

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

João Víctor Almeida da Silva

Abordagem multiescala para a simulação de fadiga em polímeros termoplásticos

Florianópolis 2020 João Víctor Almeida da Silva

Abordagem multiescala para a simulação de fadiga em polímeros termoplásticos

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica. Orientador: Prof. Eduardo Alberto Fancello, Dr. Coorientador: Eng. Jan-Michel Farias, Dr. Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

da Silva, João Víctor Almeida Abordagem multiescala para a simulação de fadiga em polímeros termoplásticos / João Víctor Almeida da Silva ; orientador, Eduardo Alberto Fancello, coorientador, Jan Michel Colombo Farias, 2020. 132 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2020.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Fadiga em polímeros. 3. Modelo multiescala. 4. Comportamento viscoso. I. Fancello, Eduardo Alberto. II. Farias, Jan-Michel Colombo. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

João Víctor Almeida da Silva

Abordagem multiescala para a simulação de fadiga em polímeros termoplásticos

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Miguel Vaz Júnior, Dr. Universidade do Estado de Santa Catarina

Prof. Jakson Manfredini Vassoler, Dr. Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Prof. Carlos Rodrigo de Mello Roesler, Dr. Universidade Federal de Santa Catarina

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Prof. Paulo de Tarso Rocha de Mendonça, Dr. Coordenador do Programa

Prof. Eduardo Alberto Fancello, Dr. Orientador

Florianópolis, 12 de novembro de 2020.

Este trabalho é dedicado a minha avó Terezinha (*in me-moriam*), aos meus queridos pais e ao Prof. Oscar Garcia Suarez.

AGRADECIMENTOS

Especialmente, agradeço aos meus pais Jonei e Ângela, irmã Ana Carolina, amigo Diego Gnatta e namorada Mauana pelo carinho, paciência e apoio em todos os momentos. Agradeço especificamente:

Aos professores da área de análise e projeto mecânico, bem como ao Prof. Oscar Garcia Suarez, fundamentais na minha formação;

Ao Prof. Eduardo Alberto Fancello pela orientação, confiança, incentivo, ensinamentos e ajuda durante todo o meu mestrado;

Ao Dr. Jan-Michel Colombo Farias pela coorientação, tempo e dedicação imprescindíveis na implementação e revisão deste trabalho;

Aos professores Jakson M. Vassoler, Miguel Vaz Junior e Rodrigo Roesler por integrarem a banca examinadora e por suas contribuições;

À todos os meus colegas do laboratório GRANTE pelo apoio quando dúvidas surgiram;

À Capes pela contribuição financeira.

"...the sciences do not try to explain, they hardly even try to interpret, they mainly make models. By a model is meant a mathematical construct which, with the addition of certain verbal interpretations, describes observed phenomena. The justification of such a mathematical construct is solely and precisely that it is expected to work that is correctly to describe phenomena from a reasonably wide area. Furthermore, it must satisfy certain aesthetic criteria that is, in relation to how much it describes, it must be rather simple."

(Method in the Physical Sciences, John von Neumann, 1955)

RESUMO

Em projetos de engenharia mecânica um dos maiores determinantes para a vida útil da estrutura é a fadiga mecânica. Esse é o caso dos implantes e próteses ortopédicas, muitos são feitos, ou incorporam, materiais poliméricos termoplásticos. Em diversos materiais semicristalinos, a fadiga mecânica é dominada pelo processo de nucleação. em consequência do acúmulo de deformações inelásticas localizadas e formação de crazes. Para simular o fenômeno local de nucleação nos polímeros, um modelo multiescala disponível na literatura foi escolhido, reproduzido e suas características analisadas e comparadas com evidências experimentais. Nesse modelo é considerado um Elemento de Volume Representativo (EVR) composto por uma matriz com uma pequena fração volumétrica de inclusões dúcteis acumuladoras de dano. A homogeneização foi formulada conforme o método Mean-Field Homogeneization (MFH), com o conceito de Linear Comparison Composites (LCC) e solução semi-analítica de Mori-Tanaka. Foram realizadas simulações de validação para o modelo constitutivo homogêneo das fases. O comportamento mecânico é limitado a pequenas deformações e desconsidera a geração de calor. As curvas preditivas de fadiga para o High Density Polyethylene (HDPE) foram reproduzidas e a contribuição desse trabalho foca na análise de sensibilidade aos efeitos da solicitação e aos parâmetros da inclusão.

Palavras-chave: Fadiga. Termoplástico. Multiescala.

ABSTRACT

In mechanical engineering projects, mechanical fatigue is one of the most frequent sources of failure of devices submitted to cyclic loads. This is the case of orthopedic implants and protheses, many of which are made of, or incorporate, polymeric materials. In large semi-crystalline polymers, mechanical fatigue is dominated by the nucleation process as a consequence of localized inelastic strain accumulation and craze formation. To simulate the local nucleation phenomenon in polymers, a multiscale model available in the literature was chosen, reproduced and his features analyzed and compared with experimental evidences. In this model it is considered an Representative Volume Element (RVE) composed by a matrix with a small volume fraction of ductile damaging inclusions. A homogenization scheme is formulated according to the Mean Field Homogenization (MFH) approach, with Linear Comparison Composite concept and the Mori-Tanaka solution. Validation simulations were carried out for the constitutive homogeneous model of phases. The mechanical behavior is limited to small deformations and disregards heat generation. The predictive fatigue life curves for High Density Polyethylene (HDPE) were reproduced and the contribution of this work focuses on the sensitivity analysis and applicability of the model to load effects and inclusion material parameters.

Keywords: Fatigue. Thermoplastic. Multiscale.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Solicitação cíclica.	25
Figura 2.2 – Curva tensão versus deformação cíclica.	25
Figura 2.3 – Encruamento e amolecimento cíclicos	26
Figura 2.4 – Evolução das deformações residuais.	27
Figura 2.5 – Análise de fadiga com base na curva $\sigma - N$	28
Figura 2.6 – Análise de fadiga com base na curva $\epsilon - N$	30
Figura 2.7 – Interpretação ilustrativa do RVE	32
Figura 2.8 – Conceito LCC aplicado à solução de Mori-Tanaka	34
Figura 2.9 – Interpretação do método incremental affine linearization.	37
Figura 2.10-Interpretação reológica unidimencional do modelo constitutivo	39
Figura 4.1 – Cisalhamento simples (Entrada: Tabela 4.1)	58
Figura 4.2 – Tração (Entrada: Tabela 4.2)	59
Figura 4.3 – Cisalhamento simples (Entrada: Tabela 4.3)	60
Figura 4.4 – Tração - Torsão (Entrada: Tabela 4.3)	61
Figura 4.5 – Casos limites para o modelo de Perzina (Entrada: Tabela 4.3; $\kappa = 0$)	62
Figura 4.6 – Cisalhamento (Entrada: Tabela 4.3; Tabela 4.4)	63
Figura 4.7 – Sensibilidade do dano à taxa de deformação (Entrada: Tabela 4.3;	
Tabela 4.4)	64
Figura 4.8 – Cisalhamento (Entrada: Tabela 4.1; Tabela 4.5; $\dot{\gamma}_{12}=0,25s^{-1}$, $t~\in$	
$[0;0,25);\dot{\gamma}_{12}=0,5s^{-1},t\in[0,25;0,5);\dot{\gamma}_{12}=0,0s^{-1},t\in[0,5;\infty))$.	65
Figura 4.9 – Tração cíclica (Entrada: Tabela 4.6; Tabela 4.7; $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-4} s^{-1}$)	67
Figura 4.10–Tração cíclica (Entrada: Tabela 4.6; $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-4} s^{-1}$)	68
Figura 4.11–Tração cíclica (Entrada: Tabela 4.9; $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-3} s^{-1}$)	70
Figura 4.12–Tração (Entrada: Tabela 4.9)	71
Figura 4.13–Campos das fases (Entrada: Tabela 4.9; $\dot{\gamma}_{33} = 10^{-6} s^{-1}$)	72
Figura 4.14–Curvas de Wöhler (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $R_s = 0; f_s = 0$	
2 Hz)	73
Figura 4.15– <i>Ratchetting</i> (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{max,33} = 25 MPa$).	74
Figura 4.16-Efeito da tensão axial máxima (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	75
Figura 4.17– <i>Ratchetting</i> (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{max,33} = 19, 8 MPa$)	76
Figura 4.18–Efeito do número de incrementos nos dois métodos de regularização	
(Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	77
Figura 4.19-Pico de iterações por ciclo (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	77
Figura 4.20-Média de iterações por ciclo (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11) .	78
Figura 4.21-Funções de solicitação com diferentes valores de tensão média e	
frequência (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	79

Figura 4.22-Sensibilidade a tensão média e frequência (Entrada: Tabela 4.10 e	
Tabela 4.11)	80
Figura 4.23–Evolução do dano (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{33} = 20 MPa$)	81
Figura 4.24– <i>Ratchetting</i> (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{max,33} = 20 MPa$;	
$R_s = -1; f_s = 2 Hz$)	81
Figura 4.25-Efeito da função sinusoidal comparada a triangular (Entrada: Ta-	
bela 4.10 e Tabela 4.11)	82
Figura 4.26–Sensibilidade a σ_{y0} (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	83
Figura 4.27–Sensibilidade a S (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	84
Figura 4.28–Sensibilidade a s (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	84
Figura 4.29–Sensibilidade a D_c (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)	85
Figura 4.30-Sensibilidade a Z, inclusão esférica, oblata e prolata (Entrada: Ta-	
bela 4.10 e Tabela 4.11)	86
Figura C.1–Estrutura cristalina de um polímero semicristalino.	114
Figura C.2–Transição vítrea para um material amorfo: a) material semicristalino;	
b) material cristalino	115
Figura C.3–Cinética microestrutural reversível.	115
Figura C.4–Cinética microestrutural irreversível.	116
Figura C.5-Morfologia de um FPPM: a) regiões amorfas; b) regiões cristalinas;	
c) sem filtro, a seta vermelha aponta as fibrilas e a azul os poros	118
Figura C.6-Micromecanimos de falha em um ensaio de tração para diferentes	
semicristalinos	118
Figura C.7-Efeito da temperatura e taxa de solicitação no comportamento me-	
cânico até a ruptura	120
Figura C.8–Tenacidade dos termoplásticos	121
Figura C.9–Análise térmica dinâmico-mecânica (medidas na escala logarítmica).	121
Figura E.1-Comportamento característico dos testes de relaxação e fluência.	130

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Parâmetros materiais	58
Tabela 4.2 – Parâmetros materiais	59
Tabela 4.3 – Parâmetros materiais	61
Tabela 4.4 – Parâmetros materiais	63
Tabela 4.5 – Parâmetros materiais	65
Tabela 4.6 – Parâmetros materiais	66
Tabela 4.7 – Etapas de solicitação.	66
Tabela 4.8 – Parâmetros materiais	68
Tabela 4.9 – Parâmetros materiais	70
Tabela 4.10–Parâmetros viscoelásticos.	72
Tabela 4.11–Parâmetros viscoplásticos da inclusao.	73

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CZMs	Modelos de Zonas Coesivas, em inglês <i>Cohesive Zone Models</i>
DMTA	Análise Térmica Dinâmico-Mecânica, em inglês Dynamic Mechani-
	cai inermai Anaiysis
EDO	Equação Diferencial Ordinária
FFM	Métodos de Campo Completo, em inglês Full-Field Methods
GRANTE	Grupo de Análise e Projeto Mecânico
GSM	Material Padrão Generalizado, em inglês Generalized Standard Ma- terial
HDPE	Polietileno de Alta densidade, em inglês High Density Polyethylene
LCC	Compósitos de Comparação Linear, em inglês Linear Comparison Composites
LEBM	Laboratório de Engenharia Biomecânica
MFH	Homogeneização de Campo Médio, em inglês Mean-Field Homo- genization
MsFEm	Métodos de Elementos Finitos Multiescala, em inglês Multiscale Fi- nite Element Methods
PEEK	Polieteretercetona, em inglês Polyetheretherketone
PMMA	Polimetilmetacrilato, em inglês Polymethylmethacrylate
PP	Polipropileno, em inglês <i>Polypropylene</i>
PVI	Problema de Valor Inicial
RVE	Elemento de Volume Representativo (EVR), em inglês Representa-
	tive Volume Element
UHMWPE	Polietileno de Ultra-Alto Peso Molecular, em inglês Ultra-High Mole- cular Weight Polyethylene

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω	Domínio de um corpo macroscópico qualquer
Γ	Contorno de um domínio qualquer
t	Тетро
σ	Tensor de tensões
b	Vetor da força de corpo por unidade de volume
t	Vetor da força de superfície no contorno
\boldsymbol{w}	Vetor do deslocamento prescrito no contorno
\boldsymbol{u}	Vetor de deslocamento
ϵ	Tensor de deformações
σ	Tensão unidimensional
ϵ	Deformação unidimensional
σ_a	Tensão alternante
σ_m	Tensão média
T_s	Período da solicitação
σ_{min}	Tensão mínima
σ_{max}	Tensão máxima
f_s	Frequência da solicitação
E'	Módulo de armazenamento
E''	Módulo de perda
ξ	Estado termodinâmico (conjunto de variáveis de estado e forças conjuga-
	das)
i	Subíndice utilizado para representar elementos de um conjunto
σ_y	Tensão de escoamento
σ_{y0}	Tensão limiar de escoamento (parâmetro material)
N	Número de ciclos até a falha (vida de fadiga)
σ_{f}	Tensão limite de fadiga
D	Variável interna relacionada ao dano
T_g	Temperatura de transição vítrea
X	Vetor de coordenadas na escala macroscópica
V	Conjunto das variáveis termodinâmicas observáveis
\mathcal{V}	Conjunto das variáveis termodinâmicas internas
$oldsymbol{x}$	Vetor de coordenadas na escala microscópica
Ι	Subíndice utilizado para representar cada inclusão no RVE
Ω_1	Domínio de uma inclusão
Ω_M	Domínio da matriz
$ar{m{\epsilon}}_M^{\prime\prime}$	Tensor da perturbação média causada na matriz devido a presença das inclusões

$ar{m{\epsilon}}_1^{\prime\prime\prime}$	Tensor da perturbação média causada em uma inclusão devido a pre-
	sença das demais inclusões
$ar{oldsymbol{\epsilon}}^e$	Tensor de deformações médias elásticas
$ar{m{\xi}}$	Estado médio no RVE
${\cal P}$	Ponto ilustrativo no domínio Ω
$\Delta \bar{\epsilon}$	Tensor com um incremento de deformações médias
\bar{C}^{tan}	Operador tangente do modelo homogêneo equivalente
$\bar{\Omega}$	Domínio homogêneo equivalente
$\Delta \bar{\boldsymbol{a}}$	Tensor com um incremento de deformações afins (em inglês affines)
$ar{C}^{alg}$	Operador tangente algorítmico do modelo homogêneo equivalente
$ar{\sigma}$	Tensor de tensões médias
$ar\epsilon$	Tensor de deformações médias
v_1	Fração volumétrica de inclusões
v_M	Fração volumétrica da matriz
\mathcal{A}	Tensor de concentração das deformações do meio homogêneo à inclusão
\mathbb{B}	Tensor de concentração das deformações da matriz à inclusão
$oldsymbol{\epsilon}_1^e$	Tensor de deformações elásticas em uma inclusão
$\dot{ar{\sigma}}$	Derivada temporal do tensor de tensões médias
$\dot{ar{\epsilon}}$	Derivada temporal do tensor de deformações médias
\mathbb{C}^{tan}	Operador tangente do modelo constitutivo das fases
n	Subíndice utilizado para representar instantes em um domínio de tempo
	discreto (também utilizado para representar o número de elementos de
	um conjunto)
$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}$	Tensor com um incremento de tensões médias
$\Delta \bar{\varpi}$	Tensor com um incremento de tensões afins (em inglês affines)
Δt	Incremento de tempo
$\check{\Phi}$	Potencial de dissipação dual
\boldsymbol{A}	Conjunto das forças termodinâmcas
E_{∞}	Parâmetro de rigidez da mola isolada do modelo de viscoelasticidade
E	Parâmetro de rigidez da mola no braço de Maxwell do modelo de viscoe-
	lasticidade
η	Parâmetro de viscosidade aparente do modelo de viscoelasticidade
η_{vp}	Parâmetro de viscosidade aparente do modelo de viscoplasticidade
X	Encruamento cinemático (em inglês chamado backstress)
a	Parâmetro de rigidez da mola do modelo de encruamento cinemático
b	Parâmetro de viscosidade aparente do modelo de encruamento cinemá-
	tico
R	Encruamento isotrópico

 ϵ^{ve} Tensor de deformações viscoelásticas

- ϵ^{v} Tensor de deformações viscosas
- Conjunto das variáveis de estado (também utilizada para representar o conjunto das variáveis de estado médias)
- Subíndice utilizado para representar medidas na mola isolada do modelo de viscoelasticidade
- W Energia de deformação por unidade de volume
- Φ Potencial de dissipação
- C Tensor constitutivo constante
- ϵ^e Tensor de deformações elásticas
- VTensor de viscosidade aparente
- ψ Energia livre de Helmholtz
- t Tensor de tempos característicos de relaxação
- *G* Função de relaxação desviadora
- K Função de relaxação volumétrica
- g Tempo característico de relaxação desviadora
- k Tempo característico de relaxação volumétrica
- ϵ^{vp} Tensor de deformações viscoplásticas
- *α* Variável interna relativa ao encruamento cinemático
- Variável interna relativa ao encruamento isotrópico (deformação viscoplástica acumulada)
- F Tensor de tensões conjugado ao tensor de deformações viscoplásticas
- X Tensor de encruamento cinemático (em inglês chamado backstress)
- *L* Transformada de Legendre-Fenchel
- κ Parâmetro de rigidez do modelo de encruamento isotrópico
- *θ* Parâmetro de potência do modelo de encruamento isotrópico
- \mathcal{E}_{σ} Conjunto de tensões admissíveis
- *f* Função de escoamento
- *S* Parte desviadora do tensor de tensões
- $\hat{\sigma}$ Tensor de tensões fora da superfície de escoamento (em inglês chamado *overstress*)
- $\omega(f)$ Modelo constitutivo de viscoplasticidade
- dS Diferencial de área
- *v* Vetor normal a uma área qualquer (também utilizado como subíndice para representar medidas nesta área)
- $d\hat{S}$ Diferencial de área dos microvazios
- $d\tilde{S}$ Diferencial de área efetiva
- $ilde{\sigma}$ Tensor de tensões efetivas
- N Tensor da direção do fluxo viscoplástico
- $R_{\mathcal{P}}$ Tensor do resíduo da linearização do equilíbrio mecânico no ponto \mathcal{P}

Q	Conjunto de variáveis independentes do modelo constitutivo das fases
$ ilde{oldsymbol{\sigma}}^{trial}$	Tensor de tensões efetivas tentativa (em inglês trial)
g	Resíduo do modelo constitutivo das fases
$ ilde{P}$	Parcela volumétrica do tensor de tensões efetivas
J_2	Segundo invariante desviador do tensor de tensões
$ ilde{S}$	Parcela desviadora do tensor de tensões efetivas
\mathbb{C}^{alg}_{n+1}	Operador tangente algorítmico consistente
$\hat{\mathbb{C}}_{n+1}^{ve}$	Operador tangente algorítmico viscoelástico
$\tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{vep}$	Operador tangente algorítmico efetivo viscoelastico-plástico
h_{vep}	Denominador viscoelástico-plástico
h_{vevp}	Denominador viscoelástico-vicoplástico
\mathbb{S}	Tensor de Eshelby
$\tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{iso}$	Parcela isotrópica do operador tangente algorítmico regularizado
$\tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{reg,vevp}$	Operador tangente algorítmico efetivo regularizado viscoelastico- viscoplástico)
\mathbb{C}^{vepd}_{n+1}	Operador tangente algorítmico viscoelastico-plástico com dano
$\mathbb{C}_{n+1}^{reg,vevpd}$	Operador tangente algorítmico regularizado viscoelástico-viscoplástico com dano
\bar{C}_{n+1}^{iso}	Operador tangente algorítmico isotrópico homogeneizado (substitui \mathbb{C}_{n+1}^{alg} em toda a formulação)
Υ	Resíduo da homogeneização
tol	Tolerância ao erro do método de Newton
\mathbb{P}	Tensor de Hill

SUMÁRIO

1		19
1.1	OBJETIVOS	21
2	FUNDAMENTAÇÃO ΤΕÓRICA	22
2.1	BALANÇO MECÂNICO	23
2.2	ASPECTOS FENOMENOLÓGICOS	24
2.2.1	Fadiga	27
2.3	CONCEPÇÃO DO ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO	32
2.4	MEAN FIELD HOMOGENIZATION	35
2.4.1	Linear Comparison Composites	36
2.5	MODELO DAS FASES CONSTITUINTES	38
2.5.1	Viscoelasticidade linear tridimensional	40
2.5.2	Plasticidade	43
2.5.3	Viscoplasticidade	45
2.5.4	Dano dúctil	46
2.5.5	Potencial de dissipação	47
3	ALGORITMO E IMPLEMENTAÇÃO	50
3.1	FORMULAÇÃO INCREMENTAL NO DOMÍNIO DE UMA FASE	51
3.1.1	Aproximação numérica do sistema não linear	52
3.1.2	Parcela isotrópica do operador tangente regularizado	53
3.1.3	Operador tangente algorítmico	54
3.2	ALGORITMO MFH	55
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	57
4.1	VALIDAÇÃO	57
4.1.1	Viscoelasticidade	57
4.1.2	Elasto-viscoplasticidade	60
4.1.3	Elasto-viscoplasticidade e dano dúctil	62
4.1.4	Viscoelasticidade-viscoplasticidade	64
4.1.5	Viscoelasticidade-viscoplasticidade-dano	67
4.1.6	Multiescala	69
4.1.6.1	Elasto-viscoplasticidade	69
4.2	FADIGA NO HDPE	72
4.2.1	Comparação dos métodos de regularização	76
4.2.2	Efeito das características do carregamento	79
4.2.3	Análise de sensibilidade aos parâmetros da inclusão	82
5	CONCLUSÃO	87
	REFERÊNCIAS	90
	APÊNDICE A – DEFINIÇÕES TENSORIAIS	96

A.1	OPERAÇÕES
A.2	SUBESPAÇOS
A.3	PRINCIPAIS OPERADORES
A.4	DERIVADAS DIRECIONAIS
A.5	DERIVADAS UTILIZADAS
A.6	NOTAÇÃO MATRICIAL
	APÊNDICE B – DEDUÇÕES DA IMPLEMENTAÇÃO 102
B.1	LINEARIZAÇÃO DA TENSÃO VISCOELÁSTICA EFETIVA 102
B.2	GRADIENTES PARA O MÉTODO DE NEWTON
B.3	OPERADOR TANGENTE CONSISTENTE
B.4	OPERADOR TANGENTE ANALÍTICO
B.5	REGULARIZAÇÃO
B.6	TENSOR DE ESHELBY 111
	APÊNDICE C – MORFOLOGIA
C.1	MICROESTRUTURA DOS SEMICRISTALINOS
C.2	MICROMECANISMOS DE DEFORMAÇÃO DOS SEMICRISTALINOS 114
C.3	MICROMECANISMOS DE FRATURA NOS SEMICRISTALINOS 117
C.4	COMPORTAMENTO MECÂNICO MACROSCÓPICO
	APÊNDICE D – DEDUÇÕES MFH
D.1	SOLUÇÃO ESHELBY 123
D.2	SOLUÇÃO MORI-TANAKA
D.3	COMPÓSITO LINEAR
	APÊNDICE E – VISCOELASTICIDADE LINEAR UNIDIMENSIONAL 128
	ANEXO A – FLUXOGRAMA

1 INTRODUÇÃO

Os polímeros termoplásticos constituem a maior parcela de produtos plásticos consumidos na atualidade. Desde o desenvolvimento da tecnologia necessária para a produção em larga escala, do início do século XX à atualidade, a produção aumentou exponencialmente. A demanda por essa classe de material é impulsionada tanto por interesses econômicos da indústria de exploração e beneficiamento de commodities, quanto pela variabilidade das propriedades, as quais dependem do monômero ou conjunto de monômeros, polimerização, composição e processamento. Notoriamente, materiais como estes, versáteis, maleáveis, oriundos de diferentes subprodutos e com produção altamente rentável, assumem destaque no desenvolvimento tecnológico.

Devido a crescente tendência global da substituição de metais por polímeros, dentre as inúmeras aplicações, o uso de termoplásticos semicristalinos em componentes de próteses ortopédicas é objeto de estudo em pesquisas recentes. O Laboratório de Engenharia Biomecânica (LEBM) e o Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE), na Universidade Federal de Santa Catarina, promovem diferentes estudos de falhas em próteses ortopédicas com componentes termoplásticos, fundamentados em ensaios mecânicos e simulações numéricas. Na revisão elaborada por Teoh (2000), a fratura por fadiga e desgaste é identificada como principal modo de falha para materiais metálicos, cerâmicos e poliméricos, em diferentes aplicações ortopédicas.

Uma dificuldade da abordagem experimental para analisar o comportamento cíclico é o tempo de observação dos ensaios, em vista da durabilidade das próteses envolver um número elevado de ciclos. No mesmo contexto, muitos testes de fadiga acelerados são incapazes de predizer a falha *in vivo* (TEOH, 2000). No estudo desenvolvido por Carvalho *et al.* (2016), foram realizados diferentes ensaios com controle de tensão oscilatória no Polietileno de Ultra-Alto Peso Molecular, em inglês *Ultra-High Molecular Weight Polyethylene* (UHMWPE). O autor identificou o fenômeno de *rat-chetting* e o decrescimento da rigidez do material, no entanto o surgimento de trinca macroscópica ficou evidente apenas no ensaio com maior solicitação.

Em condições de temperatura e solicitação oscilatória específicas, a fratura de um material ocorre de forma repentina, sem exteriorizar macroscopicamente alguma alteração no comportamento mecânico, como é o caso do copo acetabular de UHMWPE, em próteses de quadril (TEOH, 2000). Nessas circunstâncias, o comportamento mecânico é especulado localmente por técnicas de micrografia aplicadas na superfície de falha de corpos de prova. Evidências experimentais corroboram com a Teoria de Griffith para estabilidade de trincas. A nucleação inicia em defeitos aleatórios na microestrutura, oriundos do processamento, tais como microvazios e particulados. Todavia, essa teoria considera o defeito estático até o início de crescimento da trinca, mas é incapaz de descrever o processo precedente, a nucleação e crescimento de microvazios (MULLA et al., 2018).

A forma mais usual de predição da falha por fadiga consiste em utilizar curvas tensão, ou deformação, versus vida, obtidas por ensaios mecânicos de corpos de prova e comparar essas curvas, devidamente modificadas por fatores de atenuação de resistência, com a distribuição de tensões, na peça de interesse, durante um ciclo de carga (DOWLING, 2012). Entretanto, essa metodologia restringe a análise às condições específicas de solicitação do ensaio e dificilmente representa as condições complexas de solicitação no meio hostil do corpo (TEOH, 2000).

Alternativamente, modelos fenomenológicos são propostos para predizer a falha com base na deformação plástica do material. Os materias metálicos usualmente são representados pelo modelo de Coffin-Manson. Para os polímeros ainda não existe um modelo consolidado, porém o modelo de Janssen, Govaert e Meijer (2008) apresenta bons resultados para os termoplásticos analisados. Recentemente, Gao *et al.* (2019) formularam um modelo para a vida residual de fadiga baseado na densidade de *craze*, fundado em observações experimentais de ensaios sob tração oscilatória no Polimetilmetacrilato (PMMA). Todavia, essas formulações analíticas não são preditivas em condições de solicitação não proporcional.

Não há muitos estudos sobre o efeito das solicitações não proporcionais e multiaxiais no fenômeno de fadiga, sobretudo em materiais termoplásticos, conforme Amjadi e Fatemi (2020). Neste os autores estudaram modelos analíticos aplicados a solicitações multiaxiais. Os trabalhos de Berrehili, Nadot *et al.* (2010) e Berrehili, Castagnet e Nadot (2010) propõem um critério multiaxial de falha para fadiga em termoplásticos, com base na tensão equivalente de von Mises, mas não incorporam o efeito da tensão média. Não obstante, os estudos nesse contexto, geralmente, são direcionados a simulações numéricas. Nessa área, o GRANTE desenvolveu no trabalho de Castro e Fancello (2017) o estudo de um modelo constitutivo com dano dúctil e hidrolítico para a predição da falha em polímeros bioabsorvíveis. Posteriormente, foi proposta uma adaptação em Fuck *et al.* (2017), com a adição do modelo visco-hiperelástico de Farias, Stainier e Fancello (2017). Contudo, esses modelos não são capazes de predizer a fratura frágil do material.

Isto posto, no desenvolvimento deste trabalho são revisados aspectos teóricos do comportamento mecânico dos termoplásticos nas escalas microscópica e macroscópica para compreender as proposições e limitações dos modelos constitutivos encontrados na literatura, principalmente, o modelo de Krairi, Doghri e Robert (2016). Posteriormente, são revisados a formulação e conceitos desenvolvidos pelos autores e trabalhos correlatos. A sequência lógica da implementação é, por fim, apresentada com as equações e métodos utilizados. No decorrer do estudo, duas metodologias são formuladas para solução do modelo. São apresentados resultados de fadiga, sob diferentes condições de contorno, e uma análise de sensibilidade aos parâmetros da inclusão para o polímero Polietileno de Alta densidade, em inglês *High Density Polyethylene* (HDPE).

1.1 OBJETIVOS

Com base nas observações, previamente contextualizadas, o objetivo principal deste trabalho consiste em estudar e avaliar o processo de danificação por carregamentos cíclicos em materiais termoplásticos e estimar a vida de fadiga, a partir da concepção multiescala proposta por Krairi, Doghri e Robert (2016), além de outros trabalhos correlatos. Para tal, são elencados os objetivos específicos abaixo:

- 1. Revisão na literatura da falha por fadiga mecânica nos termoplásticos;
- 2. Revisão na literatura de abordagens multiescala para análise de fadiga em materiais termoplásticos;
- Estudo e implementação do modelo desenvolvido por Krairi, Doghri e Robert (2016);
- 4. Análise de sensibilidade do modelo;
- 5. Discutir a aplicabilidade do modelo e propor alternativas para continuação do estudo;

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Para identificar o mecanismo de dano nos termoplásticos semicristalinos, a sua microestrura é considerada fundamental, pois a deformação é um fenômeno complexo de interação entre as fases amorfa e cristalina (GAO *et al.*, 2019). Portanto, no Apêndice C consta uma breve revisão da morfologia, micromecanismos e microestrutura dos semicristalinos, para associá-los a aspectos do comportamento mecânico cíclico e do fenômeno de fadiga. Na Seção 2.2, são revisadas a fluência cíclica e a influência da frequência de solicitação na vida de fadiga, comumente, observado em materiais com comportamento víscido.

Nos termoplásticos, é identificada a nucleação de vazios em regiões com menor densidade de emaranhamento. Em materiais semicristalinos, essas regiões estão nas fronteiras interlamelares ou interesferulitos (BESSELL; HULL; SHORTALL, 1975; BRETZ; HERTZBERG; MANSON, 1981). Com a finalidade de incorporar este conceito a simulações da falha macroscópica, são propostos modelos constitutivos com abordagem multiescala. Neste trabalho, o termo multiescala é aplicado à escala dimensional, definido como a característica de associar mecanismos microscópicos à fenômenos macroscópicos, por meio de uma representação mesoscópica, ou intermediária, chamada de Elemento de Volume Representativo (EVR), em inglês *Representative Volume Element* (RVE). Com essa abordagem são encontradas diversas proposições de micromecanismos para descrever o fenômeno local de nucleação e métodos distintos para incorporá-los na simulação macroscópica.

Recentemente, a comunidade acadêmica desenvolve modelos multiescala para simular a adesão na superfícies de trincas e fronteira de heterogeneidades. Dentre eles, são destacados os Modelos de Zonas Coesivas, em inglês *Cohesive Zone Models* (CZMs) e modelos baseados em sistemas discretos. Em Gentieu *et al.* (2019), os autores adaptaram a solução de Mori-Tanaka (MURA, 2013) para acrescentar o efeito de interfaces imperfeitas, considerando a inclusão separada da matriz por um filme fino de outro material. Na percepção de Mulla *et al.* (2018), as superfícies são compostas por um conjunto finito de partículas e cada partícula de uma superfície interage, atrai ou repele, uma correspondente na outra superfície. Outra concepção é elaborada no trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016), no qual os autores definem regiões microscópicas com um modelo de dano dúctil para representar a nucleação e crescimento de microvazios.

No fenômeno de falha frágil, devido ao alto número de ciclos, a escolha da abordagem multiescala influenciará expressivamente no tempo de processamento da simulação. Nesse contexto, os métodos de Homogeneização de Campo Médio, em inglês *Mean-Field Homogenization* (MFH) são mais eficientes em relação aos Métodos de Campo Completo, em inglês *Full-Field Methods* (FFM), pois em circunstân-

cias usuais apresenta solução semi-analítica. Essa metodologia é aplicável quando o fenômeno permite o resumo da microestrutura a um RVE heterogêneo, com comportamento uniforme elástico em cada material e inclusões, geometricamente, específicas. A dedução concisa do método aplicado a materiais lineares é apresentada no Apêndice D. Existem diferentes abordagens para aplicar a teoria de MFH em materiais com comportamento mecânico não linear.

Alternativas são propostas com o conceito de Compósitos de Comparação Linear, em inglês *Linear Comparison Composites* (LCC), no qual a relação constitutiva macroscópica e em cada fase são linearizadas (MASSON *et al.*, 2000). Para materiais com efeito víscido, usualmente, a formulação é deduzida no domínio de Laplace-Carson, no qual a relação constitutiva é expressa por uma função linear e depende de técnicas numéricas para mapear o resultado no domínio do tempo (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010). Contudo, os modelos linearizados são restritos a solicitação monotônica e proporcional, do contrário é necessário um método de linearização incremental (MILED; DOGHRI; BRASSART *et al.*, 2013) e as propriedades efetivas do RVE são então obtidas em função dos operadores tangentes ou secantes, em cada incremento de tempo (CASTANEDA; SUQUET, 1997).

No estudo de Krairi, Doghri e Robert (2016) foi aplicada a formulação incremental elaborada por Doghri, Adam e Bilger (2010), revisada na Seção 2.4, com o intuito de diminuir o custo computacional da homogeneização de materiais não lineares e dependentes da taxa. No modelo material de Krairi, Doghri e Robert (2016), o processo de nucleação é associado ao mesmo modelo de dano dúctil estudado em trabalhos anteriores do GRANTE (CASTRO; FANCELLO, 2017; FUCK *et al.*, 2017). Essas características apresentam menor custo computacional e são semelhantes as tecnologias desenvolvidas pelo GRANTE, quando comparado a outros modelos mais recentes, como os CZMs citados. O RVE proposto pelos autores é descrito na Seção 2.3.

As fases constituintes do RVE foram tratadas com um modelo viscoelásticoviscoplástico e dano dúctil, termodinamicamente consistente, deduzido a partir de proposições energéticas e potenciais de dissipação (KRAIRI; DOGHRI, 2014). Neste trabalho, é proposta uma interpretação reológica unidimensional do modelo das fases, associado ao modelo de viscoelasticidade linear, revisado no Apêndice E, e às proposições energéticas de Krairi e Doghri (2014), conforme a Seção 2.5. Detalhes da implementação serão discutidos no próximo capítulo.

2.1 BALANÇO MECÂNICO

Na mecânica dos sólidos deformáveis, a Equação (2.1) define o equilíbrio de um corpo ocupando o aberto Ω com contorno Γ , a qualquer instante de tempo t. A Equação (2.1a) expressa o balanço mecânico de todo ponto em Ω , na qual o tensor simétrico σ representa o tensor de tensões de Cauchy e b uma força de corpo por unidade de volume. A condição de Neumann está expressa na Equação (2.1b), na parcela de contorno Γ_t , com força de superfície *t* conhecida.

$$\int div(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{b} = 0, \quad em \ \Omega \tag{2.1a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{t}, \qquad em \ \Gamma_{\boldsymbol{t}} \tag{2.1b}$$

$$u = w, \qquad em \ \Gamma_w$$
 (2.1c)

A condição de Dirichlet da Equação (2.1c), impõe o deslocamento w, na parte do contorno Γ_w . Restrito a cinemática infinitesimal, a relação do deslocamento u com a deformação é expressa pela definição do tensor simétrico de deformações ϵ , conforme a Equação (2.2). As medidas unidimensionais de tensão σ e deformação ϵ , utilizadas para apresentar alguns aspectos teóricos, representam uma componente destes tensores.

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T)$$
(2.2)

2.2 ASPECTOS FENOMENOLÓGICOS

Considere o caso de uma solicitação uniaxial de tensões, Figura 2.1, com formato sinusoidal no tempo t, tal como representa a Equação (2.3). Esta função $\sigma(t)$ é decomposta em um valor alternado σ_a , um valor médio σ_m e um período T_s . A denominada tensão média σ_m e alternada σ_a , são dependentes dos valores máximos e mínimos de $\sigma(t)$. Também é frequente definir a razão da solicitação R_s , como o quociente entre σ_{min} e σ_{max} , e a frequência da solicitação f_s , como a inversa do período T_s .

$$\int \sigma(t) = \sigma_a \sin\left(\frac{2\pi t}{T_s}\right) + \sigma_m \qquad \qquad \sigma_m = \frac{\sigma_{max} + \sigma_{min}}{2} \qquad (2.3a)$$

$$\begin{cases} R_s = \frac{\sigma_{min}}{\sigma_{max}} \tag{2.3b} \end{cases}$$

$$\int f_s = \frac{1}{T_s}$$
(2.3c)

Como resultado da solicitação cíclica, a curva tensão versus deformação assume uma geometria, em alguns casos, fechada, chamada laço de histerese. A área no interior do laço de histerese representa a dissipação, ou perda, de energia mecânica por unidade de volume, durante o período T_s . Em qualquer instante t, parte do trabalho é armazenada como energia de deformação, proporcional ao módulo de armazenamento E', e parte é dissipada, proporcional ao módulo de perda E''. Uma interpretação gráfica de E' está ilustrada na Figura 2.2, como a reta secante entre os extremos do laço (DOWLING, 2012).





Fonte: Adaptado de Dowling (2012).

Durante a solicitação, em materiais dúcteis, o laço de histerese pode apresentar encruamento e amolecimento. Contudo, esses fenômenos ocorrem em uma pequena parcela da vida de fadiga, chamada de período transitório. Por fim, o laço converge para um formato de equilíbrio, ou estável, e o efeito da amplitude de solicitação no laço estabilizado é analisado por meio da curva tensão versus deformação cíclica, composta pelos estados estabilizados $\xi(\sigma_{max,i}, \epsilon_{max,i})$, para cada bloco de solicitação *i* (STEPHENS *et al.*, 2000; ROSA, 2002).



Figura 2.2 – Curva tensão versus deformação cíclica.

Fonte: Adaptado de Stephens et al. (2000).

Efeitos de encruamento e amolecimento, pela teoria da plasticidade, estão associados a alterações na tensão limite de escoamento σ_y . Durante uma solicitação cíclica, a tensão σ_y pode aumentar ou diminuir de forma acumulativa. Por simplicidade, este fenômeno é simulado por modelos de encruamento isotrópico. Entretanto, em alguns materiais, é evidente o Efeito de Baushinger, no qual a tensão limiar de escoamento σ_{y0} , após a reversão, é diferente da tensão de escoamento σ_y . O Efeito de Baushinger é, usualmente, representado por modelos de encruamento cinemático (LEMAITRE; CHABOCHE, 1994). Efeitos semelhantes são evidentes quando há alterações relevantes no histórico de solicitação (HOSFORD, 2010).

A depender das condições de solicitação e temperatura, os materiais termoplásticos demonstram um comportamento mecânico dependente do histórico da solicitação e independe do histórico da velocidade. Esse comportamento, entretanto, é evidente em situações com solicitação oscilatória e $R_s < 0$ ou não proporcional. Para o HDPE essas observações são relatadas no estudo de Zhang e Moore (1997). Modelos incrementais e com encruamento cinemático são propostos para predizer esse fenômeno, com base no conceito de *backstress* (LEMAITRE; CHABOCHE, 1994; DOGHRI, 2013).



σ

 σ



Fonte: Adaptado de Lemaitre e Chaboche (1994).

Estável

Em ensaios cíclicos com dissipação mecânica, outros fenômenos também são identificados, conforme a Figura 2.4, como o *ratchetting* e *shakedown* (MOTTA; REIS; COSTA MATTOS, 2019). Ambos são casos de ensaios cíclicos com controle de tensão, nos quais é observado um aumento progressivo da deformação inelástica sem estabilização (ratchetting) e com estabilização (shakedown) (LEMAITRE; CHABOCHE,

1994).



Figura 2.4 – Evolução das deformações residuais.

Fonte: Adaptado de Fouvry, Kapsa e Vincent (2001).

Conforme Lemaitre e Chaboche (1994), o estado de *ratchetting* é caracterizado pelo aumento da deformação inelástica, mesmo após o transiente cíclico. No *shake-down*, após o período transiente, a deformação inelástica não evolui e, em alguns casos, a dissipação é interrompida, com a convergência do laço de histerese para uma reta, fenômeno conhecido como *elastic shakedown* (GHADIMI; NIKRAZ; ROSANO, 2016).

2.2.1 Fadiga

Em alguns materiais, como metais e polímeros, quando submetidos a solicitações cíclicas, com amplitude abaixo da tensão limite de resistência monotônica, ocorre falha devido ao fenômeno de fadiga. Esse modo de falha está intrinsecamente relacionado ao desenvolvimento de deformações plásticas localizadas, as quais ocasionam danos na escala da microstrutura do material e, após sua acumulação e coalescência, provocam falhas macroscópicas (STEPHENS *et al.*, 2000).

Nos metais, o processo de fadiga é usualmente separado em três estágios. O primeiro abrange a etapa de nucleação dos microvazios, com origem no acúmulo de deformações plásticas localizadas na microestrutura. A acumulação desses microvazios alcança uma magnitude, na qual são identificadas trincas, ou fraturas, cujos comprimentos aumentam de forma estável por um período chamado de segundo estágio. Por último, no estágio três, o tamanho da trinca atinge um valor crítico, acima do qual a trinca propaga de forma instável e resulta na fratura do corpo. (ROSA, 2002; HOSFORD, 2010; DOWLING, 2012). Na escala macroscópica, a falha é caracterizada pelo surgimento de trincas macroscópicas ou pela ruptura do material. Caso a amplitude da solicitação seja inferior ao limite de escoamento do material, a fratura ocorre, geralmente, de forma frágil, sem a percepção de um período estável de propagação de trinca, a qual culmina em regiões com acúmulo de tensões na interface de heterogeneidades presentes no interior do corpo (ROSA, 2002; HOSFORD, 2010; DOWLING, 2012).

Em outras circunstâncias, caso o comportamento macroscópico expresse ductilidade, conforme Rosa (2002), a trinca culmina no extremo de defeitos superficiais, acompanhada por um escoamento generalizado na superfície do corpo e o período de propagação corresponde a uma parcela significativa dentre os três estágios do processo de fadiga. Nestes casos, os projetos toleram um comprimento de trinca baseado em modelos preditivos da mecânica da fratura clássica (HOSFORD, 2010; DOWLING, 2012). Entretanto, em diversas circunstâncias, o período de nucleação corresponde a parcela mais longa da vida útil do componente (ROSA, 2002).







A abordagem clássica para a previsão da falha consiste em realizar ensaios mecânicos com ação de carregamentos cíclicos tanto em corpos de prova, quanto nas próprias peças, ou dispositivos analisados. O número de ciclos até a falha do objeto da análise define a vida de fadiga *N*. Inúmeros fatores influenciam na vida de fadiga dos materiais, como a composição microestrutural, acabamento superficial, geometria da peça, amplitude da solicitação, tensão média da oscilação, frequência e temperatura (ROSA, 2002).

Caso o ensaio seja realizado com controle de tensão, os dados resultam em uma curva tensão versus vida, chamada de curva de Wöhler. No caso de ensaios realizados em corpos de prova, posteriormente, os resultados obtidos são ajustados para a aplicação em componentes de projeto, pela incorporação de fatores redutores da resistência a fadiga, conforme a Figura 2.5. Em alguns materiais, o desenvolvimento da curva de Wöhler é assintótico em um valor de tensão, denominado limite de fadiga σ_f , no qual a vida N tende ao infinito e, para valores de tensão próximos a este, a vida é dita infinita (ROSA, 2002).

Em uma abordagem alternativa, o registro é realizado mediante curvas de deformação versus vida. Nessa metodologia, caso seja observado ductilidade, a deformação é decomposta em uma componente elástica e outra plástica. Assim, a vida de fadiga depende das amplitudes elástica e plástica, por Coffin-Manson, expressas por funções potência. Para solicitações maiores, a parcela plástica domina e a curva deformação versus vida decai conforme uma taxa associada ao comportamento plástico. Em contrapartida, para amplitudes de solicitação menores, a parcela elástica prevalece e o decaimento da curva de fadiga é governado pela taxa da assintota elástica.

A Figura 2.6 representa uma curva de fadiga, em termos da vida de fadiga N (número de ciclos até a falha) versus a deformação máxima ϵ_{max} . Em diferentes segmentos da curva são associados laços de histerese esquemáticos, demonstrando a dependência de ϵ na dissipação mecânica. O ponto de intersecção entre as retas da Figura 2.6 define a denominada transição N_{tr} da fadiga de baixo ciclo para alto ciclo. Esta metodologia é amplamente aplicada para estimar a vida de fadiga nos metais, porém não considera o histórico da solicitação, portanto não prevê condições complexas de solicitação (ROSA, 2002; DOWLING, 2012).

Sob solicitação multiaxial, usualmente, o critério de falha é substituído por uma medida equivalente do estado de tensões ou deformações. Tal abordagem, entretanto, é limitada à solicitações proporcionais e apresenta dificuldades para incorporar o efeito da tensão média, como comenta Amjadi e Fatemi (2020) no seu estudo com materiais termoplásticos. No trabalho de Berrehili, Nadot *et al.* (2010), foi proposto um critério de falha para solicitações com R = -1, derivado da medida equivalente de von Mises. Embora os autores discutam a possibilidade de aplicar o critério a outras condições de tensão média, os resultados e conclusões são restritos a R = -1 e R = 0.

A maior dificuldade de aplicação dessas aproximações é a restrição às condições específicas do ensaio para obtenção dos valores de tensão ou deformação de falha. De fato, sob condições complexas de carregamento, geralmente, a estimativa da vida de fadiga exige uma análise mais sofisticada do histórico da solicitação, com base na teoria da plasticidade incremental. Assim, a falha progressiva do material é simulada e avaliada, tanto no estágio de nucleação, quanto na propagação estável da trinca (DOWLING, 2012).

Semelhante nos polímeros, uma trinca macroscópica nos metais surge com a coalescência de microvazios, após o processo de nucleação. Neste contexto, o sur-



Figura 2.6 – Análise de fadiga com base na curva $\epsilon - N$.

Fonte: (ROSA, 2002).

gimento da trinca é associado a uma densidade crítica de vazios na microestrutura, contabilizada por uma variável de dano acumulado ao longo do histórico da solicitação. Então, a predição da falha consiste em analisar a evolução do dano na microestrura e posterior crescimento de trinca (DOGHRI, 2013). Embora sejam diferentes os micro-mecanismos descritos nesse processo para os polímeros e metais, o conceito geral tem a similaridade da presença de deformações inelásticas.

Através da análise do modelo constitutivo aplicado para representar um ponto material, o dano, geralmente, é caracterizado por alterações na inclinação do laço de histerese, quando este ponto está submetido a solicitações oscilatórias. Entretanto, se um ensaio mecânico é realizado sobre um corpo de prova, necessariamente macroscópico, o processo de dano é um fenômeno local, não necessariamente mas frequentemente, imperceptível para os instrumentos de ensaio (LEMAITRE; DESMORAT, 2005).

A proposição do dano surgiu no estudo de Kachanov (1958), pela definição de uma variável de dano contínuo *D* para representar a deterioração no contorno dos grãos, como relata o próprio autor em Kachanov (1994). Posteriormente, a teoria do dano foi combinada ao conceito de tensão efetiva, definida em uma "pseudoconfiguração" de referência. Um modelo de dano usual é derivado da proposição de proporcionalidade direta do dano, causado pela ciclagem, com o número de ciclos até a falha, conhecido como modelo de Palmgren-Miner (DOGHRI, 2013). A lei de potência proposta por Lemaitre-Chaboche é uma alternativa ao modelo linear (LEMAITRE; DES- MORAT, 2005). A formalização dos conceitos e equações deste último será abordada na Seção 2.5.4.

Nos polímeros semicristalinos, a deformação localizada apresenta um papel semelhante ao observado nos metais sob o fenômeno de fadiga. Todavia, há distinção nos micromecanimos de deformação, como apresentado na Seção C.2. Enquanto nos metais o primeiro estágio está associado a formação de bandas de cisalhamento e movimentação de discordâncias, nos polímeros a nucleação é relacionada apenas ao mecanismo de *craze* (HOSFORD, 2010; MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012). No Apêndice C, foi elaborada uma breve revisão do fenômeno de *crazing*.

Devido ao *craze*, a propagação de trinca nos semicristalinos ocorre de forma descontínua. No entanto, conforme Janssen, Kanter *et al.* (2008), a vida de fadiga nos polímeros é, predominantemente, representada pelo estágio um, envolvendo aproximadamente 95% da vida total em fadiga do componente. Nos materiais do seu estudo, Polipropileno, em inglês *Polypropylene* (PP) e PMMA, o resultado ficou acima de 99%. Contudo, esse modo de falha frágil depende do grau de cristalinidade do material, quanto mais cristalino, maior a densidade de emaranhamento e o material tende a fraturar sem evidência do estágio dois, como concluiu o trabalho de Bessell, Hull e Shortall (1975).

Nos termoplásticos, acima da temperatura de transição vítrea T_g , o estágio um desenvolve uma dependência do tempo de aplicação da carga. Em uma faixa de tensões alternantes específica, com o aumento da taxa de solicitação, ou frequência f_s , a vida de fadiga tende a aumentar, esse efeito foi observado para o Polieteretercetona, em inglês *Polyetheretherketone* (PEEK) no trabalho de Shrestha, Simsiriwong e Shamsaei (2016). Em contrapartida, sob alta frequência de solicitação é identificada a geração de calor no material. Todavia, a evidência desse efeito dependerá da amplitude e velocidade da solicitação, conforme Janssen, Kanter *et al.* (2008).

Em alguns polímeros, como o HDPE, a falha térmica no fenômeno de fadiga ocorre sob alta tensão, ou deformação, ou alta frequência. A natureza térmica da falha é indicada pelo aumento da dissipação, em cada ciclo, causada pelo amolecimento térmico do material (JANSSEN; KANTER *et al.*, 2008). No trabalho de Mortazavian *et al.* (2015) foi realizado um estudo do efeito da frequência f_s na geração de calor e na vida de fadiga dos termoplásticos não reforçados e com fibras de vidro. Os autores identificaram um valor crítico de frequência para o aumento instável da temperatura, acima do qual a vida de fadiga diminui. Portanto, há uma faixa de frequência na qual a geração de calor é desprezível.

Conforme Janssen, Kanter *et al.* (2008), sob solicitação com baixa frequência e, ou, baixa amplitude de tensão, a vida de fadiga é elevada e o material falha de forma frágil, com baixa dissipação, isso indica baixa significância do efeito da solicitação na temperatura do corpo. Segundo os autores, este comportamento é identificado no re-

gime de alto ciclo, denominado como domínio dominado mecanicamente. As análises realizadas no Capítulo 4 estão circunscritas neste domínio, pois não incorporam o efeito térmico, bem como a ductilidade macroscópica, evidente sob altas amplitudes de solicitação.

2.3 CONCEPÇÃO DO ELEMENTO DE VOLUME REPRESENTATIVO

A estrutura mesoscópica do material, escala intermediária entre a microscópica e macroscópica, fora definida com base na suposição do dano ocorrer em zonas localizadas. Os autores Krairi, Doghri e Robert (2016) supõem a existência de pontos fracos acumuladores de dano na microestrutura do material. Essas regiões microscópicas são modeladas com geometria esférica ou elíptica e representam uma pequena fração do RVE, a fim de não influenciar expressivamente o comportamento macroscópico do material. Essa concepção permite simular a falha progressiva, independente da observação macroscópica das perturbações. Este é o caso típico da fadiga de alto ciclo, no qual não há percepção macroscópica do processo de danificação antes da propagação de trinca.

Como revisado na Seção C.3, o mecanismo de nucleação inicia e ocorre simultaneamente com a concentração de deformações inelásticas em regiões com menor densidade de emaranhamento. Para simular esse fenômeno o dano nos pontos fracos foi formulado conforme um modelo de dano dúctil e a influência da taxa de solicitação, ou frequência, foi incorporada pela relação constitutiva de viscoelasticidade acoplada ao modelo de viscoplasticidade (KRAIRI; DOGHRI, 2014). A Figura 2.7 ilustra as suposições do RVE desenvolvido por Krairi, Doghri e Robert (2016) para aplicar o método de homogeneização elaborado por Doghri, Adam e Bilger (2010).



Figura 2.7 – Interpretação ilustrativa do RVE.

Fonte: Autor, com base em Miled (2011).

A matriz é definida com propriedades iguais às observadas na escala macroscópica, já os pontos fracos exigem conhecimento local, ou exploração, em alguns casos, experimentalmente, via micrografia, técnicas de nanoidentação, dentre outras. No entanto, estas metodologias exigem ensaios elaborados e de difícil execução. Uma abordagem alternativa consiste em determinar os parâmetros dos modelos de representação por métodos de otimização, a fim de ajustar as curvas resultantes das simulações aos ensaios experimentais. Em Krairi, Doghri e Robert (2016), os parâmetros foram obtidos pelo ajuste do modelo às curvas experimentais do comportamento cíclico, sob tração.

Na Figura 2.7, um corpo com domínio homogêneo Ω , apresenta um estado termodinâmico $\xi(\mathcal{X}, t)$. Admite-se que esse estado possa ser representado por um conjunto de variáveis observáveis V e internas \mathcal{V} . Uma vizinhança suficientemente pequena próxima a um ponto \mathcal{X} do domínio Ω é idealizada como um RVE. No trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016), o RVE é idealizado com uma microestrutura similar a um material compósito com inclusões particuladas, aleatoriamente distribuídas, representantes dos defeitos na microestrutura. A geometria e orientação das partículas são distintas, também os estados na matriz $\xi_M(x,t)$ e inclusões $\xi_I(x,t)$, para cada coordenada x no RVE.

Para simular o RVE com os estados e campos não uniformes, usualmente, são utilizados Métodos de Elementos Finitos Multiescala, em inglês *Multiscale Finite Element Methods* (MsFEm) (EFENDIEV; HOU, 2009), nos quais o campo de deformações é aproximado em cada coordenada x da microestrutura, metodologia integrada a categoria dos FFM. Uma idealização do RVE é determinada por Krairi, Doghri e Robert (2016), com todas as partículas definidas pelo mesmo domínio Ω_1 e com mesma orientação, distribuídas aleatoriamente na matriz Ω_M . Neste contexto, a interação de cada inclusão com a matriz pode ser interpretada como uma partícula isolada em um meio infinito. As hipóteses estabelecidas nessa idealização permitem o uso da solução analítica de Eshelby, revisada na Seção D.1.

A partir da teoria de Eshelby são propostas diferentes derivações para acrescentar o efeito da presença das demais inclusões. Dentre elas, na proposição de Krairi, Doghri e Robert (2016), foi implementada a solução de Mori-Tanaka. Neste método é definida uma perturbação na matriz $\bar{\epsilon}''_M$, devido a presença das inclusões, e uma perturbação em cada inclusão $\bar{\epsilon}'''_1$, causada pela presença das demais inclusões. Com distribuição aleatória $\bar{\epsilon}''_M = \bar{\epsilon}'''_1$ (MILED, 2011). A partir destes conceitos são definidos os campos médios $\bar{\epsilon}^e_i$, de cada fase *i*, em consonância com o estado médio $\bar{\xi}(\mathcal{X},t)$ no RVE, característico da deformação total do material no ponto macroscópico $\mathcal{P}(\mathcal{X},t)$ (MURA, 2013). Detalhes da aplicação do Mori-Tanaka constam na Seção D.2.

As teorias de Eshelby e Mori-Tanaka foram originalmente desenvolvidas para compósitos com comportamento elástico e linear nas fases, matriz e inclusões, con-

forme a Seção D.3. Para estender esses conceitos aos materiais não lineares, a relação constitutiva é linearizada no tempo e o processo de homogeneização é realizado em cada passo de tempo. Esta abordagem, a partir de um incremento de deformação médio $\Delta \bar{\epsilon}$ conhecido, permite determinar os incrementos médios dos demais campos atuando no compósito. Na formulação incremental, as relações constitutivas são linearizadas, portanto o método MFH consiste em calcular, para cada passo de tempo, um tensor constitutivo tangente \bar{C}^{tan} , capaz de representar o domínio homogêneo equivalente $\bar{\Omega}$ do RVE.



Figura 2.8 – Conceito LCC aplicado à solução de Mori-Tanaka.

Fonte: Autor, com base em Miled (2011).

Nos materiais cujo comportamento depende da taxa de deformação, essa metodologia não é aplicável diretamente, pois a relação constitutiva incremental contém um termo adicional $\Delta \bar{a}$, função do estado anterior. Contudo, em Krairi, Doghri e Robert (2016), este termo, considerado afim, em inglês *affine*, é relacionado a expansão térmica pela analogia da equação constitutiva incremental com o modelo de termoelasticidade linear. Assim, a teoria existente de MFH para termoelásticos é aplicada à viscoelasticidade e viscoplasticidade, com a mesma solução de Mori-Tanaka desenvolvida para compósitos elásticos (PIERARD; FRIEBEL; DOGHRI, 2004). Na Figura 2.8 é proposta uma representação do processo de homogeneização, com um esquema do fluxo de conceitos introduzidos. A descrição detalhada é apresentada na Seção 2.4 e as deduções no Apêndice D.

Como consequência do modelo de viscoplasticidade aplicado às fases, não é possível determinar um tensor constitutivo tangente único \bar{C}^{tan} . Alternativamente, o operador algorítmico \bar{C}^{alg} é utilizado para representar as propriedades equivalentes do RVE, entretanto, resulta em duas complicações. Pela falta de isotropia, o tensor \bar{C}^{alg} pode levar a resultados superestimados. A outra dificuldade provém de uma incosistência numérica decorrente do algoritmo de integração. No trabalho de Doghri, Adam e Bilger (2010), os autores propõem um operador tangente algorítmico \bar{C}^{alg} para substituir \bar{C}^{tan} na formulação LCC. Uma metodologia semelhante é desenvolvida em Krairi, Doghri e Robert (2016) e sua aplicação será explorada na Seção 3.1.2, com base nas deduções do Apêndice B.

2.4 MEAN FIELD HOMOGENIZATION

O conceito base nos processos de homogeneização está na relação entre os campos de deformação $\epsilon(\mathcal{X}, \mathbf{x}, t)$ e tensão $\sigma(\mathcal{X}, \mathbf{x}, t)$, na escala da microestrutura, com os tensores homogeneizados na macroescala, $\epsilon(\mathcal{X}, t)$ e $\sigma(\mathcal{X}, t)$. Esta relação é expressa pelas médias volumétricas $\bar{\sigma}$ e $\bar{\epsilon}$ dos respectivos campos, conforme a Equação (2.4) e Equação (2.5).

$$\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\mathcal{X}},t) = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega_{\boldsymbol{P}}} \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\mathcal{X}},\boldsymbol{x},t) dV$$
(2.4)

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mathcal{X}},t) = \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega_{\boldsymbol{P}}} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mathcal{X}},\boldsymbol{x},t) dV$$
(2.5)

A abordagem de MFH admite a hipótese de um RVE constituído por uma matriz Ω_M e fases particuladas dispersas Ω_i , cada uma delas, com partículas igualmente orientadas e propriedades uniformes. Também é admitida a representação dos campos de deformação e tensão, em cada fase, por um respectivo tensor de componentes médias. Na mesma hipótese, para uma composição com duas fases $i = \{M, 1\}$ uniformes, as equações anteriores são reformuladas em termos da fração volumétrica de inclusões v_1 e da matriz $v_M = (1 - v_1)$, conforme as equações abaixo.

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}} = v_1 \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 + (1 - v_1) \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M \tag{2.6}$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = v_1 \bar{\boldsymbol{\sigma}}_1 + (1 - v_1) \bar{\boldsymbol{\sigma}}_M \tag{2.7}$$

Na Equação (2.6) e Equação (2.7), como adiante, os subíndices 1 e M indicam os tensores das médias nas inclusões e na matriz, respectivamente. A característica
fundamental do método MFH reside na presunção da existência dos tensores concentradores de deformação $A \in \mathbb{B}$. O operador tensorial de quarta ordem A relaciona as deformações médias no domínio homogêneo equivalente com a média na fase das inclusões. Analogamente, o tensor \mathbb{B} relaciona a média na matriz com a média na fase das inclusões, conforme a Equação (2.8).

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 = \boldsymbol{A} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \boldsymbol{\mathbb{B}} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M \tag{2.8}$$

No método MFH, os tensores de concentração representam as incógnitas do problema, geralmente, definidos por soluções semi-analíticas como Voigt, Reuss, *Di-lute Method*, *Self-Consistent*, Mori-Tanaka, dentre outros. Entretanto, ao substituir a Equação (2.6) na Equação (2.8) é estabelecida uma relação entre os tensores de concentração. Portanto, o problema consiste em determinar um desses tensores e o outro é obtido diretamente pela Equação (2.9).

$$A = \mathbb{B} : [(1 - v_1) \mathbb{I} + v_1 \mathbb{B}]^{-1}$$
(2.9)

Neste trabalho, os tensores de concentração foram implementados conforme a solução de Mori-Tanaka, a qual pressupõe, inicialmente, as mesmas condições estabelecidas por Eshelby (ESHELBY, 1957). O modelo presume ambas as fases com comportamento elástico linear e, dessa premissa, propõe uma solução para o campo ϵ_1^e em uma inclusão elipsoide isolada, dispersa em um meio infinito.

O estudo de Eshelby identificou um estado uniforme de deformações e tensões na inclusão e determinou uma forma analítica para o campo de deformações ϵ_1^e em uma inclusão. Esse resultado é utilizado por Mori-Tanaka, assim como em outras metodologias, para acrescentar perturbações correspondentes a presença das inclusões nos campos médios de deformação $\bar{\epsilon}_i^e$, nas fases $i = \{M, 1\}$. No Apêndice D mais detalhes são revisados sobre a teoria MFH aplicada aos compósitos lineares.

2.4.1 Linear Comparison Composites

Em um RVE com não linearidade material, o conceito de LCC consiste em linearizar a relação constitutiva de cada fase e aplicar a formulação de MFH para compósitos lineares, revisada no Apêndice D. Neste caso, a formulação está deduzida com base na técnica desenvolvida por Masson *et al.* (2000), denominada Linearização Afim, em inglês *Affine Linearization*. Outras abordagens possíveis são as linearizações conhecidas como tangente e secante, cujos detalhes são vistos em Masson *et al.* (2000). Os métodos linearizados foram propostos, inicialmente, no contexto de solicitações monotônicas e proporcionais, entretanto essa limitação é superada pela adaptação de tais conceitos às formulações incrementais.



Figura 2.9 – Interpretação do método incremental affine linearization.

Fonte: Adaptado de Krairi, Doghri e Robert (2016).

Para um material elasto-plástico, Hill (1965b) propôs uma formulação em taxas da relação constitutiva de cada uma das fases junto a um procedimento de homogeneização. A taxa do campo médio de tensões $\dot{\bar{\sigma}}_i(\boldsymbol{x},t)$ como função da taxa do campo médio de deformações $\dot{\bar{\epsilon}}_i(\boldsymbol{x},t)$ é expressa pela Equação (2.10), na qual $\mathbb{C}^{tan}_i(\bar{\epsilon}_i(\boldsymbol{x},t),t)$ é o operador tangente, na fase $i = \{M, 1\}$.

$$\dot{\bar{\sigma}}_i = \mathcal{C}_i^{tan}(\bar{\epsilon}_i(\boldsymbol{x},t),t) : \dot{\bar{\epsilon}}_i(\boldsymbol{x},t)$$
(2.10)

Diferente do procedimento para o modelo elasto-plástico com encruamento linear, nos modelos de viscoelasticidade e viscoplasticidade não é possível obter um operador tangente único e sim dependente do estado e taxa de deformação (MILED, 2011). Nestes casos, conforme Doghri, Adam e Bilger (2010), a Equação (2.10) é reescrita com base na linearização do modelo constitutivo, realizada no instante t, suficientemente próximo a um instante Θ , para cada fase i do RVE, conforme a Equação (2.11). Mais detalhes são comentados na Seção 3.1.

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i(t) \simeq \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i(\Theta) + C_i^{alg}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i(\boldsymbol{x},t),t) : \dot{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}_i(\boldsymbol{x},t)(t-\Theta)$$
(2.11)

A Figura 2.9 ilustra uma interpretação da linearização tangente para um tempo discreto com $\Theta = t_n$ e $t = t_{n+1}$. Evidente na Figura 2.9, caso seja aplicada a linearização incremental proposta por Doghri, Adam e Bilger (2010) para estimar o incremento de tensão $\Delta \bar{\sigma}_i$, a partir do tempo t_n , representado pela linha hachurada, é identificado um termo adicional $\Delta \bar{\varpi}_i$, dito afim, em inglês *affine*, necessário para alcançar o valor total do incremento esperado $\Delta \bar{\sigma}_i$. Na formulação incremental proposta pelos autores, o operador tangente algorítmico $C_i^{alg}(t)$ é definido uniforme em cada fase, no intervalo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$.

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i(t_{n+1}) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i(t_n) \simeq C_i^{alg}(t_{n+1}) : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i + \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_i$$
(2.12)

A abordagem proposta por Doghri, Adam e Bilger (2010) foi inspirada em correção similar utilizada em modelos de homogeneização para termoelasticidade, como o revisado na Seção D.3. O Conjunto de Equações (2.13) abaixo, resume a sequência de operações necessárias para determinar o tensor algorítmico homogeneizado \bar{C}^{alg} , responsável por atribuir um incremento total $\Delta \bar{\sigma}$ ao ponto material macroscópico, a partir do incremento de deformação $\Delta \bar{\epsilon}$ conhecido. Notoriamente, o procedimento descrito depende da determinação de tensores algorítmicos incrementais consistentes de cada fase *i*, como os formulados no Apêndice B. Detalhes das deduções envolvidas nas operações abaixo constam no Apêndice D.

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = (1 - v_1) \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M + v_1 \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 \tag{2.13a}$$

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 = \boldsymbol{A} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \Delta \bar{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{B} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M + \Delta \bar{\boldsymbol{a}}$$
(2.13b)

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_M = \mathbb{C}_M^{alg} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_M + \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_M \tag{2.13c}$$

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_1 = \mathcal{C}_1^{alg} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_1 + \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_1 \tag{2.13d}$$

$$\Delta \bar{\boldsymbol{a}} = (A - \mathbb{I}) : (\mathbb{C}_1^{alg} - \mathbb{C}_M^{alg})^{-1} : (\Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_1 - \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_M)$$
(2.13e)

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\boldsymbol{C}}^{alg} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}$$
(2.13f)

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}} = (1 - v_1) \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_M + v_1 \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_1 + v_1 (\mathcal{C}_1^{alg} - \mathcal{C}_M^{alg}) : \Delta \bar{\boldsymbol{a}}$$
(2.13g)

$$\bar{\mathcal{C}}^{alg} = \left[v_1 \mathcal{C}_1^{alg} : \mathcal{B} + (1 - v_1) \mathcal{C}_M^{alg} \right] : \left[(1 - v_1) \mathcal{I} + v_1 \mathcal{B} \right]^{-1}$$
(2.13h)

No Capítulo 3, é apresentada a sequência lógica para a resolução do problema de homogeneização concatenado nas Equações (2.13). O fluxograma completo da implementação com a ordem do cômputo das equações está no Anexo A. Na seção seguinte são revisados os principais conceitos do modelo termodinamicamente consistente aplicado para representar as fases constituintes do presente RVE.

2.5 MODELO DAS FASES CONSTITUINTES

Com base no Apêndice C, nos materiais semicristalinos, ao impor uma solicitação, as ligações secundárias são alteradas e o material apresenta uma deformação. Quando a perturbação é retirada, as ligações intermoleculares são reorganizadas e parte da energia é recuperada com a restauração da deformação elástica, parte é dissipada em forma de calor. Durante a deformação, acima do limiar de escoamento σ_{y0} , ocorrem perturbações permanentes na microestrutura, também sensíveis a velocidade do processo. As perturbações exteriorizam alterações significativas na rigidez do material e, uma vez presentes, dependerão da direção do movimento.

O comportamento do material é simulado por um modelo constitutivo composto pelos conceitos de viscoelasticidade, viscoplasticidade, encruamento isotrópico não linear, encruamento cinemático não linear e dano dúctil, desenvolvido no trabalho de Krairi e Doghri (2014). Para o acoplamento dos fenômenos, os autores propuseram um potencial de dissipação dual $\check{\Phi}(A)$, no qual A é o conjunto de forças termodinâmicas dissipativas. Com o propósito de compreender os fenômenos físicos representados pelo modelo, foi elaborada uma interpretação unidimensional reológica, composta por dispositivos representativos do armazenamento energético e dissipativo do sistema.



Figura 2.10 – Interpretação reológica unidimencional do modelo constitutivo.

Fonte: Autor, com base em diferentes trabalhos (BABAEI et al., 2016; IRGENS, 2008; SHUTOV; KREISSIG, 2008).

O problema está limitado a cinemática infinitesimal, portanto na Figura 2.10 é admitida a decomposição aditiva da deformação ϵ , conforme a Equação (2.14), assim o modelo é dividido em dois grandes blocos ligados em série, um viscoelástico e outro viscoplástico.

$$\epsilon = \epsilon^{ve} + \epsilon^{vp} \tag{2.14}$$

No primeiro está representado o modelo *Standard solid* de Maxwell-Wiechert, também chamado de Maxwell Generalizado (BABAEI *et al.*, 2016). Através do conceito de rigidez efetiva, apresentado na Seção 2.5.4, a rigidez do modelo viscoelástico está caracterizada pelas molas E_{∞} e E_1 , associadas a variável de dano D, e a viscosidade pelo amortecedor η . A viscoelasticidade tridimensional é estudada na Seção 2.5.1, a partir da revisão do problema unidimensional, exposta no Apêndice E.

Na parte viscoplástica, o bloco é composto pela representação de Bingham (IR-GENS, 2008), definida pelo dispositivo de atrito σ_{y0} em paralelo com o amortecedor

 η_{vp} e pelo modelo de Armstrong-Frederick para o encruamento cinemático X (SHU-TOV; KREISSIG, 2008; KOWOLLIK *et al.*, 2011), definido pela mola *a* em série com o amortecedor *a/b*. Por simplicidade, o encruamento isotrópico, caracterizado por *R*, está implícito no braço do dispositivo de atrito. Impondo uma lei constitutiva para a taxa de deformação viscoplástica $\dot{\epsilon}^{vp}$, a viscoplasticidade é formulada diretamente para o caso tridimensional, também com uma interpretação da Figura 2.10, identificando as parcelas energéticas de encruamento e dissipação.

2.5.1 Viscoelasticidade linear tridimensional

Em vista dos princípios termodinâmicos, nesta seção, o estado $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{x},t)$, no ponto material \boldsymbol{x} , em um instante t, está descrito pelas variáveis observáveis $\boldsymbol{V} = \{\boldsymbol{\epsilon}^{ve}\}$ e pelas internas $\boldsymbol{\mathcal{V}} = \{\boldsymbol{\epsilon}^{v_i}\}$, de acordo com os $i = \{1, 2, ...\}$ braços de Maxwell. A união dos dois conjuntos resulta nas variáveis de estado $\bar{\boldsymbol{V}} = \{\boldsymbol{\epsilon}^{ve}, \boldsymbol{\epsilon}^{v_i}\}$. Correspondente a ele, é definido o conjunto de forças conjugadas $\boldsymbol{A} = \{\boldsymbol{\sigma}_{\infty}, \boldsymbol{\sigma}_{i}\}$.

De forma análoga à metodologia exposta para o Problema de Valor Inicial (PVI) da Equação (E.8), o problema viscoelástico tridimensional será deduzido a partir da compreensão unidimensional da Figura 2.10, na qual o subíndice ∞ indica medidas na mola isolada. No entanto, neste contexto, os termos E_{∞} , $E_i \in \eta_i$ serão substituídos pelas parcelas energéticas W_{∞} , $W_i \in \Phi_i$, respectivamente. A energia armazenada na mola isolada é expressa pela Equação (2.15), já a parcela na mola do segmento de Maxwell pela Equação (2.16).

$$W_{\infty} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^{ve} : \boldsymbol{\mathbb{C}}_{\infty} : \boldsymbol{\epsilon}^{ve}$$
(2.15)

$$W_i = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\epsilon}^{ve} - \boldsymbol{\epsilon}_i^v) : C_i : (\boldsymbol{\epsilon}^{ve} - \boldsymbol{\epsilon}_i^v)$$
(2.16)

Em todas as molas, o modelo elástico adotado é linear, portanto a relação entre tensão e deformação está definida por um tensor de quarta ordem constante C_i . A deformação elástica ϵ^{e_i} é a diferença entre uma parcela viscoelástica ϵ^{ve} e outra viscosa ϵ^{v_i} , distinta para cada braço de Maxwell *i*.

Foi considerado um modelo de amortecimento linear e, consequentemente, a relação entre a tensão σ_i e a taxa de deformação viscosa $\dot{\epsilon}_i^v$ também é especificada por um tensor de quarta ordem constante w_i , cujas componentes são parâmetros de viscosidade aparente. A dissipação Φ_i neste amortecedor é definida pela Equação (2.17). Como observado para o HDPE experimentalmente por Zhang e Moore (1997), tanto no regime viscoelástico quanto no viscoplástico da Seção 2.5.3, a relação da tensão com a deformação é dependente da taxa, entretanto, independe do histórico dessa taxa.

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^v : \boldsymbol{v}_i : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^v$$
(2.17)

A energia livre de Helmholtz ψ , para o bloco viscoelástico, é formulada pela Equação (2.18), na qual W_0 é a energia instantânea armazenada pelo sistema. A tensão σ é definida pela derivada direcional desse potencial de estado em relação a deformação ϵ^{ve} , conforme a lei de estado estabelecida na Equação (2.19).

$$\psi = W_0 = W_\infty + \sum_{i=1}^n W_i$$
 (2.18)

$$\frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}} = \mathbb{C}_{\infty} : \boldsymbol{\epsilon}^{ve} + \sum_{i=1}^{n} \mathbb{C}_{i} : (\boldsymbol{\epsilon}^{ve} - \boldsymbol{\epsilon}_{i}^{v})$$
(2.19)

Similar ao dispositivo reológico unidimensional, há uma condição de equilíbrio entre a mola e o amortecedor conectados em série. Das definições do potencial da Equação (2.17) e Equação (2.19) para a energia livre, tal equilíbrio é definido pela Equação (2.20) ou, após as devidas substituições, pela Equação (2.21), conforme Picard e Fafard (2011).

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^v} + \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_i^v} = 0$$
(2.20)

$$\mathbb{V}_i: \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^v - \mathbb{C}_i: (\boldsymbol{\epsilon}^{ve} - \boldsymbol{\epsilon}_i^v) = 0$$
(2.21)

Por analogia com o caso unidimensional, a Equação (2.21) é equivalente a EDO deduzida na Equação (E.4). Com as condições preestabelecidas, linearidade elástica, decomposição aditiva das deformações e viscosidade linear, as relações abaixo são deduzidas para cada braço de Maxwell *i*.

$$\dot{oldsymbol{\epsilon}}_i^v = \dot{oldsymbol{\epsilon}}_i^v - \dot{oldsymbol{\epsilon}}_i^e$$
 (2.22)

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^e = \mathbb{C}_i^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i$$
 (2.23)

$$t_i = C_i^{-1} : \mathbf{v}_i \tag{2.24}$$

Com estas relações, a Equação (2.21) resulta na Equação (2.25), semelhante ao caso unidimensional formulado na Equação (E.8a) e Equação (E.9a). A equação abaixo representa o equilíbrio em um braço de Maxwell, uma parcela da Equação (2.26), a qual estabelece o equilíbrio do conjunto de braços.

$$\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{t}_i : \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i = \boldsymbol{w}_i : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{ve} \tag{2.25}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\sigma}_{i} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{\infty}$$
(2.26)

Os tensores constitutivos \mathbb{C}_{∞} e \mathbb{C}_i são definidos pela elasticidade linear, já o tensor t_i fora determinado na dedução da Equação (2.25), pelas definições dos tempos característicos de relaxação isocórico e volumétrico (OHKAMI; ICHIKAWA, 1997). Os tensores de tensão e deformação são passíveis da decomposição aditiva em uma parcela isocórica e outra volumétrica e a mesma decomposição é aplicada à Equação (2.25), conforme a Equação (2.27). As definições tensoriais constam no Apêndice A

$$\int \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\sigma}_{i}$$
(2.27a)

$$\int \mathbb{I}^{d} : [\boldsymbol{\sigma}_{i} + \boldsymbol{t}_{i} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{i} - \boldsymbol{v}_{i} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{ve}] = 0$$
(2.27b)

$$\mathbb{I}^{v}: [\boldsymbol{\sigma}_{i} + \boldsymbol{t}_{i}: \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{i} - \boldsymbol{v}_{i}: \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{ve}] = 0$$
(2.27c)

$$\lim_{t \to -\infty} \boldsymbol{\sigma}(t) = \left(\mathbb{C}_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} \mathbb{C}_{i} \right) : \boldsymbol{\epsilon}^{ve}$$
(2.27d)

Projetar a Equação (2.25) no espaço desviador, Equação (2.27b), e volumétrico, Equação (2.27c), foi uma escolha de apresentação para demonstrar a independência entre as parcelas, estabelecida nesta formulação. O equilíbrio expresso pela Equação (2.27a), usualmente, é solucionado no domínio de Laplace-Carson. A solução, após seu mapeamento para o domínio do tempo, como mencionado no Apêndice E, resultará em funções exponenciais para cada braço *i*.

$$\boldsymbol{\sigma} = \int_{-\infty}^{t} 2\mathcal{G}(t-z)\mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz + \int_{-\infty}^{t} 3\mathcal{K}(t-z)\mathbb{I}^{v} : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz$$
(2.28)

Ao substituir as soluções na Equação (2.27a), a tensão σ pode ser expressa como na Equação (2.28). As funções de relaxação $\mathcal{G} \in \mathcal{K}$, são os módulos isocórico, ou cisalhante, e volumétrico, respectivamente. Ambos estão formulados abaixo, onde os termos $g_i \in k_i$ são os tempos característicos de relaxação, determinados pela operação da Equação (2.24).

$$G(t) = G_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} G_i e^{-\frac{t}{g_i}}$$
 (2.29)

$$\mathcal{K}(t) = K_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} K_i e^{-\frac{t}{k_i}}$$
 (2.30)

2.5.2 Plasticidade

Os materiais metálicos dúcteis, quando submetidos a um estado uniaxial de tensões, apresentam um valor limiar de tensão σ_{y0} , a partir do qual é observado de-formações permanentes. Este comportamento apresenta pouca dependência da taxa de deformação. A teoria da plasticidade clássica trata da representação deste tipo de fenômeno. Para materiais não cristalinos, como os poliméricos, entretanto, a taxa de deformação é relevante e uma forma de representá-los é através dos modelos de viscoplasticidade.

Conforme visto na Figura 2.10, a descontinuidade na resposta mecânica do material é representada por um esquema reológico de viscoplasticidade, conhecido como modelo de Bingham-Norton (IRGENS, 2008), composto pelo dispositivo do atrito seco de Coulomb associado em paralelo com um amortecedor. A resistência ao deslizamento é definida por uma tensão equivalente de escoamento σ_{y0} e o amortecedor por uma viscosidade η_{vp} . A mola *a*, associada em paralelo com Bingham-Norton, representa o encruamento cinemático caracterizado pelo *backstress X* e o termo *R* o encruamento isotrópico.

No caso tridimensional, para retratar o esquema reológico, o modelo é composto pelo conjunto das variáveis internas $\mathcal{V} = \{\epsilon^{ve}, \epsilon^{v}_{i}, \epsilon^{vp}, \alpha, r\}$ e o conjunto das variáveis de estado $\overline{\mathcal{V}} = \{\epsilon, \epsilon^{ve}, \epsilon^{v}_{i}, \epsilon^{vp}, \alpha, r\}$. Já o conjunto de forças termodinâmicas é definido como $A = \{\sigma, \sigma_{\infty}, \sigma_{i}, \mathcal{F}, X, R\}$, onde X e \mathcal{F} são o *backstress* e uma força conjugada a ϵ^{vp} , respectivamente. A energia no sistema é composta por W_{cin} , W_{iso} e Φ^{vp} , correspondentes ao encruamento cinemático, isotrópico e dissipação viscoplástica.

$$W_{cin} = \frac{1}{2}\boldsymbol{X} : \boldsymbol{\alpha}$$
(2.31)

$$W_{iso} = \int_0^{r(t)} R(l) dl \tag{2.32}$$

$$\Phi^{vp} = \mathcal{L}(\check{\Phi}^{vp}) \tag{2.33}$$

O tensor de deformação α é a variável interna conjugada à força termodinâmica X, forma tensorial do *backstress*. Já o limite superior r, na integral da Equação (2.32), está definido como a variável interna conjugada à força termodinâmica R, chamada de deformação viscoplástica acumulada. O potencial de dissipação viscoplástica Φ^{vp} está formulado como a transformada de Legendre-Fenchel \mathcal{L} do potencial dissipação dual $\check{\Phi}^{vp}$.

Como no modelo de viscoelasticidade, um potencial de Helmholtz ψ é proposto para o bloco viscoplástico como a soma das energias armazenadas no sistema. Uma parcela corresponde a resistência ao fluxo viscoplástico ψ^h e a outra à energia de deformação viscoelástica ψ^{ve} . Portanto, o quanto armazena esse sistema, como um potencial de Helmholtz ψ , toma a forma da Equação (2.34). Como a soma das energias de encruamento, o potencial ψ^h está definido na Equação (2.35).

$$\psi = \psi^{ve} + \psi^h \tag{2.34}$$

$$\psi^{h} = W_{cin} + W_{iso} = \frac{1}{2}\boldsymbol{X} : \boldsymbol{\alpha} + \int_{0}^{r(t)} R(l)dl$$
(2.35)

As relações entre as forças termodinâmicas A e as variáveis de estado \bar{V} , são obtidas ao tomar a derivada direcional do potencial de Helmholtz em relação as variáveis de estado \bar{V} . As leis de estado, como estão definidas na Equação (2.36), são comuns entre modelos de plasticidade e viscoplasticidade, com viscoelasticidade.

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \tag{2.36a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\infty} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}} \tag{2.36b}$$

$$\sigma_i = rac{\partial \psi}{\partial \epsilon_i^e}$$
 (2.36c)

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon^{vp}} \tag{2.36d}$$

$$\boldsymbol{X} = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \tag{2.36e}$$

$$R = \frac{\partial \psi}{\partial r}$$
(2.36f)

Como em Krairi, Doghri e Robert (2016), o encruamento cinemático está idealizado por uma segmento de Maxwell não linear, conforme a Figura 2.10, e o encruamento isotrópico por uma função potência. Isto posto, o potencial de Helmholtz da Equação (2.35) para a resistência ao fluxo plástico e as leis de estado derivadas dele são escritas conforme a Equação (2.37) e Equação (2.38). O termo β está representado no esquema reológico de referência como uma medida de deformação, já os termos κ , θ e *a* são parâmetros do modelo.

$$\psi^{h} = \frac{1}{2}a\boldsymbol{\alpha}: \boldsymbol{\alpha} + \int_{0}^{r(t)} \kappa l^{\theta} dl$$
(2.37)

$$\boldsymbol{X} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = a\boldsymbol{\alpha} = a(\boldsymbol{\epsilon}^{vp} - \boldsymbol{\beta})$$
(2.38a)

$$R = \frac{\partial \psi}{\partial r} = \kappa r^{\theta}$$
 (2.38b)

No problema tridimensional a dificuldade está em determinar a direção do escoamento e a resistência a ele sob carregamento multiaxial. O critério de von Mises simplifica essa problemática ao pressupor o comportamento plástico como isocórico e isotrópico. O espaço de tensões admissíveis \mathcal{E}_{σ} , para a função de escoamento de von Mises f, é representado pela Equação (2.39), na qual S é a parte desviadora do tensor σ .

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{\sigma}} = \{ \boldsymbol{\sigma} | f := \sqrt{3J_2(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{X})} - \sigma_{y0} - R \le 0 \}$$
(2.39)

$$J_2(\sigma - X) = \frac{1}{2}(S - X) : (S - X)$$
 (2.40)

2.5.3 Viscoplasticidade

A plasticidade não víscida é fortemente relacionada a condição de consistência de Prager, expressa pela Equação (2.41). Para ocorrer fluxo plástico, a tensão não só deve alcançar a superfície de escoamento, como deve permanecer nela. No entanto, essa condição não é satisfeita nos modelos usuais de viscoplasticidade.

$$\dot{f} = 0 \tag{2.41}$$

Nos modelos de Perzina e Duvaut-Lions (DE BORST *et al.*, 2012), a tensão pode estar fora do espaço \mathcal{E}_{σ} , este conceito é formulado a partir da medida de tensão fora da superfície de escoamento, chamada de *overstress* $\hat{\sigma}$, expressa pela Equação (2.42). Como alternativa, outros modelos determinam a função de escoamento *f* com dependência da taxa de deformação, nomeados *consistency models* (DE BORST *et al.*, 2012).

$$||\hat{\boldsymbol{\sigma}}|| = f = \eta_{vp} ||\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}|| \tag{2.42}$$

Dentre os modelos existentes, foi implementado um modelo da classe Perzina. Esses são definidos por uma relação constitutiva para a evolução das variáveis internas, como na Equação (2.43), e não dependem das condições complementares de Karush-Khun-Tucker. Pela interpretação da definição em De Borst *et al.* (2012) e Simo e Hughes (2006), a classe Perzina engloba inúmeros modelos, como Bigham, Bigham-Norton, dentre outros. Na Equação (2.43), o termo $\langle \bullet \rangle$ está definido como a função rampa de Macaulay.

$$\int_{\langle t \rangle \rangle} 0 \quad (e^{-t}) \quad (e^{$$

$$\dot{r}(f(t)) = \frac{\omega(f)}{\eta_{vp}} = \left\{ \frac{\omega(f)}{\eta_{vp}}, \ se \ f(t) > 0 \right.$$
(2.43b)

A lei constitutiva $\omega(f)$, geralmente, é determinada como uma potência da função de escoamento f, modelo conhecido como Bigham-Norton (SOUZA NETO; PE-RIC; OWEN, 2011). No trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016), foi utilizada uma função potência normalizada pela tensão limiar de escoamento σ_{y0} , conforme a Equação (2.44). Esta função representa a relação entre a taxa de deformação viscoplástica e o *overstress*.

$$\omega(f) = \sigma_{y0} \left(\frac{f(t)}{\sigma_{y0}}\right)^m \tag{2.44}$$

O termo η_{vp} é o parâmetro de viscosidade plástica e m é o parâmetro sensível a taxa, ambos estritamente positivos e dependentes da temperatura. O modelo invíscido equivalente é obtido caso $\{\eta_{vp}, \dot{\epsilon}\} \rightarrow 0$. No limite oposto, quando $\{\eta_{vp}, \dot{\epsilon}\} \rightarrow \infty$, o comportamento permanece sem efeito viscoplástico (SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2011).

Conforme Alfano, De Angelis e Rosati (2001), o modelo de Perzina não linear não recupera propriamente o comportamento estático e isto resulta em problemas de convergência quando $\dot{\epsilon} \rightarrow 0$. Com base nos resultados da referência, há uma inconsistência no comportamento do modelo em relação ao expoente *m* para diferentes valores de $\dot{\epsilon}$. Esta peculiaridade foi notada por Peri (1993) e o autor propôs uma variação do modelo para contorná-la. Todavia, foi implementada a Equação (2.44), pois o fenômeno de fadiga será explorado apenas para taxas elevadas de deformação.

2.5.4 Dano dúctil

Neste trabalho, a formulação do dano está limitada apenas ao dano isotrópico, ou seja, a forma tensorial do dano não será deduzida. Embora a proposição do modelo esteja fundada no fenômeno de nucleação sob carregamento cíclico, o efeito de fechamento, ou *closure effect*, será negligenciado.

O dano dúctil isotrópico D é uma representação da fração volumétrica de microvazios em um RVE. Fisicamente, o termo microvazios é generalizado e aplicado também às microtrincas. Supondo um diferencial de área com maior concentração de microvazios dS e sua normal v, o dano D_v é redefinido como a densidade superficial de microvazios, razão do diferencial de área de microvazios $d\hat{S}$ por dS.

$$D_v = \frac{dS}{dS} \tag{2.45}$$

Convenientemente, a relação da Equação (2.45) é reescrita em função de um diferencial de área efetiva $d\tilde{S}$, uma área idealizada sem a presença dos microvazios, definida como a diferença entre a área dS e $d\hat{S}$. Portanto, o dano D_v é redefinido conforme a Equação (2.46).

$$D_{\boldsymbol{v}} = \frac{dS - d\tilde{S}}{dS} \tag{2.46}$$

Neste contexto, no diferencial de área $d\tilde{S}$, atua uma tensão efetiva $\tilde{\sigma}$. Pelo equilíbrio de forças, a tensão $\tilde{\sigma}$ é relacionada à σ , relativa ao diferencial de área dS,

conforme a Equação (2.47). Pela combinação das equações anteriores com a Equação (2.47), uma medida de tensão efetiva $\tilde{\sigma}$ é expressa pela Equação (2.48). Esta dedução assume o princípio da equivalência de deformação entre o estado íntegro e aquele com dano (LEMAITRE; DESMORAT, 2005).

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}d\tilde{S} = \boldsymbol{\sigma}dS \tag{2.47}$$

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - D} \tag{2.48}$$

Ao aplicar o conceito de tensão efetiva no estado $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{x},t)$, a variável interna de dano D é inserida nos conjuntos $\boldsymbol{\mathcal{V}}$ e $\bar{\boldsymbol{V}}$, apresentados na Seção 2.5.2. O conjunto de forças conjugadas é reformulado como $\boldsymbol{A} = \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}_{\infty}, \boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\mathcal{F}}, \boldsymbol{X}, R, -Y\}$. O termo Y é definido como a taxa de energia liberada por unidade de volume, em inglês *energy density release rate* (LEMAITRE; DESMORAT, 2005). Nesta conjuntura, o potencial ψ^{ve} é expresso pela Equação (2.49).

$$\psi^{ve} = (1-D)W_0 = \frac{(1-D)}{2} \left[(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp}) : \mathcal{C}_{\infty} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp}) + \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp} - \boldsymbol{\epsilon}_i^v) : \mathcal{C}_i : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp} - \boldsymbol{\epsilon}_i^v) \right]$$
(2.49)

Com base no formalismo termodinâmico clássico, a partir da forma explícita para o potencial de Helmholtz viscoelástico ψ^{ve} , as leis de estado do modelo de viscoelasticidade, associado ao dano dúctil, são deduzidas pelas derivadas direcionais da Equação (2.36). A Equação (2.50) e Equação (2.38) compõem as leis de estado do modelo aplicado as fases do RVE e as leis de fluxo correspondentes são derivadas do potencial de dissipação proposto na próxima seção.

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi^{ve}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} = (1 - D) \left(\boldsymbol{\sigma}_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\sigma}_{i} \right)$$
(2.50a)

$$\boldsymbol{\sigma}_{\infty} = \frac{\partial \psi^{ve}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}} = (1 - D) C_{\infty} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp})$$
(2.50b)

$$\boldsymbol{\sigma}_{i} = \frac{\partial \psi^{ve}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_{i}^{v}} = -(1-D)\boldsymbol{C}_{i} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{vp} - \boldsymbol{\epsilon}_{i}^{v})$$
(2.50c)

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \psi^{ve}}{\partial \epsilon^{vp}} = -(1-D) \left(\boldsymbol{\sigma}_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\sigma}_{i} \right) = -\boldsymbol{\sigma}$$
(2.50d)

$$Y = -\frac{\partial \psi^{ve}}{\partial D} = W_0 \tag{2.50e}$$

2.5.5 Potencial de dissipação

As leis de estado definidas são complementadas pelas leis de evolução das respectivas variáveis internas, estabelecidas a partir de observações fenomenológicas. Para tal, é conveniente propor um potencial de dissipação dual Φ convexo e nulo na origem, em relação aos seus argumentos, como na Equação (2.51). Estas características e a proposição das leis de fluxo pela regra da normalidade, garantem a satisfação automática da Segunda Lei da Termodinâmica.

$$\check{\Phi} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_{i} : \boldsymbol{v}_{i}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}_{i} + \int_{0}^{f(t)} \frac{\langle \omega(z) \rangle}{\eta_{vp}} dz$$
(2.51)

A Equação (2.51) é um potencial de dissipação com critério de escoamento genérico f (ARNOLD; SALEEB, 1994), com a lei constitutiva de Perzina, Equação (2.43). O primeiro termo dessa equação é deduzido pela transformada de Legendre-Fenchel do potencial de dissipação viscoelástico Φ_i , definido anteriormente (BENAARBIA; ROUSE; SUN, 2018). A função f, para o critério de von Mises, é escrita conforme a Equação (2.52), semelhante a Equação (2.39), porém não define um conjunto de tensões admissíveis e sim a amplitude do *overstress*, conforme a Equação (2.42).

$$f = \sqrt{3J_2(\tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{X})} - \sigma_{y0} - R + \frac{b}{2a}J_2(\boldsymbol{X}) - \frac{ba}{2}J_2(\boldsymbol{\alpha}) + \left[\frac{S}{s+1}\left(\frac{Y}{S}\right)^{s+1}\frac{\mathcal{H}(p)}{1-D}\right] - \left[\frac{S}{s+1}\left(\frac{\psi^{ve}(\bar{\boldsymbol{V}})}{(1-D)S}\right)^{s+1}\frac{\mathcal{H}(p)}{1-D}\right]$$
(2.52)

O critério de escoamento está acoplado ao encruamento cinemático de Armstrong-Frederick e ao potencial de Lemaitre-Chaboche para o dano, função explícita de *Y* e *D*. O termo $\mathcal{H}(p)$ é a função degrau, em inglês chamada *Heaviside*, e determina se o dano está evoluindo, restrito ao caso onde a deformação viscoplástica acumulada efetiva *p* é superior, ou igual, a um valor limiar *p*_D. A proposição do potencial de dissipação da Equação (2.51), diferente de Equação (2.52), caracteriza o fluxo plástico como não associativo.

$$\mathcal{H}(p) = \begin{cases} 0, \ p < p_D \\ 1, \ p \ge p_D \end{cases}$$
(2.53)

$$\dot{r} = (1 - D)\dot{p}$$
 (2.54)

Por construção, o modelo é classificado como Material Padrão Generalizado, em inglês *Generalized Standard Material* (GSM), pois é aplicável a regra da normalidade generalizada (BENAARBIA; ROUSE; SUN, 2018). Assim, ao tomar as derivadas $\partial_A \Phi$, são estabelecidas as leis de fluxo para as variáveis internas \mathcal{V} , conforme a Equação (2.55). O conceito aplicado é o mesmo da Equação (2.20), entretanto o potencial de dissipação está escrito na sua forma dual, como função de \overline{V} e conjugadas A.

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{i}^{v} = \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{i}} = \boldsymbol{v}_{i}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}_{i}$$
 (2.55a)

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} = \frac{\partial \check{\Phi}}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\tilde{\sigma}}} : \frac{\partial \boldsymbol{\tilde{\sigma}}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{\langle \omega(f) \rangle}{(1-D)\eta_{vp}} \boldsymbol{N}$$
(2.55b)

$$\dot{r} = \frac{\partial \check{\Phi}}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial R} = \frac{\langle \omega(f) \rangle}{\eta_{vn}}$$
(2.55c)

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{\partial \check{\Phi}}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\langle \omega(f) \rangle}{\eta_{vp}} \left(\boldsymbol{N} - \frac{b}{a} \boldsymbol{X} \right)$$
(2.55d)

$$\dot{D} = \frac{\partial \check{\Phi}}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial Y} = \frac{\langle \omega(f) \rangle}{(1-D)\eta_{vp}} \mathcal{H}(p) \left(\frac{Y}{S}\right)^s$$
(2.55e)

$$\frac{\partial f}{\partial \tilde{\boldsymbol{\sigma}}} = -\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{N}$$
(2.56)

O mesmo procedimento exposto para a viscoelasticidade linear, relacionado ao conceito de tensão efetiva, é aplicado as leis de estado da Equação (2.50a), Equação (2.50b) e Equação (2.50c) para resumi-las à forma integral da Equação (2.57). Nesta última, a derivada da deformação é posta em evidência e as funções de relaxação nas integrais da Equação (2.28) são agrupadas em \mathbb{C}^{ve} . Esta equação representa a relação constitutiva das fases constituintes do RVE descrito na Seção 2.3 e, apesar de implícito, a derivada temporal da deformação viscoelástica é função das leis de evolução das variáveis internas, determinadas na Equação (2.55).

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = (1-D) \int_{-\infty}^{t} \mathbb{C}^{ve}(t-z) : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}(z)}{\partial z} dz$$
(2.57)

No curso da revisão do modelo constitutivo foram agrupados quatorze parâmetros materiais, representados no conjunto declarado na Equação (2.58). No contexto da abordagem multiescala, com duas fases, o modelo apresenta o dobro de parâmetros materiais somados a outros dois característicos do RVE, a razão de aspecto Ze o volume de inclusões v_1 . Identificar todos os parâmetros é uma tarefa complexa, sobretudo no fenômeno de fadiga sob solicitações multiaxiais, pois envolve um grande número de simulações e longos ensaios experimentais.

$$P = \{G_{\infty}, K_{\infty}, G_i, K_i, g_i, k_i, \eta_{vp}, \sigma_{y0}, \kappa, \theta, p_D, D_C, a, b, S, s\}$$
(2.58)

3 ALGORITMO E IMPLEMENTAÇÃO

A implementação do modelo foi desenvolvida na linguagem MATLAB, apenas para um ponto material, com a intenção de diminuir o custo computacional. Determinados os conjuntos de parâmetros P_i , de cada fase $i = \{M, 1\}$, a razão de aspecto Z, o volume de inclusões v_1 e uma função de solicitação σ , estes serão os parâmetros de entrada no algoritmo de integração temporal.

Como visto na Seção 2.4.1, o método de homogeneização incremental implementado está intrinsecamente relacionado à integração numérica implícita. Neste trabalho, as variáveis termodinâmicas são integradas com o método de Euler implícito, chamado em inglês *full implicit backward Euler method* (SIMO; HUGHES, 2006). Na Equação (3.1), o método de integração é aplicado ao equilíbrio no ponto material, conforme a relação da Equação (2.5), supondo campos uniformes e um incremento de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$.

$$\boldsymbol{\sigma}(t_{n+1}) \approx \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_n) + \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$
 (3.1)

O incremento de tensões médias $\Delta \bar{\sigma}$ é resultante do procedimento de homogeneização, formulado na Equação (2.13) e, desta forma, depende da solução do modelo constitutivo das fases do RVE. Na Seção 3.1, o GSM, revisado na Seção 2.5, é posto como um sistema de equações das suas variáveis independentes no domínio do tempo discreto. O sistema definido é formulado com um algoritmo preditor-corretor e a solução fornece um estado aproximado. Proveniente dessa aproximação, é determinado um operador tangente algorítmico $\tilde{C}_{i,n+1}^{alg}$.

No Apêndice B consta a dedução do chamado operador tangente algorítmico consistente, normalmente, utilizado na integração implícita (SIMO; HUGHES, 2006). O operador consistente é deduzido com o objetivo de melhorar o desempenho computacional do algoritmo, entretanto a sua aplicação nas relações constitutivas no método de homogeneização estabelecido resulta em inconsistências físicas. Este fato foi apontado por Doghri, Adam e Bilger (2010) e deu origem a métodos de regularização do operador tangente.

Neste trabalho, duas formulações para a regularização do modelo acoplado ao dano são deduzidas. Ambas partem do método de regularização da parcela isotrópica do tensor tangente viscoelástico-plástico, com base no desenvolvimento de Doghri, Adam e Bilger (2010) e, posterior, Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013). A formulação dos operadores e as simplificações envolvidas são descritas na Seção 3.1.3, de acordo com as deduções da Seção B.4 e Seção B.5.

A aproximação da Equação (3.1) determina um resíduo $R_{\mathcal{P}}$, conforme a Equação (3.2). A influência das duas formulações para o operador algorítmico na aproximação desse resíduo é, sucintamente, discutida em consonância com as aproximações

do problema de homogeneização e do modelo constitutivo das fases. Uma interpretação matemática da interação dos resíduos e a dedução do método de aproximação estão expostas na Seção B.2. Em suma, na Seção 3.2 é demonstrada a ordenação das equações no algoritmo de homogeneização e equilíbrio mecânico para o ponto material em análise. O fluxograma completo da implementação está no Anexo A.

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}}} = \boldsymbol{\sigma}(t_{n+1}) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_n) - \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$
(3.2)

3.1 FORMULAÇÃO INCREMENTAL NO DOMÍNIO DE UMA FASE

A relação constitutiva para cada fase é definida por quatro equações, as quais permitem acompanhar a evolução das variáveis de estado independentes. O sistema é composto pelas Equações (2.38), (2.57) e (2.55) com o conceito de tensão efetiva da Equação (2.48). No domínio contínuo do tempo, o conjunto de variáveis independentes está representado por $Q = \{\tilde{\sigma}, X, r, D\}$ e seus elementos estão formulados pelas integrais de RiemannStieltjes abaixo.

$$\left\{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \int_{-\infty}^{t} \mathbb{C}^{ve}(t-z) : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}(z)}{\partial z} dz \right.$$
(3.3a)

$$\boldsymbol{X}(t) = \int_{-\infty}^{t} \dot{r}(z) \left(a \boldsymbol{N}(z) - b \boldsymbol{X}(z) \right) dz$$
(3.3b)

$$r(t) = \int_{-\infty}^{t} \dot{r}(z)dz$$
(3.3c)

$$D(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{\dot{r}(z)}{(1 - D(z))} \mathcal{H}(p) \left(\frac{Y(z)}{S}\right)^{s} dz$$
(3.3d)

O processo de integração temporal é realizado numericamente pelo método de Euler implícito. Nesta abordagem, determinada a expressão da derivada $\partial_t Q$ é possível aproximar $Q(t_{n+1})$ a partir do valor conhecido $Q(t_n)$ e pela avaliação da derivada $\partial_t Q$, no instante t_{n+1} , conforme a Equação (3.4).

$$\boldsymbol{Q}(t_{n+1}) \approx \boldsymbol{Q}(t_n) + \left. \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} \right|_{t=t_{n+1}} \Delta t$$
 (3.4)

Na literatura, não foi encontrada uma forma de reduzir o problema a uma equação. A única dedução encontrada desconsidera o encruamento de Armstrong-Frederick (SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2011). De fato, com histórico de solicitação não proporcional, o termo não linear do *backstress* impossibilita concluir a colinearidade entre a parte desviadora \tilde{S} do tensor de tensões e a direção de fluxo viscoplástico N (LEMAITRE; CHABOCHE, 1994).

Pelo procedimento da Equação (3.4) e pela Equação (2.55), após manipulações algébricas, o sistema é reescrito na forma incremental da Equação (3.5). No apêndice

B, é apresentado o detalhamento das operações para determinar os termos da Equação (3.5a). Na formulação sequente, a variável independente *t* será condensada nos subíndices.

$$\left(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n + \left[\tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1} + \hat{\mathbb{C}}_{n+1}^{ve} : \left(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1} - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^{vp}\right)\right] \Delta t$$
(3.5a)

$$\boldsymbol{X}_{n+1} = \boldsymbol{X}_n + \dot{r}_{n+1} \left(a \boldsymbol{N}_{n+1} - b \boldsymbol{X}_{n+1} \right) \Delta t$$
(3.5b)

$$r_{n+1} = r_n + \frac{\sigma_{y0}}{\eta_{vp}} \left(\frac{f_{n+1}}{\sigma_{y0}}\right)^m \Delta t$$
(3.5c)

$$D_{n+1} = D_n + \frac{\dot{r}_{n+1}}{1 - D_{n+1}} \mathcal{H}(p) \left(\frac{Y_{n+1}}{S}\right)^s \Delta t$$
(3.5d)

3.1.1 Aproximação numérica do sistema não linear

Para solucionar o sistema da Equação (3.5) foi implementado um algoritmo preditor-corretor, em inglês chamado *return mapping algorthm*, no qual o incremento de deformação $\Delta \epsilon$ é inicialmente considerado puramente viscoelástico. Assim, *a priori*, é determinada uma medida de tensão efetiva tentativa $\tilde{\sigma}^{trial}$, em inglês *trial*, expressa pela Equação (3.6).

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^{trial} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n + \hat{C}_{n+1}^{ve} : \Delta \boldsymbol{\epsilon} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}$$
(3.6)

$$ilde{m{S}}_{n+1}^{trial} = \mathbb{I}^d: ilde{m{\sigma}}_{n+1}^{trial}$$
(3.7)

A correção da estimativa $\tilde{\sigma}^{trial}$ é realizada por um algoritmo iterativo e determinada pela solução da função resíduo $g = \{g^{\tilde{S}}, g^{X}, g^{r}, g^{D}\}$, dependente das incógnitas $\Delta Q = \{\Delta \tilde{S}, \Delta X, \Delta r, \Delta D\}$. A parcela volumétrica \tilde{P} do tensor de tensões é independente da deformação plástica, devido ao critério de escoamento J_2 , Equação (2.52). Portanto, o resíduo g é função apenas da parcela desviadora \tilde{S} do tensor de tensões efetivas.

$$\int g^{ ilde{m{S}}} = ilde{m{S}}_{n+1} - ilde{m{S}}_{n+1}^{trial} + \mathbb{I}^d : \hat{\mathbb{C}}_{n+1}^{ve} : \Delta \epsilon^{vp}$$
 (3.8a)

$$\boldsymbol{g}^{\boldsymbol{X}} = \Delta \boldsymbol{X} + \Delta r \left(a \boldsymbol{N} - b \boldsymbol{X}_{n+1} \right) \Delta t$$
(3.8b)

$$g^{r} = \Delta r + \frac{\sigma_{y0}}{\eta_{vp}} \left(\frac{f_{n+1}}{\sigma_{y0}}\right)^{m} \Delta t$$
(3.8c)

$$\left(g^{D} = \Delta D + \frac{\Delta r}{1 - D_{n+1}} \mathcal{H}(p) \left(\frac{Y_{n+1}}{S}\right)^{s} \Delta t\right)$$
(3.8d)

Como já indicado, na integração implícita, as variáveis de estado são avaliadas no tempo t_{n+1} . Assim, o resíduo está fixo nesse instante e, por praticidade, os subíndices serão suprimidos. O sistema da Equação (3.8) é expandido em série de Taylor, truncada no termo de primeira ordem, semelhante à Equação (3.4).

$$\boldsymbol{g}_{k+1} \approx \boldsymbol{g}_k + \left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \Delta \boldsymbol{Q}} \right|_k \delta \Delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{0}$$
 (3.9)

A derivada direcional da Equação (3.9), também chamada de gradiente da função resíduo $\bigtriangledown_{\Delta Q} g_k$, avaliado na iteração k, é o operador tangente do algoritmo corretor. Na Seção B.2 são formuladas as componentes desse operador. Em uma iteração k, a solução da Equação (3.9) fornece a correção $\delta \Delta Q$.

$$\delta \Delta \boldsymbol{Q} \approx -(\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k)^{-1} : \boldsymbol{g}_k \tag{3.10}$$

3.1.2 Parcela isotrópica do operador tangente regularizado

O resíduo definido pela Equação (3.8) deve ser nulo para qualquer incremento de deformação $\Delta \epsilon$. Desse critério surge o operador tangente algorítmico consistente, detalhado na Seção B.3. Quando aplicado junto ao processo de Newton, garante uma taxa de convergência quadrática ao algoritmo. No método LCC esse operador traz consequências outras, pois representa as propriedades do meio homogêneo equivalente, durante um passo de tempo Δt .

Nos modelos viscoplásticos de Perzyna, como identificado por Doghri, Adam e Bilger (2010), caso $\Delta t \rightarrow 0$, o operador tangente consistente não converge para o analítico. Em Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), para um modelo de viscoelasticidade com viscoplasticidade, foi demonstrada a mesma inconsistência. Quando $\Delta t \rightarrow 0$, o operador tangente consistente C_{n+1}^{alg} tende ao tensor viscoelástico \hat{C}_{n+1}^{ve} . Isto é, a contribuição viscoplástica do modelo no operador tangente torna-se nula. Caso nada seja feito, a rigidez da microestrutura passa a ter forte dependência com o incremento de tempo. Assim, para minimizar a dependência de Δt , os autores propuseram uma extensão para o caso viscoelástico, a partir do método de regularização desenvolvido por Doghri, Adam e Bilger (2010) para elasto-viscoplástico.

$$\tilde{\mathcal{U}}_{n+1}^{reg,vevp} = \tilde{\mathcal{U}}_{n+1}^{vep} + \left(\tilde{\mathcal{U}}_{n}^{reg,vevp} - \tilde{\mathcal{U}}_{n+1}^{vep}\right) e^{\left(-\frac{h_{vepd,n+1}}{h_{vevp,n+1} - h_{vepd,n+1}}\right)}$$
(3.11)

A regularização do tensor algorítmico apresentada por Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013) não incorpora diretamente o modelo de dano. A fim de compatibilizar a metodologia dos autores e o modelo de Krairi, Doghri e Robert (2016), a regularização é escrita na Equação (3.11), em termos do operador tangente viscoelástico-plástico efetivo \tilde{C}_{n+1}^{vep} . Os elementos h_{vep} e h_{vevp} do expoente, na Equação (3.11), são deduzidos para incorporar o modelo de dano por duas metodologias distintas, conforme a Seção 3.1.3.

A rigidez superestimada produzida pelo operador tangente algorítmico é outro problema relatado no uso do conceito LCC envolvendo plasticidade. Isso ocorre devido à anisotropia do operador \mathbb{C}_{n+1}^{alg} após o escoamento, mesmo com a definição de

um material isotrópico (PIERARD; FRIEBEL; DOGHRI, 2004). Por outro lado, é mais eficiente representar a rigidez, em cada fase material, por um tensor isotrópico, pois, neste caso, para inclusões esferoides, o tensor de Eshelby *S* apresenta solução analítica. Isto posto, é aplicado um método para extrair a parcela isotrópica \tilde{C}_{n+1}^{iso} do tensor $\tilde{C}_{n+1}^{reg,vevp}$, conforme a Equação (3.12) (KRAIRI; DOGHRI; ROBERT, 2016). As operações estão detalhadas no Apêndice A.

$$C_{n+1}^{iso} = (1 - D_{n+1})(2\hat{\mathcal{G}}^{iso}\mathbb{I}^d + 3\hat{\mathcal{K}}^{iso}\mathbb{I}^v)$$
(3.12)

$$\hat{\mathcal{G}}^{iso} = \frac{1}{10} \left(\mathbb{I}^d :: \tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{reg, vevp} \right)$$
(3.13)

$$\hat{\mathcal{K}}^{iso} = \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}^v :: \tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{reg, vevp} \right)$$
(3.14)

Surgiram dificuldades na interpretação da metodologia de regularização aplicada por Krairi, Doghri e Robert (2016) e Krairi (2015). Consequentemente, também foi formulada a regularização em função do operador tangente viscoelastico-plástico C_{n+1}^{vepd} , acoplado ao dano, deduzido com base no trabalho de Doghri (1995) e Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013). Para esta solução, a Equação (3.12) é reescrita na Equação (3.15), pois a parcela de dano está incorporada no operador tangente. As demais equações são aplicadas diretamente no tensor $C_{n+1}^{reg,vevpd}$.

$$\mathcal{C}_{n+1}^{iso} = 2\hat{\mathcal{G}}^{iso}\mathbb{I}^d + 3\hat{\mathcal{K}}^{iso}\mathbb{I}^v \tag{3.15}$$

$$\hat{\mathcal{G}}^{iso} = \frac{1}{10} \left(\mathbb{I}^d :: \tilde{\mathcal{C}}_{n+1}^{reg, vevpd} \right)$$
(3.16)

$$\hat{\mathcal{K}}^{iso} = \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}^v :: \tilde{\mathbb{C}}_{n+1}^{reg, vevpd} \right)$$
(3.17)

3.1.3 Operador tangente algorítmico

A regularização desenvolvida por Doghri, Adam e Bilger (2010) para elastoviscoplasticidade é aplicada diretamente em Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), no modelo viscoelástico-viscoplástico, apenas com a substituição do módulo de cisalhamento elástico *G* pelo viscoelástico $\hat{\mathcal{G}}$. A metologia proposta por Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013) é adaptada para um modelo semelhante acoplado ao dano, no trabalho de Krairi (2015). O autor sugere a mesma formulação estabelecida por Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013) para a regularização, com a inserção da parcela de dano na Equação (3.12). Assim, a regularização é formulada em função do tensor tangente viscoelastico-plástico efetivo \tilde{C}_{n+1}^{vep} .

$$\tilde{C}_{n+1}^{vep} = \hat{C}_{n+1}^{ve} - \frac{(2\hat{\mathcal{G}})^2}{h_{vepd,n+1}} N_{n+1} \otimes N_{n+1}$$
(3.18a)

$$\dot{p} = g = \frac{\omega(f_{n+1})}{(1 - D_{n+1})\eta_{vp}}$$
 (3.18b)

$$h_{vepd,n+1} = -\frac{\partial_p g}{\partial_{\sigma_{eq}} g}$$
(3.18c)

$$h_{vevpd,n+1} = \frac{1}{\Delta t \partial_{\sigma_{eq}} g} - \frac{\partial_p g}{\partial_{\sigma_{eq}} g}$$
(3.18d)

Pela metodologia descrita por Krairi (2015) e aplicada em Krairi, Doghri e Robert (2016), o operador tangente algorítmico \mathbb{C}_{n+1}^{alg} utilizado nas equações constitutivas do processo de homogeneização é definido pela Equação (3.12), de acordo com a Equação (3.11) e Equação (3.18). Essa metodologia não considera a sensibilidade do dano D, em relação a $\Delta \epsilon$, no operador \mathbb{C}_{n+1}^{iso} . Como alternativa, neste trabalho, é proposta a regularização da Equação (3.20), deduzida na Seção B.5, como função do operador analítico \mathbb{C}_{n+1}^{vepd} (DOGHRI, 1995) e da regularização expressa pela Equação (3.11). Nessa abordagem o operador tangente algorítmico é definido pela Equação (3.15).

$$\mathbb{C}_{n+1}^{vepd} = (1-D) \left[\hat{\mathbb{C}}^{ve} : \left(\mathbb{I} - (\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \frac{2\hat{\mathcal{G}}}{h_{vep}} \right) - \frac{2\hat{\mathcal{G}}\mathcal{H}}{(1-D)h_{vep}} \left(\frac{Y}{S} \right)^s \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \mathbf{N} \right]$$
(3.19)

$$C_{n+1}^{reg,vevpd} = C_{n+1}^{vepd} + \left((1 - D_{n+1}) \tilde{C}_n^{reg,vevp} - C_{n+1}^{vepd} \right) e^{\left(-\frac{h_{vep,n+1}}{h_{vevp,n+1} - h_{vep,n+1}} \right)}$$
(3.20)

3.2 ALGORITMO MFH

A cada passo de integração, a aproximação do resíduo determinado pela Equação (3.2) depende da homogeneização não linear do RVE. O equilíbrio mecânico estabelece um incremento médio $\Delta \bar{\epsilon}$ e, de acordo com a Equação (2.13a), os incrementos de deformações médias $\Delta \bar{\epsilon}_M$ e $\Delta \bar{\epsilon}_1$ são estimados conforme a Equação (3.21a) e Equação (3.21b).

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 = \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \tag{3.21a}$$

$$\Delta \bar{\epsilon}_M = \frac{\Delta \bar{\epsilon} - v_1 \Delta \bar{\epsilon}}{1 - v_1}$$
(3.21b)

No processo de homogeneização, um algoritmo com o método de Newton resolve o sistema da Equação (3.5) para os incrementos $\Delta \bar{\epsilon}_M$ e $\Delta \bar{\epsilon}_1$. A solução do sistema retorna o estado $\bar{\xi}(t_{n+1})$, a parcela isotrópica do operador tangente algorítmico da Equação (3.12), ou Equação (3.15), e o incremento de tensões afins médias $\Delta \overline{\varpi}$, das fases *M* e 1. Os tensores afins são obtidos pela Equação (3.22), a partir da Equação (2.13c) e Equação (2.13d).

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_1 \approx \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_1 - \mathbb{C}_{n+1,1}^{iso} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1$$
(3.22a)

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_M \approx \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_M - \mathbb{C}_{n+1,M}^{iso} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M$$
 (3.22b)

Neste ponto, com as fases aproximadas no instante atual, o método LCC da Equação (2.13) é aplicado e resulta no operador tangente isotrópico homogeneizado \bar{C}_{n+1}^{iso} , determinado pela Equação (2.13h). Após a homogeneização, o erro no campo da inclusão Υ é calculado conforme a Equação (3.23a), obtida pela combinação da Equação (2.13b) com a Equação (2.13e).

$$\Upsilon = A : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + (A - \mathbb{I}) : (\mathbb{C}_1^{iso} - \mathbb{C}_M^{iso})^{-1} : (\Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_1 - \Delta \bar{\boldsymbol{\varpi}}_M) - \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1$$
(3.23a)

$$\Delta \bar{\epsilon}_1 \approx \Delta \bar{\epsilon}_1 + \Upsilon, \qquad se ||\Upsilon|| > tol$$
(3.23b)

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M} = \frac{\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - v_{1} \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}}{1 - v_{1}}, \qquad se \ ||\boldsymbol{\Upsilon}|| > tol$$
(3.23c)

Pelas equações acima, se a norma do erro Υ estiver dentro de uma tolerância *tol*, o algoritmo volta à integração e o balanço mecânico determina um novo incremento de deformações médias $\Delta \bar{\epsilon}$. Caso contrário, os incrementos em cada fase, matriz e inclusão, são atualizados pela Equação (3.23c) e Equação (3.23b). O processo é repetido até a convergência.

Conforme já comentado, nesta implementação, o balanço mecânico está resumido a um ponto material. O resíduo da aproximação $\mathbf{R}_{\mathcal{P}}$, expresso na Equação (3.2), é utilizado no método de Newton para corrigir o incremento de deformações médias $\Delta \bar{\epsilon}$. A solução da Equação (B.17), após substituir o gradiente $\nabla \mathbf{R}_{\mathcal{P}}$ por \bar{C}_{n+1}^{iso} , fornece a correção da deformação $\delta \Delta \bar{\epsilon}$.

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}},n+1} = \boldsymbol{\sigma}(t_{n+1}) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_n) - \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$
(3.24a)

$$\delta \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \approx (\bar{\mathbb{C}}_{n+1}^{iso})^{-1} : \boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}}, n+1, l}, \qquad se \ ||\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}}, n+1, l+1}|| > tol \tag{3.24b}$$

Foi elaborado um fluxograma completo da implementação, este consta no Anexo A. Deste, ao definir as fases com mesmas propriedades, são obtidos resultados para o RVE com a relação constitutiva revisada na Seção 2.5, sem efeito da MFH. Estes resultados, bem como as curvas de fadiga e do comportamento cíclico, são analisados e comparados à referências no Capítulo 4.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Em decorrência da complexidade do modelo de homogeneização apresentado, a validação das diferentes partes que o compõem foi necessária. Neste processo, os comportamentos isolados das parcelas viscoelástica, viscoplástica, dano dúctil, e MFH foram investigados e comparados aos encontrados em material de referência (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010; MILED, 2011; MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011; MILED; DOGHRI; BRASSART *et al.*, 2013; KRAIRI; DOGHRI, 2014; KRAIRI, 2015). Para o estudo do fenômeno de fadiga as curvas de solicitação versus vida, assim como a evolução das variáveis de estado, foram comparadas as curvas obtidas por Krairi, Doghri e Robert (2016) para o HDPE. A partir destas, foi realizada uma análise dos efeitos da solicitação e de sensibilidade aos parâmetros de dano e homogeneização. Conforme destacado posteriormente, alguns resultados apresentaram diferenças em relação aos trabalhos de referência. Devido ao grande número de parâmetros agregados ao modelo, todos os resultados foram obtidos com base nos parâmetros materiais apresentados pelas referências citadas.

4.1 VALIDAÇÃO

O modelo de viscoelásticidade e o caso limite de elasticidade com viscoplasticidade foram comparados com as referências citadas, bem como à soluções analíticas para os ensaios de cisalhamento simples (MILED, 2011; MILED; DOGHRI; DELAN-NAY, 2011). Já os resultados do modelo acoplado ao dano dúctil foram comparados apenas à referência Krairi e Doghri (2014). As curvas obtidas pela implementação do método de homogeneização para fases com comportamento elasto-viscoplástico foram comparadas aos resultados de (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010), origem dos métodos *Incrementally Affine Linearization* e regularização utilizados nesta formulação (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).

4.1.1 Viscoelasticidade

A Figura 4.1 apresenta duas simulações de ensaios de cisalhamento simples com controle de deformação cisalhante γ_{12} para o material cujos parâmetros constam na Tabela 4.1. Os resultados estão comparados com a solução analítica e com as curvas digitalizadas da referência Miled, Doghri e Delannay (2011).

$$\sigma_{12} = 2\left(G_{\infty}t + \sum_{i=1}^{n} G_{i}g_{i}(1 - e^{\frac{-t}{g_{i}}})\right)\dot{\epsilon}_{12}$$
(4.1)

A solução analítica foi obtida com a definição da taxa de deformação $2\dot{\epsilon}_{12} = \dot{\gamma}_{12}$ constante ao longo do ensaio. Nesse contexto, a solução analítica da primeira integral, na Equação (2.28), é expressa pela Equação (4.1). Nas próximas seções,

Viscoelasticidade Linear					
$\overline{G_0 = 1000 \left[MPa\right]}$	$K_0 = 0 \left[MPa \right]$				
$G_i \left[MPa ight]$	$K_i \left[MPa \right]$	$g_i\left[s ight]$	$k_i \left[s \right]$		
160	0	10	∞		
40	0	10^{-1}	∞		

Tabela 4.1 – Parâmetros materiais.

Fonte: (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

serão apresentados casos com comportamento inicial elástico. Para esses casos, ao tomar o limite da relação constitutiva viscoelástica, quando os tempos característicos desviadores $g_i \rightarrow \infty$, o modelo elástico linear é recuperado com módulo igual a rigidez instantânea C_0 .

Figura 4.1 - Cisalhamento simples (Entrada: Tabela 4.1)



Fonte: Dados de comparação (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

O modelo implementado recuperou com precisão a solução analítica da Equação (4.1), nos dois ensaios, conforme a Figura 4.1. Entretanto, a curva apresentada por Miled, Doghri e Delannay (2011) não coincide com a solução analítica. Quando comparadas, conforme a taxa de deformação aumenta, é notável um aumento na diferença entre a solução da referência e a analítica, ou numérica do presente estudo.

Além da discrepância evidente na Figura 4.1, também foram observadas dife-

Viscoelasticidade Linear				
$\overline{G_0 = 577 \left[MPa \right]}$	$K_0 = 1250 \left[MPa \right]$			
$G_i [MPa]$	$K_i \left[MPa ight]$	$g_i\left[s ight]$	$k_i \left[s \right]$	
340	404	110	15	
130	369	10	5	
25	115	5	3	

Tabela 4.2 – Parâmetros materiais.

Fonte: (MILED, 2011; MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

renças nos resultados entre as próprias referências Krairi e Doghri (2014) e Miled, Doghri e Delannay (2011). Na Seção 4.1.5, algumas causas possíveis serão mencionadas. Em relação à Figura 4.1, uma causa provável é a diferença nos parâmetros materiais, pois os resultados obtidos coincidem com a curva analítica.





Fonte: Dados de comparação (MILED, 2011; MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

Com os parâmetros da Tabela 4.2, foram realizadas três simulações de ensaio trativo uniaxial, para diferentes taxas de deformação, conforme a Figura 4.2. As simulações são controladas pela componente de deformação ϵ_{33} . Os resultados estão comparados com a solução analítica e com a referência (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011). Nas três simulações de ensaio uniaxial sequentes, o modelo convergiu,

tanto para a solução analítica, quanto para o resultado relatado pela referência.

4.1.2 Elasto-viscoplasticidade

A fim de validar a implementação de viscoplasticidade, foram realizadas simulações com os parâmetros materiais da Tabela 4.3 e os resultados foram comparados com as curvas apresentadas no trabalho de Krairi e Doghri (2014). Com esse objetivo, foram obtidas curvas para quatro taxas de solicitação distintas, em cisalhamento puro, Figura 4.3, e tração combinada com torção, ilustrado na Figura 4.4.





Fonte: Dados de comparação (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

O caso combinado é controlado por uma medida equivalente da taxa de deformação $\dot{\epsilon}_{eq}$, conforme a Equação (4.2) (KRAIRI; DOGHRI, 2014). As curvas de tensão versus deformação, obtidas pelas simulações, foram comparadas com os resultados da referência. No caso combinado, Figura 4.4, foi comparada apenas a curva da componente de tensão axial σ_{33} versus deformação ϵ_{33} .

$$\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\dot{\epsilon}_{11}^2 + \left(\frac{\dot{\gamma}_{12}}{\sqrt{3}}\right)^2} \tag{4.2}$$

A implementação mostrou capacidade de representar os resultados de elastoviscoplasticidade relatados pela referência Krairi e Doghri (2014), representados pelo



Figura 4.4 - Tração - Torsão (Entrada: Tabela 4.3)

Fonte: Dados de comparação (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

marcador circular. Uma pequena diferença é observada na Figura 4.3, antes do limite de proporcionalidade elástico, possivelmente, devido a técnica de digitalização utilizada para capturar os pontos da referência. O mesmo não é observado na Figura 4.4.

Elasticidade					
$E_0 = 3700 \left[MPa \right]$	$\nu_0=0,49$				
Viscoplasticidade					
Tensão de Escoamento	to Encruamento Isotrópico Lei de Norton				
$\sigma_{y} \left[MPa \right]$	$\kappa \left[MPa ight] \qquad heta \left[- ight] \qquad \eta \left[MPa \cdot s ight] \qquad m \left[- ight]$				
36	75	0.25	3600	9	

Fonte: (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

Devido ao modelo de viscoplasticidade implementado, a tensão de escoamento $\sigma_y = \sigma_{y0} + R$ não depende da taxa de deformação. Contudo, há dependência da taxa no limite de proporcionalidade elástico, limiar no qual a parcela viscoplástica da deformação apresenta maior representatividade, evidente na Figura 4.3 e Figura 4.4. Seme-lhante ao efeito do parâmetro de viscosidade plástica η_{vp} , caso a taxa de deformação $\dot{\epsilon}_{33} \rightarrow \infty$, a parcela viscoplástica $\epsilon_{33}^{vp} \rightarrow 0$.





Fonte: Autor.

Como mencionado na Seção 2.5.3, neste modelo a plasticidade invíscida é recuperada ao definir $\{\eta_{vp}, \dot{e}\} \rightarrow 0$. Com o expoente m = 9 e uma velocidade muito baixa $(\dot{e}_{33} = 10^{-15})$ a curva é próxima do caso invíscido, recuperado quando $\eta_{vp} = 10^{-15}$, conforme a Figura 4.5. A mesma curva foi obtida ao definir o expoente m = 1, 5, com taxa $\dot{e}_{33} = 10^{-10}$. Esse comportamento é semelhante ao exposto por Alfano, De Angelis e Rosati (2001), sob baixa taxa de solicitação. Um expoente menor representa um limite de proporcionalidade menor. Entretanto, a sensibilidade ao expoente é distinta para taxas elevadas.

4.1.3 Elasto-viscoplasticidade e dano dúctil

O modelo de dano dúctil implementado, quando considerado, introduz algumas dificuldades com relação ao procedimento de Newton aplicado ao sistema de equações visto na Seção 3.1, como a deterioração da acurácia conforme o dano aumenta e, para valores elevados de dano, impossibilita a convergência. Portanto, as simulações de dano estão restritas a baixos valores de dano, próximos a 25%. A capacidade de convergência do método é garantida pela escolha adequada do passo inicial. Para tal, foi implementada a metodologia de Souza Neto, Peric e Owen (2011).

Os resultados obtidos com a implementação foram comparados às curvas de elasto-viscoplasticidade-dano apresentadas por Krairi e Doghri (2014). Foram realiza-

das simulações de cisalhamento puro, para diferentes taxas de deformação, com os parâmetros materiais da Tabela 4.3 e dano, conforme a Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Parâmetros materiais.

	Dano		
$\overline{S\left[MPa\cdot s^{-1}\right]}$	$s\left[-\right]$	$p_D\left[- ight]$	$D_c\left[- ight]$
0,06	0,01	0	1

Fonte: (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

Evidente na Figura 4.6, a implementação, sem a parcela de viscoelasticidade, converge às curvas de referência. A sensibilidade do modelo aos parâmetros de dano S e s serão discutidos na Seção 4.2.3. O efeito da taxa de deformação é demonstrado pela Figura 4.7, na qual são apresentas as curvas de dano versus a deformação visco-plástica acumulada efetiva p. É observado o crescimento proporcional do dano com o aumento da taxa de deformação. Entretanto, sob taxas menores, a parcela viscoplástica acumenta, assim como o valor final de dano.





Fonte: Dados de comparação (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

O parâmetro não linear de dano s, usualmente, caracteriza os comportamentos representados pelas curvas da Figura C.8, as quais ilustram três tipos de materiais com tenacidades diferentes. A curva (3), é simulada por valores s < 0. Neste caso,

o valor de dano satura abaixo do valor crítico D_c , assim, após um período de amolecimento, o material volta a encruar. Do contrário, como exposto na Figura 4.7, caso $0 \le s \le 0, 1$, o dano evolui, qualitativamente, de forma linear em relação a p. Já para s > 0, 1, o dano evolui exponencialmente, representado pelas curvas tracejadas. O último caso é capaz de simular a curva (2) da Figura C.8.





Fonte: Autor.

4.1.4 Viscoelasticidade-viscoplasticidade

A Figura 4.8 apresenta o resultado da simulação de um ensaio de cisalhamento simples, sob controle da componente de deformação γ_{12} , para o material com os parâmetros da Tabela 4.5. O ensaio é composto por três estágios de carga. Nos primeiros 0, 25 s é imposta uma taxa de deformação $\dot{\gamma}_{12} = 0, 25 s^{-1}$. Entre 0, 25 s e 0, 5 s a taxa de deformação aumenta para $\dot{\gamma}_{12} = 0, 5 s^{-1}$ e, do tempo 0, 5 s até o final do ensaio, a deformação é mantida constante.

Na Figura 4.8, os resultados obtidos no presente estudo coincidem com os apresentados em Miled, Doghri e Delannay (2011), no qual foi utilizada uma solução analítica para os diferentes intervalos de tempo. A comparação, para um passo de tempo suficientemente pequeno, mostra a convergência à solução analítica formulada por Miled, Doghri e Delannay (2011).





Fonte: Dados de comparação (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

Viscoplasticidade							
Tensão de Escoamento	Lei de Nor	rton					
$\sigma_{y} \left[MPa \right]$	$\kappa[MPa]$	$\theta\left[- ight]$	$\eta \left[MPa\cdot s\right]$	$m\left[- ight]$			
40	80	1	300	1			

Tabela 4.5 – Parâmetros materiais.

Fonte: (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

A simulação representada na Figura 4.8, foi realizada com ordem de grandeza para as taxas de deformação próxima à aplicada nas simulações da Figura 4.1. É importante ressaltar que, na Figura 4.1, há uma disparidade considerável entre os resultados da implementação desenvolvida e a curva de comparação. Em vista do fato das duas figuras representarem o comportamento mecânico de materiais com parâmetros viscoelásticos idênticos, há forte indício que a diferença em alguns resultados tenha origem na realização de simulações com parâmetros materiais distintos dos reportados. Essa discussão foi relevante durante o desenvolvimento, pois, em outras curvas, foram encontradas diferenças semelhantes. Esse fato dificultou consideravelmente o processo de validação da presente implementação.

No artigo de Miled, Doghri e Delannay (2011), é encontrado o exemplo simulado

Viscoelasticidade Linear							
$G_0 = 577 \left[MPa \right]$	$K_0 = 1250 \left[MPa \right]$						
$G_i [MPa]$	$G_i [MPa] K_i [MPa]$						
340	404		110	15			
130	369	10	5				
25	315	315					
	Viscoplasticidad	le					
Tensão de Escoamento	Encruamento Iso	otrópico	Lei de Nor	rton			
$\sigma_y [MPa]$	$\kappa \left[MPa ight]$	$n\left[- ight]$	$\eta \left[MPa\cdot s\right]$	$m\left[- ight]$			
10	28	0, 39	106	7			

Tabela 4.6 – Parâmetros materiais.

Fonte: (MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

com os parâmetros materiais da Tabela 4.6. Os valores da Tabela 4.6 são idênticos aos encontrados em Miled (2011). Já no artigo de Miled, Doghri e Delannay (2011), tal tabela é repetida, entretanto, difere no módulo volumétrico. Enquanto no primeiro $K_3 = 315$, no segundo $K_3 = 115$. Na Figura 4.9 estão ilustradas as curvas de tensão versus deformação de um caso uniaxial com controle de deformação ϵ_{33} , para os dois valores de K_3 , comparadas à curva da referência. Com base no resultado exposto, por dedução, o valor usado na referência foi $K_3 = 315$.

A curva de referência da Figura 4.9 corresponde a uma tentativa de capturar o comportamento mecânico do HDPE sob as cargas da Tabela 4.7, observado experimentalmente por Zhang e Moore (1997). Notoriamente, há um aumento da não linearidade no descarregamento, conforme aumenta a deformação. O trabalho de Miled, Doghri e Delannay (2011) levanta a hipótese de tratar esse comportamento com um modelo de encruamento cinemático. Outra abordagem é proposta por Krairi e Doghri (2014), através do acoplamento de dano, como será visto na próxima seção.

Fal	bela	4.7	– Eta	apas	de	S0	lici	taç	ão.
-----	------	-----	-------	------	----	----	------	-----	-----

Deformação final ϵ_{33}							
0,028	0,011	0,05	0,031	0,071	0,032		

Fonte: (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

Em Krairi e Doghri (2014), os autores também discutem a possibilidade de capturar a forte não linearidade do descarregamento com modelos de viscoelasticidade não linear, embora não tenham realizado esta análise. Comparada à hipótese de Miled, Doghri e Delannay (2011), a proposta de Krairi e Doghri (2014) parece mais eficiente, pois preserva a possibilidade de aplicar um modelo usual de encruamento cinemático para representar outros fenômenos não lineares, como anisotropia e *ratchetting*.



Figura 4.9 – Tração cíclica (Entrada: Tabela 4.6; Tabela 4.7; $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-4} s^{-1}$)

Fonte: Dados de comparação (MILED, 2011; MILED; DOGHRI; DELANNAY, 2011).

4.1.5 Viscoelasticidade-viscoplasticidade-dano

O mesmo comportamento ilustrado na Figura 4.9 foi alvo de estudo em Krairi e Doghri (2014). Entretanto, com base na Figura 4.10, a primeira amplitude de deformação $\epsilon_{33} = 0,028$, foi substituída por $\epsilon_{33} = 0,03$, assim como a penúltima $\epsilon_{33} = 0,071$, por $\epsilon_{33} = 0,07172$. Como mencionado anteriormente, os autores buscam a representação do material sob descarregamento, através da incorporação do dano. A metodologia dos autores para identificar os parâmetros viscoelásticos é a mesma utilizada por Miled, Doghri e Delannay (2011). Neste último trabalho de referência, os parâmetros viscoelásticos são apresentados já aproximados para o modelo tridimensional, em termos de $\{G, K, g, k\}$, enquanto em Krairi e Doghri (2014) os valores são reportados para o módulo elástico, Poisson e tempo característico unidimensional, respectivamente, $\{E, \nu, \tau\}$.

Na Figura 4.10, os dados do experimento e a curva de referência foram extraídos do trabalho de Krairi e Doghri (2014). Com os parâmetros viscoelásticos, viscoplásticos, de encruamento e dano reportados na referência, o resultado da implementação está muito distante da curva de referência, principalmente na primeira região viscoelástica. Portanto, para demonstrar a capacidade preditiva do modelo, foi realizado um ajuste manual dos parâmetros de encruamento e dano, conforme a Tabela 4.8. Ainda na Figura 4.10, a simulação representa o melhor ajuste obtido para os dados ex-

Viscoplasticidade							
Tensão de Escoamento Encruamento Isotrópico Lei de Norton							
$\sigma_y \left[MPa \right]$	$\kappa[MPa]$	$n\left[- ight]$	$\eta \left[MPa\cdot s\right]$	$m\left[- ight]$			
10	46, 5	0, 15	106	7			
Dano							
$\overline{S\left[MPa\cdot s^{-1}\right]}$	$S\left[- ight]$		$p_D\left[- ight]$	$D_c\left[- ight]$			
2.4	-4.6		0	0,25			

Fonte: autor (ajustados com base em Miled, Doghri e Delannay (2011)).

perimentais, apresentados em vermelho. Os parâmetros viscoelásticos foram fixados iguais aos da Tabela 4.6.

Figura 4.10 – Tração cíclica (Entrada: Tabela 4.6; $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-4} s^{-1}$)



Fonte: Dados de comparação (KRAIRI; DOGHRI, 2014).

Outro fator que dificultou o processo de validação reside na interconversão entre os parâmetros frequentemente utilizados para descrever a parcela viscoelástica do modelo. Todas as referências utilizadas para a validação, até então, aplicam a mesma simplificação na determinação dos parâmetros viscoelásticos tridimensionais a partir da aproximação unidimensional. O principal conceito dessa simplificação é a definição do coeficiente de Poisson ν constante. Isto posto, para cada braço *i* do modelo reológico, a relação entre o módulo elástico, cisalhante e volumétrico é expressa pela Equação (4.3) e os tempos característicos, conforme Ohkami e Ichikawa (1997), pela Equação (4.4). Contudo, quando as relações abaixo são utilizadas para determinar ν com os valores { G_i, K_i } da Tabela 4.6, são encontradas medidas diferentes para cada braço *i*, contrapondo as relações da Equação (4.3).

$$G_i = \frac{E_i}{2(1+\nu)}$$
; $K_i = \frac{E_i}{3(1-2\nu)}$ (4.3)

$$g_i = \frac{\tau_i E_i}{G_i} \quad ; \quad k_i = \frac{\tau_i E_i}{K_i} \tag{4.4}$$

4.1.6 Multiescala

No trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016), com o fenômeno de dano, não há resultados de simulação multiescala para um caso monotônico, mas apenas para fadiga no HDPE e em materiais reforçados com fibras. Os resultados de fadiga no HDPE serão discutidos na Seção 4.2. Em Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), há resultados de homogeneização para o modelo de viscoelasticidade-viscoplasticidade. Neste último, os autores validaram a sua implementação comparando os resultados de elasto-viscoplasticidade aos relatados por Doghri, Adam e Bilger (2010). Em vista das dificuldades de comparação dos resultados obtidos neste trabalho e os relatados por Miled, Doghri e Delannay (2011) e Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), a validação da implementação do processo de homogeneização foi constatada pela comparação das curvas com a referência Doghri, Adam e Bilger (2010), para um modelo elasto-viscoplástico.

4.1.6.1 Elasto-viscoplasticidade

O modelo elasto-viscoplástico é recuperado ao definir os parâmetros de viscoelasticidade e dano na condição limite $\{g_i, k_i, p_D\} \rightarrow \infty$, de forma a anular seus efeitos. As simulações foram realizadas utilizando os parâmetros da Tabela 4.9, com inclusões esféricas, definidas pela razão de aspecto Z = 1, e fração volumétrica $v_1 = 30 \%$. Na função potência de Norton da Equação (2.44), o denominador σ_{y0} é substituído, apenas neste exemplo, pela tensão de escoamento $\sigma_y = \sigma_{y0} + R$.

Em relação ao modelo utilizado no fenômeno de fadiga (KRAIRI; DOGHRI; RO-BERT, 2016), além da alteração anterior, no processo de homogeneização a isotropização também é diferente. No trabalho de Doghri, Adam e Bilger (2010) é aplicado o método geral para a extração da parcela isotrópica do operador tangente algorítmico, assim como em Krairi, Doghri e Robert (2016). Todavia, enquanto Doghri, Adam e Bilger (2010) utiliza a parcela isotrópica $C_{n+1,M}^{iso}$ para obter um coeficiente de Poisson ν e deste determinar os tensores de Eshelby S e Hill \mathbb{P} , a abordagem aplicada à fadiga também realiza as operações do método LCC, expressa na Equação (2.13), com os operadores $\mathbb{C}_{n+1,i}^{iso}$, de cada fase material *i*.

Elasticidade						
	Matriz		Inclu	são		
$E = 70 \left[GPa \right]$	$\nu = 0.33 [-]$ $E = 400 [GPa]$ $\nu = 0.286 [-]$					
Viscoplasticidade						
fase	Tensão de Escoamento	Encruam	ento Isotrópico	Lei de Nor	ton	
	$\sigma_y \left[MPa \right]$	$\kappa \left[GPa\right]$	$n\left[- ight]$	$\sigma_y/\eta[s^{-1}]$	$m\left[- ight]$	
Matriz	70	4	0,4	$3 \cdot 10^{-4}$	1, 5	
Inclusão	400	8	0,4	$2 \cdot 10^{-4}$	1, 5	

Tabela 4.9 – Parâmetros materiais.

Fonte: (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).





Fonte: Dados de comparação (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).

A Figura 4.11 e Figura 4.12 apresentam resultados de tração uniaxial com controle da componente de deformação ϵ_{33} . Nas figuras é observada a capacidade da implementação em representar as curvas da referência sob solicitação não monotônica e diferentes taxas de deformação. Assim como observaram Doghri, Adam e Bilger (2010) e Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), o método de regularização minimiza a sensibilidade ao tamanho de passo no tempo, ou número de incrementos, visto na Figura 4.12, pela comparação das simulações com 200 e 1000 incrementos.



Figura 4.12 – Tração (Entrada: Tabela 4.9)

Fonte: Dados de comparação (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).

A tensão equivalente de von Mises em cada fase, matriz e inclusão, está representada na Figura 4.13, em função da componente de deformação ϵ_{33} , para a mesma simulação da Figura 4.12, com taxa de deformação $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-6}$. A comparação entre as curvas resultantes e de referência demonstram um comportamento semelhante, entretanto, há uma diferença no valor de tensão após certo nível de deformação. Também visível na Figura 4.12, a disparidade entre os resultados evolui conforme aumenta a parcela viscoplástica.

Dentre as quatro curvas comparadas, apenas representação do caso invíscido, com taxa $\dot{\epsilon}_{33} = 10^{-6}$, apresentou uma diferença significativa. A classe Perzyna de modelos viscoplásticos pode ocasionar um problema numérico na reprodução do comportamento estático, ou invíscido. Como mencionado na Seção 4.1.2, a ocorrência desse problema é relacionada à magnitude do expoente *m*. Na presente implementação não foi incorporado nenhum procedimento para mitigar tal fenômeno numérico, logo surge a hipótese desse representar a causa da diferença de resultados entre as curvas obtidas nas simulações e àquelas tomadas como referencia, principalmente para velocidades extremamente baixas de deformação, conforme a Figura 4.12 e Figura 4.13.


Figura 4.13 – Campos das fases (Entrada: Tabela 4.9; $\dot{\gamma}_{33} = 10^{-6} s^{-1}$)

Fonte: Dados de comparação (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).

4.2 FADIGA NO HDPE

O comportamento de fadiga explorado nesta seção para o HDPE está limitado ao regime dominado mecanicamente, definido por Janssen, Kanter *et al.* (2008) com geração de calor desprezível. Embora os resultados das simulações apresentem uma região inicial de baixo ciclo, esta não é relevante neste trabalho. Essa limitação é definida em Krairi, Doghri e Robert (2016) e permanece neste estudo, com comportamento macroscópico estritamente viscoelástico.

Tabe	la 4.10 –	· Parâmetros	viscoe	lásticos.

Viscoelas		
$E_0 = 3000 \left[MPa \right]$	$\nu_0=0,30$	
$E_i \left[MPa \right]$		$\tau_{i}\left[s\right]$
981,5		0,01
611		0,036
500		80

Fonte: (KRAIRI; DOGHRI; ROBERT, 2016).

Caso não haja outra indicação, nos resultados apresentados foram utilizados 50 incrementos de tempo por ciclo e uma tolerância de 10^{-12} (ver Equação (3.23) e Equa-

ção (3.24)). Os parâmetros materiais aplicados são os mesmos relatados por Krairi, Doghri e Robert (2016), conforme a Tabela 4.10 e Tabela 4.11, com matriz viscoelástica e parâmetros viscoelásticos iguais à inclusão. As inclusões correspondem em volume a 2% do RVE e apresentam geometria esférica, com razão de aspecto Z = 1.

Viscoplasticidade								
Tensão de Escoamento	o de Escoamento Encruamento Isotrópico		Lei de Norton					
$\sigma_y \left[MPa \right]$	$\kappa \left[MPa ight]$	$n\left[- ight]$	$\eta \left[MPa\cdot s\right]$	$m\left[- ight]$				
7	0	1	29.10^{6}	6.2				
Dano								
$S=0,02\left[MPA\cdot s^{-1}\right]$	s = 2, 3[-]	$p_D = 0, 0 \left[-\right]$	$D_c = 25\% [-]$					

Tabela 4.11 – Parâmetros viscoplásticos da inclusao.

Figura 4.14 – Curvas de Wöhler (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $R_s = 0$; $f_s = 2 Hz$)



Fonte: (KRAIRI; DOGHRI; ROBERT, 2016).

A Figura 4.14 apresenta as curvas de Wöhler obtidas por simulação para tração uniaxial e torção, com frequência de solicitação $f_s = 2 Hz$ e razão $R_s = 0$, assim como as curvas de referência e experimentais, digitalizadas de Krairi, Doghri e Robert (2016). Os asteriscos representam as tensões máximas simuladas e as setas indicam

a interrupção da simulação, antes da falha. Evidente na Figura 4.14, para altos valores de tensão máxima, a simulação está próxima à curva de referência, porém diverge conforme esta tensão diminui. A diferença do comportamento entre as curvas das simulações de tração e torção, demonstra a dependência da pressão na evolução do dano, comportamento esperado, pois é função de *Y*.





Fonte: (KRAIRI; DOGHRI; ROBERT, 2016).

No trabalho de referência, os autores apresentam uma curva da deformação versus tempo, com $\sigma_{max,33} = 25 MPa$. A partir desta curva, foi calculada a deformação média por ciclo e esta foi comparada à resposta do modelo constitutivo implementado, conforme a Figura 4.15. É possível observar a distinção tanto no comportamento viscoelástico macroscópico, quanto no viscoelastico-viscoplástico da inclusão. A mesma simulação com passos menores no tempo, demonstra a convergência à uma média de deformação próxima a de referência, porém superior.

Para a simulação de tração da Figura 4.14, a evolução do dano em função do número de ciclos está ilustrada na Figura 4.16. Os resultados das simulações com tensão máxima $\sigma_{max,33} = \{28, 23, 21\}$ são comparados às curvas de referência. Como mencionado, na análise da Figura 4.14, as curvas obtidas divergem das referências, conforme a tensão máxima $\sigma_{max,33}$ diminui. Todavia, a função de dano demonstra uma dependência da tensão máxima semelhante a relatada na referência. Para baixas tensões, a curva apresenta um ponto de inflexão, após um número elevado de ciclos,



Figura 4.16 – Efeito da tensão axial máxima (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)

Fonte: (KRAIRI; DOGHRI; ROBERT, 2016).

como observado na curva para $\sigma_{max,33} = 19,8MPa$. Esse comportamento não é característico do modelo de Lemaitre-Chaboche, como visto na Seção 4.1.3. O ponto de inflexão representa também uma mudança no regime de fadiga, portanto aqui é proposta uma breve análise para encontrar possíveis relações desse comportamento.

Na Figura 4.17, estão representados os valores médios por ciclo da deformação macroscópica, da deformação total nas inclusões, da sua parcela viscoelástica e respectivo dano. Ao analisar a figura, é visível a saturação da deformação viscoelástica média macroscópica, representada pela linha hachurada azul, semelhante ao caso monotônico unidimensional, revisado no Apêndice E. Um efeito diferente é observado na inclusão, pela linha hachurada preta, a deformação viscoelástica média na inclusão passa a decrescer acentuadamente e simultaneamente com o aumento na evolução do dano médio, representada em magenta.

Com base na análise dos valores médios por ciclo, a evolução monotônica crescente da deformação viscoplástica e a saturação da parcela viescoelástica proporcionam o respectivo aumento e decrescimento nos seus valores médios vistos na Figura 4.17. Os resultados para $\sigma_{max,33} = 19,8 MPa$ demonstram uma relação entre o ponto de inflexão na curva de evolução do dano e a saturação da deformação viscoelástica. A Figura 4.17 induz uma relação do ponto de inflexão da curva de dano com o decrescimento da deformação viescoelástica média, aparentemente, localizado na

Figura 4.17 – *Ratchetting* (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{max,33} = 19, 8 MPa$)



Fonte: Autor.

intersecção das curvas.

4.2.1 Comparação dos métodos de regularização

No método de homogeneização implementado, a regularização desenvolvida por Doghri, Adam e Bilger (2010) garante um operador tangente algorítmico único para o método LCC aplicado à elasto-viscoplasticidade. O trabalho de Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013) contribuiu com a inclusão do modelo viscoelástico. Nessa abordagem, com o aumento do número de incrementos, o operador tangente algorítmico viscoelastico-viscoplástico C_{n+1}^{vevp} , no instante t_{n+1} , tende ao viscoelastico-plástico C_{n+1}^{vep} , ao invés de tender ao operador viscoelástico \hat{C}_{n+1}^{ve} .

Como mencionado na Seção 3.1.2, durante o desenvolvimento do trabalho, foi difícil interpretar a metodologia de regularização implementada por Krairi, Doghri e Robert (2016). Assim, surgiram duas abordagens, uma com base no relato da tese Krairi (2015) e outra deduzida a partir do trabalho precursor, isto é Doghri, Adam e Bilger (2010). Nesta seção serão apresentados os resultados para ambas, com uma breve discussão da estabilidade do método de Newton aplicado à solução do resíduo. Nesta seção, todos os resultados explorados admitem uma tolerância máxima $tol = 10^{-12}$.

Figura 4.18 – Efeito do número de incrementos nos dois métodos de regularização (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)



Fonte: autor.

Figura 4.19 - Pico de iterações por ciclo (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)



A sensibilidade da implementação ao número de incrementos por ciclo está representada na Figura 4.18. Para as duas metodologias, três casos foram avaliados: 50, 100 e 200 incrementos por ciclo. Pela análise dos resultados, os dois métodos convergem à mesma solução, para diferentes valores de tensão máxima σ_{max33} . Na Figura 4.19, constam as curvas do número máximo de iterações necessárias na aproximação dos resíduos $R_{\mathcal{P}}$ (Equação (3.24a)) e Υ (Equação (3.23a)), em cada ciclo, versus o número de ciclos. As simulações foram realizadas com $\sigma_{max,33} = 25 MPa$ e número de incrementos $q = \{8, 20, 50\}$.

As curvas para 8 e 20 incrementos justificam o menor tempo de execução observado durante a tomada destes resultados, próximo a 10% na simulação com 20 incrementos. Em contrapartida, para q = 50, o tempo de execução é, qualitativamente, o mesmo em relação ao método de Krairi, Doghri e Robert (2016). Na Figura 4.20, é feita uma análise semelhante, entretanto, pela média de iterações por ciclo, embora as curvas apresentem pouca distinção na convergência dos métodos, aparentemente, há maior eficiência na metodologia deduzida no Apêndice B.







Em Krairi, Doghri e Robert (2016) a regularização é aplicada no operador tangente algorítmico efetivo \tilde{C}_{n+1}^{vep} , conforme a Equação (3.18). Na Seção 3.1.2, foi apontada a falta do termo com a derivada do dano $\partial_{\Delta\epsilon}D$ no operador tangente algorítmico definido pelos autores. Dessa hipótese, a ausência deste poderia provocar a diminuição da taxa de convergência do método de Newton para a solução de $R_{\mathcal{P}} \in \Upsilon$. No entanto, com base nos resultados, o ganho computacional foi relativamente baixo nos casos simulados e há necessidade de uma análise mais detalhada.

4.2.2 Efeito das características do carregamento

Na Seção 2.2.1, foi relatada a dificuldade dos modelos preditivos usuais em retratar todos os efeitos da solicitação na vida de fadiga. Portanto, nesta seção, são apresentados resultados para diferentes perfis de solicitação. Foram realizadas simulações com as mesmas condições do caso uniaxial da Figura 4.14. O efeito da frequência f_s é analisado pelo dobro e metade do valor utilizado na simulação anterior. Nas mesmas circunstâncias, o efeito da tensão média é analisado no caso de reversão total da solicitação, com $R_s = -1$. Por fim, o efeito da função de solicitação, triangular e senoidal, é estudado para avaliar a sensibilidade do modelo à forma do sinal da solicitação.





Fonte: autor.

As solicitações simuladas estão representadas na Figura 4.21 com $\sigma_{max,33} = 25MPa$. Para cada perfil de solicitação, foram realizadas simulações com $\sigma_{max,33} = \{28, 25, 23, 22, 21, 20\}$. As curvas de fadiga resultantes estão ilustradas na Figura 4.22 e Figura 4.25. Note que, embora possuam a mesma tensão máxima, os casos com tração e compressão $R_s = -1$ apresentam o dobro da tensão alternante. O foco des-

tes resultados está na mudança de comportamento das curvas de solicitação versus vida, na transição dos regimes, e na capacidade, ou incapacidade, do modelo em representá-la.





Fonte: autor.

A influência da frequência na curva de Wöhler, pelas curvas da Figura 4.22, é semelhante ao relatado por Mortazavian *et al.* (2015) nos seus estudos experimentais. Em uma determinada faixa de frequência, na qual a geração de calor é desprezível, a vida de fadiga é maior conforme a frequência aumenta. Do ponto de vista do modelo homogêneo, sob velocidades de deformação maiores, a rigidez do modelo também é maior, como nos resultados da Seção 4.1. Nestes casos, a deformação e a histerese são menores, portanto o dano evolui mais lentamente.

As curvas uniaxiais com reversão completa $R_s = 1$ apresentam uma vida de fadiga menor quando comparadas ao mesmo caso com $R_s = 0$, esse comportamento é o mesmo reportado por Berrehili, Nadot *et al.* (2010). Entretanto, se apenas o efeito da velocidade fosse levado em consideração, o comportamento esperado da simulação com $R_s = -1$ e $f_s = 2 Hz$ seria um aumento na vida de fadiga, em relação a curva com mesma frequência e $R_s = 0$, pois a taxa de solicitação é maior. Para comparar as curvas com $R_s = 0$ e $R_s = -1$, sob mesma taxa de solicitação, foi realizada a simulação com $R_s = -1$ e $f_s = 1 Hz$, a qual resultou em uma vida ainda menor.



Figura 4.23 – Evolução do dano (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{33} = 20 MPa$)

Fonte: autor.

Figura 4.24 – *Ratchetting* (Entrada: Tabela 4.10; Tabela 4.11; $\sigma_{max,33} = 20 MPa$; $R_s = -1$; $f_s = 2 Hz$)



Fonte: autor.

A Figura 4.23 apresenta as curvas de evolução do dano das simulações representadas na Figura 4.21, com $\sigma_{max,33} = 20MPa$. Nas curvas com tração e compressão não é visível uma tendência a inflexão, como é observado nos casos com $R_s = 0$, embora tenham a mesma taxa de solicitação. Ao comparar as curvas da Figura 4.24 e o caso com $R_s = 0$ da Figura 4.17, a deformação média por ciclo e suas parcelas viscoelástica e viscoplástica são muito menores e próximas de zero. Nesse caso, com ausência de *rachetting*, não ocorreu inflexão na evolução do dano.







O efeito do formato da onda do sinal é observado com uma análise da Figura 4.25, na qual estão ilustradas as curvas da predição para um sinal triangular e para um sinal sinusoidal, ambas com $f_s = 2 Hz$ e $R_s = 0$. Assim como relatado por Janssen, Govaert e Meijer (2008), o sinal sinusoidal provoca uma vida de fadiga menor, quando comparado ao sinal triangular. Uma interpretação segue o mesmo conceito do efeito da frequência e taxa de solicitação, pois, próximo a tensão máxima, a taxa de solicitação é muito menor em relação ao sinal triangular.

4.2.3 Análise de sensibilidade aos parâmetros da inclusão

No trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016), os autores propuseram um conjunto de parâmetros materiais obtidos a partir da análise inversa por métodos de otimização, com base em curvas experimentais monotônicas e cíclicas macroscópicas. Os parâmetros viscoelásticos unidimensionais da matriz e inclusões foram ajustados para representar curvas de tração uniaxial, sob diferentes taxas de solicitação. Já os parâmetros tridimensionais foram aproximados ao definir o coeficiente de Poisson ν constante e igual em todos os braços de Maxwell.

Para determinar os parâmetros da viscoplasticidade e dano das inclusões, o ajuste foi realizado com base em curvas de Wöhler. O resultado são os parâmetros identificados na Tabela 4.10 e Tabela 4.11. Esta seção é destinada a explorar os efeitos dos parâmetros locais de viscoplasticidade, dano e homogeneização na curva de Wöhler. As simulações realizadas representam as mesmas condições do caso uniaxial da Figura 4.14, com sinal triangular, frequência $f_s = 2 Hz$ e razão $R_s = 0$.



Figura 4.26 – Sensibilidade a σ_{u0} (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)

Fonte: autor.

O efeito da variação de 10% na tensão limiar de escoamento σ_{y0} da inclusão é ilustrado na Figura 4.26. Esse parâmetro apresenta uma relação direta com a vida de fadiga, mais evidente sob valores maiores de tensão máxima. O oposto é observado ao analisar a Figura 4.27, na qual o parâmetro avaliado é o módulo de dano S, também com variação de 10%. As alterações em S influenciam a vida de fadiga com proporções maiores, conforme a tensão máxima diminui, com maior representatividade na fadiga de alto ciclo.



Figura 4.27 – Sensibilidade a *S* (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)

Fonte: autor.





Fonte: autor.

Nas curvas da Figura 4.28 e Figura 4.29, a mesma variação de 10% no expoente do dano *s* e no valor crítico de dano D_c , respectivamente, demonstram a mesma tendência da Figura 4.27. Entretanto, o efeito do expoente *s* é inversamente proporcional na curva de Wöhler. Dentre os parâmetros analisados o modelo mostrou menor sensibilidade ao valor crítico D_c . Contudo, as simulações propostas não permitem uma comparação do efeito dos três últimos parâmetros no regime de alto ciclo, região de interesse do presente estudo, pois os resultados apresentam uma diferença muito grande também na fadiga de baixo ciclo.



Figura 4.29 – Sensibilidade a D_c (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)



Na Figura 4.30, estão representadas as curvas com inclusões esféricas (Z = 1), oblata (Z = 0.5) e prolata (Z = 2). O caso com inclusões prolatas é equivalente a um compósito com fibras curtas, orientadas na direção da solicitação, portanto com maior rigidez nesse eixo. A simulação das inclusões prolatas com solicitação perpendicular ao eixo de maior raio das fibras é equivalente a manter aquela direção da solicitação e definir Z = 0.5. Assim, a curva para Z = 0.5 expressa menores rigidez e vida de fadiga. No modelo, o efeito da razão de aspecto Z demonstra maior influência sob baixos valores de tensão máxima e, aparentemente, quando comparado aos efeitos dos parâmetros analisados anteriormente, aumenta a sensibilidade do modelo a tensão máxima. Esta observação surge da comparação entre a Figura 4.30 e Figura 4.27, próximas nos primeiros valores de tensão máxima e bem distintas para $\sigma_{max.33} = 21MPa$.

Figura 4.30 – Sensibilidade a Z, inclusão esférica, oblata e prolata (Entrada: Tabela 4.10 e Tabela 4.11)



Fonte: autor.

5 CONCLUSÃO

Foi elaborada uma revisão do efeito das solicitações cíclicas na falha por fadiga mecânica dos materiais de engenharia, com enfase nos termoplásticos semicristalinos. A revisão abordou formas de análise, modelos preditivos e concepções do processo de nucleação. Para identificar e compreender como ocorre o processo de nucleação nos termoplásticos, foram revisados também a sua morfologia e seus micromecanismos de deformação e falha. Com base na literatura utilizada, o processo no qual ocorre a nucleação e formação de *crazes* ainda não é um consenso, contudo a presença de deformações localizadas é destacada como principal evidência na falha dos termoplásticos.

De acordo com a revisão, os modelos clássicos e recentes para a predição da falha por fadiga mecânica nos termoplásticos não são capazes de incorporar todos os fenômenos envolvidos, sobretudo em condições de solicitação não proporcional. Modelos numéricos multiescala compostos por sistemas discretos são, recentemente e amplamente, aplicados nesse tipo de análise, porém dependem de grande desempenho computacional. Os métodos MFH são uma alternativa com bom custo-benefício. Estes dependem de menor custo computacional e são capazes de incorporar um efeito local no comportamento macroscópico, mas, devido as simplificações necessárias, não o reproduz. Isto é, a MFH adotada não é adequada para representar os campos na microestrutura.

O modelo desenvolvido por Krairi, Doghri e Robert (2016) foi revisado e implementado. Na fundamentação do GSM, com maiores detalhes na tese de Krairi (2015), surgiu a dificuldade de formular a estratégia de regularização do operador tangente algorítmico estabelecida pelos autores. Conforme a revisão do trabalho de Doghri, Adam e Bilger (2010), foram formuladas duas estratégias para determiná-lo. Uma delas é fundada no relato da tese de Krairi (2015), a outra é deduzida com base em outras simplificações. Nos resultados obtidos neste trabalho, as duas estratégias apresentam curvas próximas, com tempos de execução, ligeiramente, diferentes.

Cada modelo acoplado no potencial de dissipação foi analisado separadamente. Os resultados de viscoelasticidade foram validados com a solução analítica e comparados às curvas presentes em Miled, Doghri e Delannay (2011). Não foi possível validar a implementação deste trabalho com a da referência Miled, Doghri e Delannay (2011) em alguns casos de viscoelasticidade. A parcela viscoelástica também foi comparada para alguns resultados relatados por Krairi e Doghri (2014). Em relação a este último, com os parâmetros documentados pelos autores as curvas não coincidiram em nenhum dos casos analisados. Essas dificuldades provavelmente ocorreram ao aplicar a Equação (4.3). Enquanto Krairi e Doghri (2014) apresenta apenas uma medida para o coeficiente de Poisson e afirma a mesma metodologia de Miled, Doghri e Delannay (2011), com o parâmetros deste último cada braço reológico apresenta um Poisson distinto.

As curvas obtidas com o modelo de elasto-viscoplasticidade e elastoviscoplasticidade-dano foram comparadas aos resultados relatados por Krairi e Doghri (2014) e, em todos os casos analisados, a implementação apresentar curvas idênticas as da referência. O mesmo foi constatado pela comparação dos resultados do modelo viscoelastico-viscoplástico com a referência Miled, Doghri e Delannay (2011). Devido as diferenças nos resultados de algumas curvas, todas com viscoelasticidade, houve erros ao reportar os parâmetros viscoelásticos, por parte dos autores, ou em aplicá-los neste trabalho. Contudo, foi demonstrada a capacidade do modelo completo das fases em representar as tendências dos resultados relatados por Krairi e Doghri (2014), através do ajuste manual dos parâmetros.

Em razão das dificuldades de validação dos resultados com os trabalhos citados anteriormente, a implementação do algoritmo de homogeneização foi comparada aos resultados de Doghri, Adam e Bilger (2010) para um modelo elasto-viscoplástico. As curvas coincidem para todas as taxas de solicitação simuladas, exceto para a menor taxa, próxima ao caso invíscido. De acordo com a revisão do modelo de viscoplasticidade, há uma dificuldade numérica nestes casos e na implementação desenvolvida não foi aplicada nenhuma convenção para superá-la. Portanto, a diferença nos resultados da validação do modelo multiescala, provavelmente, ocorreu por uma diferença nessa parte da implementação.

Foi proposta uma análise da aplicabilidade do modelo desenvolvido no trabalho de Krairi, Doghri e Robert (2016). Por definição, os resultados estão limitados ao regime dominado mecanicamente e sua aplicabilidade fora desse não está no escopo deste trabalho. Isto posto, com base nos resultados obtidos, foi identificada a sensibilidade aos efeitos de solicitações multiaxais, não proporcionais e da forma do sinal na vida de fadiga. Os modelos viscosos permitem incorporar o efeito da frequência e amplitude da tensão nas curvas de Wöhler. A capacidade de simular a transição do regime de baixo para alto ciclo foi evidente com o fenômeno de *ratchetting*, sem reversão completa da solicitação. Nos resultados obtidos com $R_s = -1$ tal comportamento não foi observado, assim como o ponto de inflexão na evolução do dano.

A análise de sensibilidade realizada permitiu compreender a influência dos parâmetros analisados na curva de Wöhler, em função da tensão máxima. A partir dela seria possível estabelecer uma metodologia para caracterização dos parâmetros materiais, com base em uma referência macroscópica determinada no regime de baixo ciclo, pois estes ensaios são mais fáceis de realizar. Nesse caso, após estabelecer os demais parâmetros naquele regime, é conveniente ajustar $S \in D_c$ para estender a aplicabilidade ao regime de alto ciclo, pois apresentaram menor influência neste. O mesmo é dito para a razão de aspecto das inclusões Z e este pode auxiliar a representar o efeito da tensão média.

O resultado da sensibilidade aos parâmetros da inclusão, como proposto, não possibilitou uma análise comparativa entre a maioria destes parâmetros. Simulações com variações diferentes para cada parâmetro, determinadas para resultar em curvas com relação próxima de tensão máxima versus vida durante o regime de baixo ciclo, acresceria no entendimento da correlação dos parâmetros no regime de alto ciclo. Devido ao grande volume de conteúdos abordados neste trabalho e o tempo de processamento para tomada dos resultados, as análises foram delimitadas e os casos estudados não necessariamente são suficientes para compreender o fenômeno. Assim, com base nas limitações deste trabalho, foram elencadas também algumas outras recomendações para trabalhos futuros, a fim de complementar as análises propostas e investigar outros fenômenos associados, conforme segue:

- Obter mais resultados para análise de convergência dos métodos de regularização e sua influência na resposta do processo de homogeneização;
- 2. Realizar uma análise de sensibilidade com resultados próximos no regime de baixo ciclo, a fim de isolar o efeito no regime de alto ciclo;
- Determinar os parâmetros da matriz com base no comportamento cíclico experimental multiaxial;
- 4. Investigar formas de determinar os parâmetros materiais das inclusões com base no comportamento cíclico experimental multiaxial;
- 5. Estudar o efeito da tensão média com encruamento e dano não isotrópicos, ou ainda considerando inclusões não esféricas;
- 6. Acoplar o feito térmico e geração de calor no modelo constitutivo das fases;
- 7. Aplicar outras soluções semi-analíticas ao invés de Mori-Tanaka, por exemplo o *Double Inclusion Method* para incluir o conceito dos CZMs.

REFERÊNCIAS

ABRAMS, Kerry J *et al.* Nanoscale mapping of semi-crystalline polypropylene. **physica status solidi c**, Wiley Online Library, v. 14, n. 12, p. 1700153, 2017.

ALFANO, Giulio; DE ANGELIS, Fabio; ROSATI, Luciano. General solution procedures in elasto/viscoplasticity. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 190, n. 39, p. 5123–5147, 2001.

AMJADI, Mohammad; FATEMI, Ali. Multiaxial Fatigue Behavior of Thermoplastics Including Mean Stress and Notch Effects: Experiments and Modeling. **International Journal of Fatigue**, Elsevier, p. 105571, 2020.

ARNOLD, SM; SALEEB, Atef Fatthy. On the thermodynamic framework of generalized coupled thermoelastic-viscoplastic-damage modeling. **International journal of plasticity**, Elsevier, v. 10, n. 3, p. 263–278, 1994.

BABAEI, Behzad *et al.* Efficient and optimized identification of generalized Maxwell viscoelastic relaxation spectra. **Journal of the mechanical behavior of biomedical materials**, Elsevier, v. 55, p. 32–41, 2016.

BENAARBIA, Adil; ROUSE, James Paul; SUN, Wei. A thermodynamically-based viscoelastic-viscoplastic model for the high temperature cyclic behaviour of 9–12% Cr steels. **International Journal of Plasticity**, Elsevier, v. 107, p. 100–121, 2018.

BERREHILI, A; CASTAGNET, S; NADOT, Y. Multiaxial fatigue criterion for a high-density polyethylene thermoplastic. **Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures**, Wiley Online Library, v. 33, n. 6, p. 345–357, 2010.

BERREHILI, A; NADOT, Y *et al.* Multiaxial fatigue criterion for polypropylene–Automotive applications. **International Journal of Fatigue**, Elsevier, v. 32, n. 8, p. 1389–1392, 2010.

BESSELL, TJ; HULL, D; SHORTALL, JB. The effect of polymerization conditions and crystallinity on the mechanical properties and fracture of spherulitic nylon 6. **Journal of Materials Science**, Springer, v. 10, n. 7, p. 1127–1136, 1975.

BRETZ, Philip E; HERTZBERG, Richard W; MANSON, JA. Mechanisms of fatigue damage and fracture in semi-crystalline polymers. **Polymer**, Elsevier, v. 22, n. 9, p. 1272–1278, 1981.

CALLISTER, William D; RETHWISCH, David G. **Materials science and engineering: an introduction**. [*S.I.*]: Wiley New York, 2012.

CARVALHO, André Lus Cerávolo de *et al.* Avaliação do comportamento colico do polietileno de ultra-alto peso molecular, 2016.

CASTANEDA, Pedro Ponte; SUQUET, Pierre. Nonlinear composites. *In:* ADVANCES in applied mechanics. [*S.I.*]: Elsevier, 1997. v. 34. P. 171–302.

CASTRO, Paulo Bastos de; FANCELLO, Eduardo Alberto. Coupled ductile-hydrolytic damage model based on variational constitutive updates. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 323, p. 202–229, 2017.

DE BORST, René *et al.* **Nonlinear finite element analysis of solids and structures**. [*S.l.*]: John Wiley & Sons, 2012.

DOGHRI, Issam. Mechanics of deformable solids: linear, nonlinear, analytical and computational aspects. [*S.l.*]: Springer Science & Business Media, 2013.

DOGHRI, Issam. Numerical implementation and analysis of a class of metal plasticity models coupled with ductile damage. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, Wiley Online Library, v. 38, n. 20, p. 3403–3431, 1995.

DOGHRI, Issam; ADAM, L; BILGER, N. Mean-field homogenization of elasto-viscoplastic composites based on a general incrementally affine linearization method. **International Journal of Plasticity**, Elsevier, v. 26, n. 2, p. 219–238, 2010.

DOGHRI, Issam; OUAAR, Amine. Homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures: Study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms. **International Journal of Solids and structures**, Elsevier, v. 40, n. 7, p. 1681–1712, 2003.

DOWLING, Norman E. Mechanical behavior of materials: engineering methods for deformation, fracture, and fatigue. [*S.l.*]: Pearson, 2012.

EFENDIEV, Y; HOU, TY. **Multiscale finite element methods: theory and applications**. [*S.l.*: *s.n.*], 2009.

ESHELBY, John Douglas. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. **Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences**, The Royal Society London, v. 241, n. 1226, p. 376–396, 1957.

FARIAS, Jan-Michel; STAINIER, Laurent; FANCELLO, Eduardo. A Variational Visco-Hyperelastic Constitutive Model for Glassy Polymers. *In:*

FOUVRY, S; KAPSA, Ph; VINCENT, L. An elastic–plastic shakedown analysis of fretting wear. **Wear**, Elsevier, v. 247, n. 1, p. 41–54, 2001.

FUCK, Vincius Rios *et al.* Modelo de dano visco-hiperelástico para polmeros bioabsorvveis. *In:* PROCEEDINGS of the XXXVIII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, Florianópolis, Brazil. [*S.l.: s.n.*], 2017.

GAO, Zongzhan *et al.* Craze density based fatigue-damage analysis in polyethylene methacrylate. **Journal of Mechanical Science and Technology**, Springer, v. 33, n. 1, p. 225–232, 2019.

GENTIEU, Timothée *et al.* A mean-field homogenisation scheme with CZM-based interfaces describing progressive inclusions debonding. **Composite Structures**, Elsevier, v. 229, p. 111398, 2019.

GHADIMI, Behzad; NIKRAZ, Hamid; ROSANO, Michele. Dynamic simulation of a flexible pavement layers considering shakedown effects and soil-asphalt interaction. **Transportation Geotechnics**, Elsevier, v. 7, p. 40–58, 2016.

HILL, Rodney. A self-consistent mechanics of composite materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, Elsevier, v. 13, n. 4, p. 213–222, 1965.

HILL, Rodney. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, Elsevier, v. 13, n. 2, p. 89–101, 1965.

HOSFORD, William F. **Mechanical behavior of materials**. [*S.l.*]: Cambridge university press, 2010.

IRGENS, Fridtjov. **Continuum mechanics**. [*S.l.*]: Springer Science & Business Media, 2008.

JANSSEN, Roel PM; GOVAERT, Leon E; MEIJER, Han EH. An analytical method to predict fatigue life of thermoplastics in uniaxial loading: sensitivity to wave type, frequency, and stress amplitude. **Macromolecules**, ACS Publications, v. 41, n. 7, p. 2531–2540, 2008.

JANSSEN, Roel PM; KANTER, Dirk de *et al.* Fatigue life predictions for glassy polymers: a constitutive approach. **Macromolecules**, ACS Publications, v. 41, n. 7, p. 2520–2530, 2008.

JIRASEK, Milan; BAZANT, Zdenek P. **Inelastic analysis of structures**. [*S.l.*]: John Wiley & Sons, 2001.

JOG, CS; HUTTER, K. Foundations and Applications of Mechanics, Volume I: Continuum Mechanics. **Appl. Mech. Rev.**, v. 56, n. 4, b51–b51, 2003.

JONES, David RH; ASHBY, Michael F. Engineering materials 2: an introduction to microstructures, processing and design. [*S.l.*]: Elsevier, 2005.

KACHANOV, Mark. On the concept of damage in creep and in the brittle-elastic range. **international Journal of DAMAGE MECHANICS**, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 3, n. 4, p. 329–337, 1994.

KAJIYAMA, T; OKADA, T; TAKAYANAGI, M. The role of mosaic block structure on onset of deformation and fatigue of bulk crystallized polyethylene. **Journal of Macromolecular Science, Part B: Physics**, Taylor & Francis, v. 9, n. 1, p. 35–69, 1974.

KAUSCH, Hans-Henning. **Polymer fracture**. [*S.I.*]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 2.

KOWOLLIK, D *et al.* Application of a Viscoplastic Damage Model in a 3D FSI Analysis of a Rocket Nozzle. **Sonderforschungsbereich/Transregio 40-Annual Report 2011**, 2011.

KRAIRI, A; DOGHRI, I; ROBERT, G. Multiscale high cycle fatigue models for neat and short fiber reinforced thermoplastic polymers. **International Journal of Fatigue**, Elsevier, v. 92, p. 179–192, 2016.

KRAIRI, Anouar. Multiscale modeling of the damage and failure of homogeneous and short-fiber reinforced thermoplastics under monotonic and fatigue loadings. 2015. Tese (Doutorado) – Ph. D. Thesis, Université Catholique de Louvain.

KRAIRI, Anouar; DOGHRI, Issam. A thermodynamically-based constitutive model for thermoplastic polymers coupling viscoelasticity, viscoplasticity and ductile damage. **International Journal of Plasticity**, Elsevier, v. 60, p. 163–181, 2014.

LEMAITRE, Jean; CHABOCHE, Jean-Louis. **Mechanics of solid materials**. [*S.I.*]: Cambridge university press, 1994.

LEMAITRE, Jean; DESMORAT, Rodrigue. **Engineering damage mechanics: ductile, creep, fatigue and brittle failures**. [*S.l.*]: Springer Science & Business Media, 2005.

MALVERN, Lawrence E. Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium. [*S.l.*: *s.n.*], 1969.

MASSON, Renaud *et al.* An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, Elsevier, v. 48, n. 6-7, p. 1203–1227, 2000.

MICHLER, Goerg H; BALTÁ-CALLEJA, Francisco J. Nano-and micromechanics of polymers: structure modification and improvement of properties. [*S.l.*]: Carl Hanser Verlag GmbH Co KG, 2012.

MILED, B; DOGHRI, Issam; BRASSART, Laurence *et al.* Micromechanical modeling of coupled viscoelastic–viscoplastic composites based on an incrementally affine formulation. **International Journal of solids and structures**, Elsevier, v. 50, n. 10, p. 1755–1769, 2013.

MILED, Bilel. Coupled viscoelastic-viscoplastic modeling of homogeneous and reinforced thermoplastic polymers. **Katholieke Universiteit Leuven**, 2011.

MILED, Bilel; DOGHRI, Issam; DELANNAY, Laurent. Coupled viscoelastic–viscoplastic modeling of homogeneous and isotropic polymers: Numerical algorithm and analytical solutions. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 200, n. 47-48, p. 3381–3394, 2011.

MORI, Tanaka; TANAKA, K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. **Acta metallurgica**, Elsevier, v. 21, n. 5, p. 571–574, 1973.

MORTAZAVIAN, Seyyedvahid *et al.* Effect of cycling frequency and self-heating on fatigue behavior of reinforced and unreinforced thermoplastic polymers. **Polymer Engineering & Science**, Wiley Online Library, v. 55, n. 10, p. 2355–2367, 2015.

MOTTA, EP; REIS, JML; COSTA MATTOS, HS da. Modelling the cyclic elasto-viscoplastic behaviour of polymers. **Polymer Testing**, Elsevier, v. 78, p. 105991, 2019.

MULLA, Yuval *et al.* Crack initiation in viscoelastic materials. **Physical review letters**, APS, v. 120, n. 26, p. 268002, 2018.

MURA, Toshio. **Micromechanics of defects in solids**. [*S.I.*]: Springer Science & Business Media, 2013.

OHKAMI, T; ICHIKAWA, Yasuaki. A parameter identification procedure for viscoelastic materials. **Computers and Geotechnics**, Elsevier, v. 21, n. 4, p. 255–275, 1997.

PERI, Djordje. On a class of constitutive equations in viscoplasticity: formulation and computational issues. **International journal for numerical methods in engineering**, Wiley Online Library, v. 36, n. 8, p. 1365–1393, 1993.

PETERMANN, J; KLUGE, W; GLEITER, H. Electron microscopic investigation of the molecular mechanism of plastic deformation of polyethylene and isotactic polystyrene crystals. **Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition**, Wiley Online Library, v. 17, n. 6, p. 1043–1051, 1979.

PICARD, Donald; FAFARD, Mario. Three-Dimensional Constitutive Viscoelastic Model for Isotropic Materials. **Thermodynamics: Physical Chemistry of Aqueous Systems**, BoD–Books on Demand, p. 327, 2011.

PIERARD, O; FRIEBEL, C; DOGHRI, Issam. Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: a general framework and its validation. **Composites Science and Technology**, Elsevier, v. 64, n. 10-11, p. 1587–1603, 2004.

PIERARD, Olivier *et al.* Micromechanics of inclusion-reinforced composites in elasto-plasticity and elasto-viscoplasticity: modeling and computation. **Universite Catholique de Louvain**, 2006.

ROSA, E da. Análise de resistência mecânica: mecânica da fratura e fadiga. **Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina**, 2002.

SHRESTHA, Rakish; SIMSIRIWONG, Jutima; SHAMSAEI, Nima. Load history and sequence effects on cyclic deformation and fatigue behavior of a thermoplastic polymer. **Polymer Testing**, Elsevier, v. 56, p. 99–109, 2016.

SHUTOV, AV; KREISSIG, R. Finite strain viscoplasticity with nonlinear kinematic hardening: Phenomenological modeling and time integration. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 197, n. 21-24, p. 2015–2029, 2008.

SIMO, Juan C; HUGHES, Thomas JR. **Computational inelasticity**. [*S.l.*]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 7.

SOUZA NETO, E. A. de; PERIC, D; OWEN, DRJ. **Computational methods for plasticity: theory and applications**. [*S.l.*: *s.n.*], 2011.

STEPHENS, Ralph I *et al.* **Metal fatigue in engineering**. [*S.I.*]: John Wiley & Sons, 2000.

TEOH, SH. Fatigue of biomaterials: a review. **International journal of fatigue**, Elsevier, v. 22, n. 10, p. 825–837, 2000.

WARD, Ian M; SWEENEY, John. **Mechanical properties of solid polymers**. [*S.I.*]: John Wiley & Sons, 2012.

WILLIAMS, James Gordon. Stress analysis of polymers. Longmans, 1973.

ZHANG, Chuntao; MOORE, Ian D. Nonlinear mechanical response of high density polyethylene. Part I: Experimental investigation and model evaluation. **Polymer Engineering & Science**, Wiley Online Library, v. 37, n. 2, p. 404–413, 1997.

APÊNDICE A – DEFINIÇÕES TENSORIAIS

Nesse apêndice constam as definições de operações tensoriais, derivadas essenciais para a dedução das equações e notação matricial utilizada para implementação. De forma genérica, é definido um conjunto de vetores \mathcal{V} , um conjunto dos tensores de segunda ordem *Lin* e outro para os de quarta ordem *Lin*. O espaço \mathcal{V} contém os vetores tridimensionais com componentes reais \Re . Já o espaço *Lin* representa o espaço constituído pelos operadores lineares capazes de mapear de \mathcal{V} para \mathcal{V} e *Lin* aqueles capazes de mapear de *Lin* para *Lin* (JOG; HUTTER, 2003). Os espaços são normados $|| \odot ||$, munidos da definição de produto escalar \odot .

$$Lin = \{ \boldsymbol{U} : \boldsymbol{\mathcal{V}} \to \boldsymbol{\mathcal{V}} \mid \boldsymbol{U} \cdot (a\boldsymbol{u} + b\boldsymbol{v}) = a\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{u} + b\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{v}, \\ \forall \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{\mathcal{V}}, \ \forall a, b \in \Re \}$$

$$Lin = \{ A : Lin \to Lin \mid A : (a\boldsymbol{U} + b\boldsymbol{V}) = aA : \boldsymbol{U} + bA : \boldsymbol{V}, \\ \forall \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V} \in Lin, \ \forall a, b \in \Re \}$$
(A.1a)
(A.1b)

A.1 OPERAÇÕES

Na forma indicial, dados os índices $\{i, j, k, l, m, n\}$, a contração de um índice, expressa por "·", a contração de dois índices, representada nesta notação como ":", assim como a contração de quatro índices "::", estão definidas na Equação (A.2) (DOGHRI, 2013).

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} = u_i v_i$$
 (A.2a)

$$(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V})_{ij} = U_{ik}V_{kj} \tag{A.2b}$$

$$(\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{v})_i = U_{ij} v_j \tag{A.2c}$$

$$\boldsymbol{U}: \boldsymbol{V} = U_{ij}V_{ji} \tag{A.2d}$$

$$(A: \mathbb{B})_{ijkl} = A_{ijmn} B_{nmkl} \tag{A.2e}$$

$$(\boldsymbol{A}:\boldsymbol{U})_{ij} = A_{ijkl}U_{lk} \tag{A.2f}$$

$$A :: \mathcal{B} = A_{ijmn} B_{nmji} \tag{A.2g}$$

As operações acima diferem da convenção estabelecida em outras referências (JOG; HUTTER, 2003). Conforme Malvern (1969), essa notação é equivalente àquela quando um dos operadores é simétrico. Além da contração dos índices, nos espaços definidos também é admitido o produto tensorial, representado por \otimes para ambos na Equação (A.3).

$$(\boldsymbol{u}\otimes \boldsymbol{v})_{ij}=u_iv_j$$
 (A.3a)

$$(\boldsymbol{U} \otimes \boldsymbol{V})_{ijkl} = U_{ij}V_{kl}$$
 (A.3b)

A.2 SUBESPAÇOS

O espaço Lin contém o subespaço dos operadores simétricos Lin^{sym} , o mesmo é dito para o espaço Lin, no entanto para o último esse conceito compreende simetria total, Equação (A.4b), simetria maior, expressa pela Equação (A.4c), e duas simetrias menores, conforme Equação (A.4d) e Equação (A.4e).

$$Lin^{sym} = \{ \boldsymbol{U} \in Lin \mid (\boldsymbol{U})_{ij} = (\boldsymbol{U})_{ji} \}$$
 (A.4a)

$$\mathbb{L}in^{sym,t} = \left\{ A \in \mathbb{L}in \mid (A)_{ijkl} = \frac{1}{3} \left[(A)_{ijkl} + (A)_{ikjl} + (A)_{iljk} \right] \right\}$$
(A.4b)

$$\mathbb{L}in^{sym,u} = \{ A \in \mathbb{L}in \mid (A)_{ijkl} = (A)_{klij} \}$$
(A.4c)

$$\mathbb{L}in^{sym,1} = \{A \in \mathbb{L}in \mid (A)_{ijkl} = (A)_{ijlk}\}$$
(A.4d)

$$\mathbb{L}in^{sym,2} = \{A \in \mathbb{L}in \mid (A)_{ijkl} = (A)_{jikl}\}$$
(A.4e)

Uma classe de operadores tensoriais é invariante a rotações do sistema cartesiano no qual foram definidos, chamados de isotrópicos. Os subespaços destes tensores de segunda Lin^{iso} e quarta ordem Lin^{iso} estão declarados na Equação (A.5).

$$Lin^{iso} = \{ U \in Lin \mid (U)_{ij} = \alpha \delta_{ij} \}$$
 (A.5a)

$$\mathbb{L}in^{iso} = \{ A \in \mathbb{L}in \mid (A)_{ijkl} = \alpha \delta_{ij} \delta_{kl} + \beta \delta_{ik} \delta_{jl} + \gamma \delta_{il} \delta_{jk} \}$$
(A.5b)

Os termos α , β e γ são escalares quaisquer e δ_{ij} é o delta de Kronecker, definido pela Equação (A.6).

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & se \ i = j \\ 0, & se \ i \neq j \end{cases}$$
(A.6)

A.3 PRINCIPAIS OPERADORES

As identidades simétricas de segunda I e quarta ordem I, assim como os operadores simetrizador I^s e transpositor I^T , são definidos em função do delta de Kronecker, conforme abaixo.

$$(\mathbf{I})_{ij} = \delta_{ij} \tag{A.7a}$$

$$(\mathbb{I})_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{jl} \tag{A.7b}$$

$$(\mathbb{I}^T)_{ijkl} = \delta_{il}\delta_{jk} \tag{A.7c}$$

$$(\mathbb{I}^s)_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$
(A.7d)

Notoriamente, pelas definições da Equação (A.4) e Equação (A.5), a partir dos operadores acima, um tensor de quarta ordem isotrópico, com simetria total, é escrito em termos de I e I, conforme a equação abaixo.

$$(A)_{ijkl} = \alpha(\mathbb{I})_{ijkl} + \beta(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})_{ijkl} + \gamma(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})_{ijkl}$$
(A.8)

Ao definir $\alpha = 2G$, $\beta = -\frac{2G}{3}$ e $\gamma = K$, o tensor A é reescrito em termos de dois operadores de quarta ordem, um desviador \mathbb{I}^d e outro volumétrico \mathbb{I}^v , expressos pela Equação (A.9).

$$A = 2G\mathbb{I}^d + 3K\mathbb{I}^v \tag{A.9a}$$

$$\mathbb{I}^{d} = \mathbb{I} - \mathbb{I}^{v} \tag{A.9b}$$

$$\mathbb{I}^{v} = \frac{1}{3} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \tag{A.9c}$$

O operador desviador e volumétrico apresentam algumas características importantes quando operam entre sí e em tensores de segunda ordem. Estas são utilizadas no decorrer da formulação deste trabalho e estão formuladas pela Equação (A.10).

$$\mathbb{I}^d: A = A^d \tag{A.10a}$$

$$\mathbb{I}^{v}: A = A^{v} \tag{A.10b}$$

$$\mathbb{I}^d: \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^d \tag{A.10c}$$

$$\mathbb{I}^v: \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^v \tag{A.10d}$$

Conforme revisado por Doghri e Ouaar (2003), a contração de quatro índices, entre operadores de quarta ordem, resulta em um escalar invariante da orientação do sistema de eixos cartesianos, portanto são definidas as constantes abaixo.

$$\mathbb{I}^v :: \mathbb{I}^v = 1 \tag{A.11a}$$

$$\mathbb{I}^d :: \mathbb{I}^d = 5 \tag{A.11b}$$

$$\mathbb{I}^v :: \mathbb{I}^d = 0 \tag{A.11c}$$

Pelos resultados acima, os escalares $G \in K$ são definidos pelas operações da Equação (A.12). As equações abaixo são aplicadas para extrair uma parcela isotrópica do operador tangente algorítmico na Seção 3.1.2.

$$\mathbb{I}^v :: A = 3K \tag{A.12a}$$

$$\mathbb{I}^d :: \mathbb{A} = 10G \tag{A.12b}$$

A.4 DERIVADAS DIRECIONAIS

Com base em Jog e Hutter (2003), essa sessão explora aspectos matemáticos do diferencial de campos escales e tensoriais, com argumentos não escalares. A principal diferença na notação, em relação a Jog e Hutter (2003), é o termo "•", utilizado para destacar os operadores diferenciais. Isto posto, seja \mathcal{D} um subconjunto aberto de \mathcal{K} , com $\mathcal{K} \in \mathcal{F}$ definidos espaços vetoriais, finitos e normados, uma função $f : \mathcal{D} \subset \mathcal{K} \to \mathcal{F}$ é dita diferenciável em $\mathcal{X} \in \mathcal{D}$, caso exista a transformação linear $D \bullet f(\mathcal{X}) : \mathcal{K} \to \mathcal{F}$, capaz de satisfazer a igualdade da Equação (A.13).

$$f(\mathcal{X} + \mathcal{H}) = f(\mathcal{X}) + D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] + o(\mathcal{H})$$
(A.13)

O termo $\mathcal{H} \in \mathcal{K}$ e a função $o(\mathcal{H})$ converge à zero mais rápido, quando comparada a \mathcal{H} . O segundo termo a direita da igualdade acima é definido como a derivada direcional da função f, no ponto \mathcal{X} , também chamada derivado de Gateaux. Uma vez definido o termo $D \bullet f(\mathcal{X})$, chamado derivada de Fréchet, ele é único, portanto a Equação (A.14) é satisfeita para a derivada direcional.

$$D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] = \left. \frac{d}{d\epsilon} f(\mathcal{X} + \epsilon \mathcal{H}) \right|_{\epsilon=0}$$
(A.14)

A derivada direcional satisfaz algumas das propriedades usuais das derivadas. Fundamentais para o desenvolvimento da formulação deste trabalho são:

a) Associatividade, seja $f(\mathcal{X}) = f_1(\mathcal{X}) + f_2(\mathcal{X});$

$$D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] = D \bullet f_1(\mathcal{X})[\mathcal{H}] + D \bullet f_2(\mathcal{X})[\mathcal{H}]$$
(A.15)

b) Regra do produto, seja $f(\mathcal{X}) = f_1(\mathcal{X}) * f_2(\mathcal{X})$, onde * representa a contração adequada no espaço \mathcal{F} ;

$$D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] = D \bullet f_1(\mathcal{X})[\mathcal{H}] * f_2(\mathcal{X}) + f_1(\mathcal{X}) * D \bullet f_2(\mathcal{X})[\mathcal{H}]$$
(A.16)

c) Regra da cadeia, seja $f(\mathcal{X}) = f_1(f_2(\mathcal{X}))$

$$D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] = D \bullet f_1((f_2(\mathcal{X}))[(D \bullet f_2(\mathcal{X})\mathcal{H}]$$
(A.17)

Com essas definições, são declarados dois operadores diferenciais utilizados na formulação, o gradiente ∇ e divergente div. O operador ∇ está expresso, para uma função escalar $f : Lin \rightarrow \Re$, em um elemento $\mathcal{X} \in Lin$, pela Equação (A.18b).

$$D \bullet f(\mathcal{X})[\mathcal{H}] = \left(\frac{\partial f}{\partial \mathcal{X}}\right)_{ij} : (\mathcal{H})_{ij}$$
 (A.18a)

$$(\nabla \bullet f(\boldsymbol{\mathcal{X}}))_{ij} = \frac{\partial f}{\partial(\boldsymbol{\mathcal{X}})_{ij}}$$
 (A.18b)

Para uma função tensorial $f : Lin \to Lin$, os operadores ∇ e div, em um elemento $\mathcal{X} \in Lin$, são definidos conforme a Equação (A.19).

$$(\nabla \bullet \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\mathcal{X}}))_{ijkl} = \frac{\partial(\boldsymbol{f})_{ij}}{\partial(\boldsymbol{\mathcal{X}})_{kl}}$$
(A.19a)

$$(div \bullet \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\mathcal{X}}))_{ij} = \frac{\partial(\boldsymbol{f})_{ij}}{\partial(\boldsymbol{\mathcal{X}})_{kl}} : (\boldsymbol{I})_{kl}$$
 (A.19b)

A.5 DERIVADAS UTILIZADAS

Nas deduções, principalmente, dos operadores de quarta ordem utilizados no método de Newton, foram aplicados os conceitos anteriores para o operador linear *D*. Portanto, nesta seção foram concatenadas as derivadas das principais funções presentes no sistema de equações, do resíduo da aproximação no ponto macroscópico e em cada fase material, conforme abaixo:

a) Seja $f(\mathcal{X}) = \mathcal{X}$, para todo $\mathcal{X} \in Lin$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \boldsymbol{\mathbb{I}} \tag{A.20}$$

b) Seja $f(\mathcal{X}) = (\mathbb{I}^s + \mathbb{I}^T + \mathbb{I}^v + \mathbb{I}^d) : \mathcal{X}$, para todo $\mathcal{X} \in Lin$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \left(\mathbb{I}^s + \mathbb{I}^T + \mathbb{I}^v + \mathbb{I}^d \right) : \mathbb{I}$$
(A.21)

c) Seja $f(\mathcal{X}) = \mathcal{X}$, para todo $\mathcal{X} \in Lin^{sym}$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \boldsymbol{\mathbb{I}} \tag{A.22}$$

d) Seja $f(\boldsymbol{\mathcal{X}}) = tr(\boldsymbol{\mathcal{X}}) = \boldsymbol{I} : \boldsymbol{\mathcal{X}}$, para todo $\boldsymbol{\mathcal{X}} \in \boldsymbol{Lin}$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \boldsymbol{I} : \boldsymbol{\mathbb{I}}$$
(A.23)

e) Seja $f(\mathcal{X}) = ||\mathcal{X}|| = \sqrt{\mathcal{X} : \mathcal{X}}$, para todo $\mathcal{X} \in Lin$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \frac{\boldsymbol{\mathcal{X}}}{||\boldsymbol{\mathcal{X}}||} : \mathbb{I}$$
(A.24)

f) Seja $f(\mathcal{X}) = ||\mathcal{X}||^2$, para todo $\mathcal{X} \in Lin$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = 2\boldsymbol{\mathcal{X}} : \mathbb{I}$$
 (A.25)

g) Seja $f(\mathcal{X}) = ||\mathcal{X}||^{-1}$, para todo $\mathcal{X} \in Lin$;

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}} = \frac{1}{||\boldsymbol{\mathcal{X}}||} \left(\mathbb{I} - \frac{\boldsymbol{\mathcal{X}}}{||\boldsymbol{\mathcal{X}}||} \otimes \frac{\boldsymbol{\mathcal{X}}}{||\boldsymbol{\mathcal{X}}||} \right) : \mathbb{I}$$
(A.26)

A.6 NOTAÇÃO MATRICIAL

Para armazenamento das componentes dos tensores e implementação das operações tensoriais, foi aplicada a notação de engenharia nos tensores de segunda e quarta ordem. A representação destes últimos, definida adiante, também é chamada notação de Voigt (JIRASEK; BAZANT, 2001). Conforme Jog e Hutter (2003), seja

 $U \in Lin^{sym} e A \in (\mathbb{L}in^{sym,1} \cap \mathbb{L}in^{sym,2})$, suas representações no \Re^n resultam do mapeamento $\mathcal{G} : Lin \to \Re^1 e \mathcal{G} : \mathbb{L}in \to \Re^2$.

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{U}) = \begin{bmatrix} U_{11} \\ U_{22} \\ U_{33} \\ U_{12} \\ U_{23} \\ U_{31} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{G}(A) = \begin{bmatrix} A_{1111} & A_{1122} & A_{1133} & A_{1112} & A_{1123} & A_{1113} \\ A_{2211} & A_{2222} & A_{2233} & A_{2212} & A_{2223} & A_{2213} \\ A_{3311} & A_{3322} & A_{3333} & A_{3312} & A_{3323} & A_{3312} \\ A_{1211} & A_{1222} & A_{1233} & A_{1212} & A_{1223} & A_{1213} \\ A_{2311} & A_{2322} & A_{2333} & A_{2312} & A_{2323} & A_{2313} \\ A_{3111} & A_{3122} & A_{3133} & A_{3112} & A_{3123} & A_{3113} \end{bmatrix}$$
(A.27)

A definição anterior de simetria é necessária para o mapeamento $\mathcal{G}(A)$, no entanto, também é valido caso $A \in \mathbb{L}in^{sym,t}$. Para aplicar as operações de contração e produto tensorial, definidas anteriormente, são declaradas as regras de mapeamento da Equação (A.28), na qual a multiplicação de matrizes está representada por "o".

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{U} + \boldsymbol{V}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{U}) + \mathcal{G}(\boldsymbol{V})$$
 (A.28a)

$$\mathcal{G}(A+B) = \mathcal{G}(A) + \mathcal{G}(B) \tag{A.28b}$$

$$\mathcal{G}(A^T) = [\mathcal{G}(A)]^T \tag{A.28c}$$

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{U}:\boldsymbol{V}) = [\mathcal{G}(\boldsymbol{U})]^T \circ [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \mathcal{G}(\boldsymbol{V})$$
(A.28d)

$$\mathcal{G}(A: \mathbf{V}) = \mathcal{G}(A) \circ [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \mathcal{G}(\mathbf{V})$$
(A.28e)

$$\mathcal{G}(A:\mathbb{B}) = \mathcal{G}(A) \circ [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \mathcal{G}(\mathbb{B})$$
(A.28f)

$$\mathcal{G}(A^{-1}) = \mathcal{G}(\mathbb{I}^s) \circ [\mathcal{G}(A)]^{-1} \circ \mathcal{G}(\mathbb{I}^s)$$
(A.28g)

$$\mathcal{G}(A::\mathbb{B}) = [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \mathcal{G}(A) \circ [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \mathcal{G}(\mathbb{B})$$
(A.28h)

Na notação de engenharia, a relação constitutiva elástica linear é representada pelas matrizes e vetores expressos na Equação (A.29), pois $\{\sigma, \epsilon\} \in Lin^{sym}$ e $\mathbb{C} \in Lin^{sym,t}$.

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathcal{G}(\mathcal{C}:\boldsymbol{\epsilon}) = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{bmatrix} = [2G\mathcal{G}(\mathbb{I}^d) + 3K\mathcal{G}(\mathbb{I}^v)] \circ [\mathcal{G}(\mathbb{I}^s)]^{-1} \circ \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{12} \\ 2\epsilon_{23} \\ 2\epsilon_{31} \end{bmatrix}$$
(A.29)

Conforme as definições da Equação (A.11), a identidade \mathbb{I} é mapeada por $\mathcal{G}(\mathbb{I}) = diag[1, 1, 1, 1, 1]$, \mathbb{I} por $\mathcal{G}(\mathbb{I}) = [1, 1, 1, 0, 0, 0]$ e o operador simetrizador \mathbb{I}^s por $\mathcal{G}(\mathbb{I}^s) = diag[1, 1, 1, 1/2, 1/2, 1/2]$. A função diag define uma matriz diagonal com os elementos definidos no vetor.

APÊNDICE B – DEDUÇÕES DA IMPLEMENTAÇÃO

Os principais elementos matemáticos utilizados para representar o problema são objetivamente declarados e descritos no Capítulo 3. Neste apêndice, são apresentados os termos explícitos do tensor de Eshelby e gradientes, ou aproximações, necessários na implementação dos métodos de integração temporal e de solução dos resíduos resultantes das aproximações.

B.1 LINEARIZAÇÃO DA TENSÃO VISCOELÁSTICA EFETIVA

Nos modelos usuais de viscoelasticidade linear, a relação constitutiva entre a tensão $\tilde{\sigma}$ e a deformação ϵ^{ve} , linearizada no tempo, é definida pela integral hereditária da Equação (B.1a) e suas propriedades permitem formular a Equação (B.1b).

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \int_{-\infty}^{t_{n+1}} \mathbb{C}^{ve}(t_{n+1} - z) : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} ds \tag{B.1a}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \int_{-\infty}^{t_n} \mathbb{C}^{ve}(t_{n+1} - z) : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbb{C}^{ve}(t_{n+1} - z) : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz$$
(B.1b)

Conforme definido na Equação (2.28), a tensão $\tilde{\sigma}$ é reescrita em função das séries de Prony para o módulo de cisalhamento da Equação (2.29) e volumétrico expresso pela Equação (2.30).

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \int_{-\infty}^{t_n} \left[2\mathcal{G}(t_{n+1} - z) \mathbb{I}^d + 3\mathcal{K}(t_{n+1} - z) \mathbb{I}^v \right] : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[2\mathcal{G}(t_{n+1} - z) \mathbb{I}^d + 3\mathcal{K}(t_{n+1} - z) \mathbb{I}^v \right] : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz$$

$$\mathcal{C}(t) = C + \sum_{i=1}^{p} C_i e^{-\frac{t_i}{q_i}}$$
(B.2a)

$$\mathcal{G}(t) = G_{\infty} + \sum_{\substack{i=1\\p}} G_i e^{-\frac{t}{g_i}}$$
(B.2b)

$$\mathcal{K}(t) = K_{\infty} + \sum_{i=1}^{P} K_i e^{-\frac{t}{k_i}}$$
(B.2c)

O primeiro termo da Equação (B.2a) é função do estado $\tilde{\sigma}_n$ e do incremento de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ e adiante, na Equação (B.3), representa uma medida afim $\tilde{\omega}_{n+1}$, em inglês *affine*.

$$\tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1} = \int_{-\infty}^{t_n} \left[2\mathcal{G}(t_n + \Delta t - z) \mathbb{I}^d + 3\mathcal{K}(t_n + \Delta t - z) \mathbb{I}^v \right] : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz \tag{B.3}$$

Novamente, pelas propriedades do operador integral e associatividade da contração ":", na Equação (B.3), ao deduzir a solução para uma parcela da soma entre colchetes, desviadora ou volumétrica, a outra é análoga. Convenientemente, será desenvolvida a parcela desviadora $\tilde{\omega}^d$, como segue.

$$\begin{split} \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} &= \int_{-\infty}^{t_{n}} \left[2 \left(G_{\infty} + \sum_{i=1}^{p} G_{i} e^{-\frac{(t_{n}-z)}{g_{i}}} e^{-\frac{\Delta t}{g_{i}}} \right) \mathbb{I}^{d} \right] : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz \\ &= \int_{-\infty}^{t_{n}} 2G_{\infty} \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz + \sum_{i=1}^{p} e^{-\frac{\Delta t}{g_{i}}} \int_{-\infty}^{t_{n}} 2G_{i} e^{-\frac{(t_{n}-z)}{g_{i}}} \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial z} dz \end{split}$$
(B.4)

A primeira integral da Equação (B.4), na segunda igualdade, é a parcela desviadora $\tilde{S}_{n,\infty}$ da tensão efetiva $\tilde{\sigma}_{n,\infty}$, no segmento elástico do modelo viscoelástico e instante t_n . O outro integrando representa a parcela desviadora $\tilde{S}_{n,i}$ da tensão efetiva $\tilde{\sigma}_{n,i}$, em cada segmento de Maxwell, naquele mesmo instante.

$$\tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} = \tilde{\boldsymbol{S}}_{n,\infty} + \sum_{i=1}^{p} \tilde{\boldsymbol{S}}_{n,i} e^{-\frac{\Delta t}{g_i}}$$
(B.5)

Para solucionar a segunda integral da Equação (B.2a), algum método de integração é necessário, um exemplo é a regra do ponto médio, outro, simplesmente, define a taxa de deformação constante no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. Este último foi implementado e será aplicado adiante para a parcela desviadora \tilde{S}_{n+1}^d .

$$\begin{split} \tilde{\boldsymbol{S}}_{n+1}^{d} &= \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} 2\mathcal{G}(t_{n+1}-z)\mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} 2\left(G_{\infty} + \sum_{i=1}^{p} G_{i} e^{-\frac{(t_{n}+\Delta t-z)}{g_{i}}}\right) \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} 2\left(G_{\infty} + \sum_{i=1}^{p} G_{i} e^{-\frac{(t_{n}+\Delta t-z)}{g_{i}}}\right) \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} 2G_{\infty} \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz + \sum_{i=1}^{p} \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} 2G_{i} e^{-\frac{(t_{n}+\Delta t-z)}{g_{i}}} \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \left[\left(2G_{\infty} z \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} \right) + \sum_{i=1}^{p} \left(\frac{g_{i}}{\Delta t} 2G_{i} e^{-\frac{(t_{n}+\Delta t-z)}{g_{i}}} \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} \right) \right]_{t_{n}}^{t_{n+1}} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \left[\left(2G_{\infty} z + \sum_{i=1}^{p} g_{i} 2G_{i} e^{-\frac{(t_{n}+\Delta t-z)}{g_{i}}} \right) \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} \right]_{t_{n}}^{t_{n+1}} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \\ &= \left[2G_{\infty} \Delta t + \sum_{i=1}^{p} g_{i} 2G_{i} \left(1 - e^{-\frac{\Delta i}{g_{i}}} \right) \right] \mathbb{I}^{d} : \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d} \end{split}$$

Na dedução acima, está implícito o passo no qual é aplicada a definição $\partial_{t_{n+1}} \epsilon^{ve} = \partial_{t_n} \epsilon^{ve}$. Com a condição expressa pela Equação (A.14), para o domínio discreto $[t_n, t_{n+1}]$, a derivada direcional de ϵ^{ve} , em relação a t, no instante t_{n+1} , é aproximada pela Equação (B.7).

$$\frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\partial t}\Big|_{t=t_{n+1}} \approx \frac{\boldsymbol{\epsilon}^{ve}(t_n + \Delta t) - \boldsymbol{\epsilon}^{ve}(t_n)}{\Delta t} = \frac{\Delta \boldsymbol{\epsilon}^{ve}}{\Delta t}$$
(B.7)

Ao substituir a definição acima na última igualdade da Equação (B.6), é formulado o módulo de cisalhamento tangente viscoelástico $\hat{\mathcal{G}}$, conforme a Equação (B.8b).

$$\tilde{\boldsymbol{S}}_{n+1}^{d} = 2\hat{\mathcal{G}}\mathbb{I}^{d} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^{ve} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}_{n+1}^{d}$$
 (B.8a)

$$\hat{\mathcal{G}} = G_{\infty} + \sum_{i=1}^{P} \frac{g_i}{\Delta t} G_i \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{g_i}} \right)$$
(B.8b)

Por fim, de forma análoga ao exposto para a parcela desviadora, o mesmo procedimento é aplicado à volumétrica e a tensão efetiva $\tilde{\sigma}$ é a soma de todas essas parcelas, expressa em função dos tensores \hat{C}^{ve} e $\tilde{\omega}$.

$$ilde{\sigma}_{n+1} = \hat{\mathbb{C}}^{ve} : \Delta \epsilon^{ve} + ilde{\omega}_{n+1}$$
 (B.9a)

$$\hat{\mathcal{L}}^{ve} = 2\hat{\mathcal{G}}\mathbb{I}^d + 3\hat{\mathcal{K}}\mathbb{I}^v \tag{B.9b}$$

$$ilde{oldsymbol{\omega}}_{n+1} = ilde{oldsymbol{\omega}}_{n+1}^d + ilde{oldsymbol{\omega}}_{n+1}^v$$
 (B.9c)

B.2 GRADIENTES PARA O MÉTODO DE NEWTON

O problema proposto é composto de três linearizações. A relação constitutiva macroscópica é linearizada no tempo e gera um resíduo $R_{\mathcal{P}}$. Paralelamente, a linearização afim do campo de deformação na inclusão provoca outro resíduo Υ , por sua vez, dependente da linearização temporal do conjunto das variáveis independentes de cada fase material e do respectivo resíduo g. As três funções, Equação (3.2), Equação (3.23a) e Equação (3.8), declaradas no Capítulo 3, compõem o resíduo total da aproximação \mathcal{R} .

$$\mathcal{R}_{n+1} = \mathcal{R}_{\mathcal{P},n+1} + \Upsilon_{n+1} + v_1 \mathcal{g}_{1,n+1} + (1 - v_1) \mathcal{g}_{M,n+1}$$
 (B.10a)

$$\boldsymbol{R}_{\mathcal{P},n+1} = \boldsymbol{\sigma}_{n+1} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_n - \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$
(B.10b)

$$\Upsilon_{n+1} = A_{n+1} : \Delta \bar{\epsilon} \tag{B.10c}$$

A linearização de cada um dos resíduos, em relação as suas variáveis independentes, está expressa na Equação (B.11), formulada sem a presença do subíndice n + 1, pois a formulação seguinte está estática nesse instante.

$$R_{\mathcal{P},l+1} = R_{\mathcal{P},l} + \nabla_{\Delta \bar{\epsilon}} R_{\mathcal{P},l} : \delta \Delta \bar{\epsilon}$$
 (B.11a)

$$\Upsilon_{h+1} = \Upsilon_h + \nabla_{\Delta \bar{\epsilon}_1} \Upsilon_h : \delta \Delta \bar{\epsilon}_1$$
(B.11b)

$$\boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{g}_k + \nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k * \delta \Delta \boldsymbol{Q}$$
 (B.11c)

Dada uma perturbação σ_{n+1} e correspondente ϵ_{n+1} , com o estado em t_n conhecido, o algoritmo busca a raiz de \mathcal{R}_{n+1} na ordem $g_{k+1} \rightarrow \Upsilon_{h+1} \rightarrow \mathcal{R}_{\mathcal{P},l+1}$. Portanto, em uma iteração l + 1 de $\mathcal{R}_{\mathcal{P},l+1}$ é definida a composição $\mathcal{R}_{\mathcal{P},l+1}(\Upsilon_{h+1}(g_{k+1}))$. Resta determinar os gradientes $\nabla_{\Delta \bar{\epsilon}} \mathcal{R}_{\mathcal{P},l}, \nabla_{\Delta \bar{\epsilon}_1} \Upsilon_h$ e $\nabla_{\Delta Q} g_k$.

$$\nabla \boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}}}|_{l} = \bar{\mathcal{C}}_{l}^{iso} = \left[v_{1}\mathcal{C}_{1,l}^{iso} : \mathcal{B}_{l} + (1-v_{1})\mathcal{C}_{M,l}^{iso} \right] : \left[(1-v_{1})\mathcal{I} + v_{1}\mathcal{B}_{l} \right]^{-1}$$
(B.12a)
$$\nabla_{\Delta \bar{\epsilon}_{1}} \boldsymbol{\Upsilon}_{h} = \mathcal{I}$$
(B.12b)

Os operadores $\mathbb{C}_{1,l}^{iso}(\boldsymbol{Q}_{1,k+1})$, $\mathbb{C}_{M,l}^{iso}(\boldsymbol{Q}_{M,k+1})$ e $\mathbb{B}_l(\mathbb{C}_{M,l}^{iso})$ são funções dos conjuntos de variáveis independentes $\boldsymbol{Q}_{1,k+1}$ e $\boldsymbol{Q}_{M,k+1}$, determinados pelo método Newton aplicado à Equação (B.11c). O gradiente $\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k$ apresenta a forma explícita abaixo.

$$\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_{k} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}}{\partial \Delta \boldsymbol{S}_{k}} & \frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}}{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}} & \frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}}{\partial \Delta \tau_{k}} & \frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}}{\partial \Delta D_{k}} \\ \frac{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}}{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}} & \frac{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}}{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}} & \frac{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}}{\partial \Delta \sigma_{k}} & \frac{\partial \Delta \boldsymbol{X}_{k}}{\partial \Delta D_{k}} \\ \frac{\partial \Delta r_{k}}{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}} & \frac{\partial \Delta r_{k}}{\partial \Delta X_{k}} & \frac{\partial \Delta r_{k}}{\partial \Delta r_{k}} & \frac{\partial \Delta r_{k}}{\partial \Delta D_{k}} \\ \frac{\partial \Delta D_{k}}{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}_{k}} & \frac{\partial \Delta D_{k}}{\partial \Delta X_{k}} & \frac{\partial \Delta D_{k}}{\partial \Delta r_{k}} & \frac{\partial \Delta D_{k}}{\partial \Delta D_{k}} \end{bmatrix}$$
(B.13a)

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{11} = \mathbb{I} + 2\hat{\mathcal{G}} \mathbb{I}^d : \frac{\Delta r_k}{1 - D_k} \mathbb{T}_k$$
(B.13b)

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{12} = -2\hat{\mathcal{G}} \mathbb{I}^d : \frac{\Delta r_k}{1 - D_k} \mathbb{T}_k$$
(B.13c)

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{13} = 2\hat{\mathcal{G}} \mathbb{I}^d : \frac{1}{1 - D_k} \boldsymbol{N}_k$$
(B.13d)

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{14} = -2\hat{\mathcal{G}}\mathbb{I}^d : \frac{\Delta r_k}{(1-D_k)^2} \boldsymbol{N}_k$$
(B.13e)

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{21} = -a\Delta r_k \, \mathcal{T}_k \tag{B.13f}$$

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{22} = \mathbb{I} - \Delta r_k (-a \, \mathbb{T}_k - b \mathbb{I}) \tag{B.13g}$$

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{23} = -(a \boldsymbol{N}_k - b \boldsymbol{X}_k) \tag{B.13h}$$

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{24} = 0\boldsymbol{I} \tag{B.13i}$$

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{31} = -\frac{m\Delta t \sigma_{y0}}{\eta_{vp}} \left(\frac{f_k}{\sigma_{y0}}\right)^{m-1} \frac{\boldsymbol{N}_k}{\sigma_{y0}}$$
(B.13j)

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{32} = \frac{m \Delta t \sigma_{y0}}{\eta_{vp}} \left(\frac{f_k}{\sigma_{y0}}\right)^{m-1} \frac{\boldsymbol{N}_k}{\sigma_{y0}}$$
(B.13k)

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{33} = 1 - \frac{m\Delta t \sigma_{y0}}{\eta_{vp}} \left(\frac{f_k}{\sigma_{y0}}\right)^{m-1} \frac{\partial_{\Delta r} f_k}{\sigma_{y0}}$$
(B.13l)

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{34} = 0 \tag{B.13m}$$

$$[\nabla_{\Delta Q} \boldsymbol{g}_k]_{41} = -\mathcal{H} \frac{s \Delta r_k}{1 - D_k} \left(\frac{Y_k}{S}\right)^{s-1} \frac{\partial_{\Delta \tilde{S}} Y_k}{S}$$
(B.13n)

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{42} = 0\boldsymbol{I} \tag{B.130}$$

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{43} = -\mathcal{H} \frac{1}{1 - D_k} \left(\frac{Y_k}{S}\right)^s \tag{B.13p}$$

$$[\nabla_{\Delta \boldsymbol{Q}} \boldsymbol{g}_k]_{44} = 1 - \mathcal{H} \frac{\Delta r_k}{(1 - D_k)^2} \left(\frac{Y_k}{S}\right)^s \tag{B.13q}$$

Pelas definições do Apêndice A, as derivadas direcionais restantes são obtidas pela Equação (B.15) e Equação (B.16).

$$\mathbb{T}_{k} = \frac{\partial \mathbf{N}_{k}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{S}}_{k}} = -\frac{\partial \mathbf{N}_{k}}{\partial \Delta \mathbf{X}_{k}} \\
= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{||\tilde{\mathbf{S}}_{k} - \mathbf{X}_{k}||} \left[\mathbb{I} - \frac{1}{||\tilde{\mathbf{S}}_{k} - \mathbf{X}_{k}||^{2}} (\tilde{\mathbf{S}}_{k} - \mathbf{X}_{k}) \otimes (\tilde{\mathbf{S}}_{k} - \mathbf{X}_{k}) \right]$$
(B.15)

$$\partial_{\Delta r} f_k = -\frac{\partial R_k}{\partial \Delta r_k} = -\theta \kappa r^{\theta - 1}$$
 (B.16a)

$$\partial_{\Delta \tilde{S}} Y_k = \frac{\partial Y_k}{\partial \Delta \tilde{S}_k} = \frac{1}{2G_{\infty}} \tilde{S}_{\infty,k} + \sum_{i=1}^p \frac{1}{2G_i} \tilde{S}_{i,k}$$
(B.16b)

B.3 OPERADOR TANGENTE CONSISTENTE

O método de integração implícita implementado permite deduzir um operador tangente consistente por um cálculo direto. Ao aplicar o método de Newton, com base na mesma metodologia exposta na Seção 3.1.1, a Equação (3.2) é reescrita na Equação (B.17), no entanto, agora definida independente da MFH, sem a presença da barra superior na simbologia.

$$\boldsymbol{R}_{\mathcal{P},l+1} \approx \boldsymbol{R}_{\mathcal{P},l} + \nabla \boldsymbol{R}_{\mathcal{P}}|_{l} \delta \Delta \boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{0}$$
(B.17)

$$\nabla \boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\mathcal{P}}}|_{l} = (1-D) \left(\frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{S}}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} + \frac{\partial \Delta \tilde{\boldsymbol{P}}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \right) - \frac{\partial \Delta D}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \otimes \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$$
(B.18)

As derivadas dos elementos de ΔQ , em relação ao incremento de deformação $\Delta \epsilon$, são obtidas pelo critério de consistência do algoritmo incremental, no qual a variação do resíduo g_{k+1} , após convergência, é próximo a zero, conforme a relação abaixo (LEMAITRE; DESMORAT, 2005). Ao derivar a função resíduo g_{k+1} , em relação ao incremento $\Delta \epsilon$, o resultado é a Equação (B.20).

$$\delta \boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{0} \tag{B.19}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{g}_{k+1}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \approx \frac{\partial \boldsymbol{g}_{k}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \Delta \boldsymbol{Q}} \bigg|_{\boldsymbol{\mu}} \frac{\partial \Delta \boldsymbol{Q}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} = \boldsymbol{0}$$
(B.20)

Após rearranjar os termos da Equação (B.20), as derivadas dos elementos de ΔQ , na direção de $\Delta \epsilon$, são obtidas pela Equação (B.21). Assim, o gradiente da Equação (B.18) por essa aproximação, identificada como operador tangente consistente, representado no restante da formulação por \mathbb{C}_{n+1}^{alg} .

$$\frac{\partial \Delta \boldsymbol{Q}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \approx -\left(\left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \Delta \boldsymbol{Q}} \right|_{k} \right)^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{g}_{k}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \tag{B.21}$$

B.4 OPERADOR TANGENTE ANALÍTICO

No método de regularização desenvolvido por Doghri, Adam e Bilger (2010) é utilizado o operador tangente elasto-plástico analítico, sem o acoplamento de dano. Em Krairi, Doghri e Robert (2016) é aplicada a mesma metodologia desenvolvida por Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013) para o modelo viscoelastico-viscoplástico. No entanto, não está claro como o método foi adaptado para o modelo com dano. Portanto, aqui será deduzido o operador tangente elasto-plástico com dano analítico, conforme Doghri (1995), para associá-lo a formulação de regularização.

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - D)\tilde{\mathcal{C}}^{vep} : \boldsymbol{\epsilon}^{ve}$$
(B.22a)

$$\sigma_{eq} = \sqrt{3J_2(\tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{X})}$$
 (B.22b)

$$f = \sigma_{eq} - \sigma_{y0} - R(r) \le 0 \tag{B.22c}$$

$$\dot{oldsymbol{\epsilon}}^p = \dot{p}oldsymbol{N}$$
 (B.22d)

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \dot{r}(a\boldsymbol{N} - b\boldsymbol{X}) \tag{B.22e}$$

$$\dot{D} = \dot{r} \frac{\partial F_D}{\partial Y} \tag{B.22f}$$

$$\dot{r} = (1 - D)\dot{p} \ge 0, \ \dot{r}f = 0 \ e \ \dot{r}\dot{f} = 0$$
 (B.22g)

A Equação (B.22) expressa o modelo viscoelastico-plástico com dano, semelhante ao elasto-plástico com dano apresentado em Doghri (1995). Comparado ao modelo abordado neste trabalho, além da função de relaxação \tilde{C}^{ve} apenas mais uma alteração é necessária. O potencial de dano F_D , na referência definido por um potencial quadrático, é expresso nesta formulação por uma função de ordem s+1, conforme a Equação (B.23).

$$F_D = \frac{S}{s+1} \left(\frac{Y}{S}\right)^{s+1} \frac{\mathcal{H}}{1-D}$$
(B.23)
A lei de evolução da deformação plástica acumulada efetiva p é deduzida pelo critério de consistência $\dot{f} = 0$, conforme a Equação (B.24).

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \frac{\partial f}{\partial p} : \dot{p} = 2\hat{\mathcal{G}}\boldsymbol{N} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - h_{vepd}\dot{p} = 0$$
(B.24a)

$$h_{vepd} = \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial p} - \left(\frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial r} + \frac{\partial R}{\partial r}\right) \frac{\partial r}{\partial p} = 3\hat{\mathcal{G}} - (1 - D) \left(\frac{3a}{2} - b\mathbf{N} : \mathbf{X} + \theta\kappa r^{\theta - 1}\right) \quad (B.24b)$$

$$\dot{p} = \frac{\dot{r}}{1 - D} = \frac{2\mathcal{G}N : \dot{\epsilon}}{h_{vepd}}$$
(B.24c)

O operador tangente analítico é deduzido ao derivar no tempo a Equação (B.22a). Escrito como função da tensão efetiva $\tilde{\sigma}$, o resultado é a Equação (B.25). Nessa formulação o termo $\dot{\tilde{\sigma}}$ é semelhante a $\dot{\sigma}$ de Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), entretanto o denominador h_{vepd} contém a influência do dano.

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = (1 - D)\dot{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} - \dot{D}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$$
(B.25)

Pela decomposição aditiva da deformação $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{ve} + \dot{\epsilon}^p$ e Equação (B.24), o operador tangente efetivo é expresso pela Equação (B.26a). O termo \dot{D} está definido na Equação (B.22g), ao derivar o potencial da Equação (B.23) e combinar a Equação (B.24c) resulta na Equação (B.26b).

$$\dot{\tilde{\sigma}} = \tilde{C}^{vep} : \dot{\epsilon} = \hat{C}^{ve} : \left(\mathbb{I} - (\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \frac{2\hat{\mathcal{G}}}{h_{epd}} \right) : \dot{\epsilon}$$
(B.26a)

$$\dot{D} = \left(\frac{Y}{S}\right)^{s} \frac{\mathcal{H}}{1-D} \dot{r} = \left[\left(\frac{Y}{S}\right)^{s} \frac{\mathcal{H}}{1-D}\right] (1-D) \left(\frac{2\hat{\mathcal{G}}\boldsymbol{N}:\dot{\boldsymbol{\epsilon}}}{h_{epd}}\right)$$
(B.26b)

As deduções anteriores são uma combinação dos trabalhos de Doghri (1995) e Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013). A forma final do operador tangente é obtida ao substituir os termos acima na Equação (B.25) e tomar a derivada direcional desta em relação a $\dot{\epsilon}$, como formulada na Equação (B.27).

$$\partial_{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C}^{vepd} = (1-D) \left[\hat{\mathbb{C}}^{ve} : \left(\mathbb{I} - (\boldsymbol{N} \otimes \boldsymbol{N}) \frac{2\hat{\mathcal{G}}}{h_{vepd}} \right) - \frac{2\hat{\mathcal{G}}\mathcal{H}}{(1-D)h_{vepd}} \left(\frac{Y}{S} \right)^s \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \boldsymbol{N} \right]$$
(B.27)

B.5 REGULARIZAÇÃO

Foram definidos os operadores tangentes analítico viscoelastico-plástico efetivo e com dano. Pela impossibilidade de determinar um operador tangente analítico para viscoplasticidade não linear (MILED, 2011), será revisada a regularização proposta por Doghri, Adam e Bilger (2010) a partir do caso unidimensional e, por analogia, será aplicada ao modelo tridimensional não linear, como função do operador definido na seção anterior. Essa regularização foi deduzida a partir da solução analítica para um modelo elasto-viscoplástico linear unidimensional, formulado na Equação (B.28).

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^{vp} \tag{B.28a}$$

$$\tilde{\sigma} = E : \epsilon^e$$
 (B.28b)

$$\epsilon^{vp} = \dot{p}$$
 (B.28c)

$$f = \tilde{\sigma} - \sigma_{y0} - \kappa p = \eta_{vp} \dot{p} \tag{B.28d}$$

O estudo de Krairi (2015) comenta a dificuldade de obter uma solução analítica no mesmo caso acoplado ao dano. De fato, o problema resulta em uma EDO complexa. Portanto, sem o dano, será deduzida a formulação para o caso unidimensional elasto-viscoplástico, com encruamento isotrópico linear, supondo solicitação monotônica linear crescente. Isto posto, o modelo expresso pela Equação (B.22) é resumido na EDO linear e não homogênea expressa pela Equação (B.30). A solução desta é definida na Equação (B.29b) (DOGHRI; ADAM; BILGER, 2010).

$$\dot{\epsilon}^{vp} + \frac{E + \kappa}{\eta_{vp}} \epsilon^{vp} = \frac{E}{\eta_{vp}} \dot{\epsilon}t, \ \epsilon^{vp}(0) = 0$$
(B.29a)

$$\epsilon^{vp} = \frac{E}{\eta_{vp}} \dot{\epsilon} \left[t - \frac{\eta_{vp}}{E + K} \left(1 - e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}} t \right)} \right) \right]$$
(B.29b)

Ao introduzir o conceito configuração efetiva, a tensão $\tilde{\sigma}$ é obtida pela determinação dos demais termos da Equação (B.28d) e, após o seu isolamento no lado esquerdo da igualdade, resulta na Equação (B.31). As manipulações matemáticas aplicadas estão expressas no conjunto da Equação (B.30).

$$\mathcal{Z} = t - \frac{\eta_{vp}}{E + K} \left(1 - e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t \right)} \right)$$
(B.30a)

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \left(\frac{E}{\eta_{vp}}t - \frac{E}{\eta_{vp}}\mathcal{Z}\right)\dot{\epsilon}$$
(B.30b)

$$kp = \frac{KE}{E+K} \mathcal{Z}\dot{\epsilon} \tag{B.30c}$$

$$\eta_{vp}\dot{p} = (Et - E\mathcal{Z})\dot{\epsilon} \tag{B.30d}$$

$$\tilde{\sigma} = \sigma_{y0} + \left(\frac{EK}{E+K}\mathcal{Z} + Et - E\mathcal{Z}\right)\dot{\epsilon}$$
(B.31)

Dadas as definições anteriores, a taxa de deformação $\dot{\epsilon}$ é constante, assim como a tensão limiar de escoamento σ_{y0} . destas proposições a derivada temporal da Equação (B.31) é formulada conforme a Equação (B.32). O termo entre colchetes é a expressão analítica do operador tangente contínuo elasto-viscoplástico.

$$\dot{\mathcal{Z}} = 1 - e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t\right)} \tag{B.32a}$$

$$\dot{\tilde{\sigma}} = \left(\frac{KE}{E+K} + \frac{E^2}{E+K}e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t\right)}\right)\dot{\epsilon}$$
(B.32b)

As expressões acima são utilizadas por Doghri, Adam e Bilger (2010) para desenvolver a regularização. Na Equação (B.28d), a função de escoamento f não é equivalente no mesmo modelo associado ao dano. Todavia, será proposta adiante a formulação do problema acoplado ao dano impondo a mesma solução da Equação (B.30) na evolução do dano unidimensional, conforme a Equação (B.33).

$$\dot{D} = (1 - D) \frac{\partial F_D}{\partial Y} \dot{\epsilon}^{vp} = (1 - D) \frac{\partial F_D}{\partial Y} \left(\frac{E}{\eta_{vp}} t - \frac{E}{\eta_{vp}} \mathcal{Z} \right) \dot{\epsilon}$$
(B.33)

Semelhante ao exposto na seção anterior, a derivada temporal da tensão unidimensional σ é expressa pela Equação (B.34). Após a substituição dos termos em taxas, a forma final é escrita conforme a Equação (B.34).

$$\dot{\sigma} = (1-D) \left[\left(\frac{KE}{E+K} + \frac{E^2}{E+K} e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t\right)} \right) - \frac{\partial F_D}{\partial Y} \left(\frac{E}{\eta_{vp}} t - \frac{E}{\eta_{vp}} \mathcal{Z} \right) \tilde{\sigma} \right] \dot{\epsilon} = (1-D) \left[\left(\frac{KE}{E+K} + \frac{E^2}{E+K} e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t\right)} \right) - \frac{E}{E+K} \frac{\partial F_D}{\partial Y} \tilde{\sigma} \left(1 - e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{vp}}t\right)} \right) \right] \dot{\epsilon}$$
(B.34)

Determinada a equação analítica, as mesmas constatações de Doghri, Adam e Bilger (2010) são evidentes na Equação (B.34). O operador tangente expresso acima é uma função de t decrescente em relação a este argumento. Resta determinar a influência de um incremento no tempo Δt nesse operador analítico.

$$A(t + \Delta t) = \frac{E}{E + K} \frac{\partial F_D}{\partial Y}$$
(B.35a)

$$\frac{\dot{\sigma}(t+\Delta t)}{(1-D)\dot{\epsilon}} = \frac{KE}{E+K} - A\tilde{\sigma} + \left(\frac{\dot{\tilde{\sigma}}(t)}{\dot{\epsilon}} - \frac{KE}{E+K} + A\tilde{\sigma}\right)e^{\left(-\frac{E+K}{\eta_{DD}}\right)}$$
(B.35b)

A Equação (B.36) é o mesmo problema unidimensional explorado em Doghri, Adam e Bilger (2010), porém com a inclusão da deformação viscoplástica acumulada efetiva r e dos parâmetros materiais efetivos, representados com o subíndice 0. Semelhante a Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), por analogia, os termos da Equação (B.35b) são reescritos pelos diferenciais da lei constitutiva viscoplástica g para um caso elasto-viscoplástico geral, conforme a Equação (B.36). No trabalho de Krairi (2015) não ficou clara a forma que os autores estabeleceram essa analogia e, principalmente, se os termos $h_{...}$ contêm a rigidez efetiva.

$$f = \tilde{\sigma} - \sigma_{y0} - K_0 r = \hat{\sigma}, \quad \tilde{\sigma} = E\epsilon^e, \quad \hat{\sigma} = \eta_{vp,0}\dot{r}$$

$$\dot{r} \qquad \qquad \omega(f)$$
(B.36a)

$$\dot{p} = \frac{\dot{r}}{1 - D} = g = \frac{\omega(f)}{(1 - D)\eta_{vp,0}}$$
 (B.36b)

$$\eta_{vp,0} = \frac{\eta_{vp}}{1 - D} \tag{B.36c}$$

$$K_0 = \frac{K}{1 - D} \tag{B.36d}$$

$$h_{epd} = E + K = -\frac{\partial_p g}{\partial_{\tilde{\sigma}} g} \tag{B.36e}$$

$$h_{evpd} = \frac{\eta_{vp}}{\Delta t} + h_{epd} = \frac{1}{\Delta t \partial_{\tilde{\sigma}} g} + h_{epd}$$
(B.36f)

O operador tangente algorítmico regularizado para o modelo acoplado ao dano é escrito em função da regularização do operador efetivo $\tilde{C}^{reg,vep}$ e do operador C^{vepd} , de acordo com a Equação (B.37) para o caso tridimensional viscoelástico.

$$\partial_{\dot{\epsilon}}\dot{\sigma}(t+\Delta t) = \mathbb{C}_{t+\Delta t}^{reg,vepd} = \mathbb{C}_{t+\Delta t}^{vepd} + \left((1-D)\tilde{\mathbb{C}}_{t}^{reg,vevp} - \mathbb{C}_{t+\Delta t}^{vepd}\right)e^{\left(-\frac{h_{vepd}}{h_{vevpd}-h_{vepd}}\right)}$$
(B.37a)

$$h_{vepd}(t + \Delta t) = -\frac{\partial_p g}{\partial_{\sigma_{eq}} g}$$
(B.37b)

$$h_{vevpd}(t + \Delta t) = \frac{1}{\Delta t \partial_{\sigma_{eq}} g} - \frac{\partial_p g}{\partial_{\sigma_{eq}} g}$$
(B.37c)

B.6 TENSOR DE ESHELBY

O tensor de Eshelby (1957) *S* define um campo de deformações uniforme ϵ_1 em uma inclusão elipsoide, isolada em um meio infinito isotrópico, submetida a uma perturbação livre de tensão ϵ^* . As componentes não nulas desse tensor, para uma inclusão esferoide com raios quaisquer $a_3 = a_2$ e a_1 , alinhada ao longo do eixo 1 e caracterizada pela razão de aspecto $Z = a_1/a_3$, são formuladas abaixo (MILED, 2011; PIERARD *et al.*, 2006).

$$S_{1111} = \frac{1}{2(1-\nu)} \left[2(1-\nu)(1-g) + g - Z^2 \frac{3g-2}{Z^2-1} \right]$$
(B.38a)

$$S_{2222} = S_{3333} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[2(2-\nu)g - \frac{1}{2} - \left(Z^2 - \frac{1}{4}\right)\frac{3g-2}{Z^2 - 1} \right]$$
(B.38b)

$$S_{1122} = S_{1133} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[4\nu(1-g) - g + Z^2 \frac{3g-2}{Z^2 - 1} \right]$$
(B.38c)

$$S_{2233} = S_{3322} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[-(1-2\nu)g + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\frac{3g-2}{Z^2-1} \right]$$
(B.38d)

$$S_{2211} = S_{3311} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[-(1-2\nu)g + Z^2 \frac{3g-2}{Z^2-1} \right]$$
(B.38e)

$$S_{1212} = S_{1313} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[(1-\nu)(2-g) - g + Z^2 \frac{3g-2}{Z^2-1} \right]$$
(B.38f)

$$S_{2323} = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[(1-2\nu)g + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\frac{3g-2}{Z^2-1} \right]$$
(B.38g)

As demais componentes são obtidas pela permutação cíclica dos índices $\{a, b, c, d\}$, esse processo é definido por $S_{P(ab,cd)}$ e $S_{P(a,b),P(c,d)}$. Por exemplo, $S_{P(ab,cd)}$ declara $S_{1122} = S_{2211}$ e $S_{P(a,b),P(c,d)}$, $S_{1212} = S_{1221} = S_{2112} = S_{2121}$ (MI-LED, 2011). Isto posto, o tensor S apresenta as duas simetrias menores, portanto $S \in (\mathbb{L}in^{sym,1} \cap \mathbb{L}in^{sym,2})$.

$$= \begin{cases} \frac{Z}{(Z^2 - 1)^{\frac{3}{2}}} \left[Z\sqrt{Z^2 - 1} - \cos^{-1}Z \right], & se \ 0 < Z < 1 \end{cases}$$
(B.40a)

$$g = \left\{ \frac{Z}{(1-Z^2)^{\frac{3}{2}}} \left[\cosh^{-1}Z - Z\sqrt{1-Z^2} \right], \text{ se } 1 < Z < \infty \right.$$
 (B.40b)

A função g é resultado de integrais elípticas e, para esferoides oblatos, é formulada na Equação (B.40a), já para prolatos, a solução é expressa pela Equação (B.40b). Em Miled (2011), foi encontrada uma diferença na formulação de g, quando comparada a outras referências como Pierard *et al.* (2006), portanto as expressões estão idênticas as relatadas neste último.

APÊNDICE C – MORFOLOGIA

O comportamento mecânico dos polímeros envolve diversos fenômenos não lineares, atribuídos a sua composição macromolecular. Devido a evolução das técnicas de micrografia, é constatada a grande capacidade cinética dos arranjos macromoleculares, microestrutura polimérica, e sua relação com os fenômenos mecânicos (CALLIS-TER; RETHWISCH, 2012; MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012). A movimentação das macromoléculas é altamente dependente da composição atômica e geometria das ligações interatômicas, assim como do arranjo microestrutural no qual estas estão inseridas. Assim, a caracterização da microestrutura e sua cinética é fundamental para compreender o comportamento mecânico e a aplicabilidade dos modelos propostos na literatura. As próximas seções apresentam uma breve descrição destes conceitos.

C.1 MICROESTRUTURA DOS SEMICRISTALINOS

A cadeia principal dos polímeros é uma macromolécula formada por átomos de carbono, com ou sem ramificações laterais. A geometria das cadeias depende do estado de pressão e temperatura do material e estão sujeitas a rotações e flexões ao longo do seu comprimento. Dentre as composições de macromoléculas, algumas são formadas por ligações secundárias e outras por ligações cruzadas. Os polímeros formados por ligações cruzadas são classificados como termofixos, pois não apresentam uma temperatura de fusão, do contrário são chamados de termoplásticos.

Em geral, as cadeias poliméricas não são homogêneas e podem apresentar diferentes geometrias e composições ao longo do comprimento. Devido a essa característica, não é possível a produção de um material polimérico com estrutura totalmente cristalina, pois, após a cristalização, qualquer desordem em uma região da cadeia resultará em uma fase amorfa. Além da composição das macromoléculas, o grau de cristalinidade também dependerá das condições do processo de cristalização.

No processo de cristalização ocorre uma compactação de cadeias moleculares para resultar em um arranjo atômico ordenado. Pela capacidade cinética das macromoléculas, as cadeias se dobram sobre si mesmas e se empilham sobre outras moléculas igualmente dobradas, envoltas por cadeias e ramificações conformadas aleatoriamente. A cristalização forma cristais finos e planos, lamelares, chamados de cristalitos, representados na Figura C.1. Algumas moléculas de um cristalito podem participar da estrutura de outro, a região entre os cristalitos é chamada de interlamelar e o segmento molecular entre as lamelas de ligação interlamelar.

A forma mais comum de cristalização em termoplásticos é pelo resfriamento do material fundido. Neste caso, os cristais coexistem com regiões amorfas e são distribuídos radialmente centrados em um núcleo, o resultado é uma estrutura esférica denominada esferulito, Figura C.1. Assim, a rede cristalina é um arranjo emaranhado



Figura C.1 – Estrutura cristalina de um polímero semicristalino.

Fonte: Adaptado de Callister e Rethwisch (2012).

de moléculas. Uma cadeia polimérica compõe inúmeras células cristalinas unitárias e regiões amorfas, distinto do observado em materiais com moléculas pequenas.

Devido a sua microestrutura, os semicristalinos apresentam propriedades intermediárias de ambas as fases, geralmente, associadas ao volume livre no seu interior. Em materiais cristalinos, o volume livre é suficiente para a movimentação relativa das moléculas, apenas após a temperatura de fusão T_g . Em materiais amorfos, o movimento relativo é evidente após uma temperatura de transição vítrea T_g (WARD; SWEE-NEY, 2012). Na Figura C.2, está representada a curva do volume de um semicristalino (b), em função da temperatura, a qual descreve um intermédio entre o comportamento das duas fases isoladas, amorfa e cristalina (a).

C.2 MICROMECANISMOS DE DEFORMAÇÃO DOS SEMICRISTALINOS

Nos semicristalinos com microestrutura esferulítica, a cinética de deformação envolve diferentes mecanismos. Algumas perturbações são passíveis de recuperação, a cinética de um esferulito é dividida em três estágios, com progressão gradual de





Fonte: Adaptado de Jones e Ashby (2005).

acordo com o nível de solicitação. Como exemplo, na Figura C.3, a estrutura do esferulito está representada por um plano com dois cristalitos e uma fase amorfa entre eles.





Fonte: Adaptado de Callister e Rethwisch (2012).

No início do processo de deformação, estágio um, os segmentos das cadeias em regiões amorfas são alongados na direção da solicitação, enquanto os cristalitos permanecem inalterados. O deslizamento relativo entre as cadeias é resistido pelas ligações fracas de Van der Waals, como o observado em termoplásticos amorfos (KAUSCH, 2012). Conforme as cadeias são estiradas, a rede de emaranhamento diminui, bem como a atratividade das ligações fracas.

Com o aumento da solicitação, as ligações covalentes intramoleculares da região cristalina passam a resistir aos esforços e no interior dos cristalitos os segmentos dobrados são contraídos. Consequentemente, há um aumento na espessura do cristalito, representado por Δt no estágio dois da Figura C.3. Devido as ligações intermoleculares, o estiramento na fase amorfa causa uma rotação e orientação dos cristalitos na direção da solicitação, representadas no estágio três. Se a solicitação for suspensa, essa cinética molecular é recuperada, dado um tempo suficiente para a conformação das cadeias.



Figura C.4 – Cinética microestrutural irreversível.

Fonte: Adaptado de Callister e Rethwisch (2012).

O limiar de reversibilidade da cinética molecular ocorre no estágio três, isto é, neste surgem perturbações permanentes na região ordenada do semicristalino. Com o alinhamento dos cristalitos, na direção da solicitação, as suas cadeias são estiradas e a estrutura lamelar original é dividida em lamelas menores, blocos, com dobras mais

contraídas, portanto, com maior espessura. Esse processo ocorre no estágio quatro, Figura C.4, no qual também inicia uma movimentação maior das cadeias emaranhadas na fase amorfa, de forma ordenada e cooperativa, pois as lamelas remanescentes permanecem interligadas.

No estágio cinco, as lamelas menores, ou blocos cristalinos, e as cadeias da fase amorfa estão altamente orientadas e estiradas, desta forma, a movimentação é restringida e resistida pelas ligações intramoleculares, inclusive na fase amorfa (CAL-LISTER; RETHWISCH, 2012). Em Jones e Ashby (2005), todo o micromecanismo irreversível é descrito com o desdobramento das lamelas cristalinas e orientação das macromoléculas. No entanto, em Michler e Balta-Calleja (2012, p. 239) o desdobra-mento é definido após os micromecanismos descritos por Callister e Rethwisch (2012), como um outro associado a nucleação de microvazios.

C.3 MICROMECANISMOS DE FRATURA NOS SEMICRISTALINOS

A falha nos semicristalinos, geralmente, provém do surgimento de regiões altamente estiradas de fase amorfa, chamadas de pontes fibrilares, ou fibrilas, orientadas na direção da solicitação e intercaladas por vazios (ABRAMS *et al.*, 2017). Esse fenômeno é observado, macroscopicamente, em polímeros amorfos, chamado de *crazing*, devido a aparência das trincas. Nos semicristalinos, a formação de *craze* é percebida apenas por análises microscópicas.

Na literatura, as evidências de análises microscópicas convergem para uma interpretação da cinética envolvida. Como consequência do estiramento molecular, as forças de interação intermoleculares são enfraquecidas e a mobilidade das moléculas aumenta. Neste ponto, os esferulitos tendem a alongar e assumem uma forma elipsoide. O alongamento transforma o esferulito em um conjunto de fibrilas. As fibrilas são desenvolvidas com, ou sem, a presença de bandas de cisalhamento, localizadas ou difusas. Esse micromecanismo aumenta o estiramento das cadeias e contribui para a formação das fibrilas, mas não as predispõem (MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012).

A Figura C.5 destaca fase amorfa (a), cristalina (b), fibrilar (c) e microporos (c) em um filme de polipropileno microporoso (FPPM). Os poros nesse material são formados durante um processo de estiramento a frio do filme de polipropileno. É possível observar a presença das bandas de cisalhamento em (a) e (b), com o eixo da propagação de *craze* inclinado em relação ao eixo da solicitação, paralelo a direção das fibrilas, representado pela seta rosa.

A nucleação de nanovazios ocorre entre as lamelas ou esferulitos, claramente, na fase amorfa (BRETZ; HERTZBERG; MANSON, 1981). O processo de nucleação inicia na região com menor densidade de emaranhamento ρ_e ($\rho_e = 1/M_e$), predispondo a ruptura, com o estiramento, colapso das fibrilas e coalescência dos vazios, na frente da propagação de trinca (MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012). A Figura C.6 associa o Figura C.5 – Morfologia de um FPPM: a) regiões amorfas; b) regiões cristalinas; c) sem filtro, a seta vermelha aponta as fibrilas e a azul os poros.



Fonte: Adaptado de Abrams et al. (2017).

comportamento macroscópico com os micromecanismos identificados para polímeros com diferentes pesos moleculares M_e .

Figura C.6 – Micromecanimos de falha em um ensaio de tração para diferentes semicristalinos.



Fonte: Adaptado de Michler e Baltá-Calleja (2012).

Existem diferentes proposições de micromecanismos para a formação das fibrilas a partir do estágio cinco da Figura C.4. De fato, a micrografia de semicristalinos estirados a frio demonstra apenas a diminuição de regiões cristalinas e aumento das amorfas orientadas. Assim, o micromecanismo de transição das duas fases está sujeito a interpretações (MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012). Uma hipótese propõe a formação de microfibrilas pela associação dos blocos cristalinos e das cadeias orientadas na fase amorfa (KAJIYAMA; OKADA; TAKAYA-NAGI, 1974; PETERMANN; KLUGE; GLEITER, 1979). Outra proposição é conhecida como modelo de Kobayashi, o qual levanta a hipótese do aumento do segmento amorfo das cadeias, causado pelo desdobramento das cadeias nos blocos cristalinos. Dessa forma, as fibrilas são formadas apenas por regiões amorfas (PETERMANN; KLUGE; KLUGE; GLEITER, 1979).

C.4 COMPORTAMENTO MECÂNICO MACROSCÓPICO

Segundo Williams (1973), todos os materiais apresentam um comportamento mecânico, compreendido entre um sólido rígido e um fluído newtoniano, geralmente, dependente da temperatura e do tempo de observação. Nos termoplásticos, o comportamento víscido é evidente na temperatura ambiente, devido a baixa temperatura de transição vítrea. Esse comportamento é atribuído a grande mobilidade das macromoléculas em temperaturas superiores a transição vítrea T_q (DOWLING, 2012).

Como já mencionado, a cinética molecular é altamente dependente da temperatura e do histórico de estiramento das moléculas. Portanto, a relação *E* da tensão com a deformação nos semicristalinos apresenta diferentes comportamentos, conforme a Figura C.7. Quanto menor a temperatura ou maior a taxa de solicitação, maior a rigidez do material e menor a sua tenacidade, área abaixo da curva tensão versus deformação.

A relação do efeito da taxa de solicitação com a temperatura é associada com a mobilidade molecular. Com uma alta taxa de solicitação não há tempo suficiente para a conformação das cadeias e, desta forma, os segmentos são rapidamente estirados. Semelhante, em temperaturas menores, o volume livre diminui e, mesmo a uma taxa menor de solicitação, as cadeias são estiradas rapidamente em regiões localizadas (WARD; SWEENEY, 2012).

Na Figura C.7, para o mesmo material até a ruptura, estão identificados diferentes comportamentos mecânicos, dependentes da taxa de solicitação e da temperatura. Sob uma taxa de solicitação, suficientemente, baixa, ou em altas temperaturas, o material apresenta um comportamento dúctil, com grande alongamento até a ruptura e alta tenacidade. Com a diminuição da temperatura, ou aumento da taxa de solicitação, a tenacidade do material diminui. (MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012; CALLISTER; RETHWISCH, 2012; WARD; SWEENEY, 2012).

Para polímeros, Michler e Baltá-Calleja (2012) classificam três comportamentos típicos, representados na Figura C.8. A primeira curva representa um comportamento estritamente elástico até a ruptura, característica de sólidos frágeis, comumente, observada em termoplásticos com alta orientação molecular, auto-reforçados. Outro extremo, representado na curva (2), representa baixa rigidez e alta tenacidade, caracteri-

Figura C.7 – Efeito da temperatura e taxa de solicitação no comportamento mecânico até a ruptura.



Fonte: Adaptado de Michler e Baltá-Calleja (2012).

zado pelo amolecimento do material. Já a curva (3), apresenta um comportamento intermediário, dependente de circunstâncias específicas, evitando concentração crítica de tensões, com alta tensão limite de escoamento, desencadeando vários eventos de escoamento localizado, dentre outros fatores.

A curva (2) da Figura C.8 descreve o tipo de materiais abordado com o modelo apresentado na Seção 2.5. O amolecimento descrito por Michler e Baltá-Calleja (2012) é decorrente da relaxação das tensões devido ao comportamento víscido. Esse efeito é associado ao tempo característico de relaxação τ do material, tempo necessário para o material atingir o equilíbrio termodinâmico, obtido por ensaios mecânicos.

O comportamento mecânico nesses materiais é caracterizado por um conjunto de parâmetros obtidos por ensaios monotônicos de relaxação, fluência ou por ensaios cíclicos conhecidos como Análise Térmica Dinâmico-Mecânica, em inglês *Dynamic Mechanical Thermal Analysis* (DMTA), dentre outros. Nos experimentos de relaxação, a perturbação é uma medida de deformação constante e a tensão reduz exponenci-





Fonte: (MICHLER; BALTÁ-CALLEJA, 2012).

almente a um valor assintótico. Já no experimento de fluência é imposta uma medida de tensão constante e a deformação cresce conforme uma função logarítmica (CAL-LISTER; RETHWISCH, 2012). Esses conceitos serão detalhados na Apêndice E.





Fonte: Autor.

Todavia, dentre as citadas, a metodologia mais usual e completa para carac-

terização de materiais poliméricos é o DMTA, no qual é aplicada uma deformação, ou tensão, harmônica e os dados são obtidos em função do tempo, frequência ou temperatura. A análise é feita com o desmembramento das componentes de armazenamento E' e perda E'' do módulo de resistência E com uma relação de proporção entre elas chamada de $tan \delta$, Figura C.9.

APÊNDICE D – DEDUÇÕES MFH

Para idealizar o confinamento da inclusão e o seu efeito no meio infinito, hipoteticamente, ela é retirada do meio e nela é imposta uma deformação *eigenstrain* ϵ^* , independente de tensão, semelhante a um campo de deformação térmica (MURA, 2013). Ao inserir a inclusão na matriz, a deformação ϵ^* é restringida uniformemente pela rigidez elástica da matriz \mathbb{C}_M^e .

Neste ponto, o RVE está livre de solicitações externas, mas apresenta um estado de *self-stress*, devido a tensão na interface das fases, conforme a proposição de Eshelby (1957). No contexto do problema de Eshelby, os campos microscópicos são formulados em uma matriz com domínio infinito e uma única inclusão, portanto a formulação não contém a barra superior utilizada anteriormente para indicar médias volumétricas.

D.1 SOLUÇÃO ESHELBY

Para estabelecer uma relação entre o campo *eigenstrain* ϵ^* , no RVE definido pelo domínio $\Omega_{\mathcal{P}}$, e as condições de equilíbrio em Ω e contorno Γ macroscópicos, é imposta uma condição de estado uniforme das tensões $\sigma = \sigma_M$ e deformações $\epsilon = \epsilon_M$ no domínio $\Omega_{\mathcal{P}}$. Nesse contexto, é admitida a decomposição da deformação ϵ_M em uma parcela elástica ϵ^e_M e outra ϵ^* , assim a tensão na matriz infinita σ_M é formulada conforme a Equação (D.1).

$$\boldsymbol{\sigma}_{M} = \mathbb{C}_{M}^{e} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^{*})$$
 (D.1)

No modelo hipotético, com tensões uniformes em $\Omega_{\mathcal{P}}$ e um corpo macroscópico livre de forças por unidade de volume e na superfície, o problema é resumido em solucionar a equação diferencial não homogênea da Equação (D.3), para um corpo livre submetido a um campo ϵ^* qualquer (MURA, 2013).

$$div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \tag{D.2}$$

$$\mathbb{C}_{M}^{e}: div(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbb{C}_{M}^{e}: div(\boldsymbol{\epsilon}^{*})$$
(D.3)

Uma forma de solucionar o problema proposto por Eshelby (1957) utiliza funções de Green para resolver a Equação (D.3). Como resultado, surge a expressão para uma perturbação ϵ_p^e no campo de deformações ϵ , devido a presença da inclusão, definida na Equação (D.4) para um corpo em repouso.

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}_p^e = \mathbb{S} : \boldsymbol{\epsilon}^* \tag{D.4}$$

Usualmente, a forma das inclusões é limitada a esferoides de revolução, assim o tensor de Eshelby *S* tem solução analítica para fases com comportamento isotrópico. Restrito à essas condições, o tensor $S(\nu, Z)$ é função explícita do coeficiente de Poisson ν e da razão de aspecto *Z*. Tal abordagem foi estabelecida nessa formulação e a forma explícita de *S* consta no Apêndice B. Entretanto, a propósito de simplificação, o tensor de Eshelby *S* é substituído pelo de Hill $\mathbb{P}(\mathbb{C}_M^e, S)$, Equação (D.5), pois o último apresenta simetria maior (HILL, 1965a).

$$\mathbb{P} = (\mathbb{C}_M^e)^{-1} : S \tag{D.5}$$

Caso o corpo esteja sujeito a uma excitação externa e supondo um correspondente campo uniforme ϵ_{∞}^{e} em $\Omega_{\mathcal{P}}$, por superposição dos efeitos, o campo de deformações ϵ em $\Omega_{\mathcal{P}}$ é expresso pela Equação (D.6) e a tensão na inclusão pela Equação (D.7) (MURA, 2013).

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}^e_\infty + \boldsymbol{\epsilon}^e_p \tag{D.6}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \mathbb{C}_1^e : \boldsymbol{\epsilon} \tag{D.7}$$

O campo de tensões σ é contínuo em todo o domínio $\Omega_{\mathcal{P}}$, esta definição e a condição de equilíbrio estabelecida na Equação (D.2) permitem formular a condição necessária e suficiente declarada na Equação (D.8).

$$div(\boldsymbol{\sigma}) = div(\boldsymbol{\sigma}_M - \boldsymbol{\sigma}_1) = 0 \tag{D.8}$$

A Equação (D.8) resulta na relação da Equação (D.9), pela combinação com a Equação (D.1), Equação (D.6) e Equação (D.7). Essa relação é fundamental para compreender a formulação do método de Mori-Tanaka, explorado na próxima seção, pois parte da superposição do estado estabelecido até então com outro campo uniforme de deformações.

$$\mathbb{C}_{M}^{e}: (\boldsymbol{\epsilon}^{\infty} + \boldsymbol{\epsilon}_{p}^{e} - \boldsymbol{\epsilon}^{*}) = \mathbb{C}_{1}^{e}: (\boldsymbol{\epsilon}^{\infty} + \boldsymbol{\epsilon}_{p}^{e})$$
(D.9)

D.2 SOLUÇÃO MORI-TANAKA

Neste trabalho foi aplicado o método Mori-Tanaka (MORI; TANAKA, 1973), segundo Miled, Doghri, Brassart *et al.* (2013), esse é o mais utilizado em compósitos com um volume moderado de inclusões, dispersas em um meio uniforme definido pelas propriedades da fase matriz. O método considera explicitamente a interação das inclusões no campo médio $\bar{\epsilon}$, portanto a Equação (D.9) está reescrita na Equação (D.10), com a inserção das perturbações $\bar{\epsilon}''_M$ e ϵ'''_1 . O campo $\overline{\epsilon}''_{M}$ representa a perturbação de todas as inclusões no campo médio de deformação da matriz $\overline{\epsilon}_{M}$. Já o campo $\overline{\epsilon}''_{1}$ reproduz a interferência de todas inclusões no campo médio de deformações na inclusão $\overline{\epsilon}_{1}$ (MILED; DOGHRI; BRASSART *et al.*, 2013).

$$\mathbb{C}_{M}^{e}:(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{\infty}+\boldsymbol{\epsilon}_{p}^{e}+\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{''}-\boldsymbol{\epsilon}^{*})=\mathbb{C}_{1}^{e}:(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{\infty}+\boldsymbol{\epsilon}_{p}^{e}+\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{1}^{'''}) \tag{D.10}$$

Neste ponto, os campos $\overline{\epsilon}''_M e \overline{\epsilon}''_1$ são definidos iguais, pois o RVE fora idealizado com uma distribuição aleatória (MURA, 2013). Portanto, os campos de deformação médios nas duas fases são escritos conforme abaixo.

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{e} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{\infty} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{''} \tag{D.11}$$

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{1}^{e} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{\infty} + \boldsymbol{\epsilon}_{p}^{e} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{''} \tag{D.12}$$

A partir das relações de Eshelby e Mori-Tanaka, Equação (D.4) e Equação (D.10), juntamente com as definições acima, o tensor ϵ^* é determinado conforme a Equação (D.13).

$$\boldsymbol{\epsilon}^* = -\left\{ \boldsymbol{S} - \left[\boldsymbol{\mathbb{I}} - \left(\boldsymbol{\mathbb{C}}_M^e \right)^{-1} : \boldsymbol{\mathbb{C}}_1^e \right]^{-1} \right\}^{-1} : \boldsymbol{\overline{\epsilon}}_M^e$$
(D.13)

Ao substituir a Equação (D.13) na Equação (D.12), é definido o tensor de quarta ordem de concentração \mathbb{B} , esse mapeia o campo médio de deformações na matriz para a inclusão.

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{1}^{e} = \mathbb{B} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{e} = \left\{ \mathbb{I} + \mathbb{S} : \left[\left(\mathbb{C}_{M}^{e} \right)^{-1} : \mathbb{C}_{1}^{e} - \mathbb{I} \right] \right\}^{-1} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{e}$$
(D.14)

Na Equação (D.15) o tensor \mathbb{B} é reescrito em função do tensor de Hill \mathbb{P} , expresso pela Equação (D.5). Essa equação resume o problema de homogeneização para compósitos lineares, entretanto será aplicada em um não linear com base na metodologia LCC, revisada na Seção 2.4.1.

$$\mathbb{B} = \left[\mathbb{I} + \mathbb{P} : \left(\mathbb{C}_1^e - \mathbb{C}_M^e\right)\right]^{-1} \tag{D.15}$$

D.3 COMPÓSITO LINEAR

Embora o modelo material implementado tenha forte não linearidade, a metodologia LCC implementada para homogeneização aplica diretamente as equações de MFH para compósitos termoelásticos apenas com a substituição do tensor constitutivo elástico \bar{C}^e pelo operador tangente \bar{C}^{tan} . Em vista dessa abordagem, supondo uma relação constitutiva elástica linear nas fases constituintes e a independência entre elas, o campo de tensão médio em cada fase é descrito pela Equação (D.16) e Equação (D.17).

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_M = \mathbb{C}_M^e : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M \tag{D.16}$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_1 = \mathbb{C}_1^e : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1 \tag{D.17}$$

A tensão no meio homogêneo equivalente $\bar{\sigma}$ é obtida pela Equação (D.18), deduzida a partir da substituição das tensões médias em cada fase pelas equações acima na Equação (2.7). Os termos são rearranjados com as definições da Equação (2.8) e Equação (2.9) e a deformação média $\bar{\epsilon}$ é posta em evidência. Os demais termos estão concatenados no tensor constitutivo elástico homogêneo equivalente, ou efetivo, \bar{C}^e , conforme a Equação (D.19).

$$ar{m{\sigma}} = ar{\mathbb{C}}^e : ar{m{\epsilon}}$$
 (D.18)

$$\bar{\mathcal{C}}^e = [v_1 \mathcal{C}_1^e : \mathcal{B} + (1 - v_1) \mathcal{C}_M^e] : [(1 - v_1)\mathcal{I} + v_1 \mathcal{B}]^{-1}$$
(D.19)

Para materiais termoelásticos lineares, a mesma metodologia é aplicada, incluindo os mesmos tensores de concentração $A \in \mathbb{B}$, definidos no caso isotérmico (PIERARD; FRIEBEL; DOGHRI, 2004). A relação constitutiva para o problema de termoelasticidade linear está escrita na Equação (D.20), em função do tensor de segunda ordem ϖ , chamado tensor de polarização, o termo α é o tensor de expansão térmica e θ a variação uniforme de temperatura.

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^e : \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\varpi} \boldsymbol{\theta} \tag{D.20}$$

$$oldsymbol{arphi} = -\mathbb{C}^e: oldsymbol{lpha}$$
 (D.21)

Para justificar o uso dos mesmos tensores de concentração, a dedução do modelo de MFH termoelástico parte do elástico. De fato, a Equação (D.20) é uma combinação linear do modelo elástico com uma parcela térmica, portanto vale o princípio da superposição. Nessa conjuntura, são impostas três condições de contorno distintas para avaliar cada termo separadamente.

Na primeira, o compósito é submetido a um deslocamento linear com deformação resultante $\epsilon^{s1} = \bar{\epsilon}^{s1}$, sem variação de temperatura. O estado em cada fase é definido pela formulação do caso elástico, aplicada abaixo.

$$\int \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1^{s1} = \boldsymbol{A} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \tag{D.22a}$$

$$Caso 1 \begin{cases} \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = v_1 \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1^{s1} + (1 - v_1) \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M^{s1} \\ \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M^{s1} = c_1^{s1} - c_2^{s2} - c_3^{s1} \end{cases}$$
(D.22b)

$$ar{m{\sigma}}_1^{s1} = \mathcal{C}_1^e : ar{m{\epsilon}}_1^{s1}$$
 (D.22c)

$$\left(ar{oldsymbol{\sigma}}_{M}^{s1}=\mathbb{C}_{M}^{e}:ar{oldsymbol{\epsilon}}_{M}^{s1}
ight. ext{(D.22d)}$$

No estado anterior é imposto um incremento de temperatura e outro de deslocamento linear, com resultantes $\bar{\theta} \in \Delta \bar{\epsilon}^{s^2}$. Os incrementos de tensão e deformação são definidos uniformes para isolar o efeito da temperatura na relação constitutiva da Equação (D.20), agora formulada para cada fase.

$$Caso \ 2 \left\{ \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{s2} = \mathbb{C}_{M}^{e} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{s2} + \boldsymbol{\varpi}_{M} \bar{\boldsymbol{\theta}} = \mathbb{C}_{1}^{e} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{s2} + \boldsymbol{\varpi}_{1} \bar{\boldsymbol{\theta}} \right.$$
(D.23a)

$$\left(\Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{s2} = (\mathcal{C}_1^e - \mathcal{C}_M^e)^{-1} : (\boldsymbol{\varpi}_1 - \boldsymbol{\varpi}_M)\bar{\theta}\right)$$
(D.23b)

Por fim, um incremento de deslocamento linear $\Delta \bar{\epsilon}^{s3}$ é aplicado sem variação de temperatura, caso semelhante a primeira condição de contorno e resulta em equações incrementais semelhantes.

$$\int \Delta \bar{\epsilon}_1^{s3} = A : \Delta \bar{\epsilon}^{s3} \tag{D.24a}$$

$$Caso 3 \left\{ \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^{s3} = v_1 \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_1^{s3} + (1 - v_1) \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_M^{s3} \right\}$$
(D.24b)

$$\Delta \bar{\sigma}_1^{s_3} = C_1^e : \Delta \bar{\epsilon}_1^{s_3} \tag{D.24c}$$

$$\left(\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{M}^{s3} = \mathbb{C}_{M}^{e} : \Delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{M}^{s3} \right)$$
(D.24d)

Pela superposição dos efeitos e a imposição de $\Delta \bar{\epsilon}^{s3} = -\Delta \bar{\epsilon}^{s2}$, a combinação da Equação (D.22a), Equação (D.23b) e Equação (D.24a) resulta na relação da Equação (D.25), para o campo de deformações médio na inclusão $\bar{\epsilon}_1$, em função do macroscópico $\bar{\epsilon}$, no fim do procedimento.

$$ar{m{\epsilon}}_1 = A:ar{m{\epsilon}} + ar{m{a}}$$
 (D.25)

$$\bar{\boldsymbol{a}} = (A - \mathbb{I}) : (\mathbb{C}_1^e - \mathbb{C}_M^e)^{-1} : (\boldsymbol{\varpi}_1 - \boldsymbol{\varpi}_M)$$
(D.26)

Similarmente, a relação constitutiva macroscópica, ou média no meio homogêneo equivalente, é obtida ao combinar a Equação (D.22c), Equação (D.22d), Equação (D.23a), Equação (D.24c) e Equação (D.24d) com a Equação (2.7), o resultado está expresso na Equação (D.28).

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}}^e : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \bar{\boldsymbol{\varpi}}\theta \tag{D.27}$$

$$\bar{\boldsymbol{\varpi}} = (1 - v_1)\boldsymbol{\varpi}_M + v_1\boldsymbol{\varpi}_1 + v_1(\boldsymbol{\mathbb{C}}_1^e - \boldsymbol{\mathbb{C}}_M^e) : \bar{\boldsymbol{a}}$$
(D.28)

APÊNDICE E – VISCOELASTICIDADE LINEAR UNIDIMENSIONAL

Na Figura 2.10, está exposto um esquema reológico unidimensional do modelo constitutivo, dividido em dois blocos. O primeiro bloco, viscoelástico, com deformação ϵ^{ve} , apresenta um segmento puramente elástico, com tensão σ_{∞} , e outro viscoelástico, composto por uma mola E_1 e um amortecedor η_1 .

$$\epsilon^{ve} = \epsilon_1^e + \epsilon_1^v \tag{E.1}$$

No segmento viscoelástico, há uma decomposição aditiva da deformação, em uma parcela elástica ϵ^e e outra viscosa ϵ^v , conforme a Equação (E.1). A tensão atuante nesse segmento, σ_1 , chamada de tensão viscosa, é formulada conforme a Equação (E.2) (SIMO; HUGHES, 2006).

$$\sigma_1 = E_1(\epsilon^{ve} - \epsilon_1^v) = \eta_1(\epsilon_1^v)\dot{\epsilon}_1^v \tag{E.2}$$

Na formulação sequente, os termos E_{∞} , E_1 e η_1 estão definidos como constantes, dessa forma o modelo em questão é viscoelástico linear. Consequentemente, é pertinente o teorema da superposição. A partir dessa premissa, a tensão total σ é deduzida como a soma das tensões em cada segmento *i*, Equação (E.3). Portanto, o equilíbrio estabelecido na Equação (E.2) é aplicado para os *n* segmentos constituintes do modelo.

$$\sigma = \left(E_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} E_{i}\right) \epsilon^{ve} - \sum_{i=1}^{n} E_{i} \epsilon_{i}^{v}$$
(E.3)

Destarte, a evolução da deformação viscosa ϵ_i^v , ou inelástica, em cada segmento *i*, resulta na equação diferencial ordinária linear (EDOL) evidente na Equação (E.4a), com a condição inicial da Equação (E.4b).

$$\left\{ \dot{\epsilon}_i^v + \frac{1}{\tau_i} \epsilon_i^v = \frac{1}{\tau_i} \epsilon^{ve} \right.$$
 (E.4a)

$$\lim_{t \to -\infty} \epsilon_i^v(t) = 0 \tag{E.4b}$$

Na Equação (E.4a), o termo τ_i é o tempo característico de relaxação em cada segmento *i*. Esse parâmetro material é termodinamicamente definido como o tempo necessário para a estrutura molecular do material encontrar um estado equilibrado de menor energia, após a cessão da fonte externa, estabelecido como a razão da viscosidade aparente η_i pela rigidez elástica E_i .

$$\epsilon_i^v(t) = \epsilon^{ve} - \int_{-\infty}^t \dot{\epsilon}^{ve} e^{-\frac{t-z}{\tau_i}} dz$$
(E.5)

A solução do PVI da Equação (E.4) fora obtida via fator de integração. Como resultado, a forma explícita da deformação viscosa ϵ_i^v está expressa pela Equação (E.5). No entanto, uma forma mais conveniente de formular a relação constitutiva para a tensão σ deriva da combinação da Equação (E.5) com a Equação (E.3), pois a dependência das deformações ϵ_i^v fica implícita, conforme a Equação (E.6) (SIMO; HUGHES, 2006).

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^{t} \left(E_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} E_{i} e^{-\frac{t-z}{\tau_{i}}} \right) \dot{\epsilon}^{ve} dz$$
(E.6)

O termo entre parênteses, no integrando da Equação (E.6), notoriamente a função de relaxamento $\mathcal{R}(t-z)$, descreve o comportamento observado no Gráfico (a), Figura E.1. Em concordância com o modelo de fluência viscoelástica de Kelvin-Voigt, a formulação também é capaz de reproduzir o fenômeno de fluência, representado no Gráfico (b), Figura E.1.

$$\mathcal{R}(t) = E_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} E_i e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$
(E.7)

O PVI da Equação (E.4), conhecido por modelo de Maxwell, é deduzido como um caso limite da EDOL do modelo de Maxwell-Wiechert, expresso na Equação (E.8), assim como o modelo de Kelvin-Voigt, conforme a Equação (E.9) (WARD; SWEENEY, 2012). Por simplicidade, ambos os problemas foram formulados especificamente para uma composição com um segmento elástico linear e um segmento de Maxwell, caso contrário a ordem da EDO seria igual ao número dos segmentos de Maxwell.

$$\int \sigma + \tau_1 \dot{\sigma} = E_\infty \epsilon^{ve} + \frac{\eta_1 (E_\infty + E_1)}{E_1} \dot{\epsilon}^{ve}$$
(E.8a)

Relaxação
$$\left\{ \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial t} = 0 \right.$$
 (E.8b)

$$\lim_{t \to -\infty} \sigma(t) = (E_{\infty} + E_1)\epsilon^{ve}$$
(E.8c)

$$\int \sigma + \tau_1 \dot{\sigma} = E_\infty \epsilon^{ve} + \frac{\eta_1 (E_\infty + E_1)}{E_1} \dot{\epsilon}^{ve}$$
(E.9a)

Fluência
$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0 \end{cases}$$
 (E.9b)

$$\lim_{t \to -\infty} \epsilon^{ve}(t) = 0 \tag{E.9c}$$

Em concordância com o procedimento anteriormente exposto para o problema de relaxação, o PVC da Equação (E.9) resulta na Equação (E.10) para a deformação viscoelástica ϵ^{ve} , onde o termo entre colchetes é definido como função de fluência $\mathcal{J}(t-z)$.

Figura E.1 – Comportamento característico dos testes de relaxação e fluência.



Fonte: (SIMO; HUGHES, 2006)

$$\epsilon^{ve}(t) = \int_{-\infty}^{t} \left[\frac{1}{E_{\infty}} - \frac{1}{E_{\infty}} \sum_{i=1}^{n} \frac{E_{i}}{E_{\infty} + E_{i}} e^{-\frac{(t-z)E_{\infty}}{\tau_{i}(E_{\infty} + E_{i})}} \right] \dot{\sigma} dz$$
(E.10)

Todavia, a relação constitutiva da Equação (E.6), bem como da Equação (E.10), também é deduzida diretamente do preceito fundamental da viscoelasticidade linear, o estado em um instante *t* está resumido numa composição linear de estados anteriores. Isto posto, supondo uma janela temporal, com duas partições, $(-\infty, z] \cup (z, t]$, na primeira está imposta uma deformação $\epsilon^{ve}(0)$ e na segunda $\epsilon^{ve}(0)$ mais um incremento $\Delta \epsilon^{ve}$, a tensão em um instante *t*, sujeito a *n* incrementos de deformação, é expressa como na Equação (E.11) (WARD; SWEENEY, 2012).

$$\sigma(t) = \epsilon(0)\mathcal{R}(t) + \sum_{i=1}^{n} \Delta \epsilon^{ve} \mathcal{R}(t-z) = \epsilon(0)\mathcal{R}(t) + \int_{0_{+}}^{t} \mathcal{R}(t-z) \frac{\partial \epsilon^{ve}}{\partial z} dz$$
(E.11)

A última forma de deduzir a relação constitutiva viscoelástica, convenientemente, independe de composições reológicas e a função de relaxação $\mathcal{R}(t)$ é escrita diretamente por série finita de Prony. De fato, a solução por transformadas de Laplace da Equação (E.8) e da Equação (E.9), para *n* segmentos de Maxwell, ou Kelvin-Voigt, resulta na série de Prony com *n* termos, nestas, os termos τ_i e ρ_i são, respectivamente, os tempos característicos de relaxação e fluência.

$$\mathcal{R}(t) = E_{\infty} + \sum_{i=1}^{n} E_i e^{-t/\tau_i}$$
(E.12)

$$\mathcal{J}(t) = B_{\infty} - \sum_{i=1}^{n} B_i e^{-t/\rho_i}$$
(E.13)



ANEXO A – FLUXOGRAMA