

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELO DE ELASTOPLASTICIDADE COM DANO
MECÂNICO ACOPLADO AO FENÔMENO DE
HIDRÓLISE NA SIMULAÇÃO DE POLÍMEROS
BIOABSORVÍVEIS**

Dissertação submetida à
Universidade Federal de Santa Catarina
como parte dos requisitos para a obtenção do grau de
Mestre em Engenharia Mecânica

LEANDRO PEREIRA LINDENMEYER

Florianópolis, dezembro de 2011

**MODELO DE ELASTOPLASTICIDADE COM DANO
MECÂNICO ACOPLADO AO FENÔMENO DE
HIDRÓLISE NA SIMULAÇÃO DE POLÍMEROS
BIOABSORVÍVEIS**

LEANDRO PEREIRA LINDENMEYER

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica, Área de concentração Análise e Projeto Mecânico, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.
Orientador

Júlio César Passos, Dr.
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Banca Examinadora:

Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.
Presidente

Paulo de Tarso R. de Mendonça, Ph.D.

Gean Vitor Salmoria, Dr.

Miguel Vaz Júnior, Ph.D.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, aos meus pais Mauro e Mariza e irmãos Luciane e Leonardo pelo apoio neste trabalho e por toda vida.

À minha namorada Patrícia por todo amor, compreensão, dedicação e paciência.

Aos grandes amigos da repartição Hélio Hemmendoerfer Junior, Diego Amadeu Furtado Torres e Andresa Freitas pelo acolhimento, amizade e ensinamentos.

Aos grandes amigos Henrique, Steffano, Guido, Paulo, Diana e Juliana pelo companheirismo.

Ao grande amigo e orientador Eduardo Fancello por toda contribuição acadêmica sempre me transmitindo conhecimento.

A todo PosMec, GRANTE e CNPQ.

Resumo da Dissertação apresentada à UFSC como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

**MODELO DE ELASTOPLASTICIDADE COM DANO
MECÂNICO ACOPLADO AO FENÔMENO DE
HIDRÓLISE NA SIMULAÇÃO DE POLÍMEROS
BIOABSORVÍVEIS**

Leandro Pereira Lindenmeyer

dezembro / 2011

Orientadores: Eduardo Alberto Fancello, D.Sc. Área de Concentração: Análise e Projeto Mecânico.

Palavras-chave: Polímero bioabsorvível, dano químico, mecânica do dano, Método de Elementos Finitos.

Materiais poliméricos bioabsorvíveis vêm sendo usados na medicina com maior frequência devido a sua biocompatibilidade com o corpo sem desencadear reações de corpo estranho. Estudos comprovam a eficácia dos materiais poliméricos bioabsorvíveis comparado aos materiais não-absorvíveis devido ao período de tempo em que se mantêm a fixação e, ao se decompor gradualmente, possibilitam que tensões mecânicas impostas sejam progressivamente transferidas à união osso-tecido mole permitindo sua remodelação óssea. Neste trabalho, incorpora-se uma variável escalar de dano referente ao efeito da degradação química (hidrólise) acoplada ao efeito de dano mecânico (Lemaitre 1985). A formulação desenvolvida é baseada em pequenas deformações e deslocamentos na qual respeita-se um quadro termodinamicamente consistente. O modelo desenvolvido é implementado em um código de elementos finitos. Os exemplos numéricos foram analisados através de um modelo cilíndrico com entalhe e outro modelo do tipo placa também com entalhe. Os resultados obtidos apresentaram o comportamento da degradação perante o carregamento imposto ao longo do tempo.

Abstract of Dissertation presented to UFSC as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Mechanical Engineering.

**ELASTO-PLASTICITY MODEL COUPLED WITH
MECHANICAL DAMAGE TO THE PHENOMENON OF
HYDROLYSIS IN THE SIMULATION OF
BIOABSORBABLE POLYMERS**

Leandro Pereira Lindenmeyer

Dec / 2011

Advisor: Eduardo Alberto Fancello, D.Sc..

Area of Concentration: Mechanical Analysis and Design.

Keywords: Bioabsorbable polymer, damage chemical, damage mechanics, Finite Element Method.

Bioabsorbable polymeric materials have been used in medicine more often because of their biocompatibility with the body without causing foreign body reactions. Studies confirm the effectiveness to bioabsorbable polymeric materials compared to non-absorbable materials due to the length of time that keep fixation and to decompose gradually enable mechanical stresses imposed are progressively transferred to the union bone-soft tissue allowing your bone remodeling. In this work, incorporate into a scalar variable of damage on the effect of chemical degradation (hydrolysis) coupled to the effect the mechanical damage (Lemaitre 1985). The formulation presented is developed on small deformations and displacements in which respect is a thermodynamically consistent framework. The developed model is implemented in a finite element code. The numerical examples were analyzed by a notched cylindrical model and another model type plate also notched. The results showed the behavior of the degradation before loading imposed over time.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Mecanismo de degradação (BURKERSRODA; SCHEDL; OPFERICH, 2002).	5
2.2	Elemento de volume representativo.	16
4.1	Tensão equivalente de von Mises em função das diferentes deformações máximas aplicadas ao longo de 120 dias.	43
4.2	Degradação (total, hidrolítica e plástica) em função das diferentes deformações máximas aplicadas.	43
4.3	Evolução da tensão equivalente de von Mises apresentando um comportamento elastoplástico (1 hora) com a presença marcante da degradação mecânica (dano plástico), seguida da evolução da tensão equivalente com influência da degradação hidrolítica (120 dias).	45
4.4	Comportamento da degradação durante os carregamentos (pré-carga e carregamento constante) ao longo do tempo.	45
4.5	Tensão vs. deformação para um ciclo de carga/descarga.	46
4.6	História da degradação após o final do ciclo de carregamento (descarga).	47
4.7	Evolução do dano total através da constante g	47
4.8	Deformação na direção axial para vários valores de forças prescritas durante 120 dias.	48
4.9	Evolução da degradação perante força prescrita.	49
4.10	Deformação máxima vs. tempo sob dois intervalos de carregamento.	50
4.11	Dano total vs. tempo sob dois intervalos de carregamento.	50
4.12	Deformação axial vs. tempo para um carregamento seguido de um descarregamento totalizando 120 dias.	51
4.13	Dano total vs. tempo para um carregamento seguido de um descarregamento totalizando 120 dias.	52
4.14	Vista de um cilindro de revolução (a) e sua geometria composta por uma malha de elementos finitos (b).	53
4.15	Comparação da tensão equivalente de von Mises perante a presença do dano total (à esquerda) com um material apresentando apenas do dano plástico (à direita).	55
4.16	Evolução do dano perante um deslocamento prescrito evoluindo linearmente durante 120 dias.	56
4.17	Comparação da tensão equivalente de von Mises com e sem a presença do dano hidrolítico.	58

4.18	Variável de dano total com o passar do tempo para um deslocamento instantâneo seguido de um deslocamento constante durante 120 dias	59
4.19	Tensor tensão de Cauchy máximo para um carregamento e descarregamento.	60
4.20	Dano total perante um carregamento e descarregamento. . .	61
4.21	Tensão equivalente de von Mises perante uma força prescrita aplicada durante 120 dias.	63
4.22	Evolução do dano total perante uma força prescrita.	64
4.23	Curva deformação máxima vs. tempo.	65
4.24	Tensão equivalente de von Mises para aplicação de força sobre dois intervalos de tempo.	66
4.25	Dano total perante dois intervalos de tempo.	67
4.26	Deformação máxima perante dois intervalos de tempo. . . .	68
4.27	Tensor tensão de Cauchy perante um carregamento seguido de um descarregamento.	69
4.28	Dano total perante um carregamento e descarregamento. . .	70
4.29	Deformação máxima para um carregamento seguido de um descarregamento.	71
4.30	Dimensões da chapa (a) e sua geometria composta por uma malha de elementos finitos (b).	72
4.31	Tensão equivalente de von Mises para uma placa 3D com entalhe sob aplicação de um deslocamento progressivo linearmente durante 120 dias.	74
4.32	Dano total sob aplicação de um deslocamento progressivo linearmente durante 120 dias.	75
4.33	Tensão equivalente de von Mises para um carregamento sob força prescrita.	76
4.34	Evolução do dano total após a aplicação de força progressiva e linear durante 120 dias.	77
4.35	Deformação máxima para um carregamento imposto de forma progressiva linearmente em um placa tridimensional.	78
4.36	Tensão equivalente de von Mises para uma placa 3D com entalhe.	79
4.37	Evolução da variável de dano total.	80
4.38	Deformação máxima para dois intervalos de carregamento. . .	81
4.39	Tensão de Cauchy para uma placa 3D com entalhe sob um carregamento e descarregamento.	82
4.40	Dano total para carga e descarga.	83

4.41	Deformação máxima na direção axial sob um carregamento seguido de um descarregamento.	84
------	---	----

LISTA DE TABELAS

3.1	Variáveis de estado e variáveis conjugadas.	25
4.1	Dados iniciais.	41

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MRI	Imagem de ressonância magnética
MW	Peso molecular
PDLLA	Poli D,L ácido láctico
PGA	Poli ácido glicólico
PLA	Poli ácido láctico
LCA	Ligamento cruzado anterior
IARC	Agencia Internacional de Pesquisa sobre o Câncer
PLLA	Poli L- ácido láctico
PGA/PLLA	poli (ácido láctico glicólico)
UV	Radiação ultravioleta
PLDLLA	Poli L, DL ácido láctico
PTV	Princípios dos Trabalhos Virtuais
EVR	Elemento de volume representativo
MEF	Método de Elementos Finitos
DEP	Dano elastoplástico
DEPH	Dano elastoplástico com hidrólise

LISTA DE SÍMBOLOS

\mathfrak{B}	Domínio genérico
Ω	Região do corpo
Γ	Fronteira do corpo
ρ	Densidade do material
\mathbf{v}	Campo de velocidade genérico
\mathbf{f}	Força de superfície
\mathbf{b}	Força de corpo
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor tensão de Cauchy
$\hat{\mathbf{u}}$	Campo de deslocamento virtual
\mathbf{P}_E	Potência mecânica das forças externas
\mathbf{E}_c	Energia cinética do sistema
\mathbf{P}_I	Potência das forças internas
\mathbf{Q}_E	Taxa de calor
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
r	Fonte de calor interna
\mathbf{U}	Energia total do sistema
Λ	Produção total de entropia
η	Entropia específica
θ	Temperatura absoluta
ψ	Energia livre de Helmholtz
\mathbf{D}_I	Dissipação interna de energia
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tensor deformação
$\boldsymbol{\alpha}$	Variáveis de encruamento isotrópico
\mathbf{A}	Força conjugada à variável interna
$\boldsymbol{\varepsilon}^p$	Tensor deformação plástico
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$	Deformação plástica acumulada
$\boldsymbol{\varepsilon}^e$	Tensor deformação elástico
σ_{y0}	Tensão de escoamento do material
q	Tensão equivalente de von Mises
J_2	Segundo invariante do tensor tensão de Cauchy
\mathbf{s}	Tensor tensão deviatórico
k	Força termodinâmica do encruamento isotrópico
Ψ	Potencial de dissipação
Φ	Função de escoamento
d	Dano total
d_c	Dano crítico
\mathbf{u}	Campo de deslocamento real

B	Matriz de deformação
R	Resíduo de forças
\mathbf{f}^{int}	Vetor de forças nodais internas
\mathbf{f}^{ext}	Vetor de forças nodais externas
K_T	Matriz de rigidez tangente
d^p	Dano plástico
d^h	Dano hidrolítico
γ^L	Energia liberada pelo dano plástico
γ^h	Energia liberada pelo dano hidrolítico
ψ^e	Potencial de dissipação relativa a deformação plástica e dano
ψ^p	Potencial de dissipação relativa a deformação plástica acumulada
D	Tensor de elasticidade isotrópico linear
ν	Coefficiente de Poisson
E	Módulo de elasticidade
I	Tensor identidade de segunda ordem
p	Pressão hidrostática
R_v	Função de triaxialidade
G	Módulo de cisalhamento
K	Módulo de compressibilidade
r	Parâmetro do material referente ao dano plástico
s	Parâmetro do material referente ao dano plástico
l	Parâmetro do material referente ao dano hidrolítico
g	Parâmetro do material referente ao dano hidrolítico
m	Parâmetro do material referente ao dano hidrolítico
N	Tensor de escoamento plástico
H	Módulo de encruamento
\hat{H}	Função de Heaviside
$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$	Tensor tensão deviatórico efetivo
\tilde{p}	Pressão hidrostática efetiva
γ	Parâmetro associado a plastificação
$\boldsymbol{\epsilon}_d^e$	Componente deviatórica da deformação elástica
$\boldsymbol{\epsilon}_v^e$	Componente volumétrica da deformação elástica
\tilde{q}	Tensão equivalente de von Mises efetivo
d_c	Dano crítico
$\text{div}(\cdot)$	Operador divergente de (\cdot)
$\text{tr}(\cdot)$	Operador traço de (\cdot)
$\Delta(\cdot)$	Incremento de (\cdot)
∇^s	Operador gradiente
$(\dot{\cdot})$	Derivada em relação ao tempo

$(\cdot)^T$	Operador transposto de (\cdot)
$(\cdot)_n$	Estado atual (conhecido)
$(\cdot)_{n+1}$	Estado atualizado
$(\cdot)^{tr}$	Incremento teste
$\ (\cdot)\ $	Norma Euclidiana
$ (\cdot) $	Norma de um escalar

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .	3
2.1	Biopolímeros e implantes bioabsorvíveis	3
2.2	Modelos constitutivos para degradação por hidrólise	6
2.3	Equações de balanço, leis da termodinâmica e princípios varia- cionais	8
2.4	Modelo de elastoplasticidade isotrópico	12
2.4.1	Critérios e leis de escoamento	13
2.4.2	Lei de encruamento	14
2.5	Modelo de dano contínuo	15
2.6	Método de elementos finitos	18
3	MODELO DE DANO ELASTOPLÁSTICO ACOPLADO AO DANO POR HIDRÓLISE	21
3.1	Variáveis de estado, potencial termodinâmico e variáveis con- jugadas	21
3.2	Critério de escoamento plástico e potencial dissipativo	25
3.3	Leis de evolução das variáveis internas	27
3.4	Modelo constitutivo incremental	29
3.4.1	Preditor elástico ($\Phi_{n+1} < 0$)	32
3.4.2	Corretor plástico para equação única	34
3.5	Resumos	38
3.5.1	Quadro 3.1: Preditor Elástico	38
3.5.2	Quadro 3.2: Corretor Plástico	39
3.5.3	Quadro 3.3: Método de Newton-Raphson	40
4	EXEMPLOS NUMÉRICOS	41
4.1	Introdução	41
4.2	Problema uniaxial	42
4.2.1	Ensaio uniaxiais com controle de deformação	42
4.2.1.1	Aplicação de deformação de forma pro- gressiva e linear	42
4.2.1.2	Aplicação de deformação sob dois interva- los de tempo	44

4.2.1.3	Aplicação de deformação na forma de um ciclo (carga/descarga)	44
4.2.2	Ensaio sem a presença da deformação	46
4.2.3	Ensaio uniaxiais com controle de tensão	48
4.2.3.1	Aplicação de tensão de forma progressiva e linear	48
4.2.3.2	Aplicação de tensão sob dois intervalos de tempo	49
4.2.3.3	Aplicação de tensão na forma de um ciclo (carga/descarga)	51
4.3	Problema axissimétrico com entalhe	53
4.3.1	Teste de tração com deslocamento controlado	54
4.3.1.1	Aplicação de deslocamento de forma progressiva e linear	54
4.3.1.2	Aplicação de deslocamento sob dois intervalos de tempo	54
4.3.1.3	Aplicação de deslocamento na forma de um ciclo (carga/descarga)	57
4.3.2	Teste de tração com força controlada	57
4.3.2.1	Aplicação de força na forma progressiva e linear	62
4.3.2.2	Aplicação de força sob dois intervalos de tempo	65
4.3.2.3	Aplicação de força na forma de um ciclo (carga/descarga)	68
4.4	Modelo tridimensional	71
4.4.1	Aplicação de deslocamento de forma progressiva e linear	73
4.4.2	Aplicação de força de forma progressiva e linear	73
4.4.3	Aplicação de força sob dois intervalos de tempo	78
4.4.4	Aplicação de força na forma de um ciclo (carga/descarga)	81
5	CONCLUSÃO	85
5.1	Considerações finais	85
5.2	Sugestões para futuros trabalhos	86
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88
	Apêndice A – Deduções do capítulo 3	93

A.1	Dedução do potencial em relação a inversa da lei tensão vs. deformação	93
A.2	Força termodinâmica ocasionada pelo fenômeno de hidrólise	93
A.3	Dedução da variável de dano hidrolítico para o estado teste elástico	94
A.4	Dedução do tensor tensão desviador para o estado de tempo $n + 1$	94
A.5	Dedução da variável de dano total através da variável integra de dano w	95
Apêndice B	– Método de Elementos Finitos	97
B.1	Funções governantes	97
B.1.1	Função deslocamento	97
B.1.2	Estado de deformação	97
B.1.3	Condições de equilíbrio	97
B.1.4	Condições de contorno	98
B.1.5	Relação constitutiva linear	98
B.1.6	Aproximação do campo de deslocamento e do campo de deformação	98
B.1.6.1	Elementos isoparamétricos	100
B.1.6.2	Pontos de integração (Gauss)	101
Apêndice C	– Método de diferenças finitas	103

1 INTRODUÇÃO

Os dispositivos poliméricos bioabsorvíveis vêm sendo fortemente estudados por pesquisadores tanto na área médica quanto na engenharia, com o principal objetivo de substituir os implantes de material metálico, cerâmico ou polimérico não degradável. Um dispositivo polimérico bioabsorvível ideal deve exercer as mesmas funções mecânicas que os usuais tendo como principal diferença a degradação e absorção pelo corpo. Desta forma, estes dispositivos mantêm a fixação e, ao se decompor gradualmente, possibilitam que as tensões mecânicas impostas sejam progressivamente transferidas para a união osso-tecido mole até sua fixação biológica.

Sucintamente, para que um tratamento seja satisfatório, os implantes bioabsorvíveis devem atender aos seguintes aspectos:

- sua taxa de absorção deve coincidir com a taxa de consolidação óssea, de forma que a perda de propriedades mecânicas do dispositivo seja substituída pela capacidade de absorção de cargas pelos tecidos em formação;
- o polímero deve facilitar o crescimento ósseo ou no mínimo não inibi-lo;
- o polímero e seu produto de degradação deve ser biocompatível, prevenindo reações adversas (TRANTOLO et al., 2004).

Outro aspecto positivo do uso de implantes bioabsorvíveis é que, quando expostos a irradiação em exames clínicos, como raios-X ou imagem de ressonância magnética (MRI), os implantes de polímeros bioabsorvíveis não geram artefatos de modo a alterar os resultados (FROSCH et al., 2009; KONAN; HADDAD, 2009).

Devido à natureza dos implantes bioabsorvíveis, suas propriedades mecânicas são alteradas pelo tempo em um ambiente fisiológico e a taxa de retenção destas propriedades está associada ao peso molecular (MW), grau de cristalinidade e porosidade do polímero. Um material que apresenta melhores propriedades mecânicas e tempo de degradação ideal para uma reconstrução ortopédica é o poli (D,L Lático) ácido (PDLLA), onde, este apresenta características de alto módulo de elasticidade comparado aos demais não gera partículas devido à má degradação durante o pós-operatório com uma degradação variando entre 1 a 2 anos, tempo mais do que necessário para a união osso-tecido mole, não impedindo sua consolidação (NHO, 2009).

Assim, inicia-se este trabalho de modo a entender o funcionamento referente ao comportamento mecânico quando submetido a um carregamento imposto. Tendo esta aplicação tecnológica como motivação, o presente trabalho trata da extensão de um modelo clássico de Lemaitre de dano elas-

toplástico propondo a inclusão de um termo que simule um dano hidrolítico. Embora seja conhecido que o modelo elastoplástico usado como hoje nesta proposta não é adequado para polímeros, pois aqui é utilizado em caráter exploratório para incorporar a proposta de dano.

No Capítulo 2, apresenta uma descrição das propriedades e aplicações de polímeros bioabsorvíveis, motivação do presente estudo, seguido de uma breve revisão bibliográfica de modelos de degradação. Neste mesmo capítulo, apresenta-se um conjunto de conceitos que formam a fundamentação teórica do presente trabalho: equações de balanço e princípios da termodinâmica, assim como uma breve apresentação do modelo de elastoplasticidade e conceitos de dano contínuo. O Capítulo 3 trata da proposta deste trabalho, um modelo de dano elastoplástico acoplado a uma degradação hidrolítica. O Capítulo 4 contém uma família de resultados numéricos com o objetivo de avaliar a capacidade do modelo proposto. Finalmente, o Capítulo 5 apresenta as conclusões obtidas e propostas de continuação dos trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Biopolímeros e implantes bioabsorvíveis

O fator mais importante que distingue um biomaterial de qualquer outro material é sua capacidade de estar em contato com os tecidos vivos sem causar danos ao organismo. Os materiais bioabsorvíveis utilizados em aplicações na medicina podem ser naturais, sintéticos, ou polímeros biosintéticos que sejam biocompatíveis com o corpo não desencadeando reações de corpo estranho. Os denominados bioabsorvíveis diferem dos outros materiais na propriedade de sofrer degradação por ação química (hidrólise), sendo que fragmentos deste processo químico são reabsorvidos *in vivo* por ação biológica no organismo com parcial ou total eliminação posterior (BARBANTI; CECÍLIA; ZAVAGLIA, 2005). Atualmente existem no mínimo 40 tipos de polímeros desenvolvidos para uso cirúrgico, mas os mais comumente utilizados são o ácido poliglicólico (PGA), os ácidos poliláticos (PLA) e os copolímeros (polímero constituído de diferentes unidades de repetição) associados a estes.

As indicações atuais para uso de polímeros bioabsorvíveis em ortopedia incluem a estabilização de fraturas, de osteotomias (operação cirurgia na qual um osso é cortado para ser aumentado, diminuído ou realinhado) e de enxertos ósseos, bem como para a fixação de tecidos moles tais como meniscos, tendões e ligamentos. Especificamente no joelho humano, polímeros bioabsorvíveis podem ser utilizados em reconstruções ligamentares que visam tratar a ruptura de um dos ligamentos do joelho, como por exemplo, o Ligamento Cruzado Anterior (LCA). Nestes casos, o substituto do enxerto pode ser fixado à estrutura óssea por meio de um parafuso de interferência ou de um pino transverso, fabricados em polímero bioabsorvível. No ombro, as aplicações recaem mais no uso de âncoras bioabsorvíveis utilizadas intra ou extra-articulação como meio de suporte para a sutura de tecidos moles. Já na coluna, estes materiais têm sido aplicados como espaçadores intervertebrais que substituem um disco lesado, ou como placas de estabilização para conectar os corpos vertebrais de um dado segmento da coluna em tratamentos para a fusão óssea (CICCONE et al., 2001).

Nas indicações para reconstrução ligamentar do joelho humano, as vantagens dos dispositivos fabricados em materiais metálicos incluem a fixação efetiva e confiável dos enxertos próximo à linha articular, com redução dos riscos de movimento de enxerto dentro do túnel ósseo e do alargamento destes túneis (CLATWORTHY et al., 1999). Já suas desvantagens têm

sido descritas como efeitos colaterais graves, como inflamação e irritação. Também impedem o osso de crescer dentro do espaço onde está o implante, aumentando o risco de fratura óssea (BACH, 1989; DHILLON; LOKESH, 2006). Mas a principal razão, pela qual o uso dos dispositivos metálicos nas intervenções de reconstrução do LCA tem sido questionado, é pela dificuldade de remoção nos eventos de revisão cirúrgica, quando o tratamento falha e é necessário uma nova intervenção, gerando também artefatos nas imagens de ressonância magnética dificultando a interpretação dos exames quanto à necessidade deste tipo de avaliação no pós-operatório (OKAZAKIA et al., 2004). Além disso, embora considerados resistente à corrosão, os dispositivos fabricados de materiais metálicos do tipo aço inoxidável austenítico ou ligas de níquel-titânio estão propensos a liberação de íons metálicos *in vivo* (OKAZAKIA et al., 2004). Estes íons metálicos, tal como cromo, níquel e molibdênio, foram classificados como produtos cancerígenos pela Agência Internacional de Pesquisa sobre o Câncer (IARC) (BOFFETTA, 1993).

Um material bioabsorvível dito perfeito, para o uso ortopédico, é aquele que inicialmente tem características mecânicas iguais aos implantes metálicos. Sua degradação é iniciada com o processo de cicatrização, de forma que a carga é gradualmente transferida para o tecido em cura (CICCONE et al., 2001).

A maioria das pesquisas sobre as aplicações clínicas dos materiais bioabsorvíveis têm sido focada na utilização de polímeros conhecidos como alfa-poliéster ou ácido poli (alfa-hidróxido). Isso inclui o PLA e o PGA. A combinação desses materiais permite a otimização de suas propriedades biomecânicas para determinados usos clínicos (DHILLON; LOKESH, 2006). Os polímeros são compostos de subunidades covalentemente ligados formando longas macromoléculas. Estas subunidades de repetição são denominadas monômero. Um polímero fabricado de um único monômero de repetição é chamado homopolímero, já a combinação de dois ou mais monômeros diferentes resultam em um copolímero. A morfologia dos polímeros, em estado sólido, podem ser do tipo amorfo ou cristalino, sendo estas determinadas pela orientação das cadeias poliméricas. A maioria dos implantes bioabsorvíveis são fabricados de materiais semicristalinos onde contenham tanto regiões amorfas quanto cristalinas, cada qual desempenhando um papel na taxa de resistência a tração e absorção de água.

O processo de degradação dos implantes bioabsorvíveis é irreversível dado pela quebra das ligações químicas através do fenômeno de hidrólise (degradação). Quando a integridade estrutural do implante é comprometida, ocorre micro fraturas dentro do implante acelerando o processo de hidrólise.

Neste mecanismo, primeiramente há uma perda de peso molecular, seguida por perda de tensão e finalmente perda de massa. A fase inicial da degradação é de natureza química. O processo biológico e a remoção do implante ocorrem mais tarde. Devido ao padrão de degradação, esses materiais perdem resistência funcional muito antes de serem completamente absorvidos (TRAN-TOLO et al., 2004; CHEN; ZHOU; LI, 2011).

A degradação hidrolítica do polímero depende das propriedades intrínsecas do material e está relacionada ao coeficiente de difusão da água, taxa de degradação, tamanho do corpo, nível de cristalinidade e estado de deformação mecânica. Segundo Trantolo et al. (2004), Chen, Zhou e Li (2011), a degradação pode ocorrer através de dois mecanismos:

1. Degradação superficial (*Surface Degradation*): Ocorre quando a difusibilidade de água é menor do que a taxa na qual o polímero é degradado, resultando assim em uma degradação que avança através superfície em contato.

2. Degradação Mássica (*Bulk degradation*): Este mecanismo considera o comportamento de toda a massa, ocorrendo devido a difusibilidade de água ser maior do que a taxa na qual o polímero é degradado, resultando assim em uma erosão interna do componente. Os polímeros à base de ácido lático e glicólico são exemplos de polímeros comerciais que degradam através desse mecanismo.

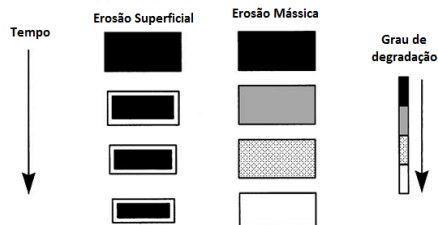


Figura 2.1: Mecanismo de degradação (BURKERSRODA; SCHEDL; OPFERICH, 2002).

No entanto, estes dois casos de degradação podem ocorrer simultaneamente para alguns materiais, podendo afetar significamente a liberação de drogas e a regeneração dos tecidos com o passar do tempo.

O tempo de degradação do material bioabsorvível é um assunto de

grande importância, pois havendo uma rápida degradação a união osso-tecido mole não se regenera por completo sofrendo grandes tensões de modo a comprometer sua funcionalidade. Quando há um tempo maior para a completa ocorrência da degradação, foi observado reações de corpo estranho devido a produtos de degradação (FROSCH et al., 2009). Diversos trabalhos relataram problemas com o Poli (L-ácido lático) (PLLA) incluindo reações inflamatórias, migração do implante através do túnel femoral e tibial, tempo de degradação superior impedindo a remodelação óssea do tecido, entre outros (BUSFIELD; ANDERSON, 2007; KONAN; HADDAD, 2009; DENTI et al., 2004).

O poli (ácido DL lático) ou poli (DL lactídeo) (PDLLA) é um copolímero onde apresenta configuração dextrógiro (D) e uma configuração levógiro (L) do ácido lático (PLA) formado por cadeias cristalinas e amorfas ao ponto de obter características suficientes para que sua degradação seja tal que, com o passar do tempo, o polímero seja degradado com tensões impostas transferidas ao tecido em fase de cicatrização. Um aspecto positivo é que o PDLLA se degrada de 1 a 2 anos, tempo suficiente para a cicatrização do tecido mole, e também não apresenta partículas cristalinas, tendo como característica ser rígido, apresentando alto módulo de elasticidade, sendo alterado na presença de outro polímero.

A combinação de diferentes percentuais de DL-lactídeo e L-lactídeo em um único copolímero podem criar materiais não só com características mecânicas ajustadas, mas também com tempos de degradação adequados possibilitando sua utilização na maioria das aplicações músculo-esquelético. Uma das combinações mais utilizadas em implantes ortopédicos é o copolímero (PLLA-co-PDLLA na proporção 70-30), amorfo, que segundo alguns autores apresentaram comportamento mecânico adequado e características menos agressivas ao tecido (LI; GARREAU; VERT, 1990).

2.2 Modelos constitutivos para degradação por hidrólise

As propriedades mecânicas dos implantes ortopédicos bioabsorvíveis devem ser consideradas tanto no momento da inserção quanto ao longo da degradação. Inicialmente os implantes são submetidos a cargas consideráveis, que diminuem gradualmente com a cicatrização do tecido. O implante ideal irá degradar a uma taxa que transfere gradualmente a carga para o tecido em cicatrização e não ultrapassa a resposta de cura. Os fatores que afetam as propriedades mecânicas dos implantes incluem o tipo de material, seu processamento e o ambiente a ser testado. Diversos trabalhos vêm sendo realizados com o objetivo de investigar a evolução da degradação de polímeros bioab-

sorvíveis considerando efeitos de hidrólise e de solitação mecânica imposta ao implante.

Miller e Williams, (MILLER; WILLIAMS, 1984), apresentaram um dos primeiros estudos sobre o efeito da deformação aplicada na degradação de um dispositivo (PLA) usado em suturas cirúrgicas. Foi aplicado um estado de deformação uniaxial entre 25% a 50% da deformação de ruptura de um material virgem. Foi observado uma tensão de relaxação durante a degradação após 14 a 21 dias onde toda tensão havia sido perdida em ambos os experimentos (*in vivo* e *in vitro*) e também foi observado, através de medidas da tensão de ruptura, que a taxa de hidrólise foi afetada pela magnitude de deformação aplicada.

Chu (CHU, 1985), relatou uma relação entre a deformação imposta com o tempo de degradação através de fibras de PLA imensas em solução. Os testes foram analisados durante 2, 4, 7, 10, 14 e 21 dias de imersão. Quando uma tensão (pré-carga) é aplicada no material, se observou que sem a presença da degradação hidrolítica o material tende a se romper, mas com a presença em um meio aquoso houve criação de microvazios permitindo maior penetração de água acelerando a degradação.

Zong e co-autores (ZHONG; DOHERTY; WILLIAMS, 1993), analisaram a influência da degradação impondo 4% de deformação em uma fibra de sutura de material do tipo PGA e PLA embebida em solução de água e peróxido de hidrogênio. Após duas semanas imersas em peróxido de hidrogênio, sofrendo acelerada degradação, concluíram que a degradação da fibra de sutura era muito mais rápida quando havia deformação do que sem deformação. Além disso, a deformação aplicada, na ausência de um ambiente químico, não alterou as propriedades mecânicas da fibra.

Deng (DENG et al., 2005), investigou o efeito da tensão na taxa de hidrólise em um copolímero (PGA/PLLA). Em testes de fluência, sujeitaram uma fibra de 0,3 mm de diâmetro com carregamento constante de 0,20 N, 0,40 N e 0,80 N que corresponde a 0,25%, 0,50% e 1,00% da tensão de ruptura de uma fibra não degradada durante 30 dias de testes. Sua conclusão foi que após imposto um carregamento externo, foi observado uma dependência das propriedades mecânicas em relação a temperatura. Com o aumento na temperatura, ocorreu uma aceleração no processo de degradação, conseqüentemente um menor tempo de degradação. Outra conclusão foi a dependência entre a deformação do corpo e o seu peso molecular.

Rajagopal e co-autores (RAJAGOPAL; SRINIVASA, 2004a; RAJAGOPAL; SRINIVASA, 2004b), desenvolveram modelos termodinamicamente consistente para considerar, em forma acoplada, aspectos de degradação induzida por

esforços mecânicos e por mecanismos químicos oriundos de hidrólise. Outros agentes como radiação (UV), difusão de oxigênio e temperatura foram inicialmente desconsiderados.

Smit e colaboradores (SMIT et al., 2008), avaliaram o efeito de um carregamento uniaxial de compressão controlando umidade e temperatura para um dispositivo usado em coluna vertebral (*cages*, na literatura de língua inglesa) do tipo (PLDLLA) 70/30. Os resultados obtidos mostraram que a resistência mecânica para o PLDLLA 70/30 é dependente do carregamento, temperatura e umidade.

Soares e Rajagopal (SOARES et al., 2008; SOARES; RAJAGOPAL; JR, 2010), apresentaram um modelo constitutivo para polímeros bioabsorvíveis quando sofrem degradação induzida por deformação. Foi proposto um campo escalar que reflete o estado local da degradação e variação das propriedades do material. Este campo é dado por uma lei de evolução que depende do estado de deformação e está acoplado ao balanço de momento linear. Neste modelo foram extraídos os comportamentos da tensão de relaxação, fluência e histerese, devido à degradação. Entretanto, este modelo não considera a ação conjunta de dano mecânico e hidrolítico.

2.3 Equações de balanço, leis da termodinâmica e princípios variacionais

A conservação do momento linear (quantidade de movimento) de um corpo \mathcal{B} ocupando uma região Ω com fronteira Γ é dada por

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Gamma_a} \mathbf{f} d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{b} d\Omega, \quad (2.1)$$

onde ρ , \mathbf{v} , \mathbf{f} e \mathbf{b} são respectivamente a massa específica, velocidade, forças de superfície atuantes na fronteira Γ_a e forças de corpo atuando sobre o volume.

Fazendo uso da definição do tensor tensão de Cauchy, do teorema da divergência, da arbitrariedade da região Ω e do teorema de Reynolds é possível reescrever a Eq. (2.1) na sua expressão local:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}(x) = \rho \frac{d\mathbf{v}(x)}{dt} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.2)$$

sujeito a condições de contorno (natural):

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{f} \quad \forall x \in \Gamma_a. \quad (2.3)$$

A conservação de momento angular se traduz na simetria do tensor tensão de Cauchy, isto é

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T. \quad (2.4)$$

Os sistemas de equações (2.2), (2.3) e (2.4) são conhecidos como *Formulação Forte do balanço mecânico* podendo ser expresadas equivalentemente na forma variacional mediante o *Princípio dos Trabalhos Virtuais* (PTV) que postula um campo de tensões $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$ em equilíbrio com os esforços externos \mathbf{f} e \mathbf{b} . O PTV trata da substituição deste sistema de equações, que caracteriza o equilíbrio, por uma equação integral sobre o domínio Ω na forma de:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega - \left(\int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma \right) = 0 \quad \forall \mathcal{V}, \quad (2.5)$$

onde o primeiro termo da equação é dito o *Trabalho virtual interno*, o termo entre parênteses é dito o *Trabalho virtual externo*, $\hat{\mathbf{u}}$ o campo de deslocamento virtual e \mathcal{V} o espaço dos deslocamentos virtuais.

A *Primeira Lei da Termodinâmica* estabelece o balanço entre a potência mecânica e a taxa de calor transferida para o sistema com a taxa de variação da sua energia total. A potência mecânica das forças externas \mathbf{P}_E , a energia cinética \mathbf{E}_c e a potência das forças internas \mathbf{P}_I (tensões desenvolvidas durante as deformações) são dadas respectivamente por

$$\mathbf{P}_E = \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{E}_c = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{P}_I = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \, d\Omega. \quad (2.8)$$

onde $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \nabla^S \mathbf{v}$ é a taxa de deformação de um ponto material.

O balanço de energia mecânica devido as forças externas (resultante da variação da energia cinética ou da geração de campos de tensões e deformações) é dado por

$$\mathbf{P}_E = \mathbf{E}_c + \mathbf{P}_I. \quad (2.9)$$

Considere-se também, a taxa de calor \mathbf{Q}_E introduzida no sistema definida por

$$\mathbf{Q}_E = \int_{\Gamma} -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \rho r \, d\Omega, \quad (2.10)$$

onde $(-\mathbf{q})$ e r são, respectivamente o fluxo de calor para dentro do sistema através da fronteira Γ e fontes de calor interna do sistema.

Finalmente, define-se a energia interna do sistema como

$$\mathbf{U} = \int_{\Omega} \rho u \, d\Omega, \quad (2.11)$$

onde u é a função densidade de energia interna definida em Ω .

Assim, a Primeira Lei da Termodinâmica define o seguinte balanço energético no corpo \mathfrak{B} ocupando a região Ω no espaço:

$$\mathbf{P}_E + \mathbf{Q}_E = \frac{d}{dt} (\mathbf{E}_c + \mathbf{U}). \quad (2.12)$$

A partir das equações de cada termo da Eq. (2.12), se tem que

$$\int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma} -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \rho R \, d\Omega = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho u \right) \, d\Omega. \quad (2.13)$$

Após o uso do teorema da divergência, da conservação de massa, do balanço da Eq. (2.9) e do teorema de Reynolds é possível expressar a Primeira Lei da Termodinâmica na sua forma local como

$$\rho \dot{u} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r. \quad (2.14)$$

A *Segunda Lei da Termodinâmica* trata de processos irreversíveis ou também chamados *dissipativos*. Define-se a produção total de entropia Λ em um processo termodinâmico como a seguinte grandeza não negativa

$$\Lambda = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \eta \, d\Omega + \int_{\Gamma} \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma - \int_{\Omega} \rho \frac{r}{\theta} \, d\Omega \geq 0. \quad (2.15)$$

Na Eq. (2.15) η é a entropia específica por unidade de massa do sistema e θ a temperatura absoluta. Nesta equação a variação total de entropia do sistema deve ser igual (processo reversível) ou superar a variação provocada pela transferência de calor (processo irreversível). Neste último caso, se diz que existe produção interna de entropia.

Novamente, admitindo que a desigualdade da Eq.(2.15) é satisfeita para qualquer partição de volume Ω do corpo, tornando-se válida a seguinte forma local:

$$\rho \dot{\eta} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) - \rho \frac{r}{\theta} \geq 0. \quad (2.16)$$

Combinando a Segunda Lei com a Primeira Lei da Termodinâmica obtém-se a seguinte desigualdade

$$\rho \dot{\eta} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) - \frac{1}{\theta} (\rho \dot{u} - \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \operatorname{div} \mathbf{q}) \geq 0. \quad (2.17)$$

Finalmente, introduzindo na Eq. (2.17) a expressão *energia livre de Helmholtz* ψ por unidade de massa, dada por

$$\psi = u - \theta \eta,$$

se obtém a inequação conhecida como *desigualdade de Clausius-Duhem*

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \rho (\dot{\psi} + \eta \dot{\theta}) - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0, \quad (2.18)$$

sendo $\mathbf{g} = \nabla \theta$. Admitindo que o processo é tal que respeita a *Lei de Fourier* e que o calor flui das regiões mais quentes para as mais frias, se observa que o último termo representando a dissipação térmica satisfaz o sinal negativo da parcela ($-\frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \geq 0$). Isto obriga o ponto material respeitar a seguinte desigualdade conhecida como *desigualdade de Clausius-Plank*:

$$\mathbf{D}_I = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \rho (\dot{\psi} + \eta \dot{\theta}) \geq 0. \quad (2.19)$$

Nesta expressão, \mathbf{D}_I é a dissipação interna de energia.

Uma hipótese utilizada amplamente no contexto da mecânica do contínuo postulada nos trabalhos de Toupin (1962) e Truesdell e Noll (1965), onde estabeleceram que o estado termodinâmico de um ponto material no instante de tempo t pode ser completamente definido pelo valor de um conjunto de variáveis denominadas variáveis de estado. No presente caso, este conjunto é representado por $\{\boldsymbol{\epsilon}, \theta, \boldsymbol{\alpha}\}$, onde a deformação $\boldsymbol{\epsilon}$ e a temperatura absoluta θ representam o conjunto das variáveis externas ou observáveis (mensuráveis) e $\boldsymbol{\alpha}$ representa o subconjunto das variáveis internas que acumulam a história do processo dissipativo. A partir desta hipótese, o potencial de energia livre ψ deve ser descrito como uma função das variáveis de estado

$$\psi = \psi \{ \boldsymbol{\varepsilon}, \theta, \boldsymbol{\alpha} \}. \quad (2.20)$$

Consequentemente, sua derivada temporal é dada por:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \dot{\boldsymbol{\alpha}}. \quad (2.21)$$

Substituindo a equação acima na Eq. (2.19), tem-se

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \left(\eta + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \dot{\boldsymbol{\alpha}} \geq 0. \quad (2.22)$$

Como a dissipação deve ser não negativa para qualquer variação $\{ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\theta}, \dot{\boldsymbol{\alpha}} \}$ termodinamicamente admissível, supõe-se um processo não dissipativo tal que $\dot{\theta} = 0$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{0}$. Neste caso, se obtém a propriedade

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (2.23)$$

Com este resultado e considerando um processo não dissipativo $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{0}$, conclui-se que

$$\eta = -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \theta}. \quad (2.24)$$

Definindo $\mathbf{A} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}}$ se tem que a dissipação interna é dada pela expressão

$$\mathbf{D}_I = -\mathbf{A} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \geq 0, \quad (2.25)$$

onde \mathbf{A} denota as denominadas forças termodinamicamente conjugadas às variáveis internas $\boldsymbol{\alpha}$.

2.4 Modelo de elastoplasticidade isotrópico

Neste modelo, supõe-se a existência de duas variáveis internas, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ e $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ relacionadas entre si. A variável $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ é o tensor de deformação plástica e $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ é a deformação plástica equivalente. Supõe-se que o potencial de energia livre possa ser decomposto em

$$\psi = \{ \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^p, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \} = \psi^e (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) + \psi^p (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p), \quad (2.26)$$

onde se define a deformação elástica como $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^p$.

Da Eq. (2.23), tem-se que

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \rho \frac{\partial \psi^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e}, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{A}_{\boldsymbol{\varepsilon}^p} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^p} = \rho \frac{\partial \psi^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^p} = -\rho \frac{\partial \psi^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} = -\boldsymbol{\sigma}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{A}_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p} = \rho \frac{\partial \psi^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p} = k(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p). \quad (2.29)$$

Substituindo na condição de dissipação não negativa (Eq. 2.25) obtém-se

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - k \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p \geq 0. \quad (2.30)$$

2.4.1 Critérios e leis de escoamento

A expressão (2.30) deve ser satisfeita para todo processo admissível $\{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p, \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p\}$. Entretanto, cada modelo estabelece as condições para existência de $\{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p, \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p\}$ não nulo (critério de escoamento) e a direção e relação entre elas (lei de escoamento).

Neste trabalho, utiliza-se o critério de escoamento de von Mises (1913), onde o escoamento plástico inicia quando a tensão equivalente de von Mises (q) atinge um valor crítico σ_{y0} característico do material:

$$q = \sqrt{3J_2}, \quad (2.31)$$

onde q é a tensão equivalente de von Mises e J_2 é o segundo invariante do tensor tensão de Cauchy dado pelas tensões desviadoras. Assim, q é dado como

$$q = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s} : \mathbf{s}}, \quad (2.32)$$

sendo \mathbf{s} a parcela desviadora do tensor tensão de Cauchy.

Deve-se realçar que este critério é independente da tensão hidrostática (primeiro invariante do tensor tensão de Cauchy), dependendo apenas da componente desviadora do tensor de Cauchy. Assim, a função de escoamento é dada por

$$\Phi(q, k) = q(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_y(k) \leq 0, \quad (2.33)$$

onde $\sigma_y(k) = \sigma_{y0} + k$ é a tensão limite de escoamento uniaxial que depende

da força adjunta k (encruamento).

O critério estabelece que não haja deformação plástica ($\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = 0$, $\dot{\bar{\epsilon}}^p = 0$) quando $\Phi(q, k) < 0$, sendo este permitido quando $\Phi(q, k) = 0$. A lei de escoamento, por sua vez estabelece a direção do fluxo plástico, quando este é permitido pelo critério. Este fluxo plástico $\{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p, \dot{\bar{\epsilon}}^p\}$ deverá ser tal que satisfaça a dissipação positiva de (2.30). A lei de escoamento de von Mises pode ser escrita mediante a hipótese de existência de um potencial de dissipação não negativo $\Psi = \Phi$ (lei associativa) convexa nas variáveis $\boldsymbol{\sigma}$ e k e zero na origem: $\Phi(0, 0) = 0$.

Assim, define-se

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = -\dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial A_{\boldsymbol{\epsilon}^p}} = \dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad \text{e} \quad \dot{\bar{\epsilon}}^p = -\dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial A_{\bar{\epsilon}^p}} = -\dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial k}. \quad (2.34)$$

O parâmetro $\dot{\gamma} \geq 0$ é um multiplicador plástico ou também chamado de *parâmetro de consistência*, sendo este um valor não negativo onde nos fornece a evolução da plastificação e obedece as condições de complementaridade de Kuhn-Tucker (*condições de carga-descarga*):

$$\Phi(q, k) \leq 0; \quad \dot{\gamma} \geq 0; \quad \dot{\gamma} \Phi = 0.$$

Na Eq. (2.34) as derivadas $\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$ e $\frac{\partial \Psi}{\partial k}$ definem a “direção” de evolução das variáveis internas (tensorial no caso de $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p$ e escalar no caso de $\dot{\bar{\epsilon}}^p$) enquanto $\dot{\gamma}$ é uma variável escalar não negativa que especifica a amplitude de evolução. Esta definição e a propriedade do potencial de dissipação Ψ garante que, quando a Eq.(2.34) é substituída na Eq. (2.30) a dissipação é não negativa. Outro aspecto fundamental do modelo é que as variáveis internas $\boldsymbol{\epsilon}^p$ e $\bar{\epsilon}^p$ não são independentes, mas relacionadas entre si. Dentre as várias alternativas, neste trabalho escolhe-se definir $\bar{\epsilon}^p$ como a deformação plástica equivalente:

$$\dot{\bar{\epsilon}}^p = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p\| \quad \text{e} \quad \bar{\epsilon}^p = \int_0^t \dot{\bar{\epsilon}}^p dt. \quad (2.35)$$

2.4.2 Lei de encruamento

O encruamento é caracterizado pela dependência do nível de tensão de escoamento σ_y em relação à história da deformação plástica sofrida. Neste modelo isotrópico, o encruamento é representado em termos da força termodinâmica k durante o escoamento plástico, alterando assim o tamanho da su-

perfície de escoamento definida pela curva de nível $\Phi(q, k) = 0$. No presente trabalho, adota-se uma lei de encruamento linear do tipo

$$\sigma_y(\bar{\epsilon}^p) = \sigma_{y0} + k(\bar{\epsilon}^p). \quad (2.36)$$

O módulo de encruamento H é definido por

$$H(\bar{\epsilon}^p) = \frac{\partial \sigma_y}{\partial \bar{\epsilon}^p} = \frac{\partial k}{\partial \bar{\epsilon}^p},$$

onde representa a taxa das forças termodinâmicas dada pelo estado de encruamento em que o material se encontra.

2.5 Modelo de dano contínuo

A mecânica do dano em meios contínuos é dada pela deteriorização do material, reduzindo assim seu módulo de elasticidade, tensão de escoamento, rigidez e densidade do material, entre outros.

Esse estudo é de suma importância para prever o início de uma fratura sujeita a um carregamento. Dano ou degradação da rigidez está relacionado com a iniciação, crescimento e interconexão de microtrincas e microporos. Com isso, a mecânica do dano contínuo foi introduzida e amplamente usada para simular o crescimento da degradação das propriedades dos materiais antes da iniciação de uma macrotrinca.

A mecânica do dano em meios contínuos teve como um dos pioneiros o trabalho de Kachanov em 1958 onde se desenvolveu uma formulação de um modelo constitutivo para descrever a degradação interna dos sólidos dentro da mecânica do contínuo. Entretanto, esse modelo não apresenta um claro significado físico para o dano. Logo após, foi introduzido o conceito de tensão efetiva por L.N. Rabotnov em 1968, e em 1971 J. Lemaitre que descreveu os princípios da deformação equivalente introduzindo o acoplamento do dano à deformação. J. Lemaitre e Kachanov em 1985 fundamentaram a termodinâmica dos processos irreversíveis e também J. Lemaitre e Kachanov em 1990 conceituaram a mecânica do dano contínuo (TORRES, 2003; NETO; PERIC; OWEN, 2008; LEMAITRE; DESMORAT, 2005).

O conceito de dano, em materiais dúcteis, se define como nucleação e crescimento (coalescência) de microvazios ou microtrincas, que são descontinuidades em um meio considerado contínuo. Em mecânica do dano em meios contínuos se introduz o conceito de Elemento de Volume Representativo (EVR). Este indica uma fração de volume do material de dimensões

suficientemente grandes para admitir homogeneidade na distribuição dos defeitos nele contido, mas ao mesmo tempo suficientemente pequena para admitir que as grandezas médias nele contido são constantes ao longo de suas dimensões. Assim, pode-se admitir continuidade para as funções representativas dos fenômenos que ocorrem no elemento representativo, e suas propriedades são valores médios que podem ser associados a um ponto material. Na figura 2.2 define-se o conceito de elemento representativo orientado por uma normal de direção \mathbf{n} .

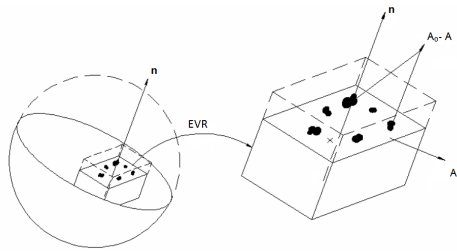


Figura 2.2: Elemento de volume representativo.

Um significado físico para a variável interna do dano dado por Kachanov (1958) foi dado por Rabotnov (1963), onde propôs uma redução de área da seção transversal que corta um EVR, devido a microtrinca, como uma medida satisfatória para o estado de dano interno. Neste contexto, denota-se inicialmente por A como área efetiva de resistência da seção transversal do EVR, correspondente a A_0 sendo sua área de interseção do plano. Para a hipótese de dano isotrópico, a variável escalar de dano d não depende da direção normal como propôs Kachanov. Assim,

$$d = \frac{A_0 - A}{A_0} = \frac{A_d}{A_0}, \quad (2.37)$$

sendo A_d a diferença entre a área íntegra A_0 e a área efetiva A a ser considerada. A definição da variável de dano d é limitada entre 0 e 1, como mostrado abaixo

$$0 \leq d \leq 1, \quad (2.38)$$

onde $d = 0$ é caracterizado um material virgem, sem danificação; e $d = 1$ é caracterizado a perda total da capacidade de resistir ao carregamento. Para

a degradação por ação química, a diferença $(1 - d)$ é dada pela medida de frações das ligações cruzadas intactas em um EVR do corpo. O valor de $d = 0$ representará uma amostra virgem e $d \rightarrow 1$ corresponderá o estado de máxima degradação possível, isto é, cadeias sem qualquer segmento de ligações cruzadas remanescentes sendo incapaz de resistir a qualquer carregamento (SOARES et al., 2008).

Assim, a parcela de seção efetivamente resistente A_0 pode ser expressa em função da variável de dano, seguindo na Eq. (2.37), temos

$$A = A_0 - A_d = A_0 - A_0 d = A_0(1 - d). \quad (2.39)$$

A tensão efetiva introduzida por Rabotnov (1963 apud (SOARES et al., 2008)) descreve as tensões relativas à superfície que efetivamente resiste ao carregamento, dada pela função de forças aplicadas por área efetiva de aplicação como

$$\sigma_{ef} = \frac{F}{A}. \quad (2.40)$$

Substituindo a Eq. (2.39) na equação acima, temos

$$\sigma_{ef} = \frac{F}{A_0(1 - d)} = \frac{\sigma}{1 - d}. \quad (2.41)$$

Estudos de Lemaitre e Chaboche em 1985 (apud (SOARES et al., 2008)) além de descreverem a fundamentação da termodinâmica dos processos irreversíveis, também formularam relações constitutivas em meios contínuos danificados, baseando-se nos Princípios Gerais de Equivalência de resposta constitutiva, nos Princípios de Equivalência de Energia, nos Princípios de Equivalência de Deformação e nos Princípios de Equivalência de Tensão. Neste trabalho, trataremos com a hipótese de equivalência de deformação relatando a deformação do meio íntegro, onde atua a tensão efetiva, igual a do meio danificado, cada qual com seu módulo de elasticidade:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{ef}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{E_{ef}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{ef}}{E} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{E(1 - d)}, \quad (2.42)$$

com

$$E_{ef} = (1 - d)E$$

$$d = \frac{E - E_{ef}}{E} = 1 - \frac{E_{ef}}{E}. \quad (2.43)$$

O dano crítico d_c é caracterizado um limite entre a mecânica do dano e a mecânica da fratura. No presente trabalho, o d_c será alcançado quando o dano total (parcela de dano plástico mais a parcela de dano hidrolítico) alcançar um dado valor experimentalmente conhecido.

2.6 Método de elementos finitos

O Método de Elementos Finitos (MEF) é um método numérico de solução aproximada de equações diferenciais parciais. Para resolver em forma aproximada o PTV (Eq. (2.5)), o MEF propõe uma aproximação dos campos de deslocamento \mathbf{u} e deslocamento virtual $\hat{\mathbf{u}}$ na forma:

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\mathbf{U} \text{ e } \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{N}\hat{\mathbf{U}}, \quad (2.44)$$

onde \mathbf{N} é a matriz de funções de forma, \mathbf{U} e $\hat{\mathbf{U}}$ são os vetores de deslocamentos nodais reais e virtuais, respectivamente. O campo de deformações $\boldsymbol{\varepsilon}$ é calculado a partir da derivada do campo de deslocamento. Em forma matricial, isto é dado por

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \mathbf{B}\mathbf{U} \text{ e } \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) = \mathbf{B}\hat{\mathbf{U}}, \quad (2.45)$$

onde a matriz \mathbf{B} contém a derivada das funções de forma. Substituindo (2.44) e (2.45) em (2.5) obtém-se o seguinte sistema discreto de equações:

$$\mathbf{R} = \mathbf{f}^{int} - \mathbf{f}^{ext} = \mathbf{0},$$

onde

$$\mathbf{f}^{int} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega \text{ e } \mathbf{f}^{ext} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_a} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Gamma. \quad (2.46)$$

Nos problemas aqui tratados, a $\boldsymbol{\sigma}$ é obtida mediante a solução de um problema constitutivo não linear, dependente da deformação $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$ e de um conjunto de variáveis internas que consideram a história do processo.

Admitindo uma discretização temporal ($t \in \{t_1, t_2, t_{n+1}\}$), o problema adota um formato incremental onde o equilíbrio deve ser satisfeito a cada tempo t_{n+1} . O balanço no passo de tempo t_{n+1} se escreve como

$$\mathbf{R}_{n+1} = \mathbf{f}_{n+1}^{int} - \mathbf{f}_{n+1}^{ext} = \mathbf{0}, \quad (2.47)$$

onde

$$f_{n+1}^{int} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}_{n+1} d\Omega \quad (2.48)$$

$$f_{n+1}^{ext} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b}_{n+1} d\Omega + \int_{\Gamma_a} \mathbf{N}^T \mathbf{f}_{n+1} d\Gamma_a \quad (2.49)$$

e o tensor tensão incremental, para o modelo constitutivo, é dado por

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\alpha}_n)$$

dependente da deformação no passo de tempo t_{n+1} ($\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = \frac{\partial \mathbf{u}_{n+1}}{\partial x_{n+1}}$) e da deformação e variáveis internas conhecidas no passo de tempo t_n .

O método utilizado neste trabalho para descobrir a raiz do sistema de equações não lineares (2.48 e 2.49) é o *método de Newton Raphson*, seguindo os passos:

Para $k = 1, 2, \dots, N_{iter}^o$, a Eq. (2.47) toma a forma de

$$\mathbf{R}_{n+1}^k \left(U_{n+1}^k \right) = \mathbf{f}^{int} \left(U_{n+1}^k \right) - \mathbf{f}_{n+1}^{ext}. \quad (2.50)$$

A Eq. (2.50) só é satisfeita quando $\mathbf{f}^{int} \left(U_{n+1}^{k-1} \right) = \mathbf{f}_{n+1}^{ext}$, isso não ocorrendo, é necessário um incremento em U_{n+1} de modo que

$$K_{n+1}^k = \frac{\partial R^k \left(U_{n+1}^k \right)}{\partial U_{n+1}^k}$$

$$\Delta U = - \left(K_{n+1}^k \right)^{-1} R_{n+1}^k$$

$$U_{n+1}^{k+1} = U_{n+1}^k + \Delta U$$

$$k = k + 1,$$

até ser satisfeita. O N_{iter}^o é o número de iteração de Newton necessárias para convergência no intervalo de carga $n + 1$.

A solução iterativa resultante do método de Newton-Raphson preserva a convergência quadrática em uma vizinhança suficientemente próxima à solução, sendo característica do próprio método. Mas isso só é possível perante a consistência do operador tangente K_T com o algoritmo de integração empregado na solução do problema incremental. Maiores detalhes consultar (SIMO; TAYLOR, 1985; NETO; PERIC; OWEN, 2008; BONET; WOOD, 2008).

3 MODELO DE DANO ELASTOPLÁSTICO ACOPLADO AO DANO POR HIDRÓLISE

Nesta seção, apresenta-se um modelo de dano que busca reproduzir o processo de hidrólise, no qual há quebra das cadeias poliméricas por efeito de reações químicas quando inserido em meio aquoso tanto *in vivo* quanto *in vitro*, como visto no Capítulo 2.

Fazendo jus ao formalismo apresentado na Seção 2.3 a respeito da termodinâmica das variáveis internas e na Seção 2.4 a respeito da teoria do dano mecânico acoplado à plasticidade, adiciona-se uma função potencial associada ao dano hidrolítico. A variável de dano passa a ser um somatório de uma parcela de dano plástico, quando inicia a plastificação e outra parcela de dano hidrolítico iniciada no instante em que o material está totalmente embebido em meio aquoso. No presente modelo, admite-se que a escala de tempo do processo de hidrólise é muito maior que o processo de difusão aquosa no polímero e portanto, este último fenômeno não é simulado.

O modelo constitutivo aqui proposto segue o formalismo similar ao modelo de dano plástico isotrópico dado por Lemaitre e Desmorat (2005). Usando a mesma base conceitual de tensões efetivas e a hipótese de equivalência de deformação do dano plástico, a formulação apresentada incorpora uma nova variável interna associada ao dano hidrolítico.

3.1 Variáveis de estado, potencial termodinâmico e variáveis conjugadas

Inicia-se esta seção definindo as variáveis de estado do sistema necessárias para determinar sua energia interna, em qualquer instante. Estas são, a deformação total $\boldsymbol{\varepsilon}$, a deformação plástica $\boldsymbol{\varepsilon}^p$, a deformação plástica equivalente $\bar{\varepsilon}^p$, a variável de dano referente ao estado de plastificação d^p e a variável de degradação hidrolítica d^h . Estas variáveis de estado estão relacionadas às variáveis conjugadas como o tensor tensão $\boldsymbol{\sigma}$, à força termodinâmica relacionada ao encruamento isotrópico χ , ao conjunto de forças termodinâmicas devido ao acúmulo de deformação plástica k , à forças termodinâmicas relacionada ao efeito de degradação plástica Y^L e à variável referente a forças termodinâmicas devido ao efeito hidrolítico Y^h . Também é conveniente definir as seguintes variáveis dependentes, como o tensor de deformação elástica

$\boldsymbol{\varepsilon}^e$ e o dano total d :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (3.1)$$

$$d = d^p + d^h, \quad (3.2)$$

sendo $\boldsymbol{\varepsilon}$ o tensor deformação, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ o tensor deformação plástico, d^p o dano escalar plástico e d^h ao dano escalar hidrolítico.

A energia livre ψ é tida como o potencial do estado do material e quantifica a energia que o sistema dispõe para realizar trabalho. Admite-se ser esta uma função convexa de todo o conjunto de variáveis de estado interna a partir do qual decorrem as leis de estado. No presente caso, o potencial apresenta a seguinte dependência:

$$\psi = \psi \left(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^p, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p, d^p, d^h \right). \quad (3.3)$$

Admite-se ainda, que o potencial seja composto por uma parcela ψ^e que depende do tensor deformação elástica e do dano e outra parcela ψ^p que dependa da deformação plástica acumulada, da seguinte forma:

$$\psi = \psi^e(\boldsymbol{\varepsilon}^e, d) + \psi^p(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p). \quad (3.4)$$

De acordo com o princípio de equivalência de deformação ((LEMAITRE; DESMORAT, 2005)), o potencial de elasticidade-dano no comportamento isotrópico linear é dado como

$$\rho \psi^e = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : \tilde{\mathbf{D}} : \boldsymbol{\varepsilon}^e = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : (1-d) \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (3.5)$$

onde \mathbf{D} é o tensor constitutivo de rigidez elástica dependente de parâmetros material. O acoplamento entre elasticidade e dano é introduzido pelo termo $(1-d)$ dado por $\tilde{\mathbf{D}} = (1-d) \mathbf{D}$.

Este potencial pode também ser escrito em termos das tensões utilizando a expressão (3.5), onde consta sua dedução no Apêndice A em (A.1). De acordo com a inversa da lei tensão/deformação temos

$$\rho \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2E(1-d)} \left\{ (1+\nu) \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\sigma} - \nu [tr(\boldsymbol{\sigma})]^2 \mathbf{I} \right\}, \quad (3.6)$$

onde ν , E e \mathbf{I} são respectivamente o coeficiente de Poisson, o módulo de elasticidade e o tensor identidade de segunda ordem.

Em forma equivalente, a Eq. (3.6) pode ser escrita em termos das tensões desviadoras e hidrostática:

$$\rho \psi^e = \frac{1+\nu}{2E} \mathbf{s} : \mathbf{s} + \frac{3(1-2\nu)}{2E} \frac{p^2}{1-d} = \frac{q^2 R_V}{2E(1-d)}, \quad (3.7)$$

onde $p = \frac{1}{3} \text{tr}[\boldsymbol{\sigma}]$ é a pressão hidrostática, $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - p\mathbf{I}$ é o tensor tensão desviador, $q = \sqrt{\frac{2}{3}} \mathbf{s} : \mathbf{s}$ é a tensão equivalente de von Mises e R_V é a função de triaxialidade definida por:

$$R_V = \frac{2}{3} (1+\nu) + 3(1-2\nu) \left(\frac{p}{q} \right)^2. \quad (3.8)$$

A razão $\frac{p}{q}$ da Eq. (3.8) é definida como razão de triaxialidade.

Por simplicidade, admite-se na seguinte proposta um modelo de plasticidade isotrópica. Neste caso, a parcela plástica de energia livre é dependente apenas da variável escalar de deformação plástica acumulada $\bar{\epsilon}^p$. A contribuição da parcela plástica, para o potencial de energia livre, é dita como

$$\psi^p = \psi^l(\bar{\epsilon}^p). \quad (3.9)$$

Seguindo os mesmos princípios das Eqs. (2.20) e (2.21), deriva-se o potencial ψ em relação às variáveis de estado para obter as variáveis conjugadas. Assim, define-se:

- O tensor tensão de Cauchy :

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^e} = (1-d)\mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon}^e; \quad (3.10)$$

- O tensor tensão χ conjugado da $\boldsymbol{\epsilon}^p$:

$$\chi = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^p} = -[(1-d)\mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon}^e] = -\boldsymbol{\sigma}; \quad (3.11)$$

- O escalar k conjugado da $\bar{\epsilon}^p$:

$$k = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \bar{\epsilon}^p} = k(\bar{\epsilon}^p); \quad (3.12)$$

Esta variável desempenha um papel importante na evolução do encru-

amento isotrópico.

- A força termodinâmica Y^L conjugada do dano plástico d^p (modelo de Lemaitre) é definida através das Eqs.(3.5 e 3.2)

$$Y^L = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial d^p} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}^e. \quad (3.13)$$

Da Eq. (3.7) temos que

$$Y^L = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial d^p} = \frac{\partial \left[\frac{q^2 R_v}{2E(1-d)} \right]}{\partial d^p} = -\frac{q^2 R_v}{2E(1-d)^2}. \quad (3.14)$$

Inserindo a função de triaxialidade vista na Eq. (3.8) chega-se a equação da Y^L como sendo

$$Y^L = -\frac{q^2(1+\nu)}{3E(1-d)^2} - \frac{3(1-2\nu)p^2}{2E(1-d)^2}, \quad (3.15)$$

ou equivalentemente

$$-Y^L = \frac{q^2}{6G(1-d)^2} + \frac{p^2}{2K(1-d)^2}, \quad (3.16)$$

onde

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad \text{e} \quad K = \frac{E}{3(1-2\nu)},$$

sendo G o módulo de cisalhamento e K o módulo de compressibilidade.

Admitindo que $\tilde{q} = \frac{q}{1-d}$ e $\tilde{p} = \frac{p}{1-d}$ a expressão de taxa de liberação de energia ($-Y^L$) ocasionada pelo estado de deformação é dada por:

$$-Y^L = \frac{\tilde{q}^2}{6G} + \frac{\tilde{p}^2}{2K}. \quad (3.17)$$

Este valor corresponde a variação de densidade de energia interna devido ao crescimento de dano plástico. Deve-se notar que este modelo trata de forma indistintiva formas tratativas ou compressivas sendo, portanto, inadequado para potenciais sensíveis a pressão como os polímeros.

- A força termodinâmica Y^h relacionada à variável interna de dano hidrolítico d^h é definida pela derivada do potencial termodinâmico dada

pela Eq. (3.5 e 3.2) como

$$Y^h = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial d^h} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}^e = Y^L. \quad (3.18)$$

Assim, obtemos $Y^L = Y^h$. Por conveniência manteremos separadas as duas variáveis, embora seu valor seja o mesmo para um dado estado. Dado a definição das variáveis de estado e variáveis conjugadas juntamente com suas correlações, agrupamo-as na tabela 3.1 a seguir:

Tabela 3.1: Variáveis de estado e variáveis conjugadas.

Var. de Estado	Var. Conjugada
$\boldsymbol{\varepsilon}^e$	$\boldsymbol{\sigma}$
$\boldsymbol{\varepsilon}^p$	$\boldsymbol{\chi}$
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$	k
d^p	Y^L
d^h	Y^h

3.2 Critério de escoamento plástico e potencial dissipativo

O critério de escoamento proposto por von Mises (1913) indica que o início do escoamento plástico se dá quando o segundo invariante do tensor tensão desviador J_2 atinge um valor crítico comparável com a tensão de escoamento do material σ_y num ensaio uniaxial. No presente caso, utiliza-se a tensão efetiva $\tilde{q} = \frac{q}{(1-d)}$ para avaliar o critério resultando em

$$\Phi(\boldsymbol{\sigma}, k, d) = \frac{\sqrt{3J_2(\mathbf{s})}}{(1-d)} - \sigma_y(k) = \tilde{q} - \sigma_y(k) \leq 0, \quad (3.19)$$

onde $\sigma_y(k)$ é a função limite de escoamento dada por

$$\sigma_y(k) = \sigma_{y0} + k. \quad (3.20)$$

Partindo da função de dissipação escrita através da desigualdade de Clausius-Planck (Eq. (2.19)), sendo ela uma função positiva satisfazendo a Segunda Lei da Termodinâmica, incorpora-se à variável de dano da seguinte

forma:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - k \dot{\bar{\varepsilon}}^p - Y^L \dot{d}^p - Y^h \dot{d}^h \geq 0. \quad (3.21)$$

Considera-se a existência de um *potencial de dissipação* Ψ que permite definir as leis de evolução das variáveis internas a partir da variação deste potencial em relação as variáveis conjugadas. Esta hipótese obedece a proposta de convexidade da função Ψ permitindo construir modelos constitutivos que satisfaçam automaticamente a Segunda Lei da Termodinâmica, especificamente a necessidade de dissipação mecânica não negativa. No presente modelo, propõe-se um potencial Ψ convexo nos seus argumentos $(\boldsymbol{\sigma}, k, d)$ na forma de

$$\Psi = \Phi(\boldsymbol{\sigma}, k, d) + \Psi^p(Y^L, d) + \Psi^h(Y^h, d), \quad (3.22)$$

onde $\Phi(\boldsymbol{\sigma}, k, d)$ é o potencial que define a regra de escoamento, Ψ^p o potencial associado ao dano por deformação plástica e Ψ^h o potencial associado ao dano por ação da hidrólise.

Ao admitir $\Psi \neq \Phi$, tem-se que o modelo de fluxo é não-associativo.

Utiliza-se, neste trabalho, o modelo de dano plástico de J. Lemaitre e Chaboche (1990 apud (NETO; PERIC; OWEN, 2008)) cujo potencial dissipativo é dado por

$$\Psi^p(Y^L, d) = \frac{r}{(1-d)(1+s)} \left(\frac{-Y^L}{r} \right)^{s+1}, \quad (3.23)$$

sendo esta uma função, em geral, não linear em $-Y^L$ dependente dos parâmetros r e s como constantes do material associadas ao fenômeno de degradação mecânica (dano plástico).

A função potencial de dano dissipativo hidrolítico se dá pela equação

$$\Psi^h(Y^h, d) = M(d) \left(\frac{-Y^h}{l} + g \right)^{m+1} \frac{l}{(m+1)}, \quad (3.24)$$

onde l , g e m são constantes de material associadas ao fenômeno de hidrólise e $M(d)$ pode tomar diferentes formas para se adequar às curvas de dano hidrolítico. No presente caso foi utilizada a expressão ((SOARES; RAJAGOPAL; MOORE, 2009))

$$M(d) = (1-d).$$

Esta função (3.24) é a proposta do trabalho onde se tende representar a

evolução do dano hidrolítico perante os diversos testes a serem apresentados (Capítulo 4).

3.3 Leis de evolução das variáveis internas

As variáveis internas $\boldsymbol{\epsilon}^p$, $\bar{\epsilon}^p$ e d^p estão diretamente vinculadas ao fenômeno de plastificação. Sua evolução (taxas) pode ser obtida da derivada do potencial de dissipação em relação às variáveis conjugadas:

- A equação de evolução de $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p$, chamada *regra de escoamento plástico* é dada por

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \dot{\gamma} \mathbf{N}, \quad (3.25)$$

onde \mathbf{N} é o tensor normal à superfície de escoamento definido como

$$\mathbf{N} = -\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}; \quad (3.26)$$

- A equação de evolução da variável taxa de deformação plástica equivalente $\dot{\bar{\epsilon}}^p$

$$\dot{\bar{\epsilon}}^p = \dot{\gamma} H = -\dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial k}; \quad (3.27)$$

- Equação de evolução da variável de dano plástico \dot{d}^p

$$\dot{d}^p = \dot{\gamma} V = -\dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial Y^L}. \quad (3.28)$$

Nas Eq. (3.26), (3.27) e (3.28), as grandezas \mathbf{N} , H e V definem a direção de evolução da $\boldsymbol{\epsilon}^p$, $\bar{\epsilon}^p$ e do d^p enquanto $\dot{\gamma}$ é um valor não negativo chamado *multiplicador de Lagrange* ou *multiplicador plástico* fornecendo a amplitude do escoamento.

A partir das Eq. (3.25), (3.27) e (3.28) com a Eq. (3.22), temos

$$\mathbf{N} = -\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\sigma}, k, Y^L, d)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma}, k, d)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}}{\|\mathbf{s}\|} \frac{1}{(1-d)} \quad (3.29)$$

$$H = -\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\sigma}, k, Y^L, d)}{\partial k} = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma}, k, d)}{\partial k} = 1 \quad (3.30)$$

$$V = -\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\sigma}, k, Y^L, d)}{\partial Y^L} = \frac{\partial \Psi^p(Y^L, d)}{\partial Y^L} = \frac{1}{(1-d)} \left(\frac{-Y^L}{r} \right)^s. \quad (3.31)$$

O fenômeno de danificação por hidrólise não está diretamente vinculado ao fenômeno de plastificação. Pode haver dano hidrolítico mesmo sem carga imposta, devido apenas a um processo químico. Assim, a velocidade de crescimento de d^h não é vinculada ao parâmetro $\dot{\gamma}$. Entretanto, é preciso garantir que o produto $Y^h d^h \geq 0$ define a dissipação não negativa. Isto é possível mediante à adoção de um potencial Ψ^h de maneira que

$$\dot{d}^h = -\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\sigma}, k, Y^h, d)}{\partial Y^h} = -\frac{\partial \Psi^h(Y^h, d)}{\partial Y^h} = M(d) \left(\frac{-Y^h}{l} + g \right)^m. \quad (3.32)$$

Se tomarmos $M(d) = (1 - d)$, o modelo torna-se similar à proposta de Soares, Rajagopal e Moore (2009). Substituindo na Eq. (3.32),

$$\dot{d}^h = (1 - d) \left(\frac{-Y^h}{l} + g \right)^m. \quad (3.33)$$

Esta expressão fornece um valor não negativo para \dot{d}^h com valor limite $d = d^p + d^h$.

Admite-se que o dano plástico d^p ocorre apenas a partir da existência de um valor mínimo de deformação plástica acumulada denominado deformação plástica crítica, denotada por $\bar{\epsilon}_D^p$. Este limiar será incorporado ao modelo redefinindo a lei de evolução do dano plástico d^p dado pela Eq. (3.28) e pela Eq. (3.31), como segue:

$$\dot{d}^p = \dot{\gamma} \frac{\hat{\mathbf{H}}(\bar{\epsilon}^p - \bar{\epsilon}_D^p)}{(1 - d)} \left(\frac{-Y^L}{r} \right)^s, \quad (3.34)$$

onde $\hat{\mathbf{H}}$ é a função de Heaviside

$$\hat{\mathbf{H}}(a) = \begin{cases} 1 & \text{se } a > 0 \\ 0 & \text{se } a \leq 0 \end{cases}. \quad (3.35)$$

Assim, \dot{d}^p é tal que

$$\dot{d}^p = \begin{cases} 0 & \text{se } \bar{\epsilon}^p \leq \bar{\epsilon}_D^p \\ \dot{\gamma} \frac{1}{(1-d)} \left(\frac{-Y^L}{r} \right)^s & \text{se } \bar{\epsilon}^p > \bar{\epsilon}_D^p \end{cases}. \quad (3.36)$$

Admite-se, neste modelo, que o início de dano hidrolítico ocorre espontaneamente logo após o contato com o meio aquoso. Logo após, completada o processo de difusão, se dá início a quebra das cadeias poliméricas

devido à ação química diretamente pela Eq. (3.33).

3.4 Modelo constitutivo incremental

A formulação proposta na seção (3.3) é descrita em termos de taxas das variáveis internas, sendo necessário a sua integração temporal em intervalos finitos de tempo $[t_n, t_{n+1}]$. Assim, descreve-se um algoritmo para integração numérica temporal da equação constitutiva apresentada. A integração numérica é obtida pelo método Euler implícito baseado no formato clássico de um preditor elástico seguido de um corretor plástico, como amplamente usado em plasticidade computacional (NETO; PERIC; OWEN, 2008; SIMO; HUGHES, 1998).

Admite-se o estado do corpo no instante t_n totalmente conhecido mediante às variáveis de estado $(\boldsymbol{\epsilon}_n, \boldsymbol{\epsilon}_n^p, \bar{\epsilon}_n^p, d_n^p \text{ e } d_n^h)$ juntamente com suas variáveis conjugadas. Admite-se também, o conhecimento da deformação total $\boldsymbol{\epsilon}_{n+1} = \boldsymbol{\epsilon}_n + \Delta\boldsymbol{\epsilon}$ no instante t_{n+1} . O algoritmo constitutivo incremental deve fornecer o valor do tensor tensão de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ assim como o valor atualizado das variáveis internas e conjugadas no novo instante de tempo.

Considere-se a Eq. (3.1) no instante de tempo t_{n+1}

$$\boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^e = \boldsymbol{\epsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^p \quad (3.37)$$

e sua separação em parte desviadora $\boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^e$ e volumétrica ϵ_{vn+1}^e , tal que

$$\boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^e = \boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^e - \epsilon_{vn+1}^e \mathbf{I}. \quad (3.38)$$

O tensor tensão de Cauchy nominal $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ é dada por:

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbf{s}_{n+1} + p_{n+1} \mathbf{I}, \quad (3.39)$$

onde

$$\mathbf{s}_{n+1} = (1 - d_{n+1}) \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}; \text{ onde } \tilde{\mathbf{s}}_{n+1} = 2G \boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^e \quad (3.40)$$

$$p_{n+1} = (1 - d_{n+1}) \tilde{p}_{n+1}; \text{ onde } \tilde{p}_{n+1} = K \epsilon_{vn+1}^e, \quad (3.41)$$

onde $\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}$ e \tilde{p}_{n+1} , são respectivamente as tensões desviadoras efetiva e pressão efetiva.

A tensão equivalente de von Mises nominal e efetiva são, respectivamente

$$q_{n+1} = (1 - d_{n+1}) \tilde{q}_{n+1} \quad (3.42)$$

onde

$$\tilde{q}_{n+1} = \sqrt{\frac{3}{2} \tilde{\mathfrak{s}}_{n+1}}; \quad \tilde{\mathfrak{s}}_{n+1} = \sqrt{3J_2(\tilde{\mathfrak{s}}_{n+1})}. \quad (3.43)$$

A condição de consistência (3.19) no estado de tempo t_{n+1} é escrita em função da tensão equivalente de von Mises como

$$\Phi(\xi_{n+1}) = \tilde{q}_{n+1} - [\sigma_{y0} + k(\bar{\epsilon}_n^p + \Delta\gamma)] \leq 0, \quad (3.44)$$

sendo ξ_{n+1} o conjunto de variáveis de estado em t_{n+1} e $\Delta\gamma$ a magnitude da evolução das variáveis associadas a plastificação e à danificação plástica.

O acréscimo de deformação plástica $\Delta\epsilon^p$ segue a Eq. (3.25) e sua forma incremental é dada por

$$\Delta\epsilon^p = \Delta\gamma \mathbf{N}_{n+1}; \quad \mathbf{N}_{n+1} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\mathfrak{s}}_{n+1}}{\|\tilde{\mathfrak{s}}_{n+1}\|} \cdot \frac{1}{(1-d_{n+1})} \quad (3.45)$$

A Eq. (3.45) mostra que o incremento de deformação plástica $\Delta\epsilon^p$ (e portando a deformação plástica total ϵ_{n+1}^p) é desviadora permitindo escrever

$$\epsilon_{dn+1}^e = \epsilon_{dn+1} - (\epsilon_n^p + \Delta\gamma \mathbf{N}_{n+1}) \quad (3.46)$$

$$\epsilon_{vn+1}^e = \epsilon_{vn+1} \quad (3.47)$$

e portanto, substituindo as Eqs.(3.46) e (3.47) nas Eqs. (3.40b) e (3.41b) chega-se às equações de $\tilde{\mathfrak{s}}_{n+1}$ e \tilde{p}_{n+1} de forma tal que

$$\tilde{\mathfrak{s}}_{n+1} = 2G (\epsilon_{dn+1} - (\epsilon_n^p + \Delta\gamma \mathbf{N}_{n+1}))$$

$$\tilde{p}_{n+1} = K \epsilon_{vn+1}^e = K \epsilon_{vn+1}.$$

O dano total d em t_{n+1} é dado pela soma das parcelas d_{n+1}^p e d_{n+1}^h :

$$d_{n+1} = d_{n+1}^p + d_{n+1}^h, \quad (3.48)$$

onde

$$d_{n+1}^p = d_n^p + \Delta d^p \quad \text{e} \quad d_{n+1}^h = d_n^h + \Delta d^h. \quad (3.49)$$

O incremento dano plástico Δd^p é obtido da Eq. (3.36), como

$$\Delta d^p = \frac{\Delta\gamma}{(1-d_{n+1})} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s. \quad (3.50)$$

A expressão incremental de dano hidrolítico Δd^h segue a Eq. (3.33) multiplicada pelo incremento de tempo físico Δt

$$\Delta d^h = \Delta t(1 - d_{n+1}) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m. \quad (3.51)$$

A atualização do dano total é então dada por

$$d_{n+1} = d_n + \frac{\Delta\gamma}{(1 - d_{n+1})} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s + \Delta t(1 - d_{n+1}) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m. \quad (3.52)$$

Essa atualização depende do regime em que se encontram as tensões e portanto do valor de Y_{n+1}^L . Entretanto, é importante observar que para $g > 0$ haverá evolução do dano, mesmo na ausência de tensões no corpo.

Neste ponto é importante discutir uma característica importante do presente modelo. A primeira é que os termos da Eq. (3.52) são de naturezas diferentes. O primeiro termo (evolução da degradação plástica) é “independente do tempo t ” no sentido que é proporcional ao multiplicador plástico $\Delta\gamma$. Isto contrasta com o segundo termo (evolução da degradação hidrolítica) que incorpora à variável tempo físico mediante o termo Δt . O segundo aspecto a ser notado é que o incremento de dano plástico é inversamente proporcional ao termo $(1 - d)$, isto é, a taxa de degradação aumenta, quanto mais danificada se encontra o corpo. O termo hidrolítico, pelo contrário, diminui sua taxa de danificação à medida que o dano aumenta. Isto proporciona comportamentos distintos de cada um dos fenômenos.

O problema final consiste em determinar as variáveis $\Delta\gamma$, Φ_{n+1} e d_{n+1} que satisfazem as Eq.(3.39), (3.44), e (3.52) de modo que seja satisfeita a condição de consistência plástica (*condição de Kuhn-Tucker*) dada por:

$$\Phi_{n+1} \leq 0; \quad \Delta\gamma \geq 0; \quad \Phi_{n+1}\Delta\gamma = 0.$$

A inequação (3.44) define a condição de escoamento e poderá ter dois valores possíveis. No primeiro caso se tem $\Phi_{n+1} < 0$, e o incremento ocorre sem plastificação ($\Delta\gamma = 0$). No segundo caso, $\Delta\gamma > 0$ e portanto $\Phi_{n+1} = 0$. Cada um destes casos será analisado a seguir.

3.4.1 Preditor elástico ($\Phi_{n+1} < 0$)

Para verificar se o passo envolve incremento de plastificação, admite-se um incremento de deformação puramente elástico ($\Delta\gamma = 0$). Assim definem-se as variáveis $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr}$ e $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{ptr}$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr} = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_n^p \quad (3.53)$$

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{ptr} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^p. \quad (3.54)$$

O tensor deformação elástico teste $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr}$ é decomposto em uma parcela desviadora $\boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr}$ e outra parcela volumétrica $\boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr}$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr} = \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr} + \boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr} \mathbf{I} \quad (3.55)$$

permitindo o cálculo do tensor tensão desviador efetivo $\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr}$, da tensão hidrostática efetiva \tilde{p}_{n+1}^{tr} , da tensão equivalente de von Mises efetivo \tilde{q}_{n+1}^{tr} e da energia livre Y_{n+1}^{htr} como

$$\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr} = 2G\boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr} \quad (3.56)$$

$$\tilde{p}_{n+1}^{tr} = K\boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr} \quad (3.57)$$

$$\tilde{q}_{n+1}^{tr} = \sqrt{\frac{3}{2}\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr} : \tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr}} \quad (3.58)$$

$$Y_{n+1}^{htr} = \frac{\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr}}{6G} + \frac{\tilde{p}_{n+1}^{tr}}{2K}. \quad (3.59)$$

Dado que foi admitido que $\Delta\gamma = 0$, o dano será ocasionado apenas pelo fenômeno de hidrólise, de forma que o dano total d_{n+1} se escreve como

$$d_{n+1}^{tr} = d_n^p + d_{n+1}^{htr}, \quad (3.60)$$

onde, das Eqs. (3.49b) e (3.51)

$$d_{n+1}^{htr} = d_n^h + \Delta t \left[\left(1 - d_n^p - d_{n+1}^{htr}\right) \left(\frac{-Y_{n+1}^{htr}}{l} + g\right)^m \right] \quad (3.61)$$

Isolando d_{n+1}^{htr} da Eq. (3.61), se obtém (onde sua dedução consta no

Apêndice A em (A.3))

$$d_{n+1}^{hr} = \frac{d_n^h + \Delta t(1 - d_n^p) \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m}{1 + \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m \Delta t}. \quad (3.62)$$

O cálculo da parcela desviadora homogênea teste s_{n+1}^{tr} , hidrostática homogênea teste p_{n+1}^{tr} e da tensão de von Mises q_{n+1}^{tr} juntamente com a variável de dano total atualizada pela parcela hidrolítica teste são dados respectivamente:

$$s_{n+1}^{tr} = (1 - d_{n+1}^{tr}) s_{n+1}^{tr} \quad (3.63)$$

$$p_{n+1}^{tr} = (1 - d_{n+1}^{tr}) \tilde{p}_{n+1}^{tr} \quad (3.64)$$

$$q_{n+1}^{tr} = (1 - d_{n+1}^{tr}) \tilde{q}_{n+1}^{tr}. \quad (3.65)$$

O valor da função de escoamento para o presente caso é então avaliada como

$$\Phi_{n+1}^{tr} := \tilde{q}_{n+1}^{tr} - [\sigma_{y0} + k(\bar{\epsilon}_{n+1}^{tr})]. \quad (3.66)$$

Se a condição $\Phi_{n+1}^{tr} \leq 0$ é satisfeita, então o passo é elástico, ($\Delta\gamma = 0$) e as atualizações das variáveis internas e dos valores de tensão encontram-se dentro ou sobre a superfície de escoamento. Todas as variáveis são atualizadas na forma

$$(\cdot)_{n+1} := (\cdot)_{n+1}^{tr}.$$

Se, pelo contrário $\Phi_{n+1}^{tr} > 0$, o passo de carga produz incremento plástico $\Delta\gamma > 0$ devendo ser calculado para satisfazer a condição $\Phi_{n+1} = 0$. Neste caso, deve-se satisfazer o sistema de oito (8) equações em $\Phi_{n+1} = 0$ e oito (8) incógnitas ($\Delta\gamma, \sigma_{n+1}, d_{n+1}$). Esta etapa é conhecida como *corretor plástico*.

3.4.2 Corretor plástico para equação única

Considere-se a separação (3.38) e o fato que o tensor de deformação plástico é desviador, a deformação elástica desviadora $\boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^e$ se escreve:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^e &= \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p \\ &= \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p - \Delta\gamma \mathbf{N}_{n+1} \\ &= \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr} - \Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|} \frac{1}{(1-d_{n+1})},\end{aligned}\quad (3.67)$$

onde o valor que substituído em (3.40b) para a obtenção da Eq. (3.40a) fornecerá (ver Apêndice A (A.4) e (A.5))

$$\mathbf{s}_{n+1} = (1-d_{n+1}) \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr} - 2G\Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|}, \quad (3.68)$$

dados que

$$\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr} = 2G\boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr}.$$

Da Eq. (3.68) se desprende que $\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}$ é proporcional a \mathbf{s}_{n+1} , o que permite escrever

$$\mathbf{s}_{n+1} = (1-d_{n+1}) \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr} - 2G\Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}}{\|\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}\|}. \quad (3.69)$$

Define-se a tensão equivalente de von Mises \tilde{q}_{n+1}^{tr} por

$$\tilde{q}_{n+1}^{tr} = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}\| \quad (3.70)$$

que pode ser substituída em (3.69). Obtém-se, desta maneira, as seguintes expressões para \mathbf{s}_{n+1} e p_{n+1} :

$$\mathbf{s}_{n+1} = \left(1-d_{n+1} - \frac{3G\Delta\gamma}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}}\right) \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}. \quad (3.71)$$

$$p_{n+1} = (1-d_{n+1}) \tilde{p}_{n+1} = (1-d_{n+1}) K \boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^e. \quad (3.72)$$

Com a Eq. (3.71) reescreve-se a definição da tensão equivalente de

von Mises e a tensão equivalente de von Mises efetiva:

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \|\tilde{s}_{n+1}^{tr}\| \left(1 - d_{n+1} - \frac{3G\Delta\gamma}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}} \right) \\ &= (1 - d_{n+1})\tilde{q}_{n+1}^{tr} - 3G\Delta\gamma, \end{aligned} \quad (3.73)$$

$$\tilde{q}_{n+1} = \frac{q_{n+1}}{(1 - d_{n+1})} = \tilde{q}_{n+1}^{tr} - \frac{3G\Delta\gamma}{(1 - d_{n+1})}. \quad (3.74)$$

Esta expressão é substituída na equação de consistência Eq. (3.66) de maneira a obter uma equação que dependa apenas de $\Delta\gamma$ e d_{n+1}

$$\Phi(\Delta\gamma, d_{n+1}) \equiv \tilde{q}_{n+1}^{tr} - \frac{3G\Delta\gamma}{(1 - d_{n+1})} - [\sigma_{y0} + k(\bar{\epsilon}_n^p + \Delta\gamma)] = 0. \quad (3.75)$$

Em forma similar, substituindo a Eq. (3.74) na definição de energia livre $-Y^L$ (3.16) temos

$$-Y^L(\Delta\gamma, d_{n+1}) = \frac{1}{6G} \left[\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \frac{3G\Delta\gamma}{(1 - d_{n+1})} \right]^2 + \frac{\tilde{p}_{n+1}^2}{2K}. \quad (3.76)$$

Em suma, o mapeamento de retorno foi reduzido a um conjunto de duas funções escalares (3.75) e (3.76) com $\Delta\gamma$ e d_{n+1} como incógnitas do sistema.

Para reduzir o sistema de equações acima para uma única equação, introduz-se por comodidade a variável $w = (1 - d)$ ((NETO; PERIC; OWEN, 2008)) que substituindo nas Eqs. (3.52), (3.75) e (3.76) fornece, respectivamente:

$$w_{n+1}(\Delta\gamma) = \frac{3G\Delta\gamma}{\tilde{q}_{n+1}^{tr} - [\sigma_{y0} + H(\bar{\epsilon}_n^p + \Delta\gamma)]} \quad (3.77)$$

$$-Y_{n+1}^L(\Delta\gamma) = \frac{1}{6G} \left[\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \frac{3G\Delta\gamma}{w_{n+1}(\Delta\gamma)} \right]^2 + \frac{1}{2K} (\tilde{p}_{n+1}^{tr})^2 \quad (3.78)$$

$$w_{n+1} - w_n + \left\{ \frac{\Delta\gamma}{w_{n+1}} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s + \left[w_{n+1} \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \right\} = 0. \quad (3.79)$$

Para obter a nova função para o mapeamento de retorno, se combinam

as Eq. (3.77) e (3.78) a Eq. (3.79), reduzindo assim a uma única função não linear da variável $\Delta\gamma$:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(\Delta\gamma) &= w_{n+1}(\Delta\gamma) - w_n + \frac{\Delta\gamma}{w_{n+1}(\Delta\gamma)} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s \\ &+ \left[w_{n+1}(\Delta\gamma) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t = 0, \end{aligned} \quad (3.80)$$

onde $w_{n+1}(\Delta\gamma)$ é dada pela Eq. (3.77) e $Y_{n+1}^L(\Delta\gamma)$ dada pela Eq. (3.78).

A solução desta equação pode ser obtida mediante o *Método de Newton-Raphson*. Em (NETO; PERIC; OWEN, 2008), propõe-se utilizar como valor inicial nas iterações de Newton a expressão

$$\Delta\gamma_{(0)} = \frac{[\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \sigma_y(\tilde{\epsilon}_n^p)] w_n}{3G},$$

que corresponde a uma solução para um incremento de dano plástico fixo na superfície de escoamento. Essa suposição reduz o número de iterações para convergência.

$$\begin{aligned} z &:= \frac{d\tilde{\Phi}(\Delta\gamma^{(k)})}{d\Delta\gamma^{(k)}} \\ \Delta\gamma_{(k+1)} &:= \Delta\gamma^{(k)} - \frac{\tilde{\Phi}}{z}, \end{aligned} \quad (3.81)$$

Uma vez encontrado a solução $\Delta\gamma$ de maneira a satisfazer $|\tilde{\Phi}(\Delta\gamma)| \leq$

tolerância, corrige-se as variáveis de estado afetadas pela plastificação.

$$\begin{aligned}
 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^p &= \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^p + \Delta\boldsymbol{\gamma} \\
 \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p &= \boldsymbol{\varepsilon}_n^p + \frac{3\Delta\boldsymbol{\gamma}}{2w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma})} \frac{\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr}}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}} \\
 \boldsymbol{\sigma}_y &= \boldsymbol{\sigma}_{y0} + k(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^p) \\
 d_{n+1} &= 1 - w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \\
 d_{n+1}^h &= d_n^h + \Delta t w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \\
 d_{n+1}^p &= d_n^p + \frac{\Delta\boldsymbol{\gamma}}{w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma})} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s \\
 p_{n+1} &= w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \tilde{p}_{n+1}^{tr} \\
 q_{n+1} &= w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \tilde{q}_{n+1}^{tr} - 3G\Delta\boldsymbol{\gamma} \\
 \mathbf{s}_{n+1} &= \left[w_{n+1}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) - \frac{3G\Delta\boldsymbol{\gamma}}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}} \right] \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr} \\
 \boldsymbol{\sigma}_{n+1} &= \mathbf{s}_{n+1} + p_{n+1} \mathbf{I}.
 \end{aligned}$$

A função $\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \boldsymbol{\varepsilon}_n, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^p, d_n)$ do problema constitutivo incremental é definido uma trajetória para a relação tensão/deformação para o intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. O módulo tangente consistente, para este caso, é dado pela derivada do $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ em relação a $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$, como

$$\mathbf{D} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}. \quad (3.82)$$

O método utilizado para o cálculo do módulo tangente consistente \mathbf{D} é método clássico de diferenças finitas (ver Apêndice C).

3.5 Resumos

3.5.1 Quadro 3.1: Preditor Elástico

Dados de entrada: $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_n^p$, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^p$, d_n^h , d_n^p

Constantes de material: K , G , σ_{y0} , k , r , s , g , l , m

Incremento de tempo: Δt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr} &= \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_n^p \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{ptr} &= \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^p \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr} &= tr(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr}) \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr} &= \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{etr} - \frac{1}{3}\boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr} \\ \tilde{\boldsymbol{p}}_{n+1}^{tr} &= K \boldsymbol{\varepsilon}_{vn+1}^{etr} \\ \tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr} &= 2G \boldsymbol{\varepsilon}_{dn+1}^{etr} \\ \tilde{q}_{n+1}^{tr} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \|\tilde{\boldsymbol{s}}_{n+1}^{tr}\| \\ d_{n+1}^{ptr} &= d_n^p \\ -Y_{n+1}^{htr} &= \frac{(\tilde{q}_{n+1}^{tr})^2}{6G} + \frac{(\tilde{p}_{n+1}^{tr})^2}{2K} \\ d_{n+1}^{htr} &= \frac{d_n^h + \Delta t(1-d_{n+1}^{ptr}) \left(\frac{-y_{n+1}^{htr}}{l} + g \right)^m}{1 + \Delta t \left(\frac{-y_{n+1}^{htr}}{l} + g \right)^m} \\ d_{n+1}^{tr} &= d_{n+1}^{ptr} + d_{n+1}^{htr} \\ p_{n+1}^{tr} &= (1 - d_{n+1}^{tr}) \tilde{p}_{n+1}^{tr} \\ s_{n+1}^{tr} &= (1 - d_{n+1}^{tr}) \tilde{s}_{n+1}^{tr} \\ q_{n+1}^{tr} &= (1 - d_{n+1}^{tr}) \tilde{q}_{n+1}^{tr} \\ \sigma_y &= \sigma_{y0} + k \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{ptr} \end{aligned}$$

Checagem do teste elástico:

Se $\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \sigma_y \leq 0$, então processo elástico e atualização
 $(\cdot)_{n+1} := (\cdot)_{n+1}^{tr}$

Se não, processo plástico. (Quadro 3.2)

3.5.2 Quadro 3.2: Corretor Plástico

Mapeamento de Retorno

$$\tilde{\Phi}(\Delta\gamma) \equiv w_{n+1}(\Delta\gamma) - w_n + \left\{ \frac{\Delta\gamma}{w_{n+1}(\Delta\gamma)} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s + \left[w_{n+1}(\Delta\gamma) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \right\} = 0$$

Calcular $\Delta\gamma$ que satisfaça a função $\tilde{\Phi}(\Delta\gamma)$ (Quadro 3.3).

Atualização do passo plástico.

$$\bar{\epsilon}_{n+1}^p = \bar{\epsilon}_{n+1}^{plr} + \Delta\gamma$$

$$\bar{\sigma}_y = \sigma_{y0} + k \bar{\epsilon}_{n+1}^p$$

$$d_{n+1} = 1 - w_{n+1}$$

$$d_{n+1}^h = d_n^h + \Delta t w_{n+1} \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m$$

$$d_{n+1}^p = d_n^p + \frac{\Delta\gamma}{w_{n+1}} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s$$

$$p_{n+1} = w_{n+1} \tilde{p}_{n+1}^{tr}$$

$$\mathbf{s}_{n+1} = \left(w_{n+1} - \frac{3G\Delta\gamma}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}} \right) \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}$$

$$q_{n+1} = w_{n+1} \tilde{q}_{n+1}^{tr} - 3G\Delta\gamma$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbf{s}_{n+1} + p_{n+1} \mathbf{I}$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^p = \boldsymbol{\epsilon}_n^p + \frac{3\Delta\gamma}{2w_{n+1}} \frac{\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr}}{\tilde{q}_{n+1}^{tr}}$$

3.5.3 **Quadro 3.3: Método de Newton-Raphson**

Método de Newton Raphson para o cálculo da raiz da função $\tilde{\Phi}(\Delta\gamma)$

$$d_n = d_n^p + d_n^h$$

$$w_n = 1 - d_n$$

$$\sigma_y = \sigma_{y0} + k \bar{\epsilon}_n^p$$

$$\Delta\gamma^{(k)} = \frac{[\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \sigma_y] w_n}{3G}$$

$$\tilde{\Phi}(\Delta\gamma) = w_{n+1}(\Delta\gamma) - w_n + \left\{ \frac{\Delta\gamma}{w_{n+1}(\Delta\gamma)} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s + \left[w_{n+1}(\Delta\gamma) \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \right\}.$$

Se $|\tilde{\Phi}| \leq \text{tol}$ retorna para (Quadro 3.2), se não, atualiza $\Delta\gamma$ de forma:

$$z = \frac{d\tilde{\Phi}}{d\Delta\gamma}$$

$$\Delta\gamma^{(k+1)} = \Delta\gamma^{(k)} - \frac{\tilde{\Phi}}{z}$$

$$k = k + 1$$

$$w_{n+1}(\Delta\gamma) = \frac{3G\Delta\gamma}{\tilde{q}_{n+1}^{tr} - [\sigma_{y0} + k(\bar{\epsilon}_n^p + \Delta\gamma)]}$$

$$-Y_{n+1}^L = \frac{1}{6G} \left[\tilde{q}_{n+1}^{tr} - \frac{3G\Delta\gamma}{w_{n+1}(\Delta\gamma)} \right]^2 + \frac{1}{2K} (\tilde{p}_{n+1}^{tr})^2.$$

4 EXEMPLOS NUMÉRICOS

4.1 Introdução

Neste capítulo é apresentado um conjunto de exemplos numéricos obtidos como resultados das implementações a partir dos Resumos (3.5.1, 3.5.2 e 3.5.3), vistos no Capítulo 3. Os diferentes exemplos mostrados neste capítulo buscam avaliar a aplicabilidade do modelo proposto. As propriedades do material para a degradação mecânica e para a degradação química (hidrólise), aqui utilizada, não correspondem a nenhum processo de identificação de material real, sendo meramente ilustrativas, de modo a respeitar um comportamento de pequenas deformações e deslocamentos. Foram, assim, escolhidos os seguintes parâmetros de teste:

Tabela 4.1: Dados iniciais.

$E = 3000 \text{ MPa}$
$\nu = 0,40$
$\sigma_{y0} = 50,00 \text{ MPa}$
$k = 50,00 \text{ MPa}$
$r = 0,50 \text{ MPa}$
$s = 1,00$
$d_c = 0,99$
$g = 0,0001$
$l = 10,00 \text{ MPa}$
$m = 1,00$

Os exemplos aqui propostos foram divididos em um carregamento uniaxial progressivo linearmente controlando deslocamento e força. Para ambos os carregamentos foi imposto, no primeiro teste, um carregamento de forma linear durante 120 dias. Para o segundo teste, foi aplicado um carregamento total durante 1 hora mantendo-o sob valor constante durante 120 dias. Por último, aplicou-se um carregamento durante 60 dias seguido de um descarregamento durante o mesmo período de tempo (60 dias), de forma a alcançar um carregamento *zero*.

Inicialmente, apresenta-se um modelo ilustrativo na forma de um bloco de volume unitário, logo após um modelo axissimétrico com entalhe, finalizando com uma placa 3D com entalhe. Para o teste com o bloco, os resultados foram extraídos num ponto de integração. Para os resultados

axissimétrico 2D e tridimensional foi utilizado, para visualização, o programa *GID 10.0.5* (versão livre), um programa de pré e pós-processamento para soluções numéricas. Para a plotagem dos resultados, o próprio programa utiliza a média dos valores dos pontos de integração, extraídos da implementação numérica, para os pontos nodais. O modelo constitutivo do material é o elastoplástico com dano e encruamento isotrópico sob o critério de plastificação de von Mises. Para que o material apresente um comportamento que respeite pequenas deformações e deslocamentos, foi interrompido o algoritmo após atingir uma deformação máxima de 0,05.

4.2 Problema uniaxial

Esta seção avaliará o comportamento de um bloco de volume unitário submetido a solicitações axiais, controladas por deslocamento e por força. Quando o material se encontra em regime de deformação puramente elástico, a evolução do dano total é dada apenas pelo dano hidrolítico, mas quando o material apresenta um comportamento elastoplástico, o dano é composto pela parcela hidrolítica mais uma parcela correspondente a ações mecânicas (dano plástico). Com isso, o dano total é dado pela Eq. (3.52). São comparados os resultados com um modelo de dano elastoplástico (DEP) e um modelo de dano elastoplástico com hidrólise (DEPH). Para ambos modelos, a degradação mecânica (dano plástico) é evoluída.

4.2.1 Ensaios uniaxiais com controle de deformação

Iniciam-se os exemplos com a apresentação do comportamento do material perante três diferentes deformações prescritas máximas de 0,05, 0,03 e 0,01 respectivamente, aplicadas num intervalo de tempo total de [0, 120] dias.

4.2.1.1 Aplicação de deformação de forma progressiva e linear

Neste primeiro exemplo, apresenta-se o comportamento do material perante três diferentes deformações prescritas de 0,05, 0,03 e 0,01 respectivamente, aplicadas de forma progressiva e linear.

A Fig. (4.1) apresenta curvas de tensão equivalente de von Mises em função dos diferentes níveis de deformação. Três destas curvas representam o comportamento elastoplástico-dano plástico (a variável de dano inicia logo após o material ultrapassar o limite de escoamento sendo caracterizado pela

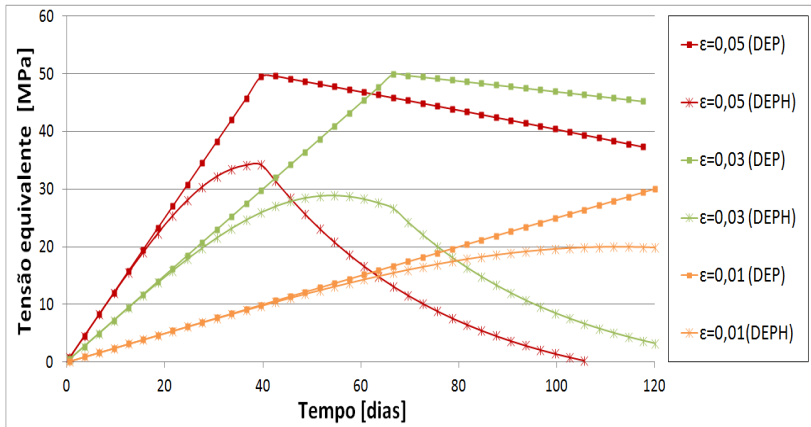


Figura 4.1: Tensão equivalente de von Mises em função das diferentes deformações máximas aplicadas ao longo de 120 dias.

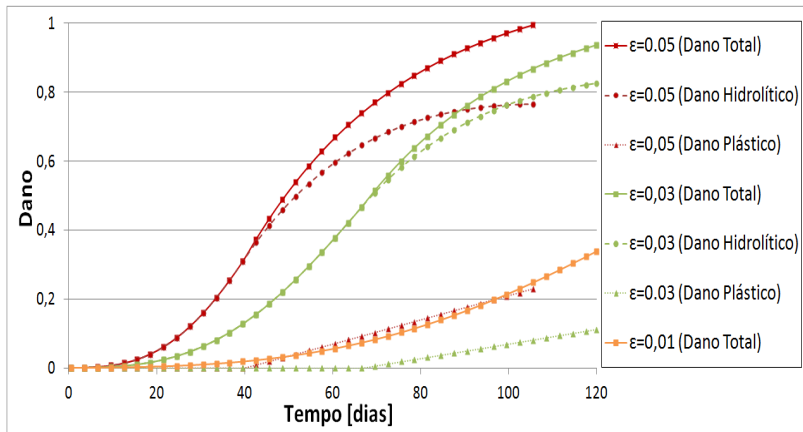


Figura 4.2: Degradação (total, hidrolítica e plástica) em função das diferentes deformações máximas aplicadas.

degradação mecânica), para efeitos de comparação com os casos que incorporam dano total (dano plástico mais dano hidrolítico). Para o caso com deformação final de 0,05, o material teve início o regime plástico a partir de 40 dias sob influência da degradação hidrolítica. Para o caso de deformação total de 0,03, o início do regime plástico ocorreu a partir de 67 dias apresentando um valor de 0,49 para o dano hidrolítico neste dia. Para a deformação prescrita total de 0,01, não houve comportamento plástico nem, portanto, não havendo evolução do dano plástico ou encruamento do material, apresentando assim, no final dos 120 dias um dano puramente hidrolítico com valor de 0,40. Observaram-se em ambas as Figs. (4.1) e (4.2), como era de esperar, um avanço na degradação logo após o início da deformação plástica afetando, assim, o comportamento das variáveis de estado, sendo apresentada aqui a tensão equivalente de von Mises durante o tempo.

4.2.1.2 Aplicação de deformação sob dois intervalos de tempo

Nas Figs. (4.3) e (4.4), apresentam a evolução da tensão equivalente de von Mises e do dano para uma história de deformação prescrita de 0,05, 0,03 e 0,01, aplicada de forma progressiva e linear no intervalo de 1 hora sendo mantido este valor de deformação por 120 dias.

Pode-se notar durante o primeiro intervalo de carregamento (quase instantâneo na escala de tempo de degradação), que não houve evolução significativa do dano hidrolítico. O dano plástico, por sua vez, responde instantaneamente ao carregamento (*rate independent plasticity*). Na Fig. (4.3), a tensão equivalente de von Mises decai na forma exponencial, após 1 hora de carregamento, apresentando um fenômeno de relaxação na própria tensão sob dependência do tempo. O dano, por sua vez, está diretamente relacionado com as tensões naquele estado, tendo velocidade máxima no início, decaindo com o tempo devido à presença da própria tensão de relaxação. Nota-se, também, uma diferença significativa entre as curvas com deformação prescrita de 0,05 e 0,03 comparado com a deformação prescrita de 0,01, onde em 1 hora de teste não há presença do encruamento, por consequência a sua relaxação durante a deformação constante é lenta.

4.2.1.3 Aplicação de deformação na forma de um ciclo (carga/descarga)

As Figs. (4.5) e (4.6), apresentam os resultados para os mesmos três casos de aplicação do carregamento com 1 ciclo cada. Cada ciclo corresponde à aplicação de uma deformação controlada crescendo linearmente durante 60

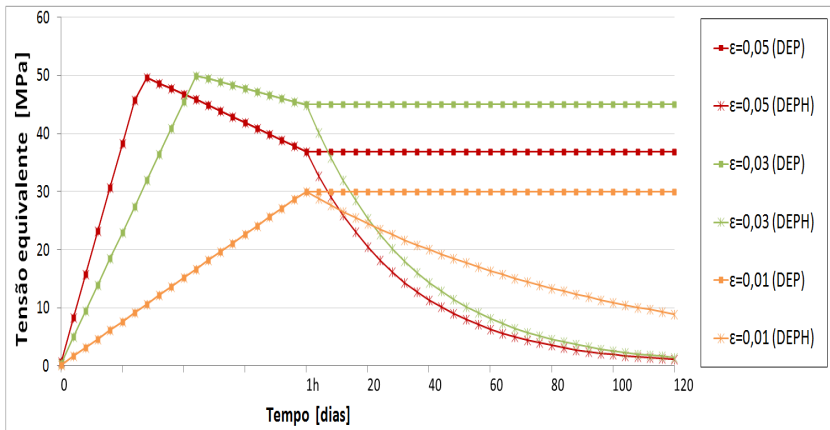


Figura 4.3: Evolução da tensão equivalente de von Mises apresentando um comportamento elastoplástico (1 hora) com a presença marcante da degradação mecânica (dano plástico), seguida da evolução da tensão equivalente com influência da degradação hidrolítica (120 dias).

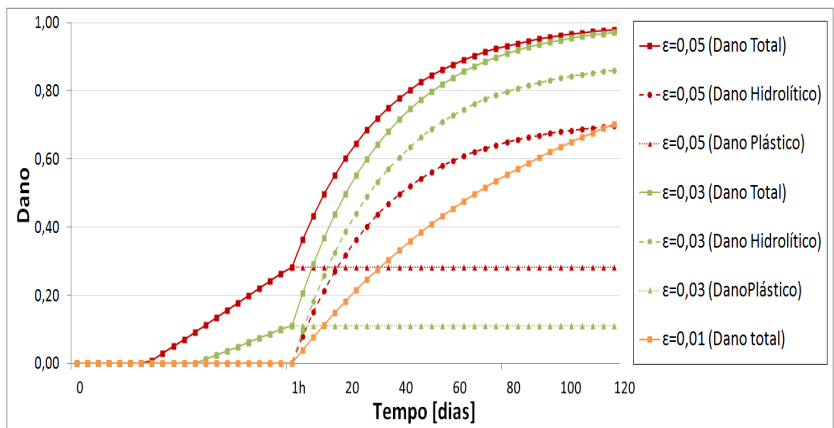


Figura 4.4: Comportamento da degradação durante os carregamentos (pré-carga e carregamento constante) ao longo do tempo.

dias até o valor máximo (0,05, 0,03 e 0,01 respectivamente) seguido de uma descarga progressiva durante 60 dias até o estado de deformação total nulo.

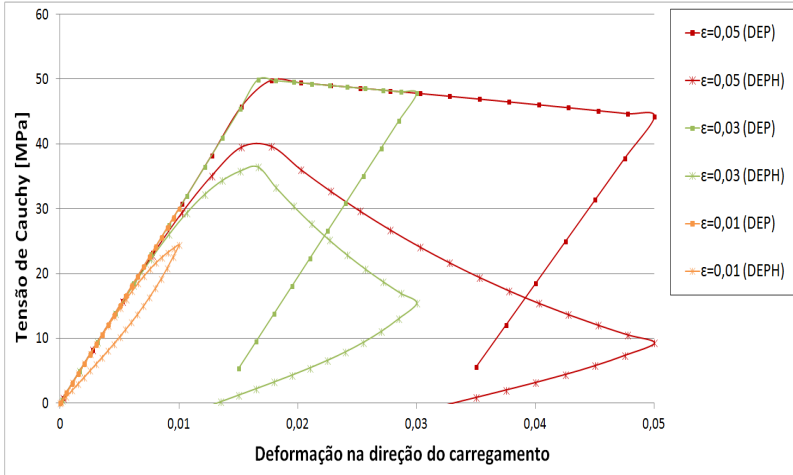


Figura 4.5: Tensão vs. deformação para um ciclo de carga/descarga.

Para ser mais ilustrativo do ciclo, apresenta-se na Fig. (4.5) o comportamento da tensão de Cauchy na direção de tração (σ_{zz}) em função da deformação na mesma direção de modo a observar o comportamento histerético. Na Fig. (4.6), observa-se uma região onde a taxa de degradação é muito pequena (quase constante), devida apenas ao dano hidrolítico. Esta parte corresponde a etapa de retorno elástico no período de descarregamento. Assim, a evolução do dano é sempre positiva.

4.2.2 Ensaio sem a presença da deformação

Neste ensaio não há aplicação de qualquer carregamento prescrito, sendo ele avaliado apenas a ação do dano hidrolítico dado pela constante g . Na Fig. (4.7) é apresentada a evolução do dano total através da constante g sendo ela linear e positiva.

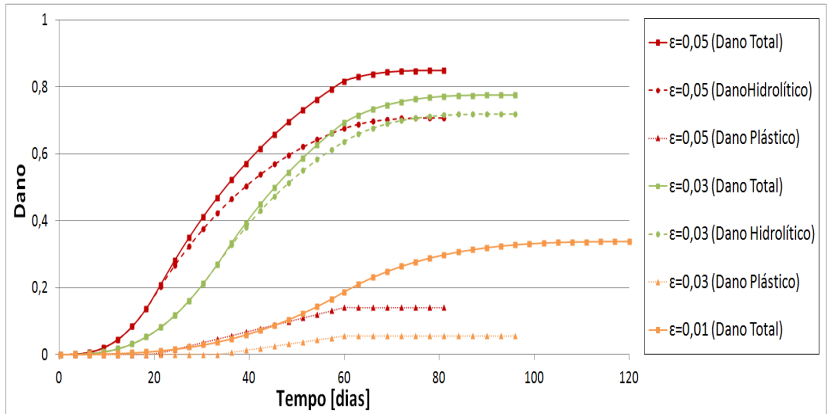


Figura 4.6: História da degradação após o final do ciclo de carregamento (descarga).

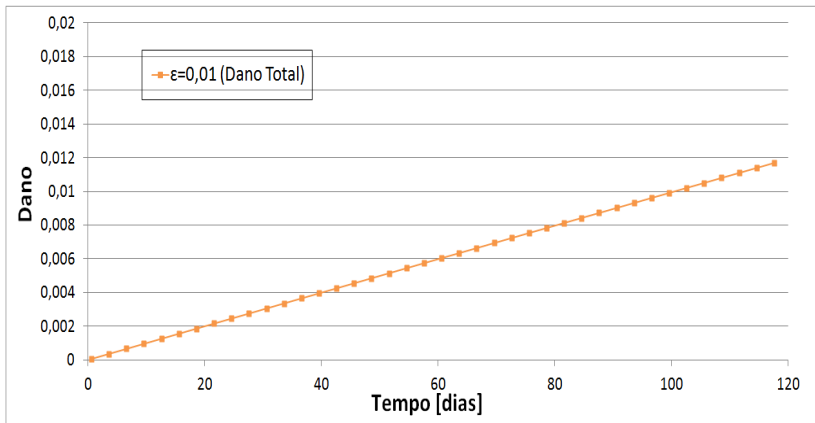


Figura 4.7: Evolução do dano total através da constante g .

4.2.3 Ensaios uniaxiais com controle de tensão

Nesta seção, apresentam-se exemplos similares aos da seção anterior (Seção (4.2.1)), mas a aplicação da carga segue um controle de tensão prescrita primeiramente com valores de 60 MPa, 40 MPa e 20 MPa durante o tempo total de 120 dias. Um segundo teste com aplicação da tensão sob dois intervalos de tempo de 0 a 26 MPa e 20 MPa, respectivamente de modo que as tensões anteriores (60 MPa, 40 MPa e 20 MPa) apresentaram o limite de deformação estipulado (0,05) antes de completar 1 hora de teste. Por último, para o teste dividido em um ciclo de carga e um ciclo de descarga, aplicou-se uma tensão de 0 a 20 MPa e 18 MPa, também pelo mesmo motivo do segundo teste, mas neste caso, por não completar o carregamento.

4.2.3.1 Aplicação de tensão de forma progressiva e linear

Foi executado um teste com cargas externas crescentes linearmente de 0 a 60 MPa, 40 MPa e 20 MPa para o intervalo de 120 dias. As Figs. (4.8) e (4.9) representam a evolução da deformação axial e do dano (total, hidrolítico e plástico) ao longo do período de aplicação da carga.

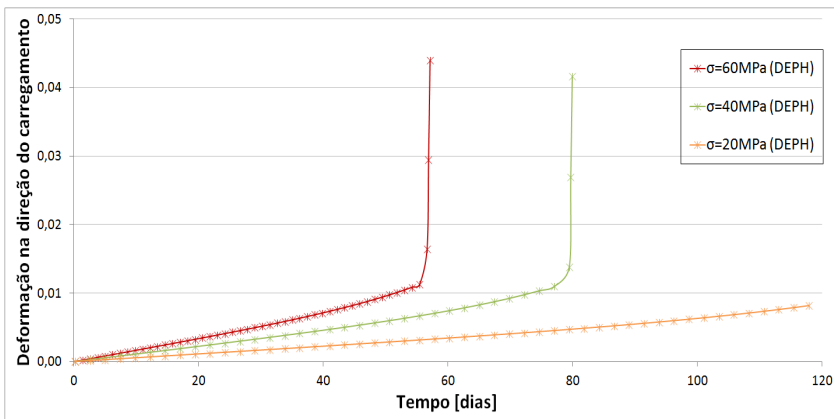


Figura 4.8: Deformação na direção axial para vários valores de forças prescritas durante 120 dias.

Nota-se que para os casos de maior carregamento (60 MPa e 40 MPa) para o intervalo de 120 dias, ao atingir o limite de plastificação, a veloci-

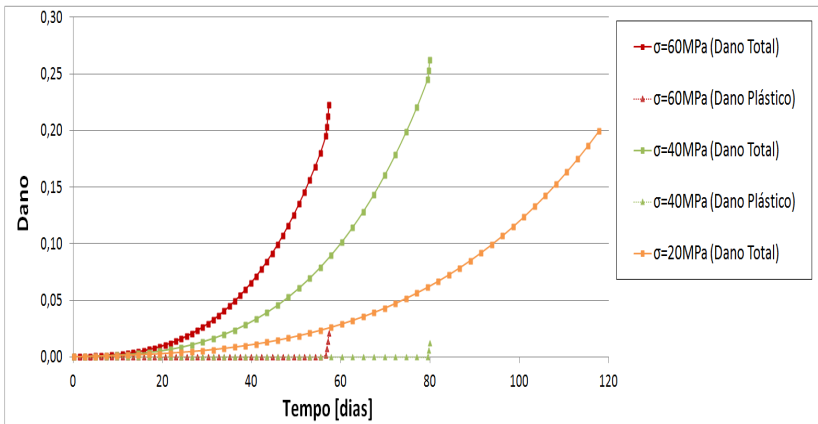


Figura 4.9: Evolução da degradação perante força prescrita.

dade de crescimento do dano é superior ao encruamento ocorrendo colapso plástico (deformações crescem indefinitivamente). No caso de menor carga (20 MPa), o carregamento total é aplicado antes de ocorrer plastificação. Na Fig. 4.9 não foi apresentado a evolução do dano hidrolítico como nos exemplos anteriores devido ao valor apresentado não modificar, de forma visível, o comportamento da evolução do dano total.

4.2.3.2 Aplicação de tensão sob dois intervalos de tempo

Nas Figs. (4.10) e (4.11), aplicam-se tensões de 26 MPa e 20 MPa da mesma forma vista na seção (4.2.1.2).

Para a apresentação deste teste, mostra-se o comportamento da deformação máxima na direção do carregamento (Fig.(4.10)). Após 1 hora de carregamento para a tensão de 26 MPa (DEPH), o material inicia o segundo intervalo de carregamento já em regime plástico com um valor de dano igual a $1,4 \times 10^{-3}$. Durante este intervalo o material apresenta uma deformação crescente de forma exponencial apresentando o comportamento de colapso plástico antes mesmo de atingir o limite de deformação (0,05) com 16 dias de teste. Após o final do processo (16 dias), o valor de dano total é igual a 0,73. Para o teste com tensão igual a 20 MPa (DEPH), o material apresentou comportamento abaixo do limite de escoamento (comportamento elástico). Devido a presença da hidrólise, durante o período de tensão

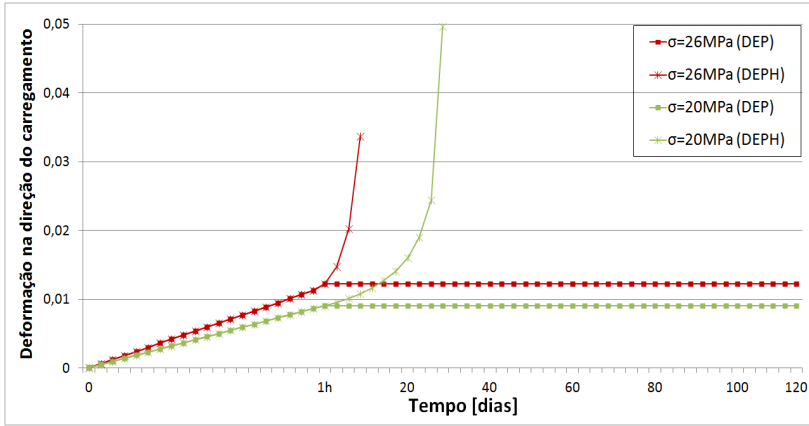


Figura 4.10: Deformação máxima vs. tempo sob dois intervalos de carregamento.

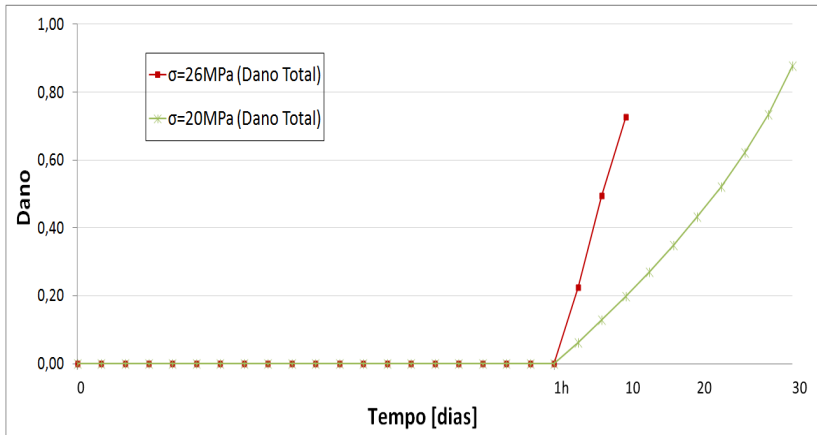


Figura 4.11: Dano total vs. tempo sob dois intervalos de carregamento.

constante, o material passa a apresentar um regime plástico ocasionado pelo acréscimo de degradação hidrolítica. Ao atingir o final do primeiro intervalo (1 hora), o valor do dano total é de 3×10^{-4} e ao atingir a deformação máxima obteve um valor de 0,90 para o dano total com 30 dias de teste.

4.2.3.3 Aplicação de tensão na forma de um ciclo (carga/descarga)

As Figs. (4.12) e (4.13), apresentam o comportamento da deformação axial e do dano (total, hidrolítico, plástico) para um carregamento progressivo e linear durante 60 dias e, na sequência um descarregamento nas mesmas condições do carregamento (60 dias), totalizando 120 dias de testes.

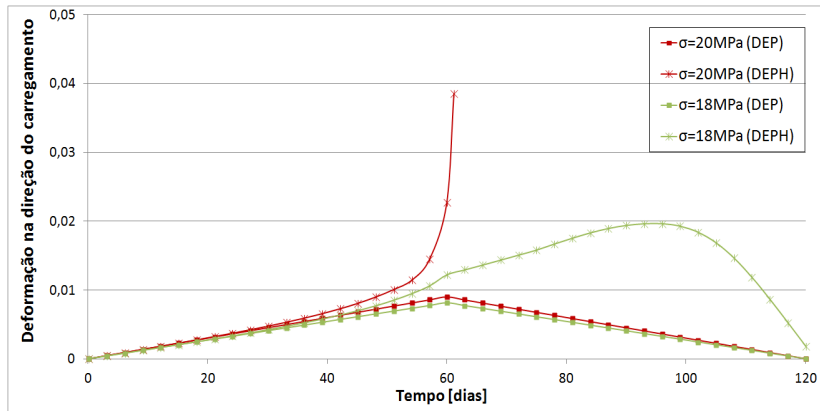


Figura 4.12: Deformação axial vs. tempo para um carregamento seguido de um descarregamento totalizando 120 dias.

Para a Fig. (4.12), há duas curvas distintas para o teste com a presença do dano hidrolítico. A diferença recai quando, a partir do início do descarregamento ($\sigma = 20$ MPa (DEPH)), a velocidade de degradação é maior que a velocidade de descarregamento resultado no aumento da deformação ultrapassando o limite máximo (0,05) logo no segundo dia de teste (62 dias totais) totalizando 0,6 de dano total máximo. Para a curva $\sigma = 18$ MPa (DEPH), ocorre o mesmo fenômeno mas com menor intensidade que o comportamento apresentado sob tensão aplicada no valor de 20 MPa (DEPH), sendo que após 96 dias o fenômeno se inverte (velocidade de degradação menor (Fig. 4.13) que a velocidade de descarregamento). Para esta tensão imposta axialmente

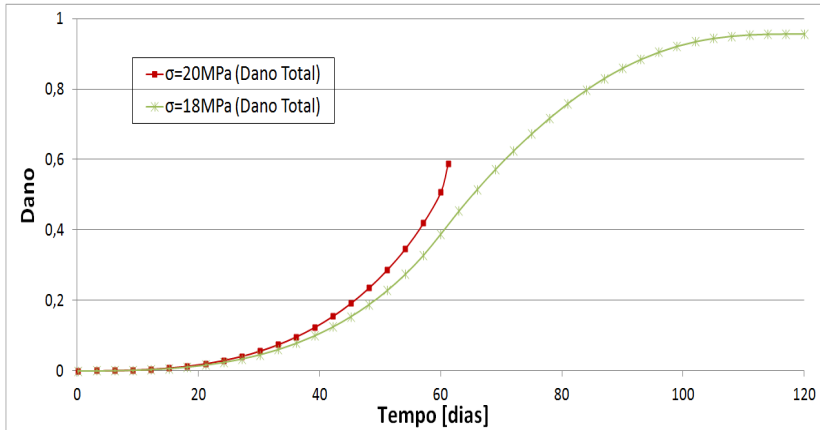


Figura 4.13: Dano total vs. tempo para um carregamento seguido de um descarregamento totalizando 120 dias.

($\sigma = 18 \text{ MPa}$), o dano total, no final do carregamento (60 dias), apresenta 0,39 e no final do descarregamento apresenta 0,95 nos 120 dias de teste.

4.3 Problema axissimétrico com entalhe

O problema analisado a seguir trata de um corpo de prova cilíndrico com entalhe, cujas características geométricas são apresentadas na Fig. (4.14). Devido a sua simetria axial, analisa-se um quarto da estrutura através de elementos tipo sólido de revolução, mediante uma malha de elementos finitos apresentada na mesma figura. Foram utilizados elementos bilineares de 4 (quatro) nós com 4 (quatro) pontos de integração.

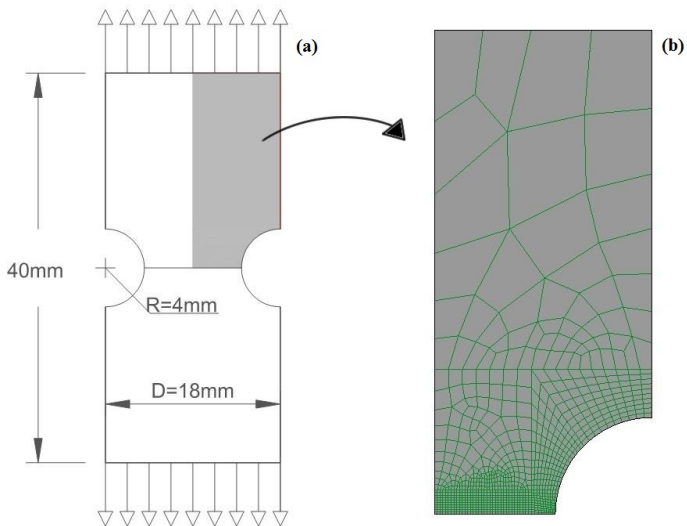


Figura 4.14: Vista de um cilindro de revolução (a) e sua geometria composta por uma malha de elementos finitos (b).

Foram colocadas condições de contorno impedindo o deslocamento vertical no plano de simetria no entalhe. O carregamento foi realizado no plano superior do corpo de prova, mediante à aplicação de dois tipos de solicitação. A primeira, controlando o deslocamento situado neste plano. A segunda, mediante aplicação controlada de força distribuída uniformemente. O deslocamento prescrito é aplicado de forma linear crescente ao longo de 200 passos até atingir um valor máximo de 0,15 mm. A força prescrita é imposta de forma similar, crescendo até um valor máximo de 1021 N.

Os resultados abaixo estão apresentados de forma que; à esquerda,

apresenta um regime de carregamento com a presença da hidrólise (corpo embebido sob solução aquosa) e à direita um regime de carregamento sem a presença da hidrólise (“corpo seco”).

4.3.1 Teste de tração com deslocamento controlado

Os testes com deslocamento prescrito segue os mesmos exemplos apresentados na seção (4.2.1) respeitando os 3 (três) testes aplicados durante 120 dias.

4.3.1.1 Aplicação de deslocamento de forma progressiva e linear

Dando início ao teste de tração, aplica-se um deslocamento controlado com valor de 0,15 mm de forma progressiva e linear num intervalo de tempo de $[0, 120]$ dias. As Figs. (4.15) e (4.16) apresentam o comportamento da tensão equivalente de von Mises e dano total para dois casos. O primeiro caso representa 40 dias após a aplicação do carregamento seguido do resultado que caracteriza o final do processo (segundo caso com 94 dias).

O dano total máximo, durante os 94 dias, atingiu um valor de 0,95 e a tensão equivalente de von Mises máxima atingiu um valor de 7,20 MPa (dados extraídos no ponto de integração de máximo valor de dano total). A variável de dano não evoluiu em direção ao centro do cilindro de revolução devido à presença do dano hidrolítico atuando em todos os elementos da malha de elementos finitos. Outra observação é que, como foi notado na Fig. (4.15), houve evolução da tensão equivalente de von Mises para o centro do corpo por conta, novamente, da evolução do dano hidrolítico. Para este teste, o resultado do dano total sem a presença da hidrólise, nos 40 dias, não apresentou regime plástico (por conveniência mantemos a figura com escalas de zeros). Para os 94 dias de teste, o dano total máximo para o teste sem a presença da hidrólise atingiu o valor de $8,5 \times 10^{-4}$, novamente, por conveniência, na figura a respeito não se deve comparar, à nível de cores, com o teste com a presença da hidrólise.

4.3.1.2 Aplicação de deslocamento sob dois intervalos de tempo

Os testes demonstrados nas Figs. (4.17) e (4.18) seguem os mesmos princípios das Figs. (4.3) e (4.4), mas neste caso, aplicam-se dois intervalos de deslocamento, sendo o primeiro progressivo linearmente com valor máximo de 0,15 mm (deslocamento progressivo por 1 hora) e o segundo

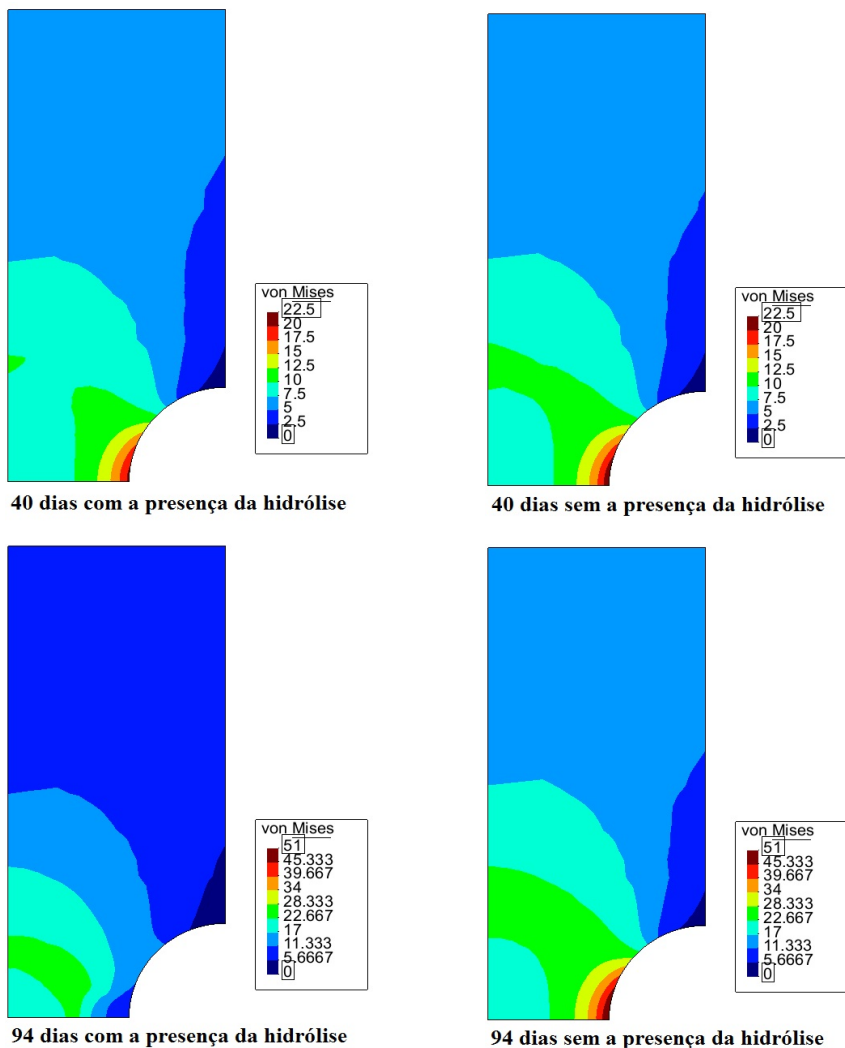


Figura 4.15: Comparação da tensão equivalente de von Mises perante a presença do dano total (à esquerda) com um material apresentando apenas do dano plástico (à direita).

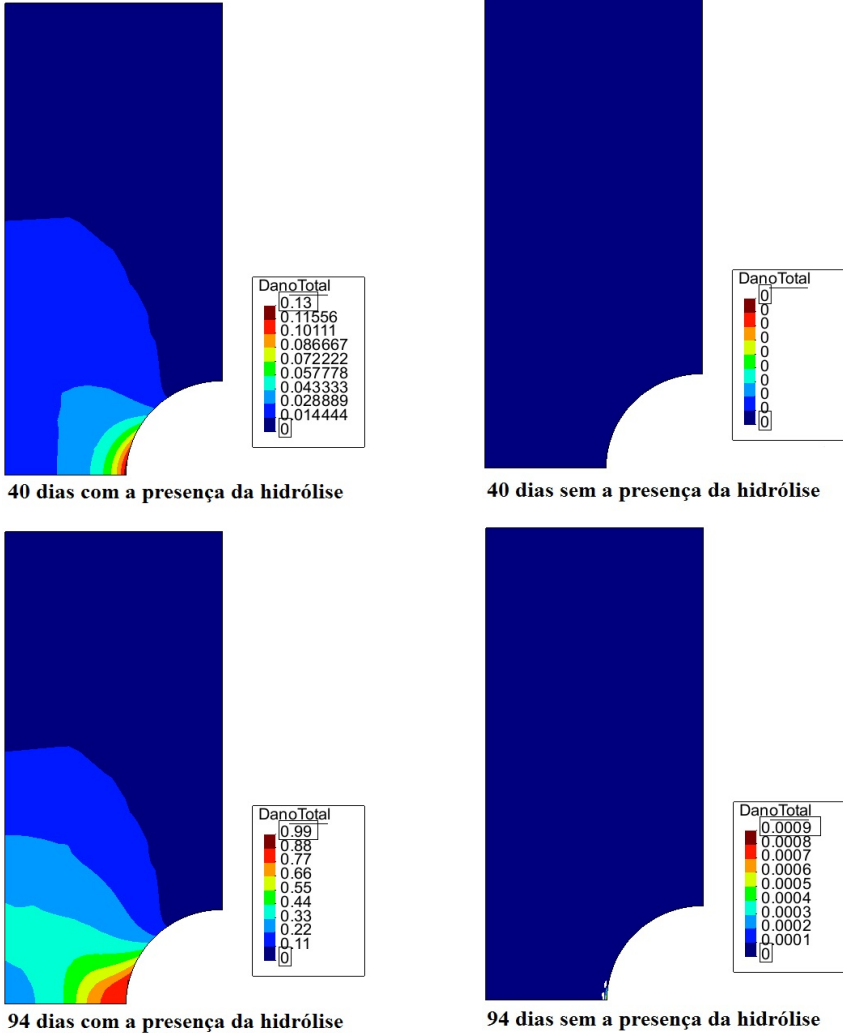


Figura 4.16: Evolução do dano perante um deslocamento prescrito evoluindo linearmente durante 120 dias.

intervalo mantendo-se o valor do deslocamento prescrito constante por 120 dias.

Na primeira etapa de carregamento (1 hora) (Fig. (4.17)), as tensões equivalentes de von Mises obtiveram valores iguais (com e sem a presença do dano hidrolítico) devido ao comportamento do próprio carregamento (quase instantâneo para a escala de tempo) com valor máximo de 50,18 MPa. Para este primeiro carregamento, o material apresentou regime plástico marcado pelo fenômeno mecânico (Fig. 4.18) cujo valor de dano plástico máximo é igual a $3,7 \times 10^{-3}$. Já o segundo intervalo de carregamento (carregamento constante), o valor máximo para o dano total foi de 0,91 e a tensão equivalente máxima de von Mises igual a 4,47 MPa durante 26 dias (dados extraídos no ponto de integração). Este valor de dano total é devido a fenômenos químicos. O algoritmo foi interrompido por atingir a máxima deformação (0,05).

4.3.1.3 Aplicação de deslocamento na forma de um ciclo (carga/descarga)

Nas Figs (4.19) e (4.20), é apresentado o carregamento de forma crescente até o valor máximo de 0,15 mm durante 60 dias, seguido de um descarregamento controlado (60 dias) até atingir um valor de deslocamento zero, totalizando 120 dias.

Como apresentado nas Figs. (4.5) e (4.6), apresentam-se aqui os resultados do tensor tensão de Cauchy onde, para o final do carregamento (60 dias), obteve o valor de 19,56 MPa na direção axial no ponto de integração para o valor máximo de dano total (0,64) (dados extraídos diretamente da implementação). Durante o descarregamento (60 dias), o tensor tensão de Cauchy obteve um valor de 1,08 MPa na direção axial para o ponto de integração de máximo valor de dano total (0,91) (dados extraídos diretamente da implementação).

4.3.2 Teste de tração com força controlada

Utilizando a mesma sequência de testes dados na seção (4.2.3), analisa-se o mesmo modelo axissimétrico com uma carga externa sob controle de força aplicado linearmente com valor máximo de 1021 N durante 120 dias.

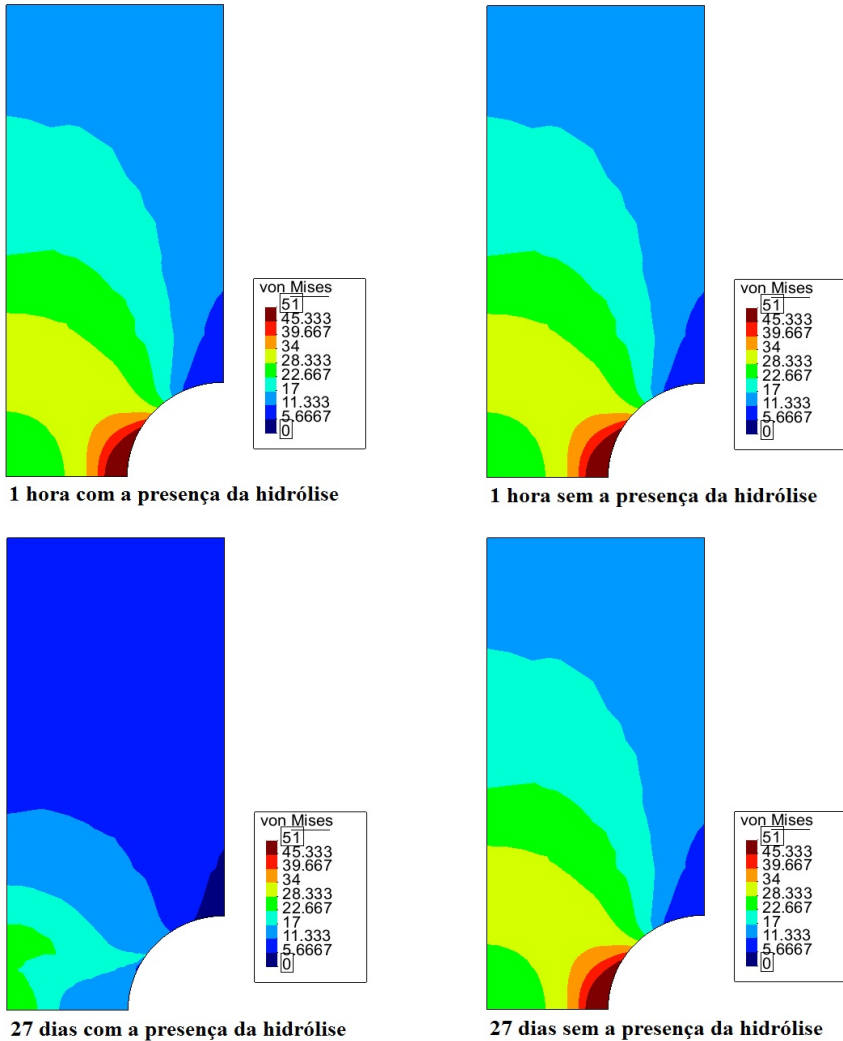


Figura 4.17: Comparação da tensão equivalente de von Mises com e sem a presença do dano hidrolítico.

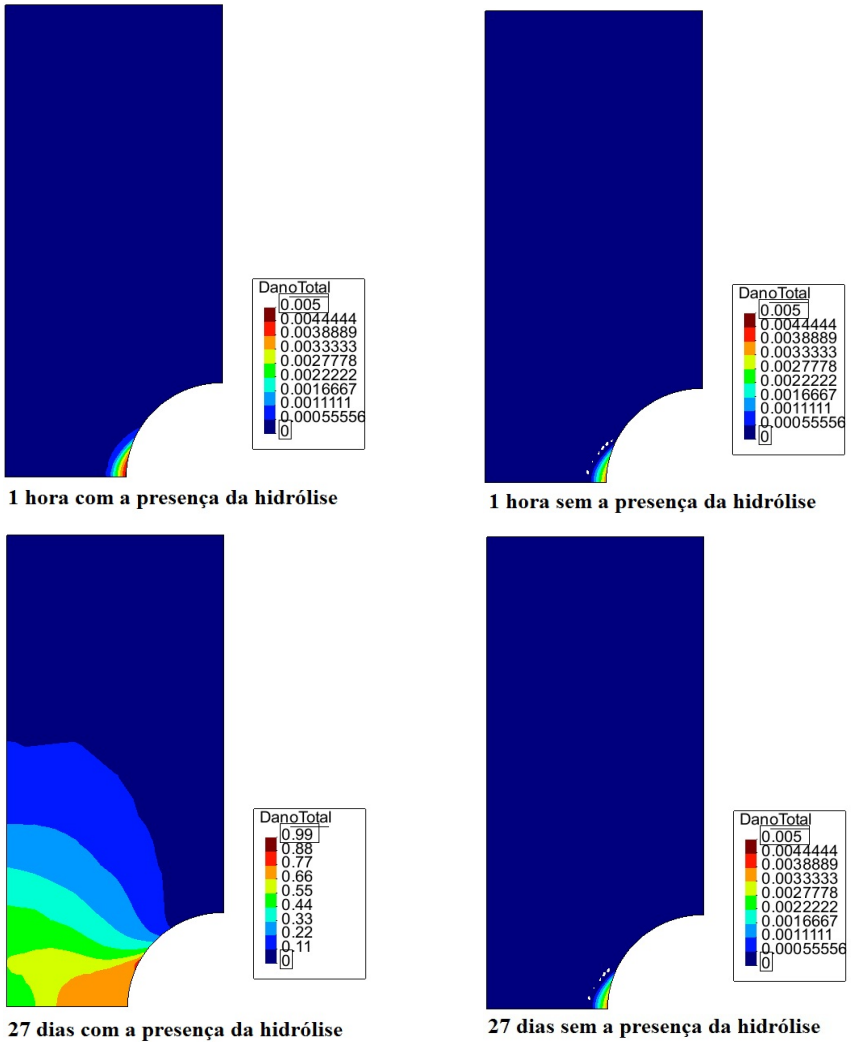


Figura 4.18: Variável de dano total com o passar do tempo para um deslocamento instantâneo seguido de um deslocamento constante durante 120 dias

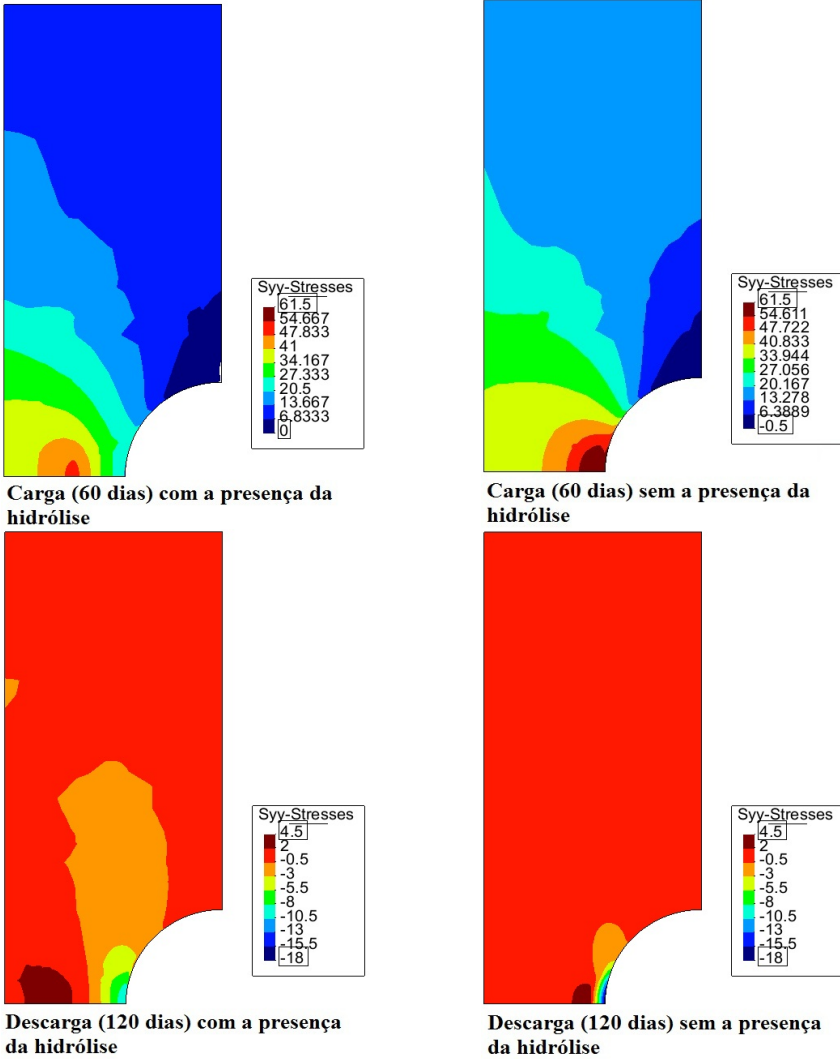


Figura 4.19: Tensor tensão de Cauchy máximo para um carregamento e descarregamento.

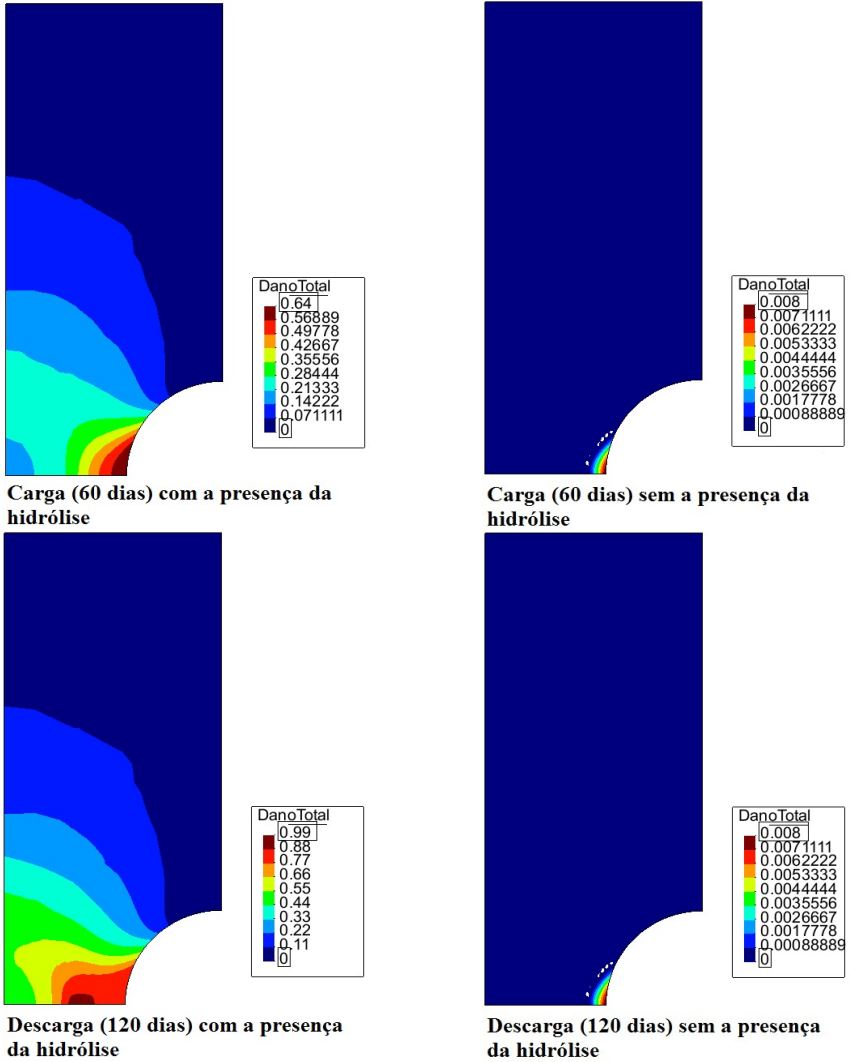


Figura 4.20: Dano total perante um carregamento e descarregamento.

4.3.2.1 Aplicação de força na forma progressiva e linear

Para as Figs. (4.21) e (4.22), aplica-se uma força controlada progressivamente durante 120 dias. A análise foi interrompida quando se atingiu uma deformação máxima axial de 0,05 (Fig.(4.23)). O resultado alcançado para o dano total máximo foi de 0,81 com uma tensão equivalente de von Mises de 9,65 MPa, sendo valores extraídos diretamente no ponto de integração. Para o material alcançar este valor de deformação máxima, foi necessário 82 dias de carregamento sob presença da hidrólise. Na Fig. (4.23), para o caso com a presença da hidrólise, o comportamento do material tende ao colapso mesmo sem apresentar regime plástico por consequência da própria evolução do dano hidrolítico. Para este teste não houve presença plastificação.

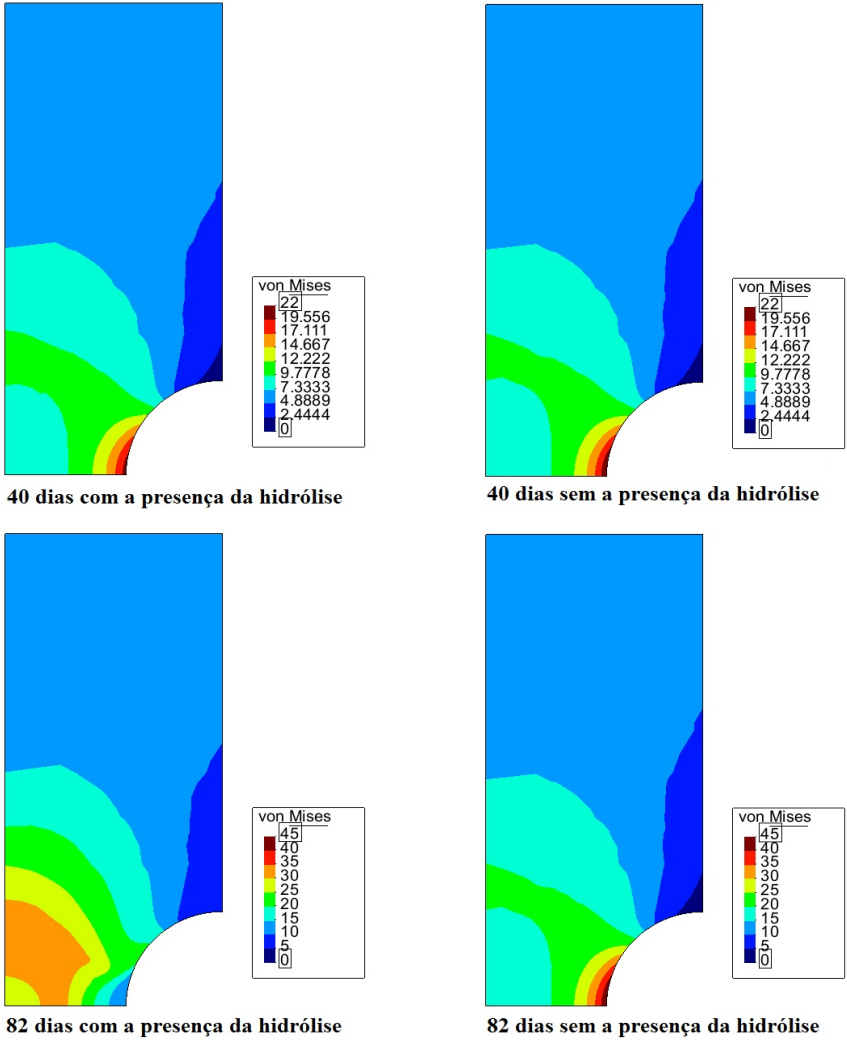


Figura 4.21: Tensão equivalente de von Mises perante uma força prescrita aplicada durante 120 dias.

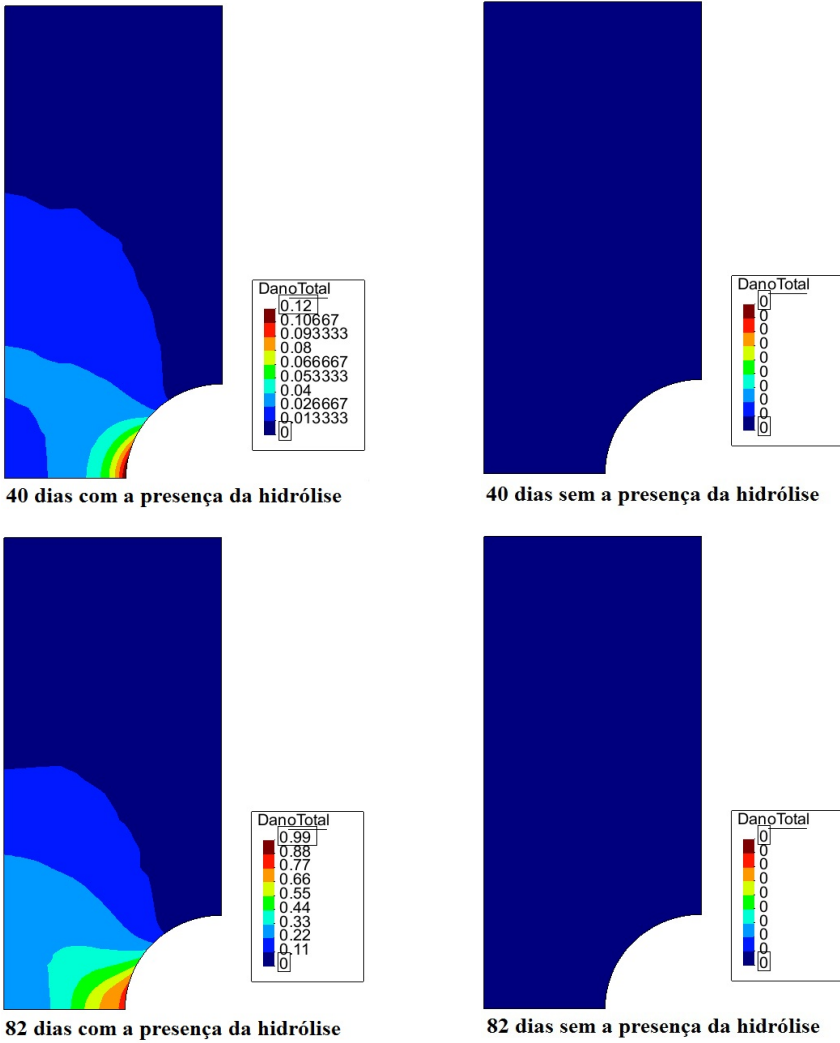


Figura 4.22: Evolução do dano total perante uma força prescrita.

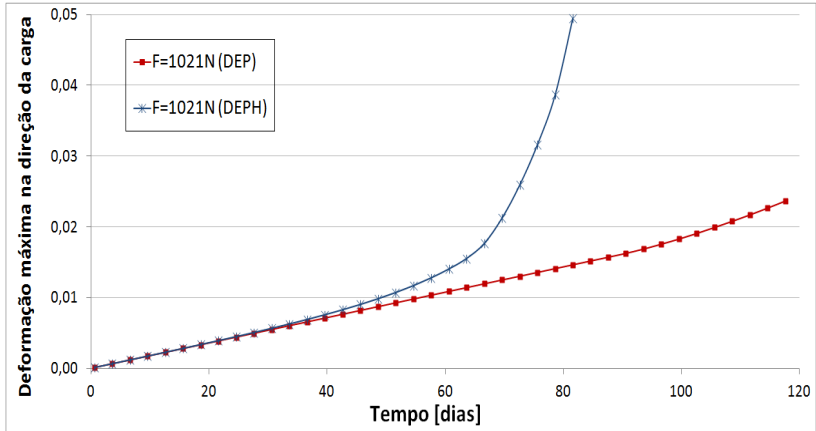


Figura 4.23: Curva deformação máxima vs. tempo.

4.3.2.2 Aplicação de força sob dois intervalos de tempo

Quando se aplica um carregamento controlado progressivamente por força (1 hora) até o valor máximo de 1021 N distribuído na superfície superior, a máxima tensão equivalente de von Mises atinge um valor de 50,00 MPa, seguida de um carregamento constante durante 120 dias (Figs. (4.24) e (4.25)). Os valores extraídos no ponto de integração obtiveram, para máxima deformação axial (0,05), um dano máximo de 0,92 e para tensão equivalente de von Mises de 21,21 MPa (estes dados foram obtidos com 13 dias de teste). Novamente, foi observado aqui, a evolução da tensão equivalente de von Mises para o centro do cilindro de revolução.

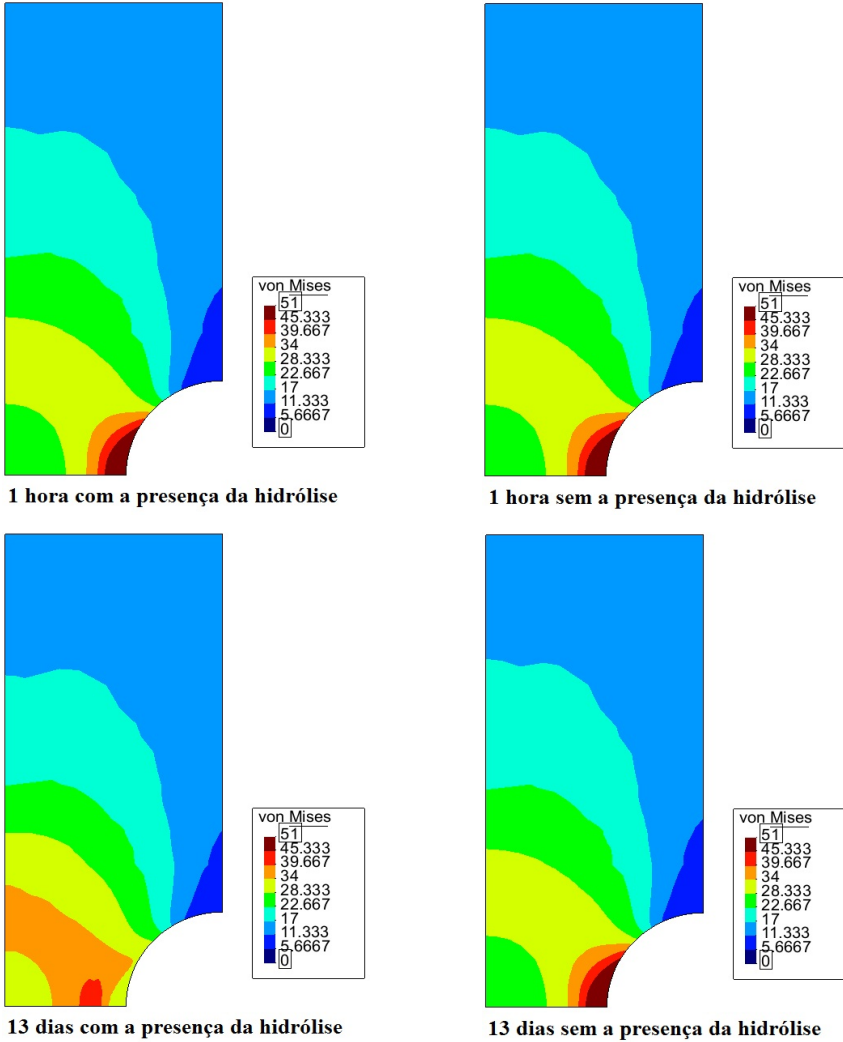


Figura 4.24: Tensão equivalente de von Mises para aplicação de força sobre dois intervalos de tempo.

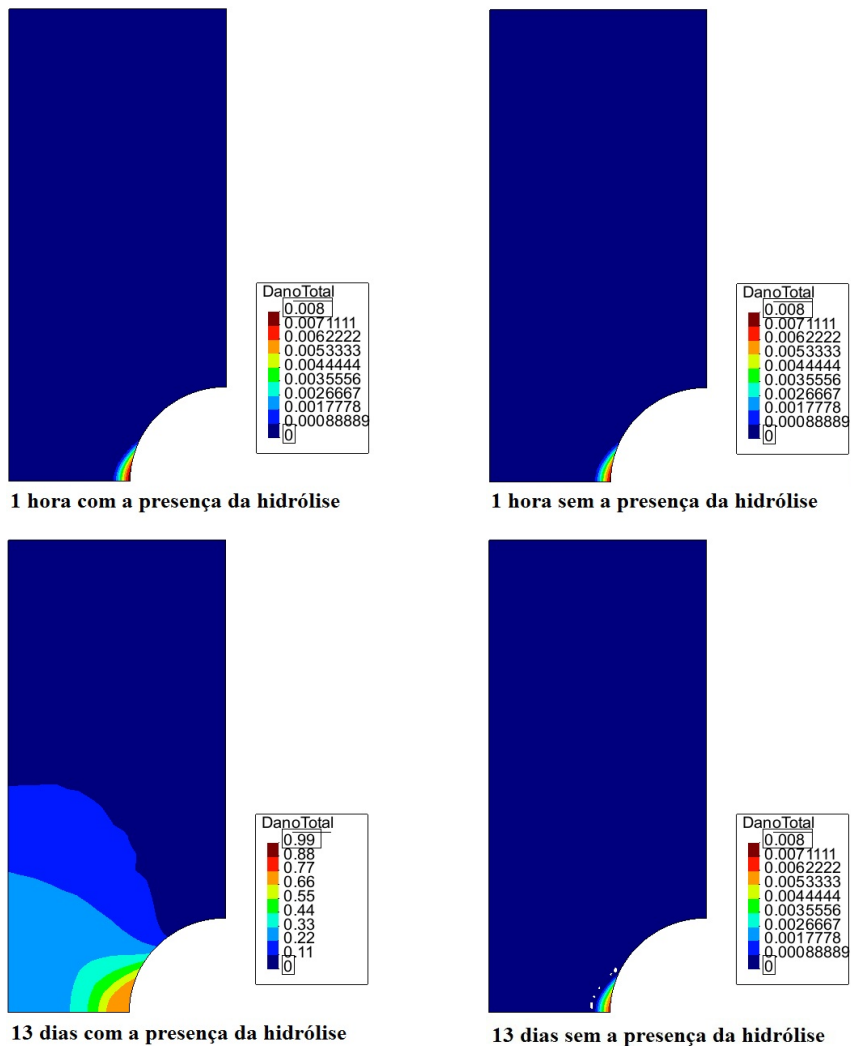


Figura 4.25: Dano total perante dois intervalos de tempo.

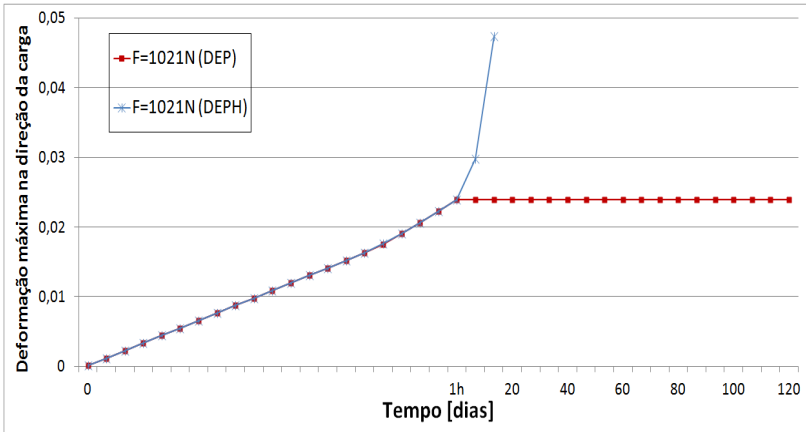


Figura 4.26: Deformação máxima perante dois intervalos de tempo.

4.3.2.3 Aplicação de força na forma de um ciclo (carga/descarga)

Nas Figs. (4.27) e (4.28) aplica-se um carregamento controlado progressivamente durante 60 dias seguidos de um descarregamento controlado progressivamente até o estado de deformação total nulo totalizando 120 dias de teste. Os valores máximos no 60º dia para a tensão de Cauchy e para o dano alcançaram os valores de 21,30 MPa e 0,62, respectivamente. Para o descarregamento (79 dias de teste), o valor máximo do dano atingiu um valor de 0,90 com uma tensão de Cauchy de 9,30 MPa (Figs. (4.27) e (4.28)). Para este teste, o algoritmo foi interrompido pela máxima deformação (0,05) (Fig. (4.29)) não apresentando regime plástico. Como comentado na seção (4.2.3.3) o comportamento material continua a evoluir positivamente devido a presença do dano hidrolítico.

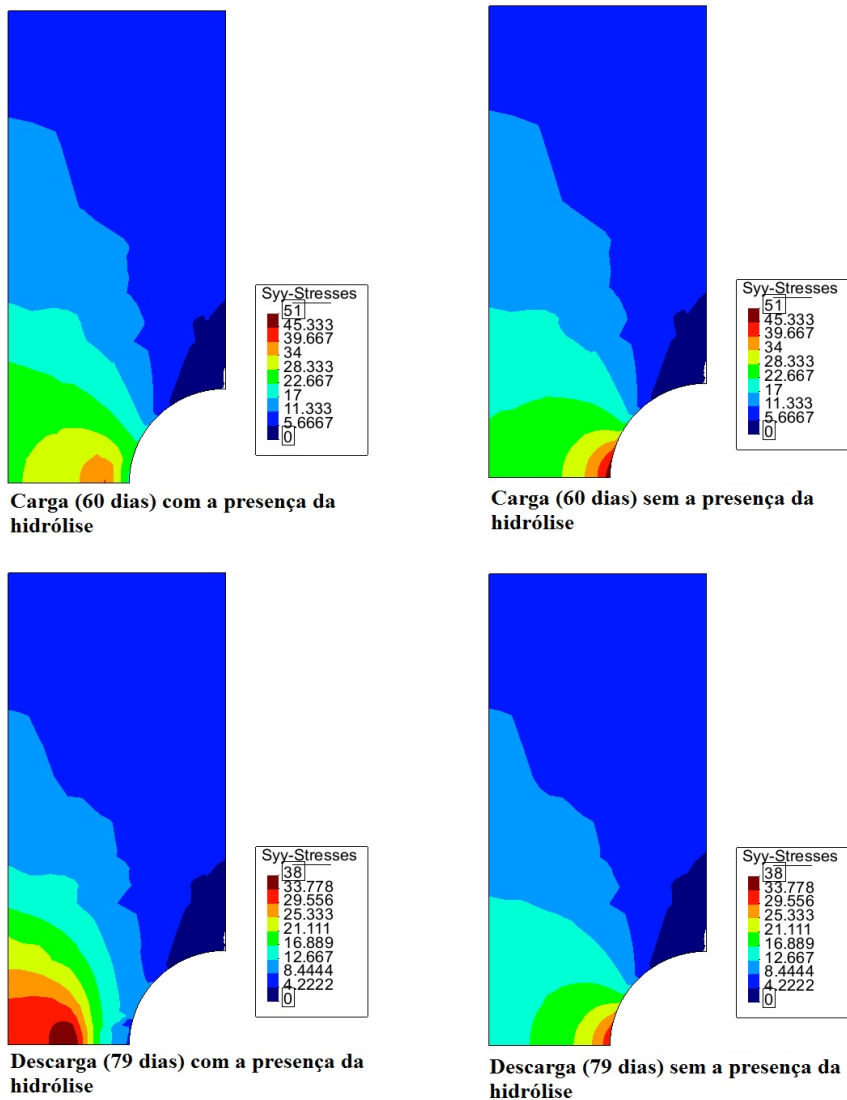
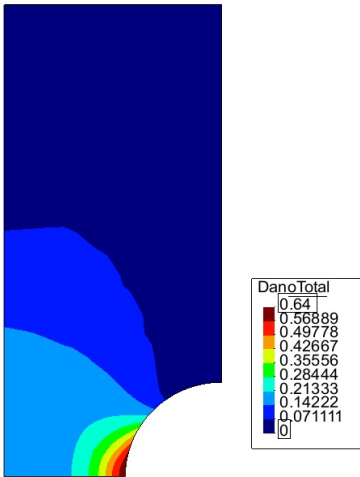
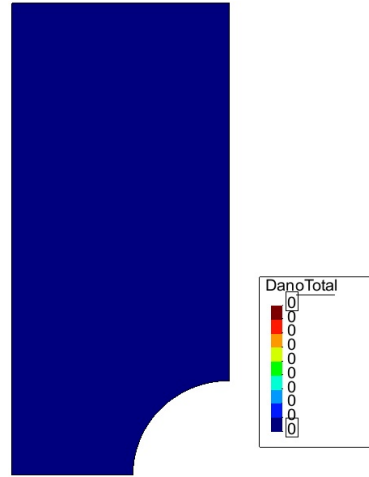


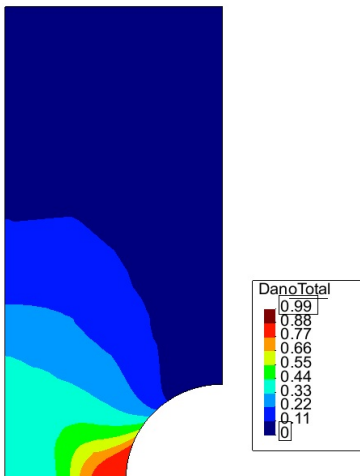
Figura 4.27: Tensor tensão de Cauchy perante um carregamento seguido de um descarregamento.



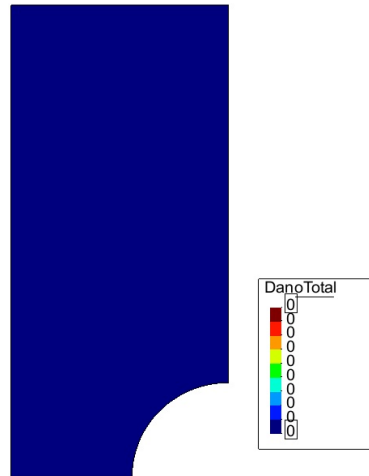
Carga (60 dias) com a presença da hidrólise



Carga (60 dias) sem a presença da hidrólise



Descarga (79 dias) com a presença da hidrólise



Descarga (79 dias) sem a presença da hidrólise

Figura 4.28: Dano total perante um carregamento e descarregamento.

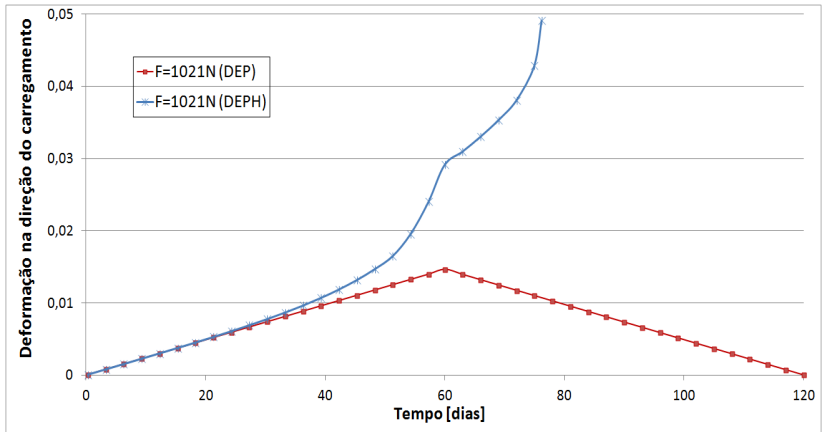


Figura 4.29: Deformação máxima para um carregamento seguido de um descarregamento.

4.4 Modelo tridimensional

Nesta seção, apresentam-se os resultados para um carregamento na forma de deslocamento e força, aplicados linearmente em uma chapa modelada tridimensionalmente por elementos sólidos, cujas características geométricas são apresentadas na Fig. (4.30). Para estes testes, foram utilizados uma malha de 3 elementos na espessura, cujo elemento finito é do tipo hexaedro de 8 nós composto por 8 pontos de integração. As propriedades mecânicas e químicas são as mesmas usadas em todos os exemplos deste capítulo. O carregamento na forma de deslocamento controlado progressivamente tem um valor máximo de 0,15 mm na face superior e na forma de força controlada progressivamente igual a 250,75 N distribuídos também na face superior da placa. Para os testes com força prescrita, apresentam-se além da tensão equivalente de von Mises e do dano total um gráfico do comportamento da deformação máxima para o caso com a presença da hidrólise e sem sua presença, durante 120 dias. A análise estrutural é realizada apenas sobre um oitavo da estrutura.

As condições de contorno estão impostas, primeiramente num plano normal ao eixo z (metade da espessura) e no plano normal ao eixo x cor-

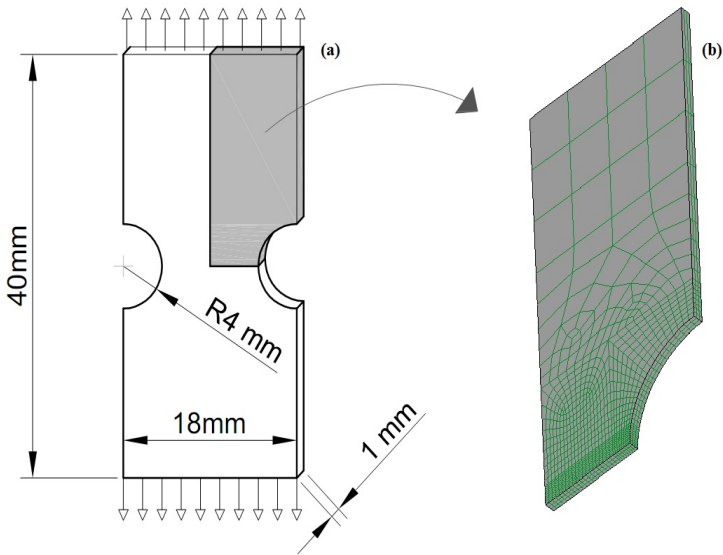


Figura 4.30: Dimensões da chapa (a) e sua geometria composta por uma malha de elementos finitos (b).

tando o centro da placa de forma a impedir o deslocamento vertical, e na face superior é imposto um carregamento controlado. O carregamento controlado é aplicado ao longo de 200 passos. Os dados da implementação foram importados para o programa GID 10.0.5 (versão livre), como para o caso axissimétrico, para sua visualização. O algoritmo foi interrompido quando a máxima deformação axial atingiu um valor de 0,05, valor o qual representa o limite imposto para um comportamento de pequenas deformações e deslocamentos. A comparação dos resultados segue os mesmos princípios da seção anterior (4.3), onde se compara dois casos: à esquerda representa os resultados com a presença da hidrólise e à direita apresenta os resultados sem a presença da hidrólise.

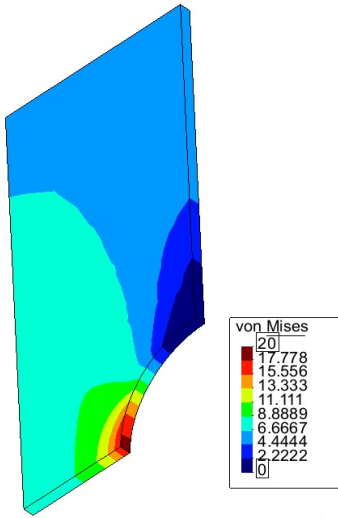
4.4.1 Aplicação de deslocamento de forma progressiva e linear

Nas Figs. (4.31) e (4.32), apresentam-se os resultados de tensão equivalente de von Mises e dano total para um carregamento controlando deslocamento progressivo linearmente durante 120 dias. No primeiro caso (Fig. (4.31) à esquerda), a tensão equivalente de von Mises, para 40 dias de carregamento, apresentou uma tensão equivalente de von Mises de 18,08 MPa no ponto de integração de máximo dano total ($7,3 \times 10^{-2}$). Nos 113 dias de testes, a tensão equivalente de von Mises apresentou 8,21 MPa para o ponto de integração de máximo dano total (0,84). O algoritmo foi interrompido pelo limite de deformação máximo (0,05). Para a Fig. (4.32) é apresentada a evolução do dano para os mesmos dois exemplos anteriores (com e sem a presença da hidrólise). O material apresentou regime plástico em ambos os testes. Para o caso em que à presença da hidrólise, o material apresenta regime plástico a partir do 83° dia de teste.

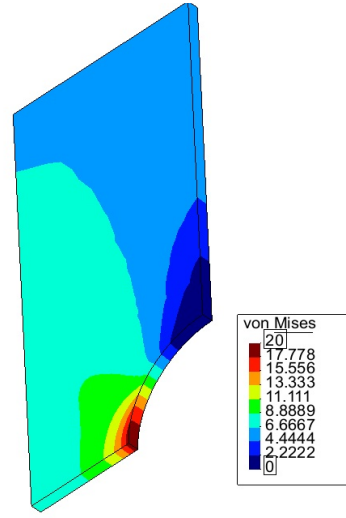
4.4.2 Aplicação de força de forma progressiva e linear

Nas Figs (4.33), (4.34) e (4.35), apresentam-se os resultados para aplicação de um carregamento controlando força progressiva linearmente durante 120 dias.

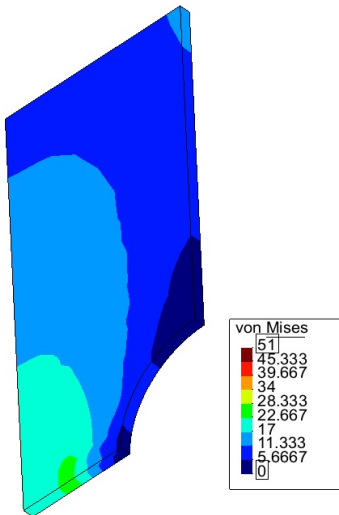
Neste teste, a tensão equivalente de von Mises máxima, para 110 dias de carregamento, apresentou um valor de 28,44 MPa e o valor do dano total é igual a 0,83. O algoritmo foi interrompido por apresentar uma deformação máxima igual a 0,05 (limite de deformação). Para este teste com a presença do dano hidrolítico, o material apresenta comportamento plástico a partir do 91° dia, totalizando no final do processo, um dano plástico igual a 0,03.



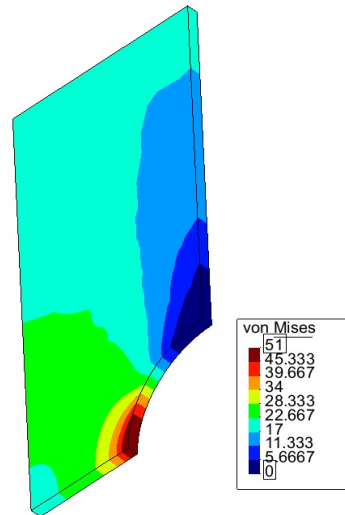
40 dias com a presença da hidrólise



40 dias sem a presença da hidrólise



113 dias com a presença da hidrólise



113 dias sem a presença da hidrólise

Figura 4.31: Tensão equivalente de von Mises para uma placa 3D com entalhe sob aplicação de um deslocamento progressivo linearmente durante 120 dias.

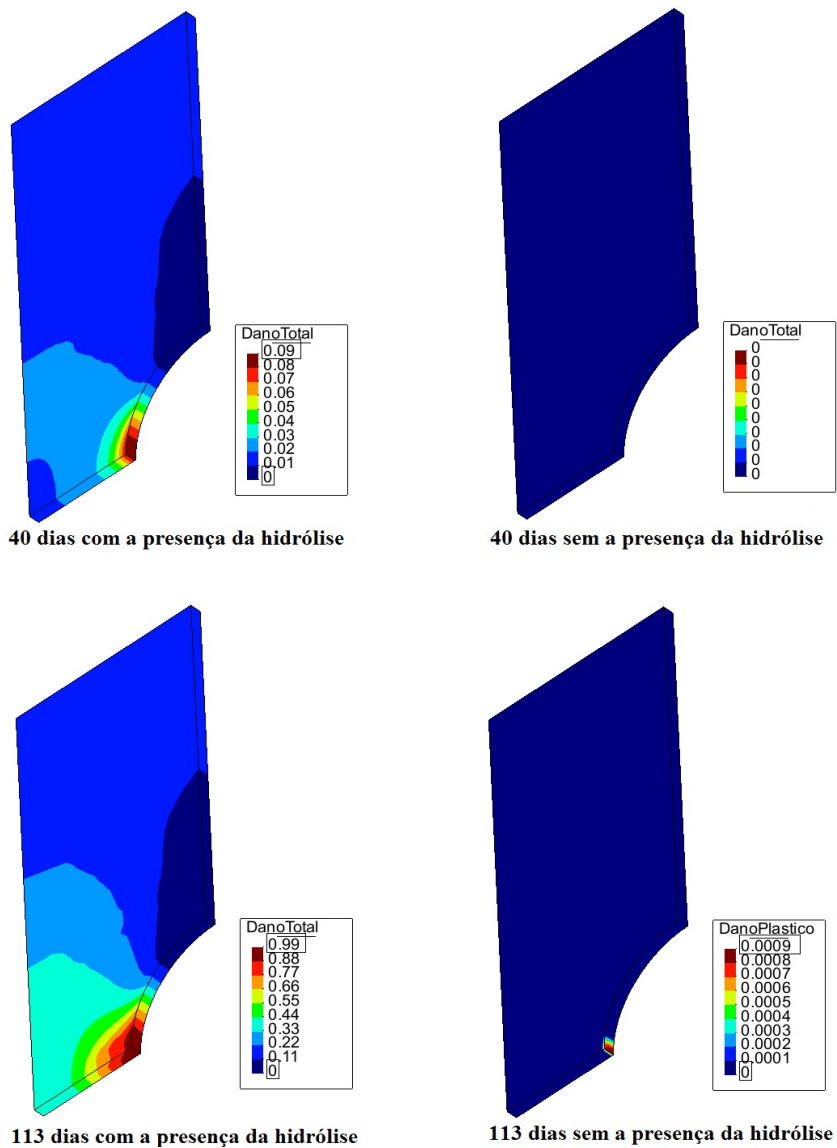
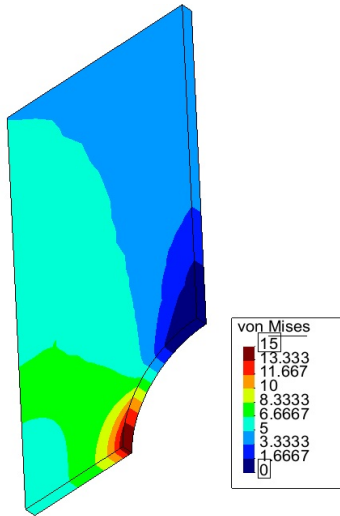
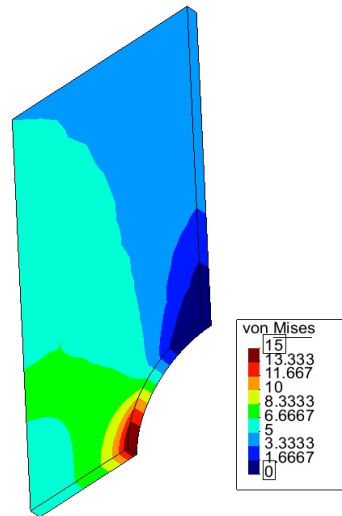


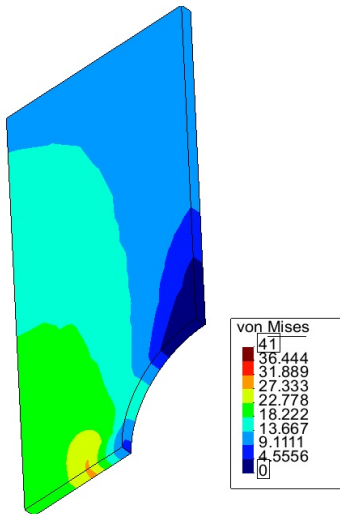
Figura 4.32: Dano total sob aplicação de um deslocamento progressivo linearmente durante 120 dias.



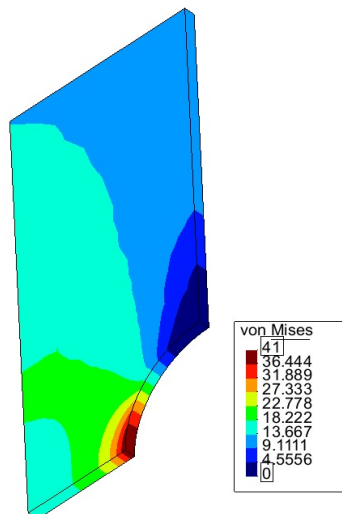
40 dias com a presença da hidrólise



40 dias sem a presença da hidrólise



110 dias com a presença da hidrólise



110 dias sem a presença da hidrólise

Figura 4.33: Tensão equivalente de von Mises para um carregamento sob força prescrita.

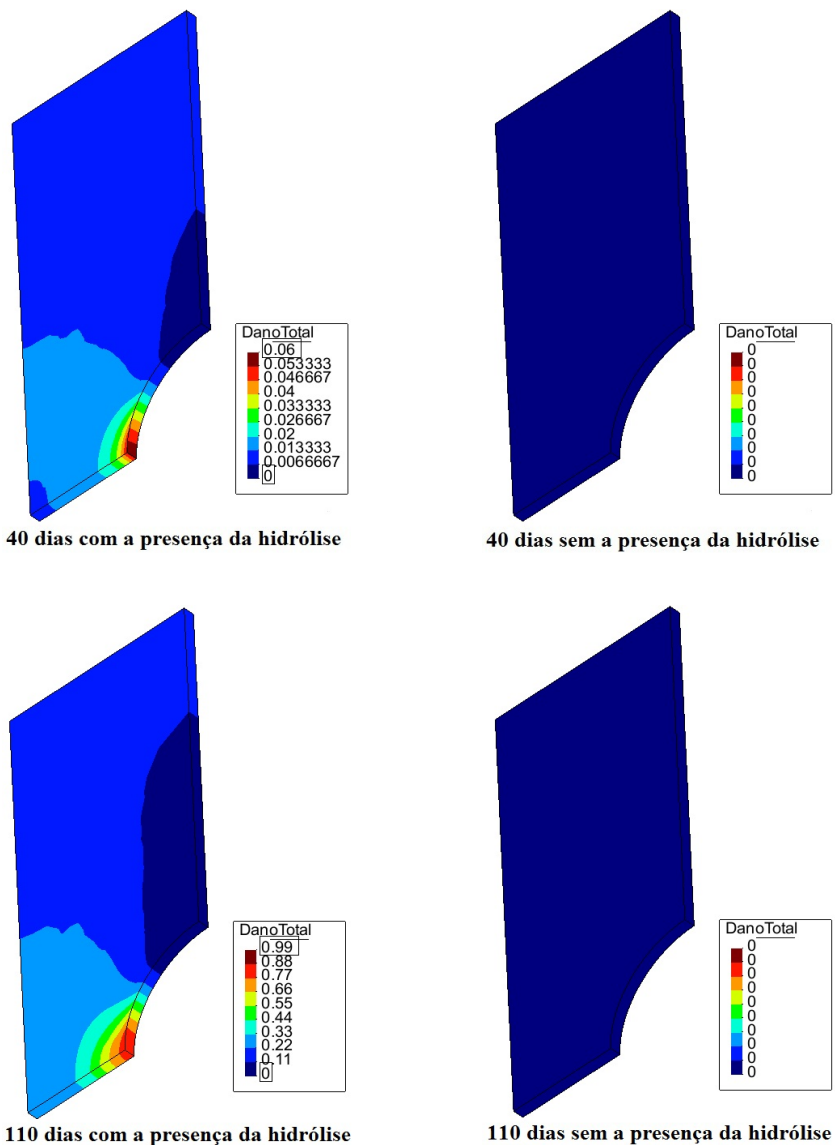


Figura 4.34: Evolução do dano total após a aplicação de força progressiva e linear durante 120 dias.

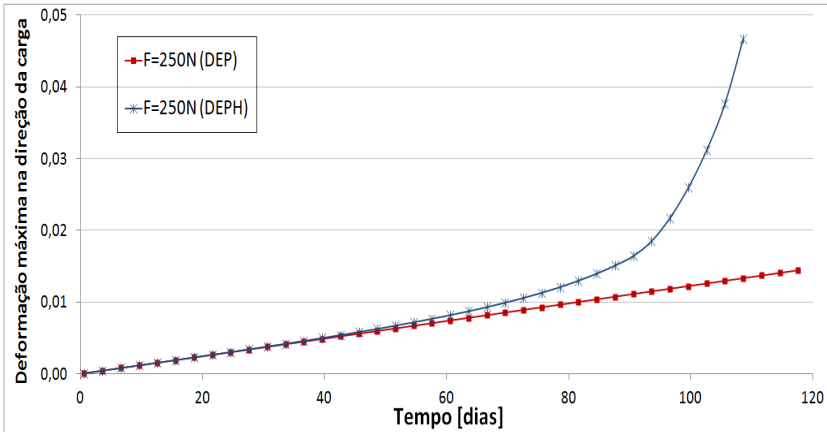


Figura 4.35: Deformação máxima para um carregamento imposto de forma progressiva linearmente em um placa tridimensional.

4.4.3 Aplicação de força sob dois intervalos de tempo

Este teste segue os mesmos procedimentos de (4.3.2.2), onde na primeira etapa aplica-se uma força progressiva linear no intervalo de 1 hora sendo mantido seu valor de forma constante durante 120 dias.

Na Fig. (4.36) após 1 hora de carregamento totalizando a força máxima prescrita de 250,75 N, a tensão equivalente de von Mises atingiu o valor máximo de 43,93 MPa apresentado no ponto de integração de máximo valor de dano total ($4,6 \times 10^{-4}$) (dano hidrolítico). Para o segundo intervalo (força constante ao longo dos 120 dias), a tensão equivalente de von Mises diminui seu valor devido ao valor do dano total contabilizando 12,98 MPa para o ponto de integração de máximo dano total (0,74) (Fig. 4.37). Para os 32 dias de testes com a presença da hidrólise, o material apresentou regime plástico logo após a pré-carga (1 hora) com um valor de dano plástico máximo de 0,03. O algoritmo foi interrompido pela máxima deformação admitida (0,05) (Fig. 4.38). Todos os valores foram extraídos no próprio ponto de integração.

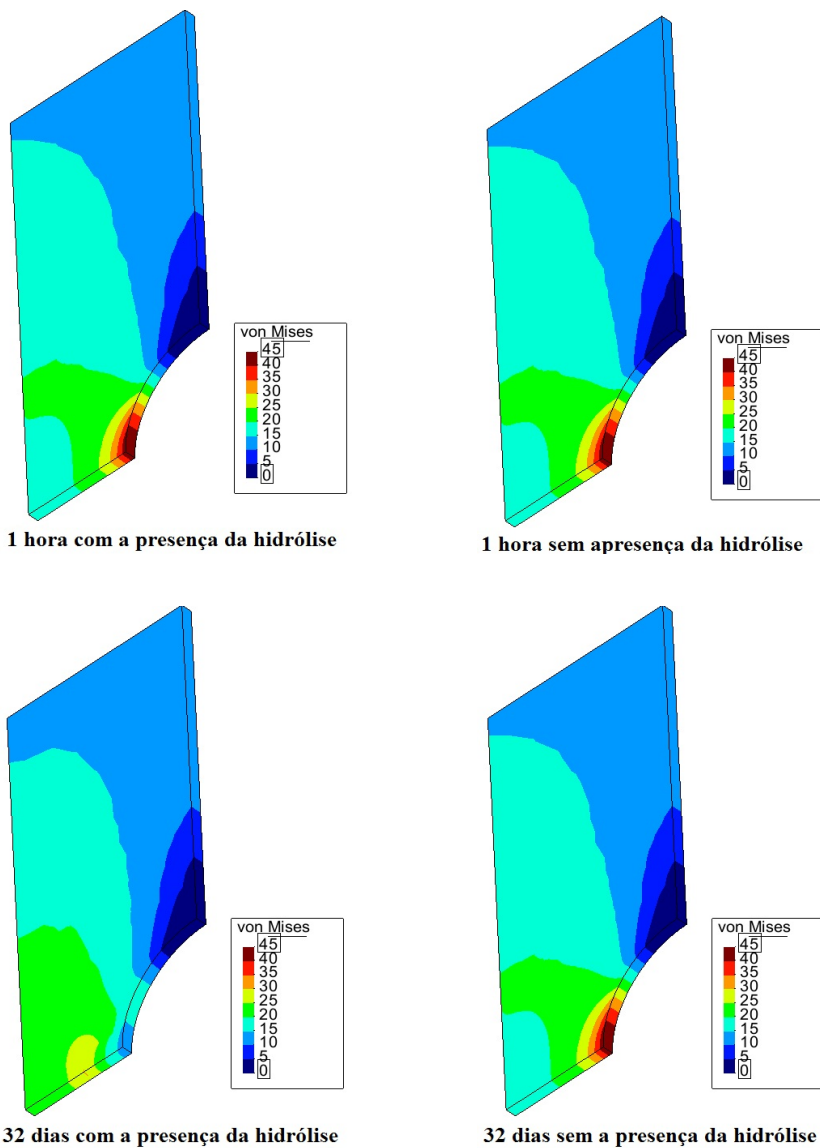
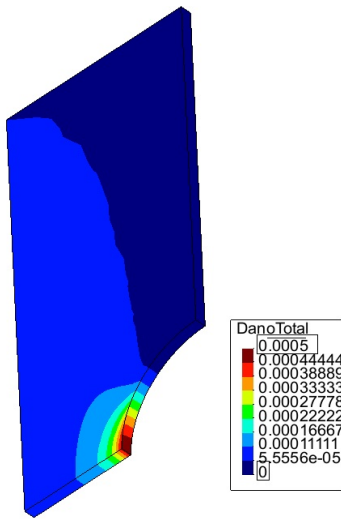
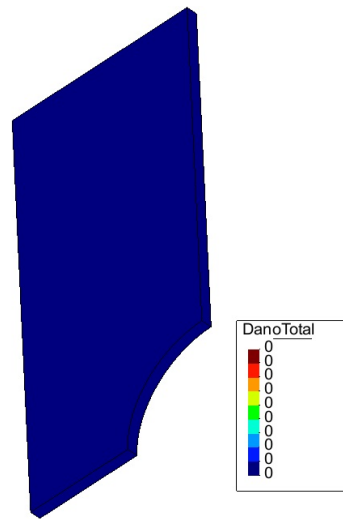


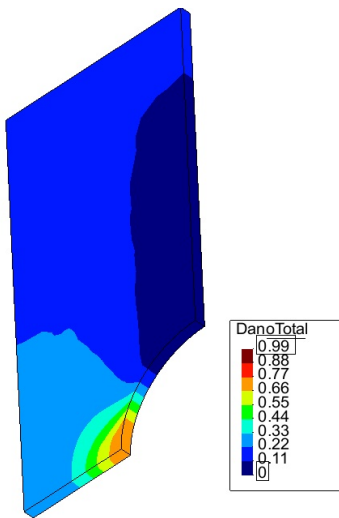
Figura 4.36: Tensão equivalente de von Mises para uma placa 3D com entalhe.



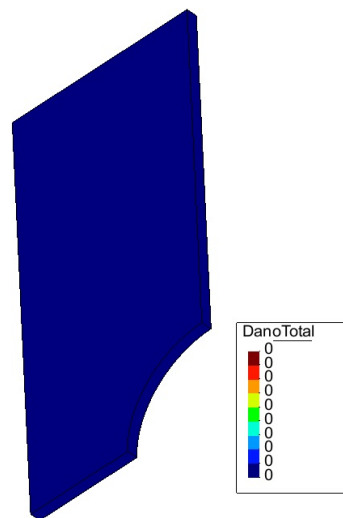
1 hora com a presença da hidrólise



1 hora sem a presença da hidrólise



32 dias com a presença da hidrólise



32 dias sem a presença da hidrólise

Figura 4.37: Evolução da variável de dano total.

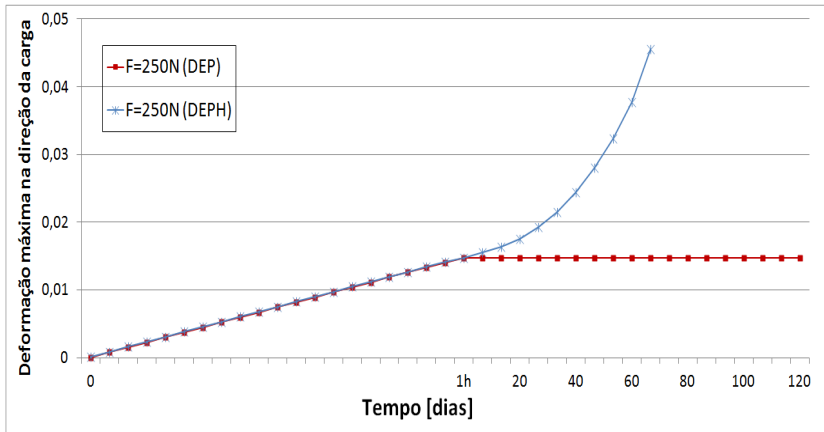


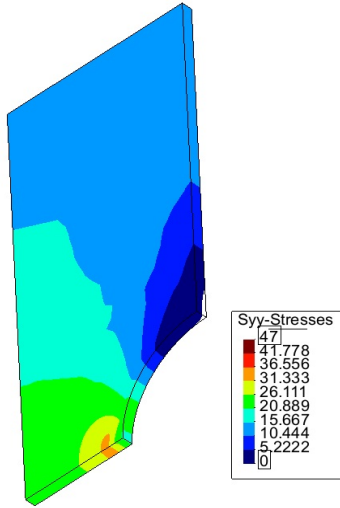
Figura 4.38: Deformação máxima para dois intervalos de carregamento.

4.4.4 Aplicação de força na forma de um ciclo (carga/descarga)

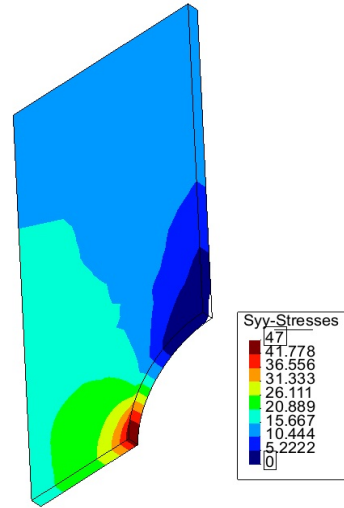
As Figs. (4.39), (4.40) e (4.41) apresentam o comportamento do material perante dois ciclos de carregamentos: carga sob força progressiva linearmente com valor máximo de 250,75 N e uma descarga sob força progressiva linearmente até obter uma força nula.

No processo de carregamento, o valor da tensão de Cauchy na direção do carregamento é igual a 20,21 MPa no ponto de integração de máximo valor de dano total (0,60). Neste ciclo de carregamento, o material ultrapassou o limite de escoamento totalizando um valor para o dano plástico de 0,01. Para o final do segundo ciclo (descarregamento), a tensão de Cauchy obteve um valor de $-3,70 \times 10^{-5}$ MPa no ponto de integração de máximo valor de dano total (0,93). Para este teste, foram analisados os 120 dias em que o material foi submetido aos dois ciclos de carregamento.

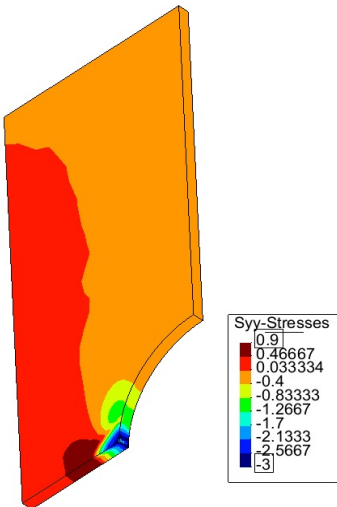
Como visto nesta seção, o dano hidrolítico atua nas variáveis de estado em cada ponto de integração desde o início do processo.



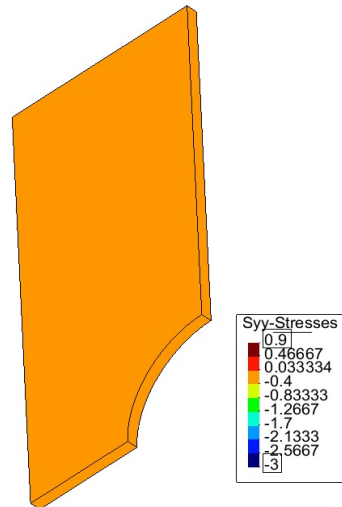
Carga (60 dias) com a presença da hidrólise



Carga (60 dias) sem a presença da hidrólise

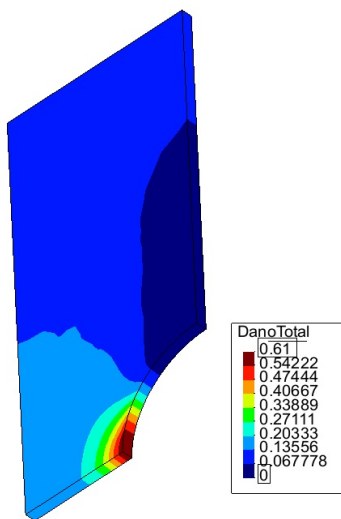


Descarga (120 dias) com a presença da hidrólise

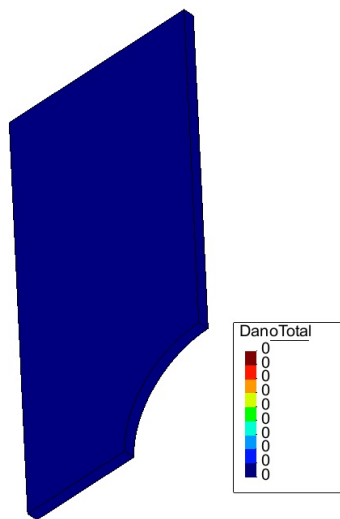


Descarga (120 dias) sem a presença da hidrólise

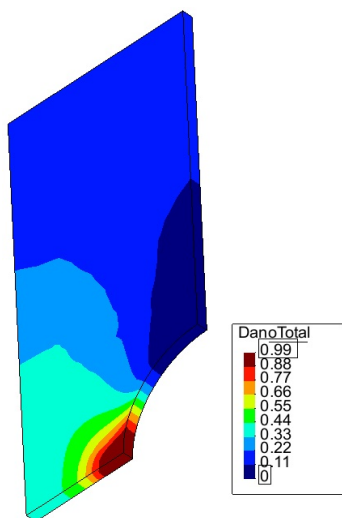
Figura 4.39: Tensão de Cauchy para uma placa 3D com entalhe sob um carregamento e descarregamento.



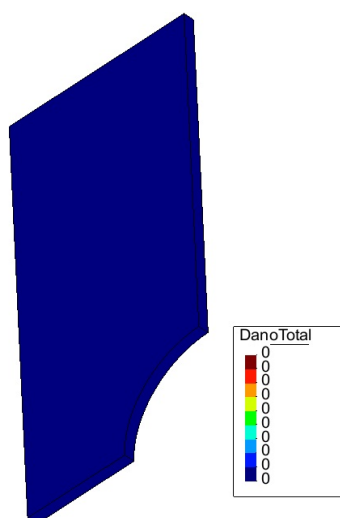
Carga (60 dias) com a presença da hidrólise



Carga (60 dias) sem a presença da hidrólise



Descarga (120 dias) com a presença da hidrólise



Descarga (120 dias) sem a presença da hidrólise

Figura 4.40: Dano total para carga e descarga.

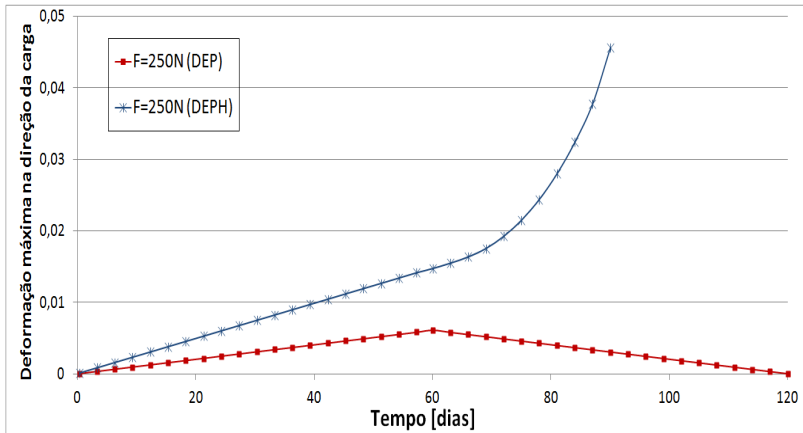


Figura 4.41: Deformação máxima na direção axial sob um carregamento seguido de um descarregamento.

5 CONCLUSÃO

5.1 Considerações finais

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo constitutivo capaz de representar o comportamento de um polímero bioabsorvível sob ação mecânica acoplado a fenômenos químicos (hidrólise). A principal característica do modelo é representar o comportamento do material tanto em regime elástico quanto plástico atuando a degradação diretamente nas variáveis de estado desde o início do processo. Assim, pode-se simular o comportamento do polímero com cargas que ultrapassam o limite de escoamento do material e, o mais importante, como o material responde a cada comportamento. Foi escolhido um modelo elastoplástico isotrópico respeitando um quadro termodinamicamente consistente. A nova variável de dano é fenomenológica referente ao comportamento da evolução do dano hidrolítico. Inicia-se os testes com um bloco de volume unitário (seção 4.2) de modo a observar e avaliar o comportamento da equação constitutiva utilizando carregamentos (deformações e forças prescritas). Logo após, foram realizadas simulações em geometrias mais complexas (modelo axissimétrico e tridimensional).

As equações utilizadas caracterizam um comportamento de pequenas deformações e deslocamentos (deformação máxima na direção axial igual a 0,05) não havendo a incorporação do encruamento cinemático, limitando-o a um encruamento isotrópico com lei de fluxo de von Mises.

Em resumo, foi possível concluir com este trabalho os seguintes aspectos:

- Os exemplos apresentaram resultados coerentes com o esperado para os vários tipos de carregamentos. Para o início do carregamento (passo elástico), o dano teve uma evolução determinada apenas pelo processo de hidrólise. Quando o carregamento leva o material a um escoamento plástico, a taxa de degradação aumenta significativamente devido ao acoplamento da taxa de dano hidrolítico ao nível de energia de deformação e a incorporação do dano plástico.
- Como previsto, a função que rege a evolução hidrolítica interferiu em todas as variáveis de estado ($\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$, $\bar{\varepsilon}^p$, d^p , d^h) de todos os pontos materiais do corpo. Há de ressaltar que devido à existência da constante g associada ao fenômeno de hidrólise apresentado na Eq. (3.32), o modelo de dano obtém evolução mesmo sem a presença de um estado de deformação.

- Através dos resultados numéricos, pôde-se observar, como já comentado, a diferença no comportamento do dano hidrolítico comparado ao dano plástico devido à posição da parcela $(1 - d)$ na Eq. (3.52). Para o dano hidrolítico, esta parcela está no numerador do próprio potencial (Eq. (3.33)), já para o dano plástico, esta parcela está no denominador do potencial (Eq. (3.34)) proporcional ao encruamento $(\Delta\gamma)$. À medida que a degradação aumenta, a taxa de dano plástico aumenta enquanto a taxa de dano hidrolítico diminui com decaimento exponencial.
- Nos exemplos onde se aplicou um carregamento por controle de deslocamento prescrito, os resultados apresentaram relaxação das tensões sendo caracterizada pela própria velocidade de degradação. Já para o carregamento com controle de força prescrita, as deformações crescem à medida que o dano aumenta podendo, para um carregamento constante, passar do regime elástico para o plástico culminando com o colapso da peça caso o carregamento se mantenha.
- Nos testes onde se aplicam um carregamento e descarregamento por controle de força, após o início do processo de descarregamento a velocidade de deformação continua evoluindo positivamente (Figs. (4.12), (4.29) e (4.41)). Este fenômeno ocorreu nos casos testados devido a maior velocidade de degradação comparado a velocidade em que o material está sofrendo o descarregamento.
- Nos casos testados, o valor de dano hidrolítico apresentou um crescimento maior que o dano elastoplástico. Entretanto, isto deve-se a escolha relativamente arbitrária dos parâmetros de material utilizados nos exemplos, dado que não foi feito nenhum processo de identificação a partir de um material real, sendo isto objeto de trabalhos futuros. Também pode-se dizer que a própria velocidade de dano plástico é provocada pelo carregamento.

5.2 Sugestões para futuros trabalhos

De modo a dar prosseguimento neste assunto, sugerem-se alguns tópicos a serem tratados:

- Dedução da expressão analítica da matriz tangente consistente do problema;

- Realização de ensaios experimentais para obtenção de dados que caracterizam o modelo;
- Modificar a lei de evolução do dano hidrolítico para se adaptar a dados experimentais;
- Implementar um modelo com características viscoelásticas incluindo o critério de escoamento que dependa do estado de pressão (ex. Drucker-Prager), melhorando a descrição do comportamento de um polímero;
- Aplicar a equação de evolução do dano hidrolítico em um modelo que represente grandes deformações e deslocamentos;
- Desenvolver um modelo que represente o processo de difusão no polímero;
- Inclusão do modelo desenvolvido neste trabalho em um programa comercial de elementos finitos de modo a simular geometrias mais complexas.

REFERÊNCIAS

- BACH, B. B. Potencial pitg falls of kuposaka screw interference fixation for acl surgery. *Am j. Knee Surg.*, v. 2, p. 76–82, 1989.
- BARBANTI, S. H.; CECÍLIA, A. C.; ZAVAGLIA, C. Polímeros bioreabsorvíveis na engenharia de tecidos. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v. 15, p. 13–21, 2005.
- BOFFETTA, P. Carcinogenicity of trace elements with reference to evaluations made by the international agency for research on cancer. *Scand J Work Environ Health*, v. 19, p. 67–70, 1993.
- BONET, J.; WOOD, R. D. *Nonlinear Continuum Mechanical for Finite Element Analysis*. [S.l.: s.n.], 2008.
- BURKERSRODA, F. von; SCHEDL, L.; OPFERICH, A. G. Why degradable polymers undergo surface erosion or bulk erosion. *Biomaterials*, v. 23, p. 4221–4231, 2002.
- BUSFIELD, B. T.; ANDERSON, L. J. Sterile pretibial abscess after anterior cruciate reconstruction from bioabsorbable interference screws: A report of 2 cases. *The Journal of Arthroscopic and Related Surgery*, v. 23, p. 911.e1–911.e4, 2007.
- CHEN, Y.; ZHOU, S.; LI, Q. Mathematical modeling of degradation for bulk-erosive polymers: Applications in tissue engineering scaffolds and drug delivery systems. *Acta Biomaterialia*, v. 7, p. 1140–1149, 2011.
- CHU, C. Strain-accelerated hydrolytic degradation of synthetic absorbable sutures. *Surgical research, recent developments: Proceedings of the First Annual Scientific Session of the Academy of Surgical Research*, p. 111–115, 1985.
- CICCONE, W. J. et al. Bioabsorbable implants in orthopaedics: New developments and clinical applications. *Journal of the American Academy of Orthopaedic Surgeons*, v. 9, p. 280–288, 2001.
- CLATWORTHY, M. G. et al. Tunnel widening in anterior cruciate ligament reconstruction: A prospective evaluation of hamstring and patella tendon grafts. *Knee Surg Sports Traumatol Arthrosc*, v. 7, p. 138–145, 1999.

- DENG, M. et al. Effect of load and temperature on in vitro degradation of poly(glycolide-co-l-lactide) multifilament braids. *Biomaterials*, v. 26, p. 4327–4336, 2005.
- DENTI, M. et al. Bioabsorbable interference screws for bone-patellar tendon-bone anterior cruciate ligament reconstruction: clinical and computerized tomography results of four different models. a prospective study. *J. Orthopaed Traumatol*, v. 5, p. 151–155, 2004.
- DHILLON, M. S.; LOKESH, A. V. Bioabsorbable implants in orthopedic. *Indian Journal of Orthopaedics*, v. 40, p. 205–209, 2006.
- FROSCH, K. H. et al. Magnetic resonance imaging analysis of the bioabsorbable milagro tm interference screw for graft fixation in anterior cruciate ligament reconstruction. *Springer-Verlag*, v. 4, p. 73–79, 2009.
- KONAN, S.; HADDAD, F. S. A clinical review of bioabsorbable interference screws and their adverse effects in anterior cruciate ligament reconstruction surgery. *The Knee*, v. 16, p. 6–13, 2009.
- LEMAITRE, J.; DESMORAT, R. *Engineering Damage Mechanics: ductile, creep, fatigue and brittle failures*. [S.l.: s.n.], 2005.
- LI, S. M.; GARREAU, H.; VERT, M. Structure-property relationships in the case of the degradation of massive aliphatic poly-(a-hydroxy acids) in aqueous media, part 1 : Poly (dl -lactic acid). *Journal of materials science: Materials in medicine*, v. 1, p. 123–130, 1990.
- MILLER, N.; WILLIAMS, D. The in vivo and in vitro degradation of poly(glycolic acid) suture material as a function of applied strain. *Biomaterials*, v. 5, p. 365–368, 1984.
- NETO, E. A. de S.; PERIC, D.; OWEN, D. R. J. *Computational methods for plasticity: Theory and applications*. [S.l.]: WILEY, 2008.
- NHO, S. J. Bioabsorbable anchors in glenohumeral shoulder surgery. *Arthroscopy*, v. 25, p. 788–793, 2009.
- OKAZAKIA, Y. et al. Comparison of metal concentrations in rat tibia tissues with various metallic implants. *Biomaterials*, v. 25, p. 13–20, 2004.
- RAJAGOPAL, K. R.; SRINIVASA, A. R. On the thermomechanics of materials that have multiple natural configurations part i: Viscoelasticity and classical plasticity. *Z. angew. Math. Phys*, v. 55, p. 861–893, 2004a.

- RAJAGOPAL, K. R.; SRINIVASA, A. R. On the thermomechanics of materials that have multiple natural configurations part ii: Twinning and solid to solid phase transformation. *Z. angew. Math. Phys.*, v. 55, p. 1074–1093, 2004b.
- SIMO, J. C.; TAYLOR, R. L. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 48, p. 101–118, 1985.
- SIMO, J. V.; HUGHES, T. J. R. *Computational Inelasticity*. [S.l.: s.n.], 1998.
- SMIT, T. H. et al. Time-dependent mechanical strength of 70/30 poly(L,D-lactide). shedding light on the premature failure of degradable spinal cages. *Spine*, v. 33, p. 14–18, 2008.
- SOARES, J. S. et al. Constitutive framework for biodegradable polymers with applications to biodegradable stents. *ASAIO Journal*, p. 295–301, 2008.
- SOARES, J. S.; RAJAGOPAL, K. R.; JR, J. E. M. Deformation-induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus. *Biomechanics Model Mechanobiol*, v. 9, p. 177–186, 2010.
- SOARES, J. S.; RAJAGOPAL, K. R.; MOORE, J. E. Deformation-induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus. *Springer-Verlag*, v. 9, p. 177–186, 2009.
- TORRES, I. F. R. *Desenvolvimento e aplicação do método dos elementos finitos generalizados em análise tridimensional não-linear de sólidos*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2003.
- TOUPIN, R. A. Elastic materials with couple-stresses. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, v. 11, p. 385–414, 1962.
- TRANTOLO, D. J. et al. *Biomaterials in Orthopedics*. [S.l.: s.n.], 2004.
- TRUESDELL, C.; NOLL, W. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. New York: Springer-Verlag, 1965.
- ZHONG, S. P.; DOHERTY, P. J.; WILLIAMS, D. F. The effect of applied strain on the degradation of absorbable suture in vitro. *Clinical Materials*, v. 14, p. 183–189, 1993.

APÊNDICE A – DEDUÇÕES DO CAPÍTULO 3

Deduz-se neste apêndice as expressões decorrida no Capítulo 3.

A.1 Dedução do potencial em relação a inversa da lei tensão vs. deformação

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\varepsilon}^e &= \mathbf{D}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_{ef} = \mathbf{D}^{-1} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{(1-d)} \\
 \rho \psi^e &= \frac{1}{2(1-d)^2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{-1} : \boldsymbol{\sigma} \\
 &= \frac{1+\nu}{2E} \frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\sigma}}{1-d} - \frac{\nu}{2E} \frac{[tr(\boldsymbol{\sigma})]^2 \mathbf{I}}{1-d} \\
 \rho \psi^e &= \frac{1}{2E(1-d)} \left\{ (1+\nu) \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\sigma} - \nu [tr(\boldsymbol{\sigma})]^2 \mathbf{I} \right\} \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

A.2 Força termodinâmica ocasionada pelo fenômeno de hidrólise

$$\begin{aligned}
 -Y_{n+1}^{hr} &= \frac{\left(\sqrt{\frac{3}{2}} \|\mathbf{s}_{n+1}^{tr}\| \right)^2}{6G(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} + \frac{(p_{n+1}^{tr})^2}{2K(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} \\
 &= \frac{(\mathbf{s}_{n+1}^{tr} : \mathbf{s}_{n+1}^{tr})}{4G(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} + \frac{(p_{n+1}^{tr})^2}{2K(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} \\
 &= \frac{(\mathbf{s}_{n+1}^{tr} : \mathbf{s}_{n+1}^{tr})}{4G(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} + \frac{(p_{n+1}^{tr})^2}{2K(1-d_n^p - d_{n+1}^{hr})^2} \\
 &= \frac{(\tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr} : \tilde{\mathbf{s}}_{n+1}^{tr})}{4G} + \frac{(\tilde{p}_{n+1}^{tr})^2}{2K} \quad (\text{A.2})
 \end{aligned}$$

A.3 Dedução da variável de dano hidrolítico para o estado teste elástico

$$\begin{aligned}
 d_{n+1}^{hr} &= d_n^h + \Delta t(1 - d_n^p - d_{n+1}^{hr}) \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m \\
 &= d_n^h + \Delta t(1 - d_n^p) \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m - d_{n+1}^{hr} \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m \Delta t \\
 &= \frac{d_n^h + \Delta t(1 - d_n^p) \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m}{1 + \left(\frac{-Y_{n+1}^{hr}}{l} + g \right)^m \Delta t}. \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

A.4 Dedução do tensor tensão desviador para o estado de tempo $n + 1$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{s}_{n+1} &= (1 - d_{n+1})2G \left[\boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^{etr} - \Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|} \frac{1}{(1 - d_{n+1})} \right] \\
 &= (1 - d_{n+1})2G \boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^{etr} - (1 - d_{n+1})2G\Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|} \frac{1}{(1 - d_{n+1})} \\
 &= (1 - d_{n+1})2G \boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^{etr} - 2G\Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|}, \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

onde substituindo $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^{tr} = 2G \boldsymbol{\epsilon}_{dn+1}^{etr}$ na equação acima, tem-se

$$\mathbf{s}_{n+1} = (1 - d_{n+1}) \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^{tr} - 2G\Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}_{n+1}}{\|\mathbf{s}_{n+1}\|}. \tag{A.5}$$

A.5 Dedução da variável de dano total através da variável integra de dano w

$$\begin{aligned}
 1 - w_{n+1} &= 1 - w_n + \frac{1}{w_{n+1}} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s \Delta\gamma + \left[w_{n+1} \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \\
 w_{n+1} &= w_n - \left\{ \frac{1}{w_{n+1}} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s \Delta\gamma + \left[w_{n+1} \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \right\} \\
 w_{n+1} - w_n + \left\{ \frac{1}{w_{n+1}} \left(\frac{-Y_{n+1}^L}{r} \right)^s \Delta\gamma + \left[w_{n+1} \left(\frac{-Y_{n+1}^h}{l} + g \right)^m \right] \Delta t \right\} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{A.6}$$

APÊNDICE B – MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

B.1 Funções governantes

B.1.1 Função deslocamento

O deslocamento para cada ponto do domínio Ω é representado por um vetor \mathbf{u} onde suas posições são determinadas pelos eixos de coordenadas cartesianas (x, y, z) .

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \\ w(x, y, z) \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

B.1.2 Estado de deformação

O estado de deformação é caracterizado pelo vetor $\boldsymbol{\varepsilon}$ em cada ponto do domínio Ω através de

$$\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_{xx} \ \varepsilon_{yy} \ \varepsilon_{zz} \ \gamma_{xy} \ \gamma_{yz} \ \gamma_{zx}]^T, \quad (\text{B.2})$$

onde $\gamma_{ij} = 2\varepsilon_{ij}$.

A relação deformação-deslocamento é dada por

$$\boldsymbol{\varepsilon} = L\mathbf{u}, \quad (\text{B.3})$$

onde L é um operador diferencial. Em forma matricial, tem-se

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

B.1.3 Condições de equilíbrio

O equilíbrio de um corpo sujeito a forças de corpo por unidades de volume \mathbf{f}_v , definido pela equação diferencial de equilíbrio abaixo, é válida em todos os pontos do domínio Ω , sendo esta uma função chamada de

formulação forte

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0 \text{ em } x \in \Omega, \quad (\text{B.5})$$

em que o operador divergente vale da igualdade $\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = L^T \boldsymbol{\sigma}$ e sendo usual x, y, z como sistema de referência adotado. O tensor tensão Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ é dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Em forma de vetorial, o tensor tensão de Cauchy é dada por:

$$\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_{xx} \ \sigma_{yy} \ \sigma_{zz} \ \sigma_{xy} \ \sigma_{yz} \ \sigma_{zx}]^T. \quad (\text{B.7})$$

O vetor \mathbf{b} é definido como as componentes de forças de corpo por unidade de volume

$$\mathbf{b} = [b_x \ b_y \ b_z]^T. \quad (\text{B.8})$$

B.1.4 Condições de contorno

Estas condições são definidas em cada ponto da superfície do sólido, sendo elas funções conhecidas no contorno. Divide-se essas condições em condições de contorno de deslocamento e condições de contorno de força (tração, compressão, pressão, entre outras), respectivamente

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{t} = \bar{\mathbf{t}}. \quad (\text{B.10})$$

B.1.5 Relação constitutiva linear

As relações constitutivas estabelecem a lei que relaciona o campo de tensões e de deformações. Para materiais com comportamento elástico linear esta relação é expressada como

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (\text{B.11})$$

onde \mathbf{D} é a matriz de elasticidade.

B.1.6 Aproximação do campo de deslocamento e do campo de deformação

O MEF trata do deslocamento dos nós como incógnita básica do problema. Para o cálculo deste deslocamento aproximado, introduz funções de

forma de modo que

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \sum \mathbf{N}\mathbf{u}, \quad (\text{B.12})$$

onde \mathbf{u} representa o deslocamento nodais e \mathbf{N} as funções de forma dos elementos. A partir do campo de deslocamentos \mathbf{u} , o campo de deformações $\boldsymbol{\varepsilon}$ são calculados a partir da derivada de \mathbf{u} em relação as coordenadas do sistema, de modo que

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} = \sum \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N}{\partial z} \\ \frac{\partial N}{\partial y} & \frac{\partial N}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N}{\partial z} & \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \sum \mathbf{B}\mathbf{u}, \quad (\text{B.13})$$

sendo \mathbf{N} em forma matricial

$$N^e = \begin{bmatrix} N_1^e & 0 & 0 & \dots & N_a^e & 0 & 0 \\ 0 & N_1^e & 0 & \dots & 0 & N_a^e & 0 \\ 0 & 0 & N_1^e & \dots & 0 & 0 & N_a^e \end{bmatrix}. \quad (\text{B.14})$$

Para que se possa expressar essa função em relação aos deslocamentos, característica básica do chamado *método dos deslocamentos*, é preciso fazer o uso da relação constitutiva tensão-deformação definida pela matriz \mathbf{D}

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (\text{B.15})$$

onde \mathbf{D} , para material elástico linear e isotrópico tem a seguinte expressão:

$$\mathbf{D} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \cdot \begin{bmatrix} (1-\nu) & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & (1-\nu) & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & (1-\nu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(1-2\nu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(1-2\nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(1-2\nu) \end{bmatrix}, \quad (\text{B.16})$$

sendo E o módulo de elasticidade longitudinal e ν o coeficiente de Poisson do material.

Para o cálculo da matriz de rigidez e do vetor de forças nodais, a Eq. (2.50) assume a forma de

$$KU = f_{ext}, \quad (\text{B.17})$$

onde

$$K = \int_{\Omega}^T \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega, \quad (\text{B.18})$$

e \mathbf{f}_{ext} , agindo nos pontos nodais, é dada por

$$\mathbf{f}_{ext} = \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_f} \mathbf{N} \bar{\mathbf{t}} d\Gamma. \quad (\text{B.19})$$

Continuando, para o sistema global dada pela conectividade entre os elementos, serão impostas condições de contorno estáticas dada por valores prescritos nas posições correspondentes ao vetor de deslocamento global \mathbf{u} . Conhecidos os deslocamentos nodais de cada elemento, pode-se obter o campo de deformações e de tensões usando as Eqs. (B.13) e (B.15).

B.1.6.1 Elementos isoparamétricos

Para o cálculo de K_e e \mathbf{f}_{ext} , em certos casos, os elementos estão distorcidos devido a irregularidades geométricas gerada do próprio MEF. Para relacionar as funções de forma de um elemento regular com um elemento distorcido usa-se o chamado *elementos isoparamétricos* onde as coordenadas do elemento são pré-definidas entre -1 e $+1$ e suas coordenadas locais, ou também chamadas homogêneas, sendo ξ , η , ζ , para outro sistema de coorde-

nadas x y z (chamado de sistema de coordenadas físicas). O mapeamento da geometria é feito através do uso das mesmas funções de forma para interpolar os deslocamentos. Assim, o mapeamento necessita dos dois sistemas de coordenadas.

Estendendo para o caso tridimensional, onde por exemplo, usam-se elementos isoparamétricos hexaédricos, as coordenadas naturais $\xi\eta\zeta$ precisam ser ortogonais e não necessariamente paralelas às coordenadas físicas xyz . As faces do hexaedro correspondem a $-1 \leq \xi \leq 1$, $-1 \leq \eta \leq 1$ e $-1 \leq \zeta \leq 1$, sendo o ponto $(0,0,0)$ o centro do elemento.

Para que as integrais (Eq. (B.18)) possam ser calculadas no domínio de coordenadas naturais, é necessário mudar os limites de integração e o domínio, sendo feito através da *matriz Jacobiana* de transformação de coordenadas. Neste caso, a *matriz Jacobiana* \mathbf{J} relaciona um elemento infinitesimal do domínio físico a um do domínio de coordenadas naturais da seguinte forma:

$$d\Omega = \det(\mathbf{J})d\xi d\eta d\zeta, \quad (\text{B.20})$$

onde $\det(\mathbf{J})$ é o *determinante da matriz jacobiana*

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

Assim,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.22})$$

Substituindo na Eq. (B.18)

$$K_e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \det(\mathbf{J}) d\xi d\eta d\zeta. \quad (\text{B.23})$$

B.1.6.2 Pontos de integração (Gauss)

A Eq. (B.23) pode ser calculada analiticamente usando equações na forma fechada através de tabelas de integrais ou de forma numérica, utilizando a técnica de integração numérica chamada *quadratura de Gauss*, onde aproximará a integral (Eq. (B.23)), geralmente como um somatório com

pesos dos valores assumidos pela função em pontos específicos dentro do domínio de integração.

Assim sendo,

$$K = \sum_{i=1}^{npi} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \det(\mathbf{J}) w_p, \quad (\text{B.24})$$

onde w_p é o peso da função em cada direção do eixo de coordenadas e npi o número de pontos de integração.

APÊNDICE C – MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

O desenvolvimento do método por diferenças finitas dada para o cálculo de

$$\mathbf{D} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}$$

será mostrado abaixo:

Inicia-se primeiramente com uma função $F(\mathbf{x})$ que contém o conjunto de variáveis do sistema, como

$$\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_m\}^T,$$

sendo m o número de variáveis do sistema.

Para o nosso caso, o número de variáveis do sistema serem 6, $(\varepsilon_{xx}^e, \varepsilon_{yy}^e, \varepsilon_{zz}^e, \varepsilon_{xy}^e, \varepsilon_{yz}^e, \varepsilon_{xz}^e)$, assim, a função $F(\mathbf{x})$ será

$$F(\mathbf{x}^{(k)}) = \{F(x_1^{(k)}), F(x_2^{(k)}), F(x_3^{(k)}), \dots, F(x_6^{(k)})\}^T. \quad (\text{C.1})$$

Aplicando série de Taylor para a função $F(\mathbf{x}^k)$, tem-se

$$F(\mathbf{x}^{(k+1)}) = F(\mathbf{x}^{(k)}) + \frac{\partial F(\mathbf{x}^{(k)})}{\partial \mathbf{x}^{(k)}} \Delta \mathbf{x}^{(k)}, \quad (\text{C.2})$$

onde admite-se que

$$\frac{\partial F(\mathbf{x}^{(k)})}{\partial \mathbf{x}^{(k)}} = J(\mathbf{x}^{(k)}) \quad \text{e} \quad F(\mathbf{x}^{(k+1)}) = 0. \quad (\text{C.3})$$

Assim, substituindo a Eq. (C.3) na Eq. (C.2), tem-se

$$F(\mathbf{x}^{(k)}) + J(\mathbf{x}^{(k)}) \Delta \mathbf{x}^{(k)} = 0. \quad (\text{C.4})$$

Isolando $\Delta \mathbf{x}^{(k)}$ da equação acima

$$\Delta \mathbf{x}^{(k)} = \frac{-F(\mathbf{x}^{(k)})}{J(\mathbf{x}^{(k)})},$$

com

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)}.$$

O próximo passo é testar sua convergência de modo que:

$$\frac{|\Delta\mathbf{x}^{(k)}|}{\mathbf{x}^{(k+1)}} < \textit{tolerância}.$$

Para o cálculo de $J(\mathbf{x}^{(k)})$ utiliza-se a aproximação pelo *método de diferenças finitas*, como

$$J(\mathbf{x}^{(k)}) = \frac{\partial F(\mathbf{x}^{(k)})}{\partial \mathbf{x}^{(k)}},$$

tendo $\Delta y = (0,00001)x^{(k)}$ em a j -ésima coluna da matriz $J(\mathbf{X}^{(k)})$ de ordem $(m \times m)$ é escrita como

$$\frac{F(y_1) - F(y_1)}{2\Delta x_1},$$

onde

$$y_1 = \{x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_m^{(k)} + \Delta y_m, \dots\}^T$$

$$y_2 = \{x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_m^{(k)} - \Delta y_m, \dots\}^T.$$

Assim, a matriz $J(\mathbf{x}^{(k)})$ é aproximada de forma que

$$J(\mathbf{x}^{(k)}) = \left[\frac{F(y_1) - F(y_1)}{2\Delta x_1} \quad \frac{F(y_1) - F(y_1)}{2\Delta x_2} \quad \dots \quad \frac{F(y_1) - F(y_1)}{2\Delta x_m} \right],$$

sendo que

$$x^{(k)} = x^{(0)} = x_n,$$

pois $x^{(0)}$ é o primeiro valor convergido no passo de carga n da iteração de Newton-Raphson global.