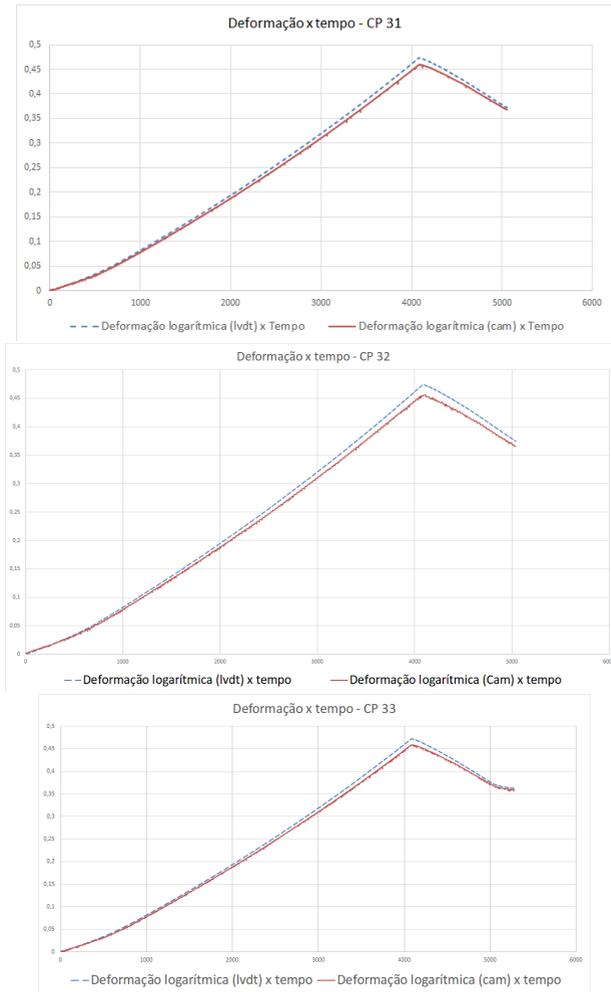


Figura H.1: Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmera, para taxa de 10^{-4} .

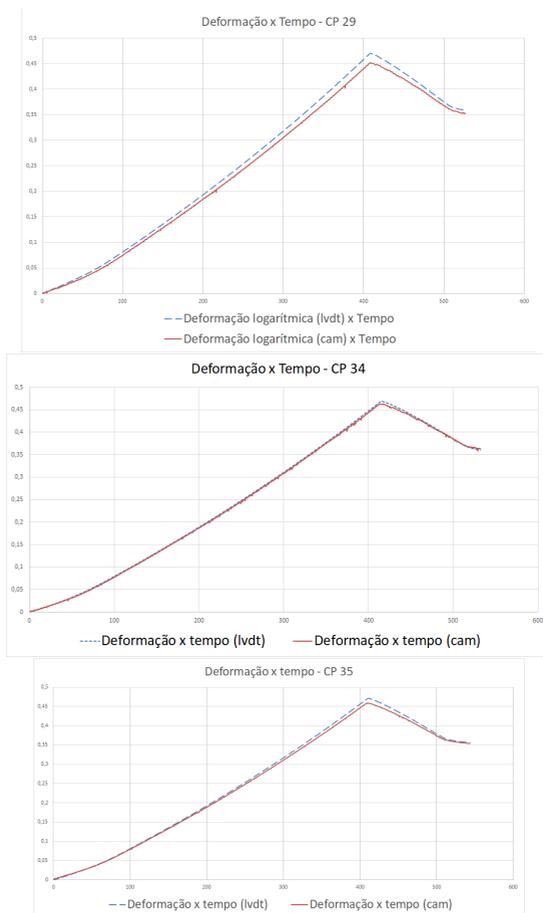


Figura H.2: Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmara, para taxa de 10^{-3} .

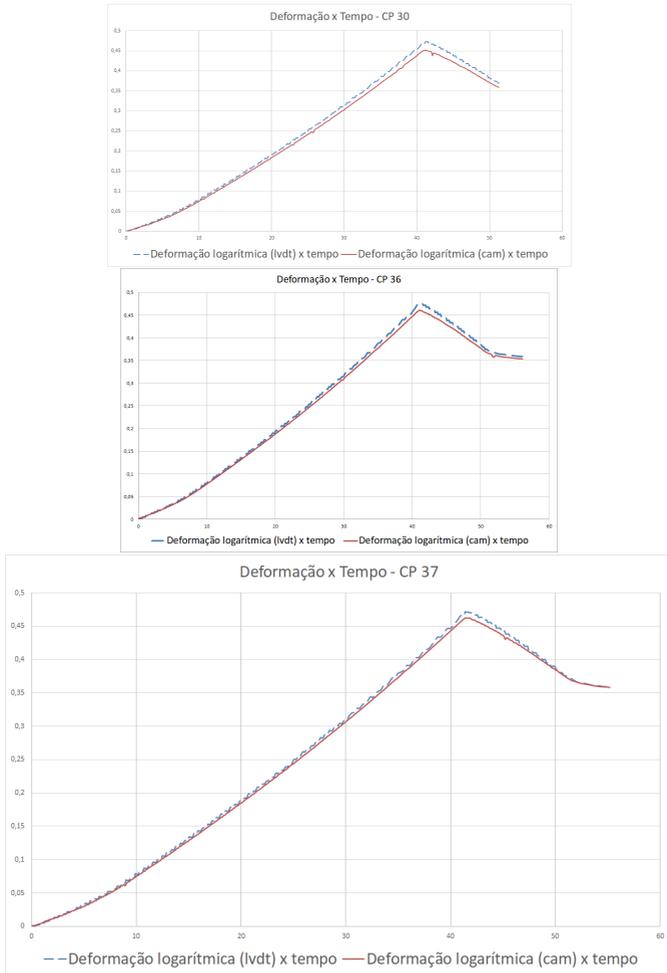
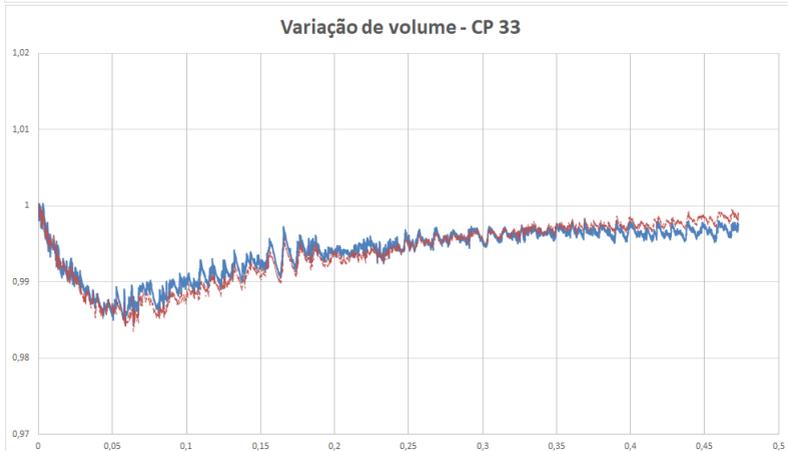
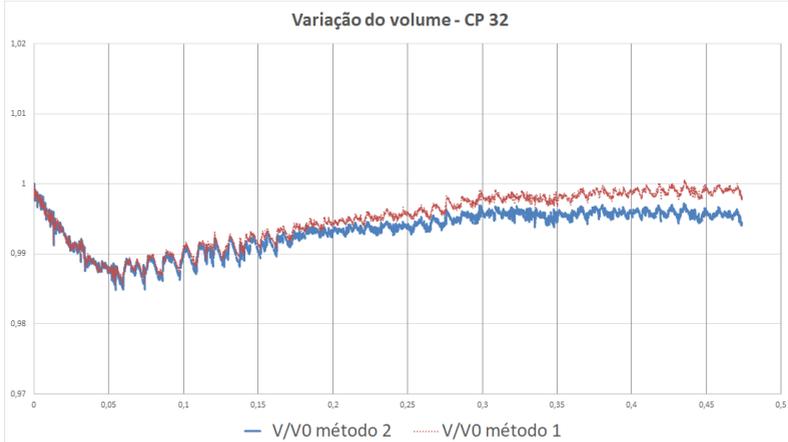
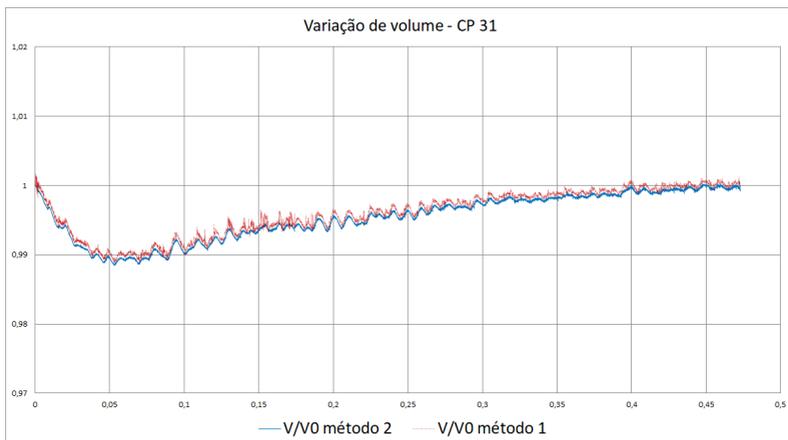


Figura H.3: Curvas de deformação por tempo medidas pelo lvdt e pelo método de detecção a partir das imagens obtidas pela câmera, para taxa de 10^{-2} .

H.2 Razão de volume por deformação



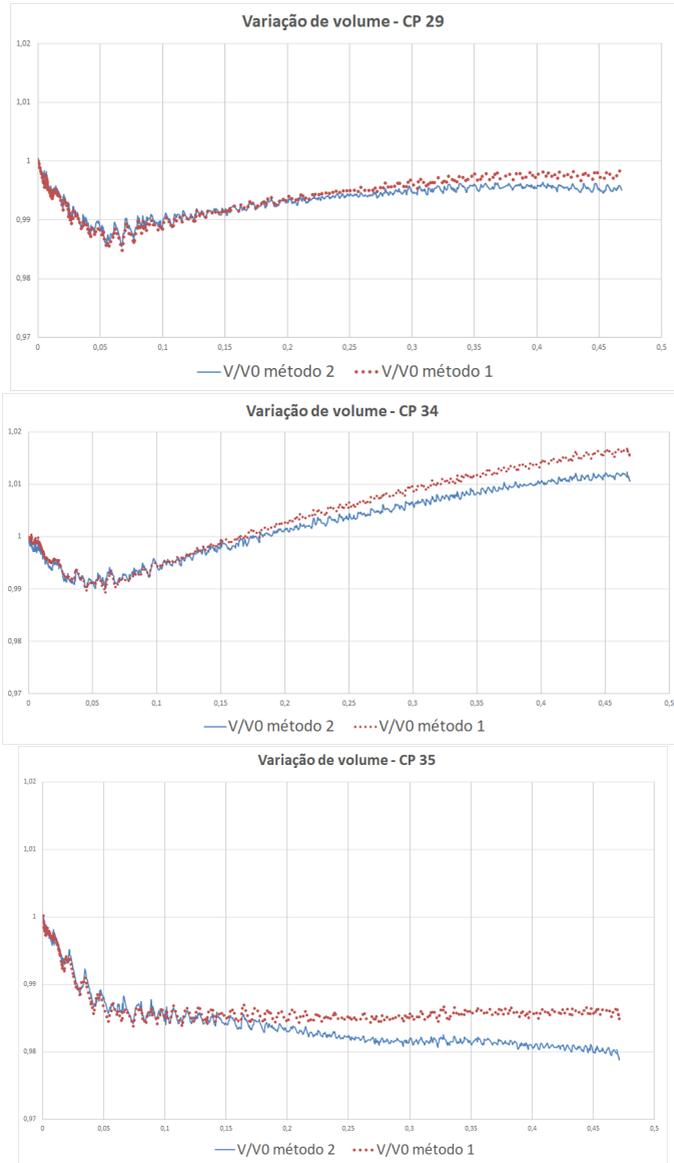


Figura H.5: Curvas de variação de volume por deformação (logarítmica, medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-3} .

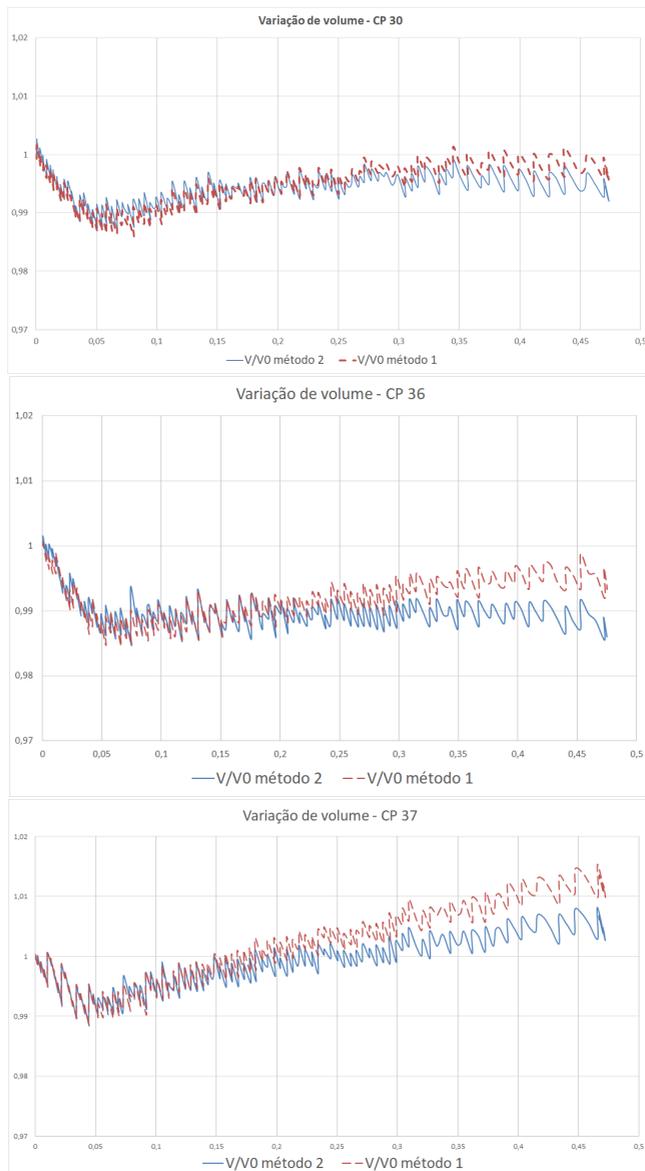


Figura H.6: Curvas de variação de volume por deformação (logarítmica, medida pelo $lvdt$), para taxa de 10^{-2} .

H.3 Tensão por deformação

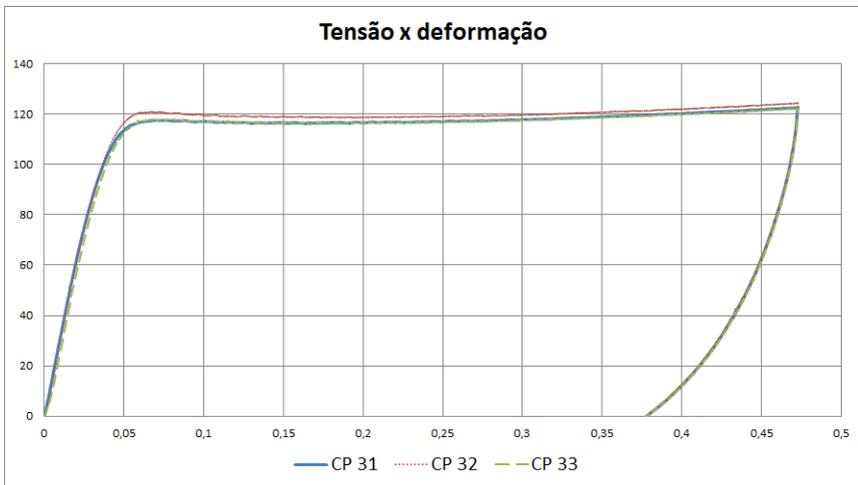


Figura H.7: Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo lvdt), para taxa de 10^{-4} .

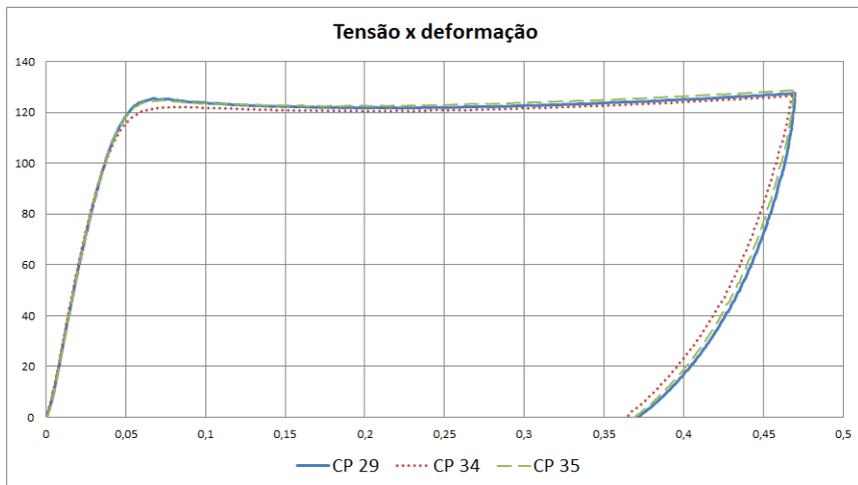


Figura H.8: Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo $lvdt$), para taxa de 10^{-3} .

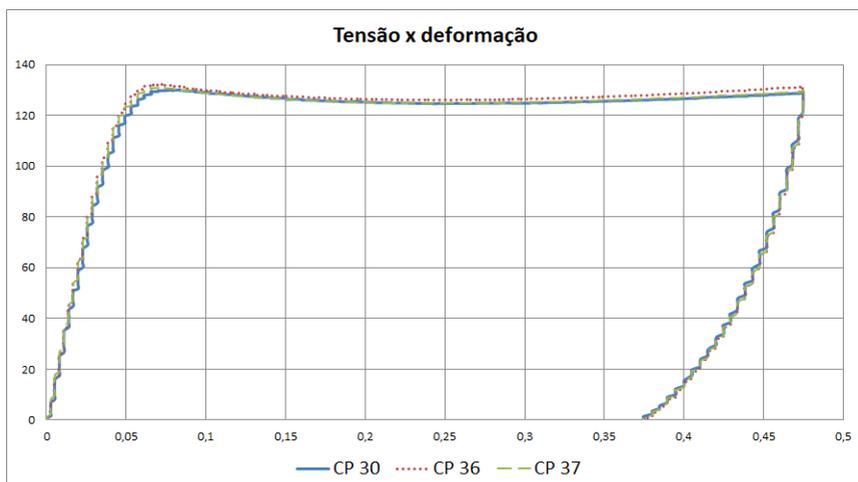


Figura H.9: Curvas de tensão real por deformação real (medida pelo $lvdt$), para taxa de 10^{-2} .