

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

MODELOS CONSTITUTIVOS VARIACIONAIS DE
VISCOELASTICIDADE E VISCOPLASTICIDADE
PARA MATERIAIS TERMOPLÁSTICOS SUBMETIDOS A
DEFORMAÇÕES FINITAS

Dissertação submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

JAKSON MANFREDINI VASSOLER

FLORIANÓPOLIS, SC - BRASIL
Agosto de 2007

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

MODELOS CONSTITUTIVOS VARIACIONAIS DE
VISCOELASTICIDADE E VISCOPLASTICIDADE
PARA MATERIAIS TERMOPLÁSTICOS SUBMETIDOS A
DEFORMAÇÕES FINITAS

JAKSON MANFREDINI VASSOLER

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

Prof. Eduardo Alberto Fancello, D.Sc. - Orientador

Prof. Fernando Cabral, Ph.D - Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Clovis Sperb de Barcellos, Ph.D.

Prof. Paulo de Tarso Rocha Mendonça, Ph.D.

Prof. Pablo Andrés Muñoz Rojas, Dr. Eng.

"Por que cometer erros antigos se
há tantos erros novos a escolher? "
(Bertrand Russel)

Agradecimentos

A todos professores que me guiaram no meu percurso acadêmico, principalmente ao meu grande amigo e orientador Eduardo Fancello, pela contribuição na minha formação, pela confiança, incentivo e amizade durante o mestrado.

Aos meus pais Valcir e Marisa, pelo incentivo e apoio incondicional durante todos estes anos.

Ao meu irmão Ronaldo, pelo seu exemplo de determinação.

A minha família pelas frases de incentivo durante os momentos mais difíceis.

A minha namorada Beatriz por todo amor e compreensão.

E a todos os amigos que torceram por mim.

Sumário

Resumo	vii
Abstract	ix
1 Introdução e objetivos	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos	2
2 Propriedades dos polímeros	4
2.1 Características dos polímeros	4
2.2 Classificação dos polímeros	6
2.3 Estado sólido nos polímeros	7
2.4 Propriedades mecânicas do polímero sólido	10
2.5 Termoplásticos	15
2.6 Relações constitutivas em polímeros	18
2.6.1 Modelos reológicos viscoelásticos e viscoplásticos	19
2.6.2 Modelos constitutivos viscoelásticos e viscoplásticos	21
3 Conceitos básicos em mecânica do contínuo	24
3.1 Cinemática. Medidas de deformação	24
3.2 Equilíbrio. Medidas de tensão	28
3.3 Hiperelasticidade	31
3.4 Princípio variacional de balanço	33
3.5 Princípios termodinâmicos nos meios contínuos	34

4	Modelos constitutivos	36
4.1	Formulação variacional para materiais inelásticos	36
4.1.1	Definição do (pseudo) potencial incremental	36
4.1.2	Conceito de caminho minimizante	40
4.2	Modelo de viscoelasticidade	43
4.2.1	Conjunto de potenciais	43
4.2.2	O problema de minimização	46
4.2.3	Cálculo de tensão	49
4.2.4	Tensor material	50
4.2.5	Exemplos de modelos de materiais	51
4.3	Modelo de elasto-viscoplasticidade	53
4.3.1	Conjunto de potenciais	54
4.3.2	O problema de minimização	58
4.3.3	Cálculo da tensão	61
4.3.4	Tensor material	61
4.3.5	Exemplos de modelos de material	62
4.4	Modelo de visco-elastoplasticidade	64
4.4.1	O problema de minimização	64
4.4.2	Tensor material	65
5	Exemplos numéricos	67
5.1	Problema uniaxial	67
5.1.1	Modelo viscoelástico	69
5.1.2	Modelo elasto-viscoplástico	70
5.1.3	Modelo visco-elastoplástico	75
5.2	Problema de cisalhamento	79
5.3	Ensaio de tração	82
6	Conclusões	88
	Bibliografia	90

A	Modelo viscoelástico	93
A.1	Minimização de Ψ em relação a \mathbf{M}_a^v	93
A.2	Minimização de Ψ em relação a Δq_a^v	94
A.3	Derivadas de φ e φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$	95
A.4	Derivada de ϵ_i^e em relação a ϵ_i^{pr}	96
B	Modelo elasto-viscoplástico	97
B.1	Minimização de Ψ em relação a \mathbf{M}_a	97
B.2	Minimização de Ψ em relação a q_a e Δq	97
B.3	Derivada de φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$	99
B.4	Derivada de ϵ_i^e em relação a ϵ_i^{pr}	100
C	Tópicos na minimização do modelo elasto-viscoplástico	102

Resumo

JAKSON MANFREDINI VASSOLER (2007), **Modelos constitutivos variacionais de viscoelasticidade e viscoplasticidade para materiais termoplásticos submetidos a deformações finitas**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis (S.C.), Brasil.

Orientador: Eduardo Alberto Fancello, *D.Sc.*

O grande interesse desenvolvido pelos termoplásticos, sobretudo na fabricação de peças e componentes estruturais, é devido às suas boas propriedades mecânicas e capacidade de substituir os metais em certas aplicações. Porém estes materiais possuem um comportamento mecânico muito mais complexo que os materiais metálicos, com deformação não linear quando solicitados, alta sensibilidade a variações de velocidade de deformação e de temperatura. Devido a estas características, os termoplásticos necessitam modelos específicos para a sua simulação numérica, capazes de representar adequadamente a relação de tensão e deformação, taxa de deformação, temperatura, etc. na faixa de análise.

Este trabalho trata do estudo, desenvolvimento e implementação de um conjunto de modelos constitutivos que conjugam características viscoelásticas e viscoplásticas de forma a permitir a simulação do comportamento não linear encontrado em materiais poliméricos sob grandes deformações a diferentes velocidades de deformação.

A formulação utilizada está baseada numa estrutura variacional, na qual a atualização da tensão e das variáveis internas a cada incremento de carga é realizada mediante um princípio de mínimo. Esta formulação faz uso de uma decomposição espectral das quantidades de medida de deformação, fato que permite a utilização de potenciais isotrópicos arbitrários, cuja escolha depende do tipo de aplicação desejada.

A formulação foi implementada em um código acadêmico de elementos finitos em C++ para avaliação de desempenho dos modelos, apresentando resultados satisfatórios. Estes

resultados foram comparados e validados com os resultados equivalentes obtidos para casos de deformação simples (tração uniaxial/ cisalhamento) implementados no código livre GNU Octave.

Nos exemplos numéricos foram testados diversos potenciais e parâmetros, onde foi possível representar o típico fenômeno de estrição com propagação ao longo de todo o corpo de prova de materiais termoplásticos. Os mesmos bons resultados foram obtidos para os exemplos numéricos de tração uniaxial e cisalhamento, onde foi possível verificar a representatividade do típico comportamento de amolecimento e encruamento simplesmente alterando os potenciais e seus parâmetros.

Abstract

JAKSON MANFREDINI VASSOLER (2007), **Variational constitutive models of viscoelasticity and viscoplasticity for thermoplastics under finite strain**. Master Dissertation. Mechanical Engineering Post-Graduation Program, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis (S.C.), Brazil.

Advisor: Eduardo Alberto Fancello, *D.Sc.*

The continuous development of thermoplastics composites has led to a growing interest as an alternative material for structural applications. Good mechanical properties, facilities of molding and low costs are some of the characteristics that enforce their use instead of classical materials. However, these polymers have in general a much more complex mechanical behavior than metals. Strongly dependent on strain rates and temperature, these materials need specific constitutive models for their mathematical representation and, later, for their numerical simulation.

This thesis presents the development and implementation of a set of constitutive models that conjugate viscoelastic and viscoplastic characteristics common to the behavior of many polymeric materials submitted to finite strains and strain-rates.

The formulation used is based on a variational approach in which the stress and the internal variables updates obey a minimum principle within each load increment. The formulation use a spectral decomposition that allows for the choice of arbitrary isotropic potentials representing different specific material models.

This constitutive formulation have been implemented in an academic finite elements code in order to evaluate its numerical performance, showing quite satisfactory results.

A set of numerical examples were studied using different potentials (specific material models) and material parameters. Simple traction and shear tests allowed to verify the ability of the formulation to represent typical softening and hardening behavior of thermoplastics as well as their dependency to strain rates. Also, the case of an uniaxial traction test in

which the necking stabilizes and propagates along the whole specimen has been successfully represented.

Capítulo 1

Introdução e objetivos

1.1 Motivação

A utilização de materiais poliméricos na fabricação de peças e componentes estruturais tem sido crescente nos últimos anos. Isto se deve às suas boas propriedades de isolamento térmico e elétrico, baixa densidade, alta resistência aos químicos e facilidade de trabalho. Por outro lado, devido aos avanços no desenvolvimento de compostos estes têm substituído materiais metálicos sem grande perda de eficiência estrutural.

Dentre as inúmeras possibilidades de aplicação de polímeros, pode-se citar as estruturas de automóveis associadas à proteção de pedestres [1], estruturas de aviões, vidros de segurança de janelas, coletes a prova de bala [2], tubos e conexões, adesivos para junções coladas, espumas poliméricas para absorção de impacto em veículos, etc. Em muitas destas aplicações, o comportamento do material a grandes deformações e altas velocidades de deformação é o principal interesse no projeto do componente estrutural envolvido e, por isto, estes efeitos devem ser tratados de forma adequada.

O comportamento mecânico dos materiais poliméricos é, em geral, muito sensível a variações de velocidade de deformação e de temperatura. Estes ainda possuem um comportamento com deformação não linear quando solicitados, onde a não linearidade pode ser verificada seja em regime de deformações permanentes como em regime de deformações não permanentes.

O uso de métodos numéricos para simular o comportamento do componente em estudo permite definir uma direção conveniente de projeto do componente, diminuindo as desvantagens dos projetos baseados em tentativa e erro e uso exclusivo de protótipos.

Um componente importante da simulação numérica é o modelo constitutivo do material,

que deve ser capaz de representar adequadamente a relação de tensão e deformação, taxa de deformação, temperatura, etc. na faixa de análise. Estes modelos, por sua vez, precisam da caracterização de parâmetros que o alimentem e devem ser obtidos de forma experimental para cada material. A regra, em geral, diz que quanto mais complexo o comportamento do material, mais sofisticado deve ser o modelo constitutivo e, portanto, mais parâmetros constitutivos devem ser caracterizados.

Os materiais poliméricos possuem um comportamento complexo e necessitam modelos adequados para a sua simulação numérica. Isto se torna mais significativo se a faixa de observação inclui deformações finitas. Assim, é necessário identificar modelos constitutivos adequados para simular o comportamento destes materiais, enfatizando eficiência e consistência na representação.

1.2 Objetivos

O objetivo deste trabalho é o estudo, desenvolvimento e implementação de um conjunto de leis constitutivas que conjugam características viscoelásticas e viscoplásticas de forma a permitir a simulação do comportamento não linear encontrado em materiais poliméricos sob grandes deformações a diferentes velocidades de deformação. Dar-se-á especial atenção ao marco variacional proposto por [3] e [4] devido a sua capacidade de combinar modelos viscoelásticos com modelos viscoplásticos.

Entre os inúmeros tipos de polímeros usados na fabricação de componentes, este estudo toma como meta de aplicação os materiais termoplásticos que são os polímeros mais utilizados em componentes estruturais por apresentarem boas propriedades mecânicas de rigidez e resistência. Pode-se citar como exemplo o polipropileno (*PP*), que é um polímero semicristalino e o policloreto de vinila (*PVC*), que é um polímero amorfo, em fase vítrea.

No Capítulo 2 é feita uma descrição das características microestruturais dos polímeros sólidos, de suas propriedades mecânicas quando submetidos a esforços e uma breve revisão bibliográfica dos modelos constitutivos utilizados em sua simulação. No Capítulo 3 são apresentados aspectos clássicos de mecânica do contínuo, mas necessários para introduzir a notação utilizada no próximo capítulo e tornar o texto autocontido.

A lei constitutiva aqui estudada é baseada na formulação variacional dos trabalhos [3], [5], e [6], e é apresentada no Capítulo 4, que, devido a não ser clássica, é mostrada com um

certo grau de detalhamento. Neste capítulo é apresentado o desenvolvimento de um novo modelo viscoplástico, e posteriormente, a sua combinação com o modelo viscoelástico de [5]. No modelo viscoplástico foi necessário incorporar uma técnica para identificar o início de plastificação que é apresentada no Apêndice C.

No Capítulo 5, mostram-se alguns resultados numéricos obtidos para diversos casos de aplicação e finalmente no Capítulo 6 apresentam-se as conclusões.

Capítulo 2

Propriedades dos polímeros

Neste segundo capítulo se apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre as características microestruturais dos polímeros sólidos, que são interessantes no uso de engenharia. Serão abordados assuntos desde sua empregabilidade até suas características mecânicas quando submetidos a esforços.

2.1 Características dos polímeros

O grande e crescente interesse sobre o estudo dos polímeros é devido às suas boas características como material, principalmente de um ponto de vista mecânico. Os polímeros são apreciados pela sua leveza, boa qualidade mecânica e plasticidade, ou seja, a facilidade de serem trabalhados e modelados. Estes são dotados de uma notável tenacidade e capazes de substituir os metais em certas aplicações [7].

A palavra polímero serve para designar uma macromolécula na qual uma unidade estrutural relativamente simples se repete, ligando-se covalentemente com outras iguais por um grande número de vezes. A unidade repetitiva pode ser um único átomo, como por exemplo no enxofre polimérico $-(S)_n-$, ou mais complexa como no *nylon6*, que pode ser esquematizada no seguinte modo: $(NH - (CH_2)_5 - CO)_n$. Assim, os polímeros são constituídos de agregados de moléculas muito grandes, chamadas de macromoléculas. As macromoléculas são similares a um longo fio de dimensão longitudinal que pode atingir alguns milhares de Angstrom ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$) e são fortemente emaranhadas tanto em si mesmas como com outras moléculas mostrando uma forte limitação de mobilidade. Uma representação esquemática é mostrada na Fig.2.1.

O comportamento mecânico dos polímeros é devido ao movimento dos emaranhados que

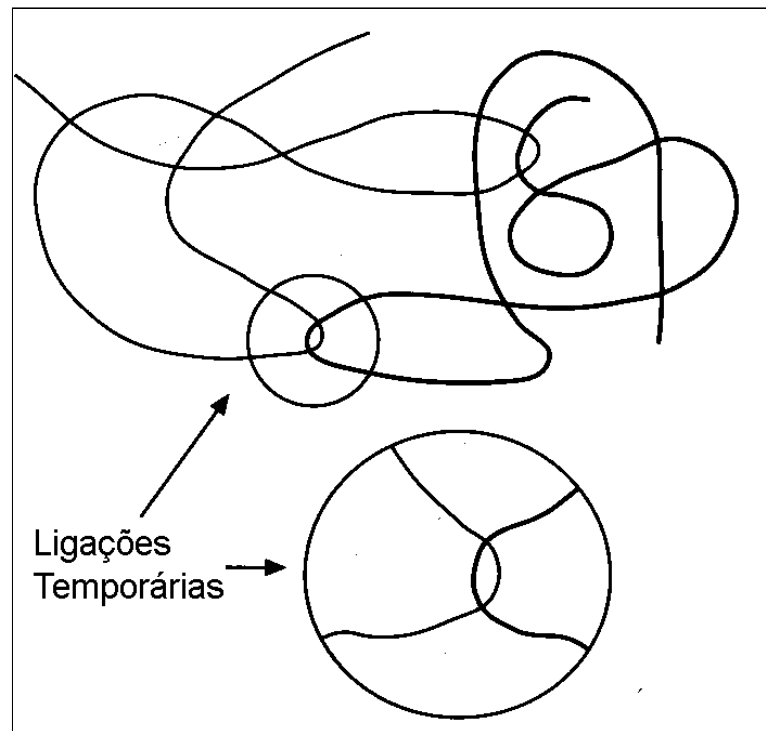


Figura 2.1: Ligações temporárias devido ao emaranhado de macromoléculas [8].

impedem que a deformação prossiga quando esta atinge um certo limite. Neste instante, criam-se ligações temporárias que nascem entre duas macromoléculas de cadeia linear. Estas ligações são caracterizadas pelo fato que podem desfazerem-se e reformarem-se em um outro lugar mantendo constante o seu efeito do ponto de vista estatístico [8].

Uma outra característica fundamental no comportamento destes materiais é sua sensibilidade à temperatura, que confere ao sistema uma configuração pouco estática. Uma elevação da temperatura reduz o poder inibidor das ligações temporárias e o material adquire a fluidez necessária para consentir o trabalho de deformação de um processo de modelagem, enquanto um sucessivo abaixamento da temperatura congela o estado atingido e o material mantém a forma por um tempo indeterminado.

Ainda a nível molecular, os polímeros podem se apresentar em diferentes configurações segundo o modo no qual os átomos que constituem a macromolécula se unem. Destas configurações obtêm-se os vários tipos de materiais plásticos encontrados no comércio, como o polietileno (*PE*), utilizado por exemplo em recipientes de líquidos, o policloreto de vinila (*PVC*), utilizado para a produção de garrafas e tubos, o poliestireno (*PS*), utilizado para embalagens, o polipropileno (*PP*), utilizado para produzir artigos domésticos, malas e tantos

outros. Estes poucos exemplos introduzem uma importante distinção em suas propriedades devido às suas características de agregados moleculares.

2.2 Classificação dos polímeros

A enorme quantidade de polímeros atualmente conhecidos requer uma forma de organização para classificá-los. Os polímeros cobrem interesses extremamente diferenciados que vão dos químicos, voltados principalmente a síntese e propriedades químicas, até as tecnologias de transformação, que por sua vez, são interessadas nas características de processabilidade [8]. Neste estudo, os interesses são baseados nas tecnologias de transformação e em base as características mecânicas dos materiais, e assim serão classificados.

Para uma classificação segundo as tecnologias de transformação, faz-se uma distinção entre os polímeros termoplásticos e polímeros termorígidos. Os termoplásticos respondem a um aumento de temperatura com uma diminuição da viscosidade e uma maior facilidade de fluir e assumir qualquer formato, enquanto uma diminuição da temperatura leva a uma situação molecular estática e o material mantém a forma indefinitivamente. Nota-se que, o ciclo de aquecimento e resfriamento pode ser repetido muitas vezes uma vez que a transição entre o estado deformável e o estado rígido é de caráter físico e não químico, portanto reversível. Os polímeros termorígidos, frequentemente indicados como resinas termoindurentes, têm um comportamento diferente. O aquecimento produz um endurecimento do material uma vez que a energia térmica favorece a formação de ligações covalentes entre as cadeias dando origem a polímeros reticulados. A reticulação bloqueia irreversivelmente a mobilidade molecular, e uma vez modelados, não são mais suscetíveis a modificações e tornam-se praticamente insensíveis às variações térmicas.

Uma classificação dos polímeros segundo as características mecânicas dos materiais é feita em: elastômeros, materiais plásticos e fibras. Os elastômeros são caracterizados por pequenos módulos elásticos e grandes deformações. A sua característica fundamental é a reversibilidade das deformações, assegurada pela vulcanização (ligações covalentes que ligam as cadeias entre si). As fibras são as mais resistentes entre os materiais poliméricos e se caracterizam por uma alta relação entre o seu comprimento e as suas dimensões laterais. Os materiais plásticos são geralmente caracterizados pelas suas propriedades intermediárias entre as borrachas e as fibras. Trata-se de materiais empregados em um amplo campo de

aplicação, onde suas diferentes propriedades refletem toda esta variabilidade e podem até substituir as borrachas e fibras em certas aplicações.

2.3 Estado sólido nos polímeros

No estado sólido, as propriedades mecânicas dos polímeros variam enormemente, indo de comportamentos do tipo borrachoso até muito rígidos e frágeis. Esta grande variabilidade de comportamento é devido à liberdade de movimento das macromoléculas dentro do agregado e do estado sólido presente no polímero. Grande liberdade de movimento dá origem a materiais que se deformam facilmente. Pode-se observar comportamentos completamente elásticos, sem deformação permanente (borrachas) ou com a permanência de deformação (materiais com deformação viscosa ou plástica), ou ainda ambos comportamentos (materiais viscoelásticos e/ou viscoplásticos). Destas considerações, surge a importância de se conhecer os estados sólidos dos polímeros e suas diferenças. A principal distinção entre os estados sólidos dos polímeros são os sólidos cristalinos e os sólidos amorfos. Nos polímeros, os estados cristalinos não se apresentam com exclusividade e a situação mais comum é um sólido parcialmente cristalino.

Nos polímeros cristalinos a natureza macromolecular influi notavelmente sobre suas características, onde as macromoléculas são organizadas de modo tridimensional ordenado e se apresentam como cadeias de comprimento muito grandes, que dão origem a uma lamela cristalina onde a mesma macromolécula linear dá origem a mais pedaços da mesma lamela, como mostrado na Fig.2.2 [8].

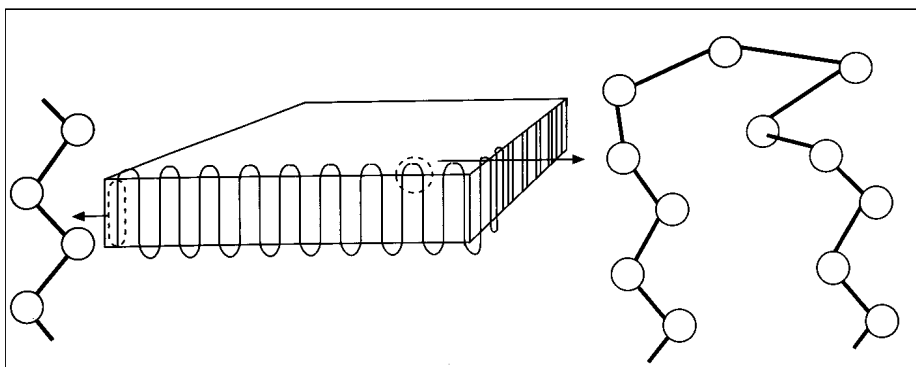


Figura 2.2: Lamela cristalina [8]

Nos Polímeros amorfos, o estado sólido não possui uma organização como no estado

cristalino. A zona amorfa sólida, também conhecida como zona vítrea, correspondente a uma situação molecular em que as cadeias poliméricas estão emaranhadas umas com outras em modo estático e desordenado. Na zona vítrea, os movimentos moleculares são impedidos e o material se apresenta muito rígido. Aumentando a temperatura, os movimentos térmicos aumentam sua amplitude e as macromoléculas têm como se rearranjar. Isto significa que é possível um certo movimento molecular, mas ainda não suficiente para permitir seu deslocamento. O material perde rigidez enquanto os emaranhados podem se desfazerem e se reformarem. O material comporta-se de modo borrachoso e boa parte das deformações são reversíveis. Neste ponto, um aumento maior de temperatura leva a uma elevada mobilidade das moléculas com possibilidade de deslocamento das macromoléculas, quando este apresenta um comportamento fluido.

Vale notar que é muito difícil encontrar um material polimérico completamente cristalino, o que se observa na realidade é a existência de ambas fases amorfa e cristalina, sendo chamado de sólido semicristalino. Este possui a configuração esquematizada na Fig.2.3. Já o estado amorfo pode ser completamente encontrado em polímeros sólidos.

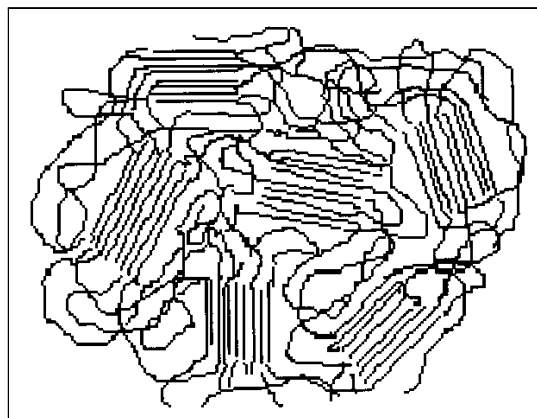


Figura 2.3: Polímero semicristalino [8].

Na Fig.2.4 apresenta-se esquematicamente o comportamento para um polímero amorfo ao variar do peso molecular, onde a temperatura de transição do estado sólido vítreo (*a*) ao borrachoso (*b*) é a temperatura de transição vítrea T_g . Nota-se que a transição do estado borrachoso (*b*) ao estado líquido (*c*) não é caracterizada de uma temperatura exata, mas de um intervalo amplo.

Na Fig.2.5 apresenta-se o comportamento de um polímero parcialmente cristalino, onde

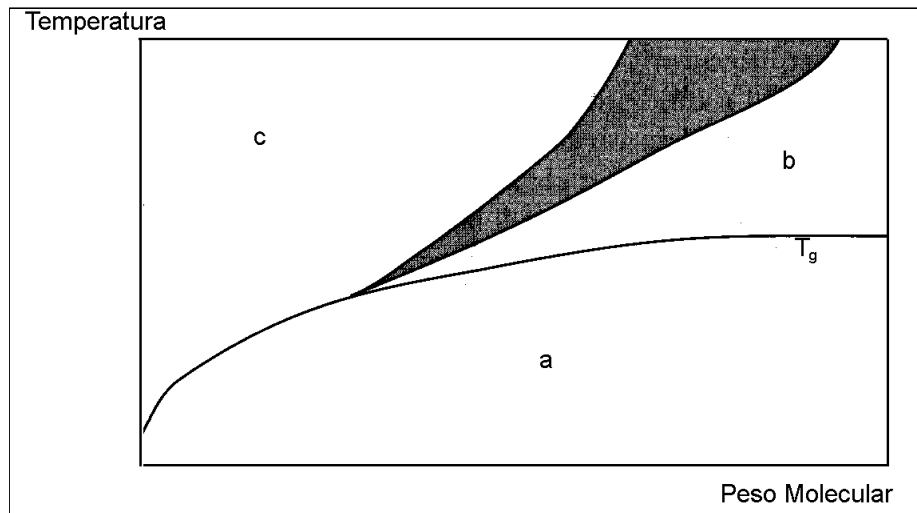


Figura 2.4: Transição do estado sólido em um polímero amorfo [8].

a situação é um pouco mais complexa porque existe uma transição cristalino-borrachoso T_m . Os estados (a), (c) e (d), são respectivamente os estados sólidos cristalino, borrachoso e líquido.

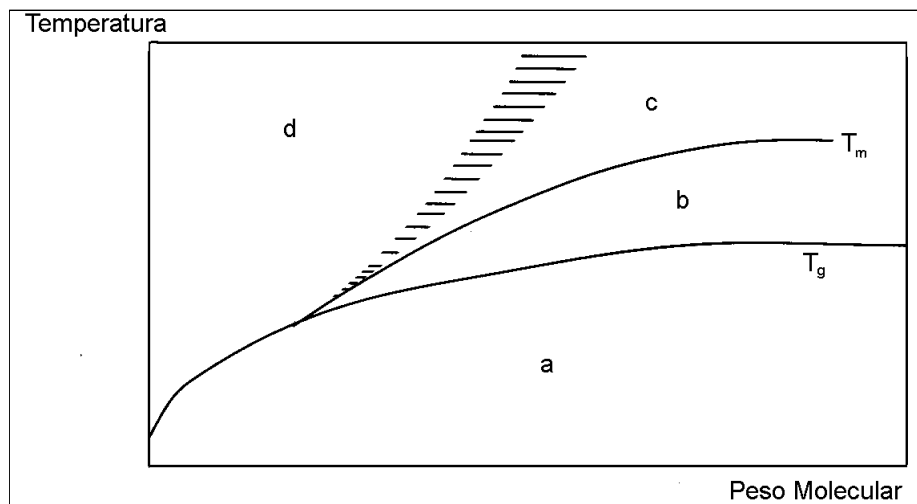


Figura 2.5: Transição do estado sólido de um polímero cristalino [8].

A estado (b) denominado cristalino borrachoso corresponde a um polímero na qual a componente amorfa é do tipo borrachosa, acima da temperatura de transição vítrea T_g , enquanto a fase cristalina, abaixo da T_m , mantém ainda a sua rigidez.

2.4 Propriedades mecânicas do polímero sólido

Segundo [8], pode-se definir três mecanismos de deformação associado a polímeros, onde a deformação total é a soma das deformações devido aos três mecanismos:

- Mecanismo *A* - aumento de energia potencial elástica do sistema;
- Mecanismo *B* - processos viscoelásticos;
- Mecanismo *C* - escorregamento entre as cadeias que provocam deslocamentos entre várias macromoléculas, que pode representar um fluxo newtoniano próximo ao estado líquido ou um processo viscoplástico ainda sólido.

No mecanismo *A* a deformação é mecanicamente reversível e proporcional a sollicitação, como na lei de Hooke. Não possui dissipação de energia durante a deformação nem histerese em eventuais ciclos de tensão-deformação e a deformação é termodinamicamente reversível.

No mecanismo *B* (deformações viscoelásticas) e no mecanismo *C* (deformações viscoplásticas) as deformações são funções da temperatura e do tempo de aplicação da carga, enquanto que no mecanismo *A* são independentes. No mecanismo *B* a deformação mecânica é reversível, enquanto que a deformação termodinâmica é irreversível devido à presença de atritos viscosos entre os grupos móveis e o resto da cadeia. No mecanismo *C* a deformação mecânica e a deformação termodinâmica são irreversíveis devido escorregamentos não reversíveis entre as cadeias.

Os polímeros reais têm um comportamento intermediário entre os sólidos elásticos e os fluídos viscosos, que pode ser descrito com uma combinação de processos puramente elásticos e de processos puramente viscosos. A esquematização dos mecanismos de deformação são apresentados na Fig.2.6.

Para conhecer as propriedades mecânicas de um material, é importante analisar seus dados experimentais, como a curva de tensão-deformação a tração.

Na Fig.2.7 é apresentada uma curva de tensão-deformação típica de um material polimérico, de qual pode-se obter informações sobre o módulo de elasticidade, sobre a tensão de escoamento σ_E , sobre a tensão de ruptura σ_R , sobre suas deformações de escoamento ε_E e ruptura relativas ε_R e ainda sobre a fragilidade e a tenacidade do material.

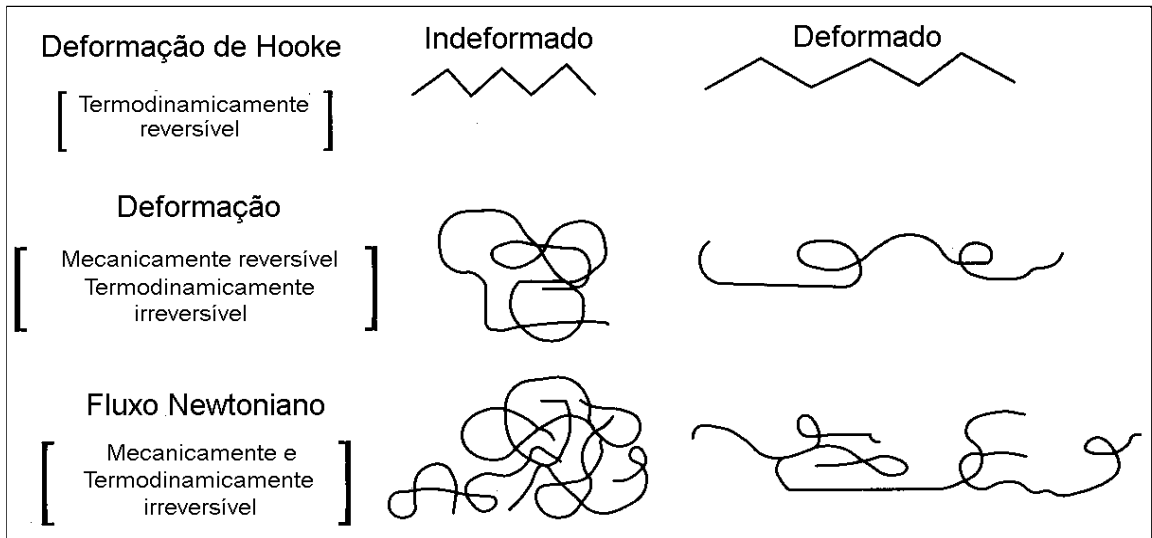


Figura 2.6: Mecanismos de deformação [8].

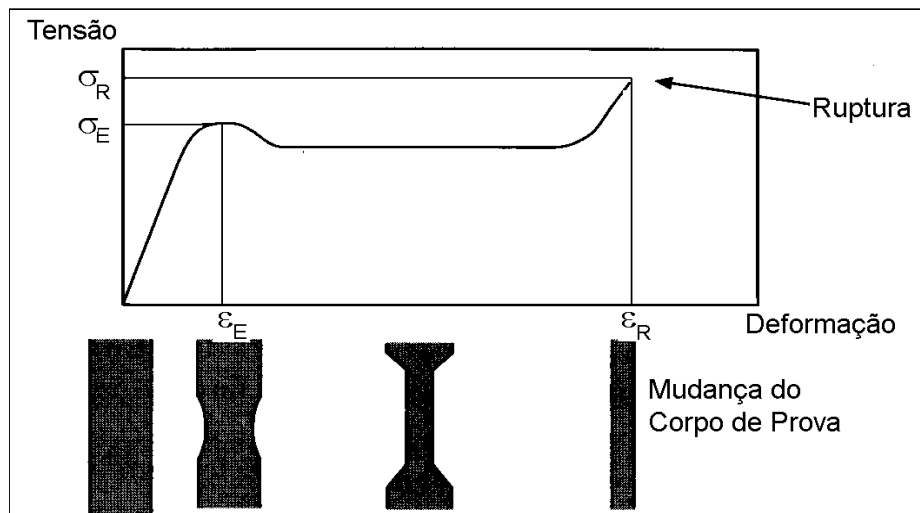


Figura 2.7: Curva de tensão-deformação de um material polimérico [8].

A curva tensão-deformação de um material polimérico ainda pode dar informações sobre o comportamento do material ao variar a temperatura e a velocidade de deformação, indicando se estes materiais apresentam mecanismos viscosos de deformação. No caso de um material polimérico termoplástico, à paridade de velocidade de deformação, em temperaturas baixas observa-se que a tensão cresce quase linearmente com a deformação até a ruptura, que acontece de modo frágil, como mostra a curva (a) da Fig.2.8.

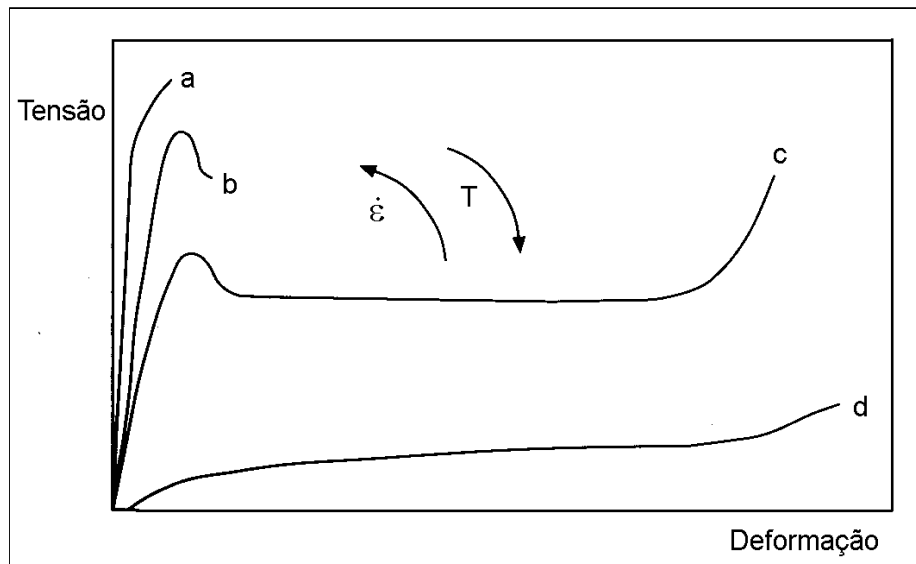


Figura 2.8: Comportamento da curva tensão-deformação [8].

Em temperaturas mais elevadas, como na curva (b) da Fig.2.8, observa-se um ponto de tensão máxima, conhecida com tensão de escoamento σ_E ; sucessivamente a σ_E , as tensões diminuem, com o aparecimento de uma redução local da seção, formando uma estrição, e posteriormente o sólido se rompe de modo dútil, mas com deformações baixas, cerca de 10 – 20%. Em temperatura ainda mais elevadas, como a curva (c) da Fig.2.8, superado a tensão de escoamento σ_E , a zona de estrição se estabiliza e se estende a todo corpo de prova até que alcança alongamentos muito elevados. As macromoléculas quando esticadas se orientam e a tensão final de ruptura a tração torna-se mais alta que a tensão necessária para a propagação da estrição. Este fenômeno é conhecido como encruamento. A Fig.2.9 mostra a modificação da forma do corpo de prova durante o início e a propagação da estrição. Quando se trabalha com temperaturas ainda maiores não se observa mais escoamento nem estrição, a deformação torna-se homogênea em todo o comprimento do corpo de prova e a ruptura acontece a grandes deformações, como na curva (d) da Fig.2.8. Este comportamento é típico

dos elastômeros. Em geral, o módulo de elasticidade e a tensão de escoamento σ_E diminuem com o aumento da temperatura e crescem com o aumento da velocidade de deformação, como mostrado na Fig.2.8. O aumento da velocidade de deformação em um ensaio com corpo de prova provoca a mudança do comportamento do material de elastomérico a elasto-plástico, elástico frágil, de forma análoga a uma diminuição de temperatura.

Ainda analisando a área sob a curva de tensão-deformação, pode-se medir o trabalho mecânico absorvido por uma unidade de volume do material em teste antes de romper. Integrando a área sob a curva obtém-se a ductilidade do material. Se a área sob a curva for pequena, o material é frágil, como a área sob a curva do poliestireno indicado como *PS* na Fig.2.9.

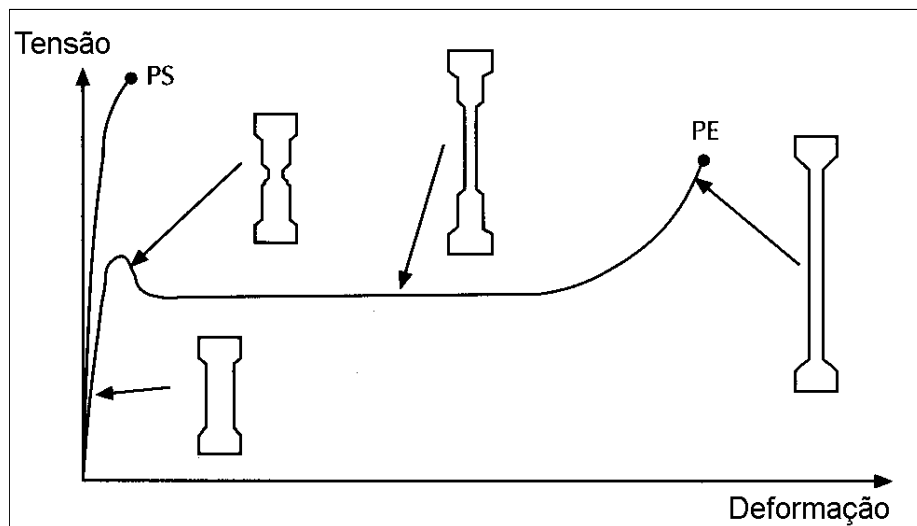


Figura 2.9: Dutilidade dos polímeros [8].

Em casos com grandes áreas sob a curva de tensão-deformação o material apresenta comportamento dútil, como na curva do polietileno indicado como *PE* na Fig.2.9. Observa-se que aumentando a velocidade de deformação, os materiais tendem a tornar-se frágeis, por isto a verificação da fragilidade é feita com provas de impacto a alta velocidade de deformação. O fenômeno de escoamento, seguido de encruamento, acontece a temperatura ambiente no caso de vários polímeros amorfos como o policloreto de vinila *PVC*, e em vários casos de polímeros semicristalinos, como o Polipropileno *PP*.

Vários polímeros tenazes são caracterizados, à temperatura ambiente, de uma suficiente mobilidade de rotação das macromoléculas presentes nas zonas amorfas. Nos polímeros

completamente amorfos, as macromoléculas não orientadas são orientadas na direção da tração. Nos polímeros cristalinos o fenômeno de estrição sob tração é mais complexo que no caso de polímeros amorfos, mesmo se baseados no mesmo critério de mobilidade de macromoléculas. As lamelas giram em modo que o eixo da cadeia polimérica e assumem a direção de tração, como apresentado na Fig.2.10.

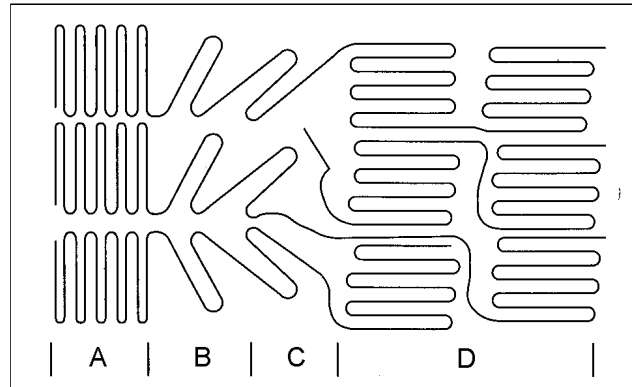


Figura 2.10: Esquema da deformação a nível molecular [8].

Como resultado nesta fase de tração verifica-se um fluxo de material localizado na zona de propagação da estrição acompanhado de um forte aquecimento localizado devido a dissipação. A tensão permanece quase constante até que o alongamento alcança um valor de alongamento natural, que corresponde ao limite de fácil estendibilidade de pedaços da cadeia. Sucessivamente, as tensões aumentam e o corpo de prova se rompe deformando-se ainda um pouco, uma vez que as cadeias não podem estender-se mais.

O comportamento do material ainda pode ser influenciado por uma eventual pressão hidrostática exercida pelo exterior. A Fig.2.11 mostra um experimento sobre o polímero *PPMA* sob deformação de cisalhamento a diferentes pressões.

Nos polímeros, a influência da pressão tem uma sensível importância, diferentemente dos metais. Isto deve-se ao fato que elevadas pressões diminuem o volume livre intermolecular e crescem as interações entre as moléculas. Por este fato, em alguns casos é necessário levar em conta o efeito da pressão no critério de escoamento adotado, utilizando critérios adequados.

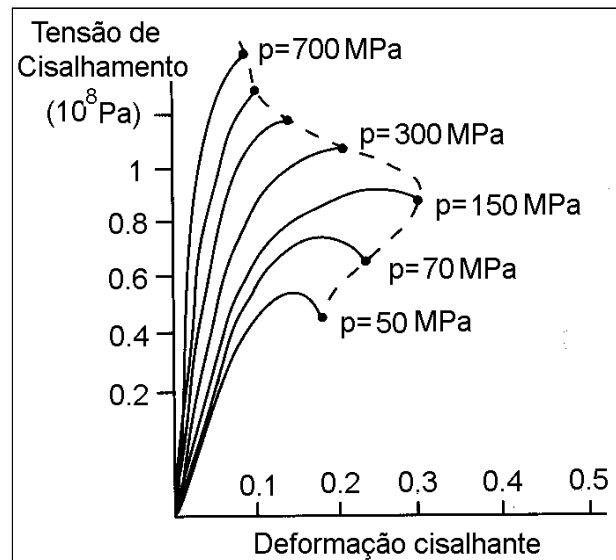


Figura 2.11: Curva de tensão-deformação para várias pressões [8].

2.5 Termoplásticos

Nesta seção será dada ênfase ao comportamento dos termoplásticos, que são os materiais em estudo neste trabalho. Serão apresentados e discutidos alguns tópicos importantes sobre características específicas dos termoplásticos semicristalinos e vítreos.

Algumas questões estão em discussão em trabalhos recentes sobre o comportamento mecânico dos termoplásticos no campo de deformações. Segundo [9], os polímeros amorfos vítreos, em temperatura ambiente, exibem um comportamento viscoelástico seguido de escoamento com um amolecimento e posterior encruamento viscoplástico orientado, como no comportamento do *PVC* mostrado na Fig.2.12.

O comportamento é diferente para os polímeros semicristalinos, que não exibem amolecimento na curva, mas apresentam um comportamento viscoelástico com posterior encruamento viscoplástico, como o comportamento do *PP* apresentado na Fig.2.13.

Este comportamento é contestado por [2], que afirma que na realidade não acontece o amolecimento dos polímeros amorfos no estado vítreo, afirmando que este fenômeno é um erro de medida que acontece com mudança da posição da formação da estrição do corpo de prova, que esconde os resultados.

É conhecido que os termoplásticos são muito sensíveis a mudanças na velocidade de deformação ([1], [2], [10]), seja esta na região viscoelástica (sem deformação permanente), quanto

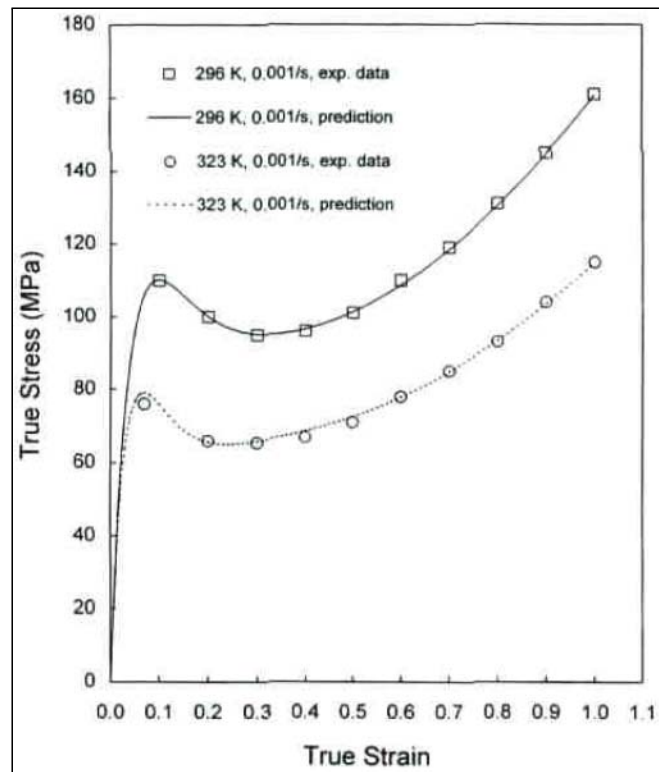


Figura 2.12: Curva tensão-deformação para o PVC [10].

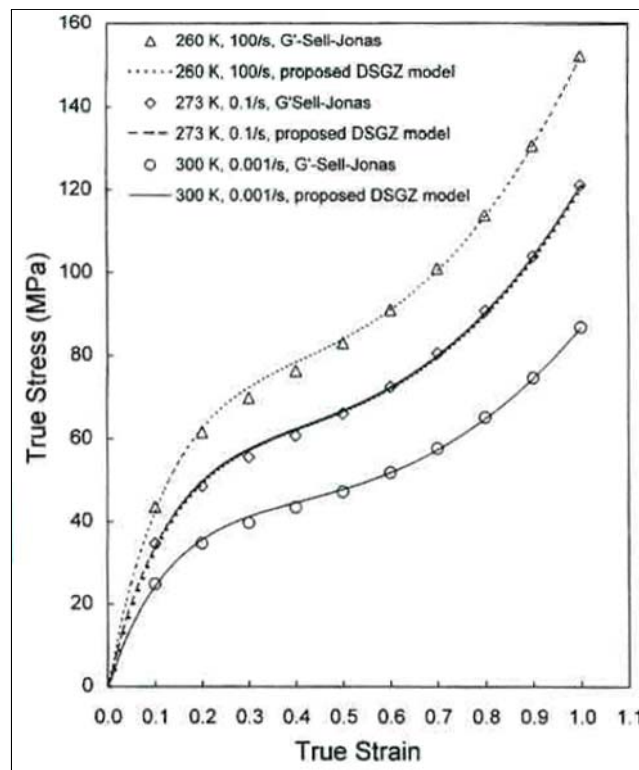


Figura 2.13: Curva tensão-deformação para o PP [10].

na região de encruamento viscoplástico (com deformação permanente). O comportamento na região viscoelástica, bem como na região viscoplástica geralmente requerem leis constitutivas com comportamento não linear em relação à deformação real, como no comportamento do polímero amorfo de mistura binária *PP – EPDM* demonstrado na Fig.2.14.

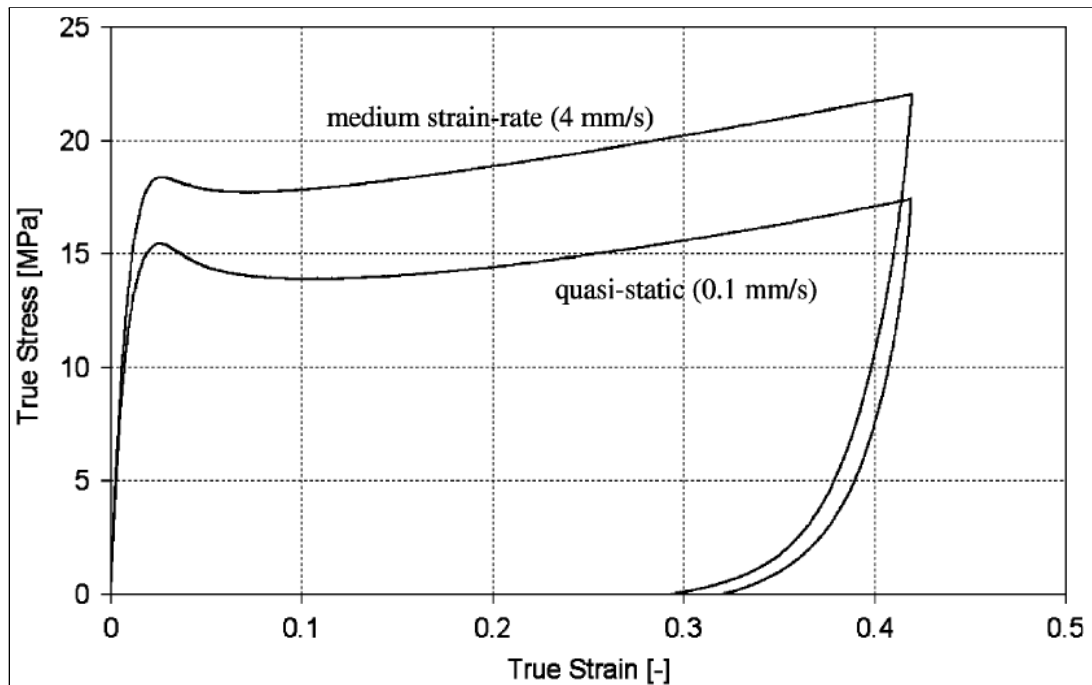


Figura 2.14: Comportamento da curva tensão-deformação para o *PP – EPDM* [1].

Como no caso dos metais, a quantidade de energia absorvida para o termoplástico está vinculada principalmente à deformação plástica depois do escoamento. Este tipo de resposta física requer o uso de leis de encruamento adequadas para reproduzir o comportamento de amolecimento dos polímeros.

Outra variável de grande influência é a temperatura. Assim, a capacidade do modelo constitutivo de incorporar esta variável durante a deformação plástica é um aspecto importante dependendo da aplicação. Em problemas de impacto, por exemplo, onde o fenômeno de deformação acontece a altas velocidades ($10^2 \sim 10^3$ /s) frequentemente se admite que o fenômeno térmico é adiabático e dependente da dissipação local, evitando assim a necessidade de modelar o acoplamento termomecânico [9].

Uma outra característica não menos importante, é que os termoplásticos possuem um comportamento diferente para tração e compressão e sensibilidade à pressão na tensão de escoamento. Esta última pode ser tomada em consideração com modelos do tipo Drucker-

Prager [11] ou von Mises modificado [8].

Em geral, os polímeros quando descarregados têm uma inclinação menor na curva de tensão-deformação que quando carregados, geralmente associado a processos de dano, como se pode observar na Fig.2.14.

Finalmente, um fenômeno que merece destaque é o comportamento puramente viscoelástico. Quando submetidos a carregamentos de projeto, componentes termoplásticos frequentemente trabalham em regimes de deformações infinitesimais, embora localizações de deformação finita venham a acontecer em regiões específicas. Neste contexto, tensões relativamente baixas, devido as características viscoelásticas, podem gerar deformações significativas para tempos suficientemente altos.

2.6 Relações constitutivas em polímeros

Nesta seção, apresenta-se uma breve revisão dos modelos e relações constitutivas utilizadas para os materiais poliméricos.

Observam-se na literatura duas abordagens: A primeira baseada em estudos de micromecânica, os modelos são construídos compreendendo os mecanismos moleculares do material. A obtenção das equações a nível macroscópico é feita com técnicas de homogeneização. Na segunda abordagem, o comportamento é modelado completamente com dados experimentais já em escala macroscópica. Os modelos baseados neste segundo procedimento são denominados modelos fenomenológicos, e estes modelos são os mais usuais e de fácil obtenção, uma vez que não é necessário o conhecimento de todos os mecanismos moleculares do material em estudo.

Algumas leis elastoplásticas baseadas em modelos reológicos foram desenvolvidas para caracterizar o comportamento de materiais metálicos baseados em plasticidade cristalina. Com a escassez de leis constitutivas adequadas a termoplásticos, estas leis foram utilizadas, mas com certos limites de aplicação devido às diferenças existentes entre os comportamentos destes materiais. O principal aspecto é a forte dependência da velocidade de deformação, tanto na região de deformação permanente quanto na região de deformação não permanente. Este comportamento dirige o estudo aos modelos viscoelásticos e aos modelos viscoplásticos. Outros fenômenos relacionados, como a dependência da temperatura, sensibilidade do ponto de escoamento à pressão e à existência de deformações permanentes não isocóricas, devem

ser tomados em consideração como parâmetros.

2.6.1 Modelos reológicos viscoelásticos e viscoplásticos

Os modelos reológicos viscoelásticos clássicos que descrevem o comportamento a pequenas deformações, e que supõem que o material seja viscoelástico linear, são bem conhecidos. Nestes modelos reológicos, as tensões aplicadas, em teoria, são a soma dos componentes elásticos e dos componentes viscosos. Os dois tipos de componentes são descritos respectivamente em uma função de deformação elástica, da lei de Hooke, e em função da velocidade de deformação, da lei de Newton. Para uma simples tensão, os parâmetros são o módulo de elasticidade e a viscosidade. Para descrever os comportamentos elástico e viscoso de um material viscoelástico usam-se dois componentes simples que seguem a lei de Hooke e a lei de Newton. Estes são constituídos de uma mola elástica de módulo E e de um amortecedor de viscosidade η . Os modos de combinar os dois elementos são: combinação paralela, denominado Modelo de Kelvin ou Voigt e combinação em série, denominado Modelo de Maxwell. Os modelos de Kelvin e Maxwell são apresentados respectivamente na Fig.2.15. A descrição destes modelos simples no presente contexto se justifica em função que muitos modelos para deformações finitas estão baseados em extensões dos mesmos conceitos mecânicos. A simplicidade destes

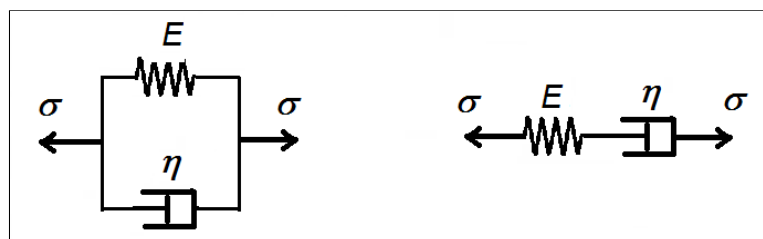


Figura 2.15: a) Modelo de Kelvin (Voigt) e b) Modelo de Maxwell.

dois modelos impede o seu uso em algumas condições. Para interpretar o real comportamento dos materiais poliméricos é necessário utilizar modelos com mais componentes. Um modelo muito usado é o modelo de Zener, apresentado na Fig.2.16.

Também pode-se citar o modelo de quatro componentes de Alfrey, apresentado na Fig.2.17. Constituído de um modelo de Maxwell em série com um modelo de Kelvin, o modelo de Alfrey é capaz de prever com melhor aproximação o comportamento à fluência de um polímero que os modelos apresentados precedentemente. Quanto maior o número de componentes, e

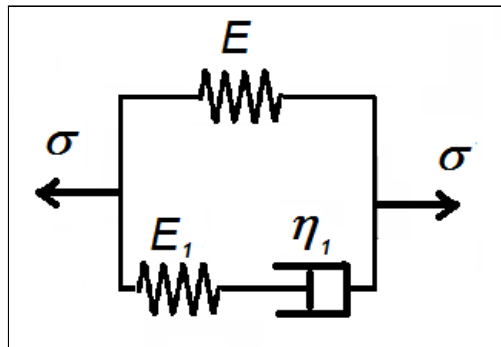


Figura 2.16: Modelo de Zener

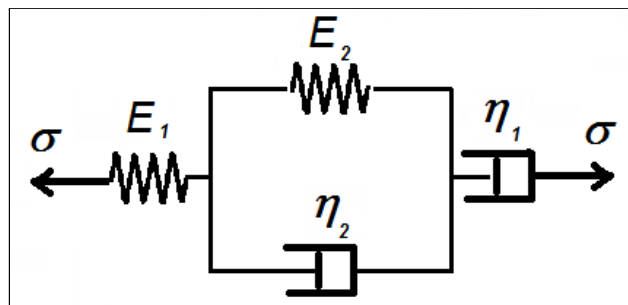


Figura 2.17: Modelo de Alfrey

consequentemente de parâmetros, torna-se mais fácil representar com maior acuracidade o comportamento dos polímeros reais. Assim, uma boa representação do comportamento dos polímeros é obtida através dos modelos generalizados de Maxwell e de Kelvin apresentados respectivamente na Fig.2.18.

Os modelos reológicos viscoplásticos descrevem o comportamento viscoplástico do material e são caracterizados por um componente de atrito dissipador de energia. Este componente pode ser usado em série ou em paralelo com os componentes de mola e/ou amortecedor, citados anteriormente, em diferentes configurações como apresentado na Fig.2.19. O componente de atrito é responsável pelas deformações permanentes e começa a atuar quando atinge um valor específico de tensão σ_E , que representa o fim do regime elástico. O componente de atrito pode ser do tipo seco ou viscoso. O componente de atrito viscoso já possui uma parcela de deformação viscosa incorporada ao componente, enquanto que o componente de atrito seco não. Para incorporar o comportamento viscoso a um modelo reológico viscoplástico com um componente de atrito seco adiciona-se um amortecedor no arranjo do modelo reológico. Este amortecedor fica responsável pela parcela de deformação plástica viscosa. Da mesma

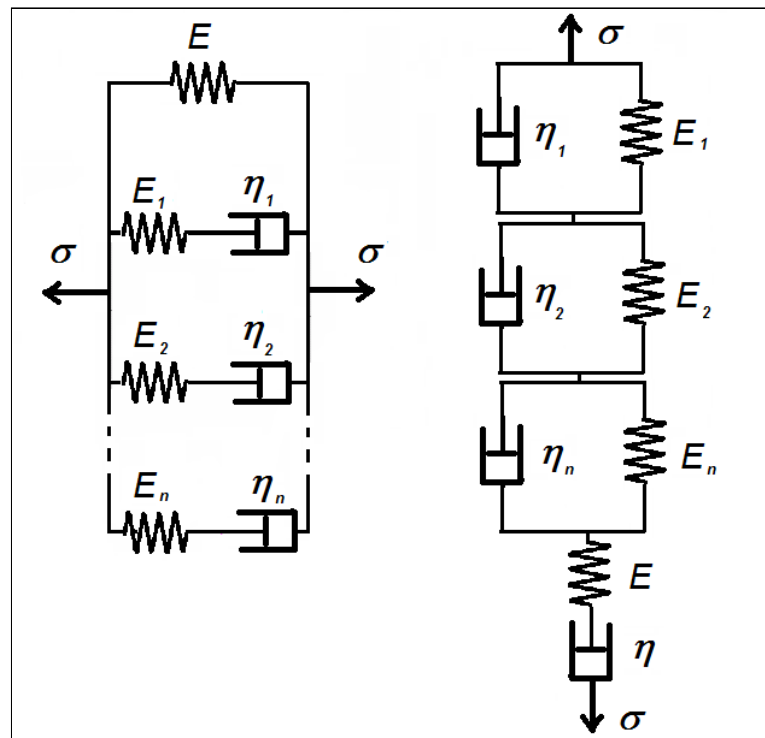


Figura 2.18: Modelo generalizado de Maxwell e Kelvin (Voigt)

forma, pode-se incorporar a lei de encruamento no componente de atrito, ou usar uma mola para representá-la no arranjo do modelo reológico, dependendo da escolha da representação.

2.6.2 Modelos constitutivos viscoelásticos e viscoplásticos

Diferentes estudos encontrados na literatura apresentam modelos constitutivos que combinam características viscoelásticas com características viscoplásticas, necessárias para simulação de termoplásticos em regime de deformações finitas e velocidade de deformação variável.

Muitos são os modelos viscoelásticos para deformações finitas encontrados em literatura, dentre eles pode-se citar [5], [12], [13], [14], [15], [16], [17] e [18]. Alguns destes modelos apresentam características apropriadas para o problema. O modelo em [12] é baseado sobre uma decomposição aditiva das contribuições de tensões em equilíbrio e não-equilíbrio. A lei de evolução é definida com uma equação diferencial linear sobre as tensões em não-equilíbrio. Este mesmo modelo é apresentado em [11]. Em [14] inclui-se a decomposição multiplicativa do gradiente de deformação isocórica em uma parte elástica e uma parte viscosa.

Em [5] foi proposta uma família de modelos de viscoelasticidade finita, que tem como principais características uma formulação com uma base variacional com variáveis internas

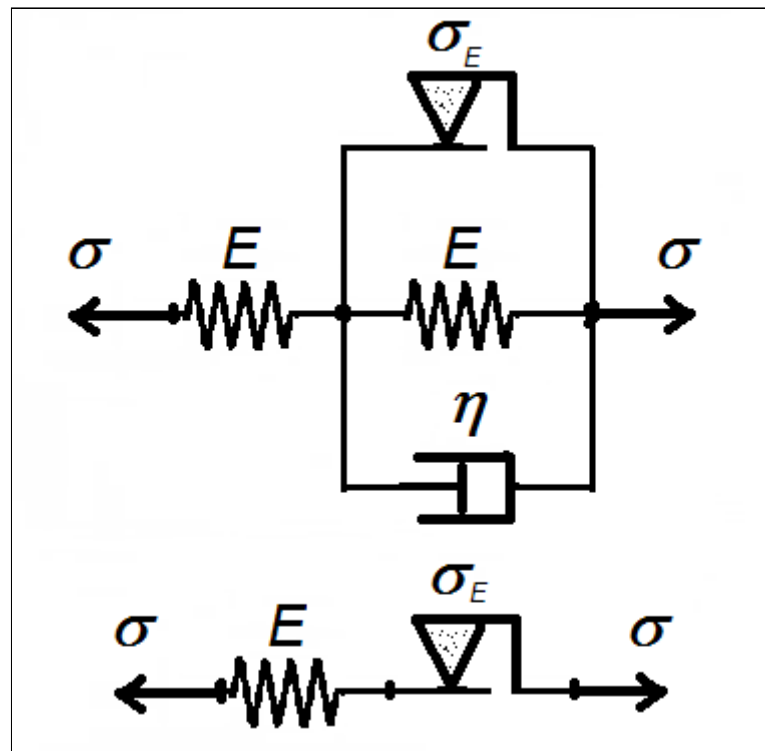


Figura 2.19: Modelos reológicos viscoplásticos

e uma decomposição espectral das grandezas relacionadas a deformação. A formulação é dita variacional, pois suas variáveis internas são calculadas por um princípio de mínimo a cada incremento de carga. A mesma base variacional foi proposta em estudos similares em viscoplasticidade por [3] [4] [19] e mais recentemente [20] [21].

Em [3] é proposto um modelo constitutivo variacional viscoplástico em um contexto isotérmico e depois estendido ao problema termomecânico em [20]. Em [21] é proposta a mesma base variacional de [3] para viscoplasticidade em materiais metálicos porosos combinando a plasticidade de von Mises com uma expansão plástica volumétrica tomada em conta pela adição de uma variável interna à formulação variacional.

Ainda outros modelos que são importantes pelas suas características que combinam propriedades de viscoelasticidade e viscoplasticidade são [2], [22] e [23]. Em [22] e [23] é apresentado um modelo constitutivo de base fenomenológica chamado de modelo “DSGZ” proposto para descrever o comportamento de deformação dos polímeros semicristalinos e amorfos no estado vítreo sob carregamento monotônico de impacto. O modelo possui oito parâmetros constitutivos que necessitam muitas curvas experimentais para identificá-los, incluindo variação de velocidade de deformação. A dependência do comportamento do tipo

de carregamento, seja tração ou compressão, é tomada em consideração com o parâmetro de sensibilidade à pressão hidrostática. A evolução térmica é calculada a partir da dissipação, onde admite-se um comportamento adiabático do material. Também é incorporado um critério de ruptura baseado sobre o acúmulo de dano indicado pela deformação plástica. Em [2] propõe-se um modelo que combina propriedades viscoelásticas com viscoplásticas, onde a velocidade de deformação deviatória é separada aditivamente em uma contribuição viscoelástica e uma contribuição viscoplástica, enquanto a parte volumétrica é puramente viscoelástica. O modelo inclui efeitos de sensibilidade à pressão hidrostática e lei de encruamento observadas em termoplásticos amorfos no estado vítreo. Porém, este modelo apresenta um número muito grande de parâmetros a serem identificados, tornando-o um modelo pouco atrativo.

Devido à característica variacional de [5], que possibilita a combinação de seu modelo viscoelástico com um modelo variacional viscoplástico, escolheu-se estudar este tipo de formulação. Assim, desenvolveu-se um modelo viscoplástico com decomposição espectral em sua formulação [6] capaz de combinar suas propriedades com o modelo viscoelástico de [5]. Incorporando o modelo viscoplástico desenvolvido [6], com o modelo viscoelástico de [5], pode-se obter um modelo viscoelastoplástico capaz de representar com maior acuracidade e flexibilidade o comportamento dos polímeros em geral.

Capítulo 3

Conceitos básicos em mecânica do contínuo

Neste capítulo será apresentada uma breve revisão de aspectos de mecânica do contínuo que podem ser encontrados com mais detalhes em [16], [17] e [18]. O objetivo desta revisão é introduzir a notação utilizada neste trabalho e assim deixar o texto autocontido.

3.1 Cinemática. Medidas de deformação

Admite-se a existência de um corpo \mathcal{B} que no instante inicial $t = 0$ ocupa uma região Ω_0 com fronteira Γ_0 no espaço físico euclidiano \mathbb{E} . Nesta região, ou configuração de referência, a posição das partículas p é dada pelo vetor \mathbf{X} . O corpo sofre um movimento dado pelo mapeamento $\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ de forma tal que a cada instante de tempo é possível definir um deslocamento dos pontos dado por $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}$. Este movimento é usualmente representado mediante as descrições Lagrangeana e a Euleriana. A primeira considera como variáveis independentes o vetor de posição \mathbf{X} na configuração indeformada e o tempo t . A segunda (Euleriana), considera como variáveis independentes o vetor posição \mathbf{x} na configuração deformada e o tempo t .

Os campos de velocidades \mathbf{v} e aceleração \mathbf{a} são dados, respectivamente, por

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial^2 \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial t^2} \quad (3.2)$$

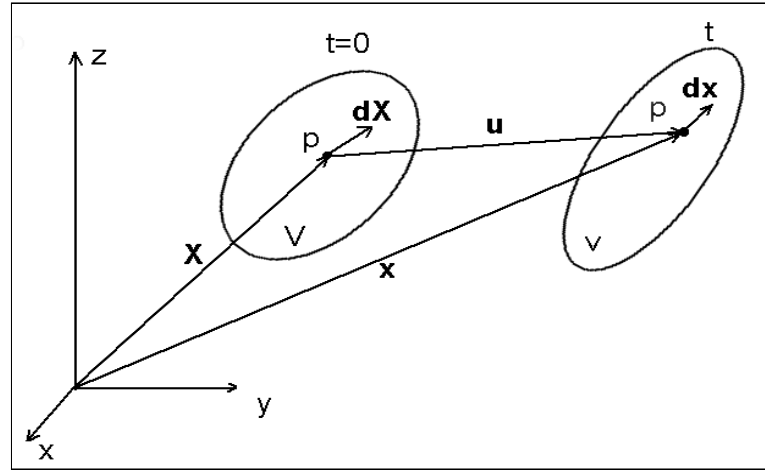


Figura 3.1: Movimento do corpo

Tensor gradiente de deformação

O tensor gradiente de deformação \mathbf{F} , para um instante de tempo t , é definido por

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \quad (3.3)$$

ou ainda na notação indicial por

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial X_j} \quad (3.4)$$

O gradiente de deformação quantifica as alterações de tamanho e forma de um corpo no instante considerado e define a transformação de um vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração indeformada em um vetor espacial $d\mathbf{x}$ na configuração deformada, segundo

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X} \quad (3.5)$$

O determinante de \mathbf{F} , representa a relação de volume entre a configuração indeformada e a deformada. Este também é chamado de Jacobiano J e é definido por

$$J = \det \mathbf{F} = \frac{dv}{dV} = \frac{d\rho}{d\rho_0} \quad (3.6)$$

Deformação isocórica

Deformação que não produz mudança de volume. Esta é caracterizada por

$$\det \mathbf{F} = 1 \quad (3.7)$$

Deformação volumétrica

Deformação caracterizada por uma dilatação ou contração uniforme em todas as direções, então expressada por

$$\mathbf{F} = \alpha \mathbf{I} \quad (3.8)$$

onde α é um escalar e \mathbf{I} um tensor identidade de segunda ordem.

Decomposição volumétrica e isocórica

Qualquer deformação pode ser decomposta em uma deformação puramente volumétrica \mathbf{F}_{vol} seguida por uma deformação isocórica \mathbf{F}_{iso} ou uma deformação isocórica \mathbf{F}_{iso} seguida de uma deformação puramente volumétrica \mathbf{F}_{vol} . Fazendo a decomposição multiplicativa de \mathbf{F} , apresentada em (3.9), obtém-se a componente de deformação puramente volumétrica (3.10) e a componente de deformação isocórica (3.11).

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{iso} \mathbf{F}_{vol} = \mathbf{F}_{vol} \mathbf{F}_{iso} \quad (3.9)$$

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

$$\mathbf{F}_{iso} = (\det \mathbf{F})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} \quad (3.11)$$

Deve-se notar que, por definição, a componente isocórica representa uma preservação na mudança de volume. Assim, $\det \mathbf{F}_{iso} = 1$ e então $\det \mathbf{F}_{vol} = \det \mathbf{F}$.

Decomposição polar

Todo tensor deformação \mathbf{F} pode ser decomposto em um tensor ortogonal, que representa uma rotação \mathbf{R} , e em um tensor simétrico positivo-definido, que representa uma deformação pura \mathbf{U} ou \mathbf{V} . Os tensores \mathbf{U} e \mathbf{V} são denominados, respectivamente, tensores de alongamento direito e esquerdo. Esta decomposição é chamada de decomposição polar e é expressa por

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad (3.12)$$

Tensor de deformação de Cauchy-Green

O tensor gradiente de deformação \mathbf{F} incorpora informações sobre deformações e rotações. Com o objetivo de obter medidas de deformação que excluam as rotações de corpo rígido,

definem-se os tensores de Cauchy-Green à Direita \mathbf{C} e à Esquerda \mathbf{B} , respectivamente, por

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{U}^T \mathbf{R}^T \mathbf{R} \mathbf{U} = \mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{U}^2 \quad (3.13)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{V} \mathbf{R} \mathbf{R}^T \mathbf{V}^T = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{V}^2 \quad (3.14)$$

Tensor deformação de Green-Lagrange e logarítmico

O tensor de deformação de Green-Lagrange \mathbf{E} é definido pela mudança no comprimento de um elemento infinitesimal material $d\mathbf{X}$ de um corpo analisado, expressa por (3.17). Substituindo os comprimentos dos elementos infinitesimais $d\mathbf{x}$ e $d\mathbf{X}$, dados respectivamente por (3.15) e (3.16), em (3.17), obtém-se a expressão (3.18) para o tensor de deformação de Green-Lagrange, onde o operador (\cdot) corresponde ao produto interno de dois vetores. Ainda pode apresentar-se com a notação indicial por (3.19).

$$\|d\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{F} d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F} d\mathbf{X} = \mathbf{C} d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (3.15)$$

$$\|d\mathbf{X}\|^2 = d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = \mathbf{I} d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (3.16)$$

$$\|d\mathbf{x}\|^2 - \|d\mathbf{X}\|^2 = 2\mathbf{E} d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (3.17)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \right) \quad (3.18)$$

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) \quad (3.19)$$

O tensor de deformação logarítmico, por sua vez, é definido por

$$\epsilon = \ln \mathbf{C} \quad (3.20)$$

Tensor gradiente espacial de velocidade

Define-se o gradiente espacial de velocidade \mathbf{L} por

$$\mathbf{L} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \quad (3.21)$$

Dois importantes tensores são obtidos da decomposição do gradiente espacial de deformação \mathbf{L} em uma parte simétrica \mathbf{D} e uma parte antisimétrica \mathbf{W} :

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) + \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (3.22)$$

O tensor \mathbf{D} é chamado tensor taxa de deformação e \mathbf{W} é o tensor vorticidade. Na forma indicial são apresentados respectivamente por

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.23)$$

$$W_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.24)$$

3.2 Equilíbrio. Medidas de tensão

Medidas de tensão são definidas a partir dos vetores de tração mostrados na Figura 3.2.

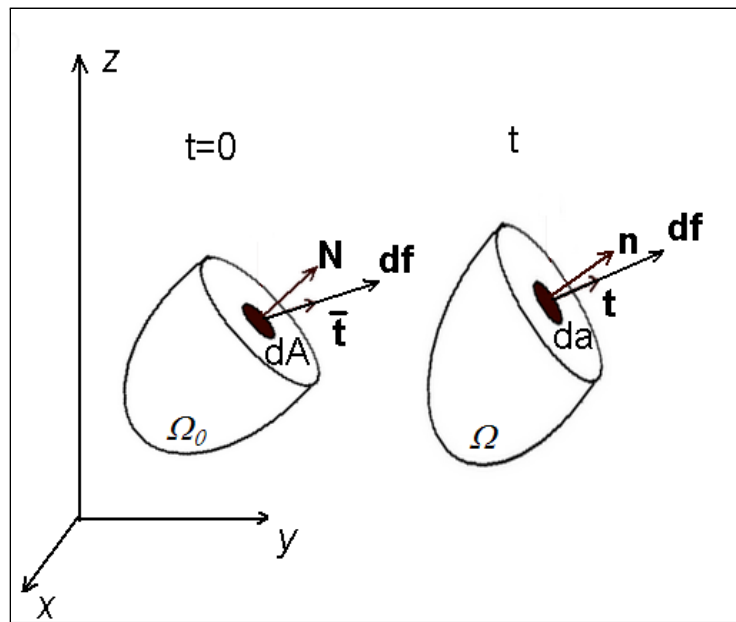


Figura 3.2: Vetor tração

Tensor de Cauchy

Na configuração deformada, a força $d\mathbf{f}$ que age sobre a área da com normal unitária \mathbf{n} , é associada a um vetor tração (vetor força de superfície) \mathbf{t} segundo

$$d\mathbf{f} = \mathbf{t} da \quad (3.25)$$

O teorema de Cauchy assegura a existência de um tensor único simétrico, chamado tensor de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, associado ao vetor de força \mathbf{t} segundo a expressão

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \quad (3.26)$$

Tensor de Kirchhoff

A tensão de Kirchhoff é calculada com a tensão de Cauchy, multiplicado-a pela variação de volume do corpo dada pelo Jacobiano J , e é definida por

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} \quad (3.27)$$

Devido à simetria do tensor de Cauchy, o tensor de Kirchhoff também é simétrico.

Primeiro e segundo tensor de Piola-Kirchhoff

O primeiro tensor de Piola Kirchhoff \mathbf{P} é definido em relação à configuração indeformada do corpo. Na configuração indeformada, a força externa $d\mathbf{f}$ que age sobre a área indeformada dA de normal unitária \mathbf{N} , é associada ao vetor tração $\bar{\mathbf{t}}$ segundo

$$d\mathbf{f} = \bar{\mathbf{t}} dA \quad (3.28)$$

O primeiro tensor de Piola Kirchhoff \mathbf{P} , de modo análogo ao tensor de Cauchy, é associado ao vetor tração $\bar{\mathbf{t}}$ segundo

$$\bar{\mathbf{t}} = \mathbf{P}\mathbf{N} \quad (3.29)$$

Igualando a força externa aplicada $d\mathbf{f}$, obtém-se

$$d\mathbf{f} = \mathbf{P}\mathbf{N} dA = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} da \quad (3.30)$$

Substituindo a fórmula de Nanson

$$\mathbf{n} da = J\mathbf{F}^{-1}\mathbf{N} dA \quad (3.31)$$

em (3.30), obtém-se a expressão para o primeiro tensor de Piola Kirchhoff \mathbf{P}

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad (3.32)$$

O primeiro tensor de Piola Kirchhoff \mathbf{P} não é necessariamente um tensor simétrico, devido à operação com o tensor \mathbf{F} . Por isto, é conveniente definir o segundo tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} que baseia-se em uma força fictícia $d\mathbf{f}_0$ que age sobre a área indeformada dA segundo

$$d\mathbf{f}_0 = \mathbf{S}\mathbf{N} dA \quad (3.33)$$

que é ligada à força $d\mathbf{f}$ que age sobre a superfície deformada mediante a mesma relação existente entre \mathbf{X} e \mathbf{x}

$$d\mathbf{f}_0 = \mathbf{F}^{-1}d\mathbf{f} \quad (3.34)$$

Substituindo os termos, obtém-se

$$\mathbf{S}\mathbf{N} dA = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{N} dA \quad (3.35)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} \quad (3.36)$$

Potência de deformação

Para cada uma das tensões estudadas, temos uma dada taxa de deformação que é energeticamente conjugada, onde a potência específica desenvolvida no processo de deformação deve ser a mesma, independente do par conjugado escolhido. A potência de deformação w é definida por [18]

$$w = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}dv = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}dV = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}dV \quad (3.37)$$

onde os tensores \mathbf{D} , $\dot{\mathbf{F}}$ e $\dot{\mathbf{E}}$ são, respectivamente, as quantidades cinemáticas conjugadas dos tensores tensão $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{P} e \mathbf{S} e o operador $(:)$ corresponde ao produto interno de dois tensores. Uma outra alternativa para w é obtida do uso da relação $\dot{\mathbf{C}} = 2\dot{\mathbf{E}}$ (ver equação (3.18)), assim

$$w = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}dV = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \frac{\dot{\mathbf{C}}}{2}dV \quad (3.38)$$

onde pode-se escrever, na configuração indeformada, que a potência de deformação por unidade de volume é

$$\dot{w} = \mathbf{S} : \frac{\dot{\mathbf{C}}}{2} \quad (3.39)$$

Equações de equilíbrio

Admite-se que o corpo β está sujeito a forças de corpo (força por unidade de volume) \mathbf{b} no seu interior e forças de superfície (forças por unidade de área) \mathbf{t} na sua fronteira. Assim, o equilíbrio de cada partícula no instante de tempo t está dada por

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} &= \rho\ddot{\mathbf{u}} && \text{em } \Omega \\ \mathbf{t} &= \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} && \text{em } \Gamma_f \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} && \text{em } \Gamma_u \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde $\nabla_{\mathbf{x}}(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial\mathbf{x}$ representa o gradiente em relação à coordenada \mathbf{x} , Γ_f é a região da fronteira sujeita a esforços conhecidos (condição de contorno natural) e Γ_u é a região de Γ onde os deslocamentos (ou posição \mathbf{x}) é conhecida (condição de contorno essencial). Equivalentemente, pode-se expressar (3.40) na configuração indeformada Ω_0 em termos do primeiro tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} , através de

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{P} + \mathbf{b}_0 &= \rho_0\ddot{\mathbf{u}} && \text{em } \Omega_0 \\ \bar{\mathbf{t}} &= \mathbf{P}\mathbf{N} && \text{em } \Gamma_{0f} \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} && \text{em } \Gamma_{0u}\end{aligned}\tag{3.41}$$

onde \mathbf{b}_0 é a força de corpo por unidade de volume na configuração indeformada.

3.3 Hiperelasticidade

Um material é denominado hiperelástico, se sua densidade de energia de deformação W , na configuração de referência, é uma função exclusiva do estado de deformação e a tensão pode ser calculada de sua derivada. A equação para calcular o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} dada por [18]

$$\mathbf{S} = 2\frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial\mathbf{C}}\tag{3.42}$$

De (3.42), por sua vez, obtém-se a expressão (3.43) para o primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} .

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F}\frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial\mathbf{C}}\tag{3.43}$$

O tensor material, ou tensor de elasticidade, é importante quando a solução exige a utilização do método de Newton. O tensor material de quarta ordem \mathcal{C} na configuração inicial deve satisfazer a relação

$$d\mathbf{S} = \mathcal{C} : d\mathbf{E}\tag{3.44}$$

e pode ser obtido a partir de W por

$$\mathcal{C} = 4\frac{\partial W}{\partial\mathbf{C}\partial\mathbf{C}}\tag{3.45}$$

onde o tensor material demonstra propriedades de simetria $\mathcal{C}_{abcd} = \mathcal{C}_{cdab}$ e $\mathcal{C}_{abcd} = \mathcal{C}_{bacd}$.

Hiperelasticidade isotrópica

Um material é isótropo quando a resposta do material não é afetada por qualquer rotação na configuração inicial. As energias devem ser independentes das rotações, sendo $W(\mathbf{F}) = W(\mathbf{F}\mathbf{R})$ válido para todo tempo t e todo tensor rotação \mathbf{R} . Esta propriedade faz com que W possa ser expresso em termos dos alongamentos principais $W = W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$.

Os autovetores $\{\mathbf{N}_j\}$ e autovalores $\{\lambda_j\}$ do tensor de alongamento à direita \mathbf{U} , são definidos de forma que $\mathbf{U} = \sum_{j=1}^3 \lambda_j \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_j$, onde o operador (\otimes) corresponde ao produto tensorial. Observa-se ainda que o Jacobiano é dado por $J = \det \mathbf{U} = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$.

O segundo tensor de Piola Kirchhoff \mathbf{S} tem as mesmas direções principais do tensor de deformação de Cauchy-Green à direita \mathbf{C} e por isto tem as mesmas direções principais do tensor de alongamento à direita \mathbf{U} . Então pode-se escrever \mathbf{S} por [18]

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = \sum_{j=1}^3 2 \frac{\partial W}{\partial \lambda_j} \frac{\partial \lambda_j}{\partial c_j} \frac{\partial c_j}{\partial \mathbf{C}} = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{\lambda_j} \frac{\partial W}{\partial \lambda_j} \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_j = \sum_{j=1}^3 S_j \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_j \quad (3.46)$$

onde c_j são os autovalores de \mathbf{C} , tal que $c_j = \lambda_j^2$ e $S_j = \frac{1}{\lambda_j} \frac{\partial W}{\partial \lambda_j}$.

O tensor material, por sua vez, é expresso por [18]

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \sum_{j,i=1}^3 \frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial S_j}{\partial \lambda_i} \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i + \\ &+ \sum_{\substack{j,i=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{S_i - S_j}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} (\mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_i + \mathbf{N}_j \otimes \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_j) \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde

$$\lim_{\lambda_i \rightarrow \lambda_j} \frac{S_i - S_j}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} = \frac{S_i}{\lambda_i^2} - \frac{S_j}{\lambda_i^2}$$

Cálculo de tensões com separação isocórica/volumétrica

É usual em problemas de deformações finitas fazer uma decomposição isocórica/volumétrica das deformações. O principal objetivo é desacoplar a resposta volumétrica que tem uma função importante no problema de travamento volumétrico. A decomposição multiplicativa do gradiente de deformação \mathbf{F} em uma deformação isocórica $\hat{\mathbf{F}}$ e uma deformação volumétrica escalar θ é dada por

$$\mathbf{F} = \theta^{\frac{1}{3}} \hat{\mathbf{F}} \quad (3.48)$$

Define-se o tensor de Cauchy-Green isocórico $\hat{\mathbf{C}}$ como

$$\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^T \hat{\mathbf{F}} \quad (3.49)$$

É também frequente admitir que a densidade de energia $W(\mathbf{C})$ pode ser decomposta como a soma de uma parte isocórica $\hat{W}(\hat{\mathbf{C}})$ e uma parte volumétrica $U(\theta)$ segundo

$$W(\mathbf{C}) = \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}) + U(\theta) \quad (3.50)$$

Apartir da equação (3.43), pode-se escrever

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} = 2\mathbf{F} \left(\frac{\partial \hat{W}(\hat{\mathbf{C}})}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial U(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{C}} \right) \quad (3.51)$$

onde as derivadas $\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}}$ e $\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{C}}$ são dadas, respectivamente por (3.52) e (3.53) [11]. O tensor \mathcal{I} em (3.52) é o tensor identidade de quarta ordem.

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right] \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{C}} = \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} \quad (3.53)$$

Substituindo (3.52) e (3.53) em (3.51), obtém-se a expressão (3.54) para o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} ,

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= 2\mathbf{F} \left(J^{-\frac{2}{3}} \left\{ \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} - \frac{1}{3} \left[\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} : \mathbf{C} \right] \mathbf{C}^{-1} \right\} + \frac{\partial U}{\partial \theta} \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} \right) \\ &= \mathbf{F} \left(J^{-\frac{2}{3}} \text{DEV} \left(2 \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right) + \frac{\partial U}{\partial \theta} \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde $\text{DEV}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} - \frac{1}{3} (\mathbf{A} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1}$ [11].

3.4 Princípio variacional de balanço

Os princípios variacionais permitem definir diversas condições a que um corpo mecânico está submetido através da extremização de um funcional \mathcal{H} com relação às suas variáveis. Dentre os diversos funcionais usuais na literatura, neste trabalho faz-se referência ao funcional de Energia Potencial Total. Este princípio variacional admite a satisfação das relações de compatibilidade e constitutivas e é expresso segundo o funcional (na configuração de referência)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega_0} \Psi(\nabla_0 \mathbf{x}^T \nabla_0 \mathbf{x}) \, d\Omega_0 - \left[\int_{\Omega_0} \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{x} \, d\Omega_0 + \int_{\Gamma_{0f}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{x} \, d\Gamma_0 \right] \\ &= \int_{\Omega_0} \Psi(\mathbf{C}(\mathbf{x})) \, d\Omega_0 - \left[\int_{\Omega_0} \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{x} \, d\Omega_0 + \int_{\Gamma_{0f}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{x} \, d\Gamma_0 \right] \end{aligned} \quad (3.55)$$

onde a primeira integral é o potencial de energia de deformação e os outros dois somados são o trabalho das forças externas. Aplicando o princípio de mínimo de energia potencial

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{K}} \mathcal{H}(\mathbf{x}) \quad (3.56)$$

onde \mathcal{K} é o conjunto de deslocamentos cinematicamente admissíveis, a condição necessária de otimalidade define a equação de equilíbrio do problema dada por

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}, \delta \mathbf{x} \right\rangle = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_0 \delta \mathbf{x} dv - \left[\int_{\Omega_0} \mathbf{b}_0 \cdot \delta \mathbf{x} d\Omega_0 + \int_{\Gamma_{0f}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{x} d\Gamma_0 \right] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (3.57)$$

onde \mathcal{V} é o espaço das variações de configuração.

3.5 Princípios termodinâmicos nos meios contínuos

Primeiro princípio da termodinâmica

O primeiro princípio da termodinâmica postula a conservação de energia. Segundo este, a taxa de crescimento da energia interna \dot{e} na configuração indeformada deve ser igual a soma da potência externa aplicada $\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}$ e do calor produzido R na configuração indeformada menos o divergente do fluxo de calor Q (para fora). Simbolicamente [18],

$$\dot{e} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} + R - \text{div}_{\mathbf{x}} Q \quad (3.58)$$

Segundo princípio da termodinâmica

O segundo princípio da termodinâmica postula a existência de entropia com variável de estado e $\oint \frac{dQ}{T} = 0$ para fenômenos reversíveis, e a irreversibilidade de produção de energia $\oint \frac{dQ}{T} < 0$ para fenômenos reversíveis. Isto implica na desigualdade de Clausius-Duhem [18]

$$\dot{s} - \frac{R}{T} + \frac{1}{T} \text{div}_{\mathbf{x}} Q - \frac{1}{T^2} Q \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T \geq 0 \quad (3.59)$$

onde \dot{s} é a taxa de entropia específica e T é a temperatura.

Combinando o primeiro princípio da termodinâmica com a desigualdade de Clausius-Duhem [18]

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - (\dot{e} - T\dot{s}) - \frac{1}{T} Q \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T \geq 0 \quad (3.60)$$

Introduzindo a energia livre específica, $W = e - Ts$ (energia livre de Helmholtz) obtém-se

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{W} - \dot{T}s - \frac{1}{T} Q \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T \geq 0 \quad (3.61)$$

Uma vez que (3.61) é obtida da combinação de ambos os princípios da termodinâmica, esta deve ser válida para qualquer estado termodinâmico. Reduzindo a desigualdade (3.61) ao problema isotérmico, sem considerar a variação de temperatura no tempo ($\dot{T} = 0$) e a ausência de fluxo de calor, reescreve-se (3.61) como

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{W} \geq 0 \quad (3.62)$$

Conceito de termodinâmica com variáveis internas

Na termodinâmica clássica, em qualquer instante t , o estado termodinâmico em um ponto p pode ser completamente conhecido por um conjunto finito de variáveis de estado conhecidas, onde o estado termodinâmico depende somente dos valores instantâneos das variáveis de estado e não do seu histórico. Na mecânica do contínuo, este conjunto de variáveis de estado é formado por um subconjunto de variáveis externas (observáveis), que são valores que podem ser medidos e controlados, e por um subconjunto de variáveis internas (ocultas), que são variáveis supostas para descrever aspectos da estrutura interna dos materiais, como efeitos dissipativos. Este postulado é utilizado na descrição do problema constitutivo apresentado no capítulo a seguir.

Capítulo 4

Modelos constitutivos

Neste capítulo mostra-se a formulação variacional proposta por [5], para o modelo viscoelástico, assim como uma adaptação do modelo elasto-viscoplástico proposto por [3]. Finalmente propõe-se um modelo visco-elastoplástico obtido mediante a combinação (adição) destes dois primeiros modelos que possuem a mesma estrutura na formulação.

4.1 Formulação variacional para materiais inelásticos

A partir dos conceitos da termodinâmica apresentados anteriormente, pode-se chegar a um conjunto de equações termodinamicamente consistentes que definem o comportamento constitutivo do material. Este conjunto inclui equações diferenciais de evolução das variáveis internas que devem ser integradas para obtermos expressões constitutivas incrementais. Será mostrado que estas equações podem ser também obtidas da variação de uma função potencial construída a cada incremento, denominada função potencial incremental.

4.1.1 Definição do (pseudo) potencial incremental

Considera-se um conjunto de variáveis de estado definido por $\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}^i, \mathbf{Q}\}$, onde \mathbf{F} é o gradiente de deformação total. A variável de estado \mathbf{Q} representa um conjunto arbitrário de variáveis internas e destaca-se uma variável em especial, que representa uma parcela do gradiente de deformação total, denominada gradiente de deformação inelástica \mathbf{F}^i . A rigor, a variável interna \mathbf{F}^i depende do conjunto de variáveis internas \mathbf{Q} e poderia ser incorporada neste conjunto, porém esta é admitida como uma variável interna adicional por conveniência.

Admite-se por hipótese a existência de um potencial de energia $W(\mathbf{F}, \mathbf{F}^i, \mathbf{Q})$, que representa a parcela conservativa da formulação. Tomando a derivada parcial em relação às

variáveis de estado, obtém-se a taxa potencial de energia \dot{W} , definida por

$$\dot{W} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} \quad (4.1)$$

Substituindo (4.1) em (3.62) obtém-se

$$\left(\mathbf{P}^c - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \right) : \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0 \quad (4.2)$$

onde o índice c indica a parcela conservativa (ou em equilíbrio) do tensor \mathbf{P} .

A equação (4.2) deve ser satisfeita para qualquer processo termodinâmico. Assim, desconsiderando restrições cinemáticas para $\dot{\mathbf{F}}$, assim como a possibilidade de processos não dissipativos ($\dot{\mathbf{F}} = \mathbf{0}, \dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{0}$) [15], se chega a

$$\mathbf{P}^c = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \quad (4.3)$$

$$-\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0 \quad (4.4)$$

onde (4.3) é a bem conhecida equação constitutiva para o primeiro tensor de Piola Kirchhoff, e (4.4) é a desigualdade da evolução das variáveis internas \mathbf{F}^i e \mathbf{Q} , que define a condição de dissipação não negativa.

Definindo as forças termodinâmicas conjugadas \mathbf{T}^c e \mathbf{A}^c , associadas respectivamente às variáveis internas \mathbf{F}^i e \mathbf{Q} , como

$$\mathbf{T}^c = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i}(\mathcal{E}) \quad (4.5)$$

$$\mathbf{A}^c = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}}(\mathcal{E}) \quad (4.6)$$

pode-se reescrever (4.4) como

$$-\mathbf{T}^c : \dot{\mathbf{F}}^i - \mathbf{A}^c : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0 \quad (4.7)$$

As parcelas dissipativas do sistema dependem do caminho percorrido pelo processo termodinâmico através da evolução das variáveis de estado. Consideram-se aqui classes de processos termodinâmicos em que as variáveis de estado podem ser obtidas de pseudo-potenciais inelásticos avaliados apenas no estado atual [3]. Para isto, primeiro admite-se a hipótese que existam duas funções diferenciáveis $\phi(\mathbf{P}^d)$ e $\psi(\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d)$, tais que

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial \phi(\mathbf{P}^d)}{\partial \mathbf{P}^d}, \quad \dot{\mathbf{F}}^i = \frac{\partial \psi(\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d)}{\partial \mathbf{T}^d}, \quad \dot{\mathbf{Q}} = \frac{\partial \psi(\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d)}{\partial \mathbf{A}^d} \quad (4.8)$$

onde as forças \mathbf{P}^d , \mathbf{T}^d e \mathbf{A}^d representam as forças dissipativas generalizadas. Adicionalmente, admite-se a existência de dois pseudo-potenciais dissipativos $\phi^*(\dot{\mathbf{F}})$ e $\psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}})$ obtidos de $\phi(\mathbf{P}^d)$ e $\psi(\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d)$ mediante a transformada de Legendre (4.9) e (4.10),

$$\phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) = \max_{\mathbf{P}^d} \left\{ \mathbf{P}^d : \dot{\mathbf{F}} - \phi(\mathbf{P}^d) \right\} \quad (4.9)$$

$$\psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) = \max_{\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d} \left\{ \mathbf{A}^d : \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{T}^d : \dot{\mathbf{F}}^i - \psi(\mathbf{A}^d, \mathbf{T}^d) \right\} \quad (4.10)$$

com as propriedades

$$\mathbf{P}^d = \frac{\partial \phi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}), \quad \mathbf{T}^d = \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}), \quad \mathbf{A}^d = \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{Q}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \quad (4.11)$$

Uma vez que as forças termodinâmicas conjugadas associadas as variáveis internas não contribuem ao trabalho externo, pois se equilibram internamente, a soma de suas parcelas dissipativas e conservativas devem ser nulas. Assim, obtêm-se as seguintes condições

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^c + \mathbf{P}^d = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathcal{E}) + \frac{\partial \phi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) \quad (4.12)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^c + \mathbf{T}^d = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i}(\mathcal{E}) + \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) = 0 \quad (4.13)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^c + \mathbf{A}^d = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}}(\mathcal{E}) + \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{Q}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) = 0 \quad (4.14)$$

Com o objetivo de simplificar a notação e eliminar os supraíndices em (4.12-4.14), redefine-se $\mathbf{T} = \mathbf{T}^d = -\mathbf{T}^c$ assim como $\mathbf{A} = \mathbf{A}^d = -\mathbf{A}^c$ resultando no seguinte conjunto de expressões

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathcal{E}) + \frac{\partial \phi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) \quad (4.15)$$

$$\mathbf{T} = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i}(\mathcal{E}) = \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \quad (4.16)$$

$$\mathbf{A} = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}}(\mathcal{E}) = \frac{\partial \psi^*}{\partial \dot{\mathbf{Q}}^i}(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \quad (4.17)$$

Assim, a equação (4.15) fornece a equação constitutiva para o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} , enquanto as equações (4.16) e (4.17) definem as restrições sobre as variáveis internas.

As equações (4.15), (4.16) e (4.17) definem um sistema de equações constitutivas onde (4.15) é a equação constitutiva do modelo hiperelástico, e (4.16) e (4.17) são as equações que definem restrições sobre a evolução das variáveis internas. O ponto importante a ser notado é que (4.13) e (4.14) são exatamente as condições necessárias de otimalidade do seguinte

problema de mínimo, correspondente ao princípio de dissipação mínima,

$$\min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \right\} \quad (4.18)$$

Por construção, pode-se definir um potencial \mathcal{D} dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) &= \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} + \phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \\ &= \dot{W}(\mathcal{E}) + \phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde se observa que \mathcal{D} possui as seguintes propriedades:

- Os argumentos de $\dot{\mathbf{F}}^i$ e $\dot{\mathbf{Q}}$ que minimizam o potencial \mathcal{D} , em relação a estas variáveis, são aqueles que satisfazem as restrições (4.13) e (4.14) para as variáveis internas.
- Sua derivada em relação a taxa $\dot{\mathbf{F}}$ fornece a equação constitutiva (4.15) para \mathbf{P} .

Assim, a minimização de \mathcal{D} em relação a $\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}$ define um novo funcional \mathcal{D}_{eff} , tendo somente $\dot{\mathbf{F}}$ como variável

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\text{eff}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) &= \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \mathcal{D}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \right\} \\ &= \phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) + \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \dot{W}(\mathcal{E}) + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \right\} \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde este funcional tem a característica que

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{D}_{\text{eff}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E})}{\partial \dot{\mathbf{F}}} = \frac{\partial W(\mathcal{E})}{\partial \mathbf{F}} + \frac{\partial \phi^*}{\partial \dot{\mathbf{F}}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) \quad (4.21)$$

mostrando assim que $\mathcal{D}_{\text{eff}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E})$ constitui um potencial em taxas de $\dot{\mathbf{F}}$ para \mathbf{P} .

As expressões (4.20) e (4.21) estão baseadas na avaliação de um determinado estado das variáveis internas e suas derivadas temporais. É preciso portanto sua integração temporal de forma a obter um potencial termodinâmico incremental e correspondente relação constitutiva incremental consistentes com estas expressões. Integrando (4.20) no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$,

$$\begin{aligned} \Psi &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{D}_{\text{eff}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) + \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \dot{W}(\mathcal{E}) + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \right\} \right) dt \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) dt + \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{W}(\mathcal{E}) dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) dt \right\} \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) dt + \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \left\{ [W(\mathcal{E})]_{t_n}^{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) dt \right\} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Uma possível aproximação por diferenças finitas desta integral temporal é dada por [5]

$$\Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = \Delta t \phi^* \left(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{E}_n \right) + \min_{\mathbf{F}_{n+1}^i, \mathbf{Q}_{n+1}} \left\{ W(\mathcal{E}_{n+1}) - W(\mathcal{E}_n) + \Delta t \psi^* \left(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}_n \right) \right\} \quad (4.23)$$

que depende das variáveis de estado \mathcal{E}_n (conhecidas), e do gradiente das deformações atualizado \mathbf{F}_{n+1} . As variáveis $\dot{\mathbf{F}}(\mathbf{F}_{n+1}, \mathcal{E}_n)$, $\dot{\mathbf{F}}^i(\mathbf{F}_{n+1}^i, \mathcal{E}_n)$ e $\dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}_{n+1}, \mathcal{E}_n)$ são aproximações das variáveis de taxa $\dot{\mathbf{F}}$, $\dot{\mathbf{F}}^i$ e $\dot{\mathbf{Q}}$, respectivamente. Este potencial fornece a equação constitutiva incremental (4.24) análoga a (4.21)

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^i, \mathbf{Q}_n)}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \quad (4.24)$$

A expressão (4.24) significa que o estado termodinâmico atual, representado pelas variáveis internas \mathbf{F}_{n+1}^i e \mathbf{Q}_{n+1} pode ser calculado pela equação constitutiva incremental, uma vez que o valor de \mathbf{F}_{n+1} é conhecido.

Diferentes comportamentos de material podem ser modelados em função das escolhas dos potenciais e suas relações. Neste trabalho são apresentados dois diferentes modelos, um modelo para comportamento viscoelástico e um para o comportamento elasto-viscoplástico, assim como a sua combinação, que será denominada de modelo visco-elastoplástico. Antes de particularizar para estes modelos, mostra-se um conceito que norteia a construção deste potencial incremental.

4.1.2 Conceito de caminho minimizante

Mostra-se a seguir que a definição e construção do potencial em taxas (4.20) e sua versão incremental (4.22) está relacionada com o conceito de **caminho minimizante**. Segundo este, dentre os diferentes valores que podem ser tomados pelas variáveis internas num processo dissipativo entre dois instantes de tempo, escolhe-se aqueles que minimizam o trabalho produzido pelas tensões no ponto considerado.

A forma aqui usada para apresentar este conceito foi extraído de [24] e é usada em diferentes trabalhos do gênero [3], [5], [6] e [25].

Por simplicidade é abordado um caso isotérmico e faz-se a hipótese adicional de inexistência de efeitos dissipativos associados ao gradiente de deformação total, isto é, admite-se $\phi^*(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) = 0$. Considera-se que o estado inicial $\{\mathbf{F}(0), \mathbf{F}^i(0), \mathbf{Q}(0)\}$ seja completamente conhecido e o estado final $\mathbf{F}(t_f)$ imposto. Calcula-se o trabalho produzido pelas tensões no

intervalo dado por:

$$\Psi = \int_0^{t_f} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} dt \quad (4.25)$$

Por outro lado, substituindo (4.16) e (4.17) em (4.1), obtêm-se

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} = \dot{W} + \mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} \quad (4.26)$$

Substituindo (4.26) em (4.25), chega-se a uma equação integral para o potencial Ψ ,

$$\begin{aligned} \Psi &= \int_0^{t_f} \left(\dot{W} + \mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} \right) dt \\ &= W_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i dt + \int_0^{t_f} \mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} dt \end{aligned} \quad (4.27)$$

A variação do potencial em relação as suas variáveis \mathbf{F} , \mathbf{F}^i , \mathbf{Q} , \mathbf{T} e \mathbf{A} é dada por

$$\begin{aligned} \delta\Psi &= [\delta W]_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{T} : \delta\dot{\mathbf{F}}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{A} : \delta\dot{\mathbf{Q}} \right) dt \\ &= \left[\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} : \delta\mathbf{F} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \delta\mathbf{F}^i + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \delta\mathbf{Q} \right]_0^{t_f} + \\ &+ \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{T} : \delta\dot{\mathbf{F}}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{A} : \delta\dot{\mathbf{Q}} \right) dt \\ &= [\mathbf{P} : \delta\mathbf{F} - \mathbf{T} : \delta\mathbf{F}^i - \mathbf{A} : \delta\mathbf{Q}]_0^{t_f} + \\ &+ \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{T} : \delta\dot{\mathbf{F}}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{A} : \delta\dot{\mathbf{Q}} \right) dt \end{aligned} \quad (4.28)$$

Realizando integração por partes nos dois últimos termos das integrais da equação (4.28), obtêm-se

$$\int_0^{t_f} \left(\mathbf{T} : \delta\dot{\mathbf{F}}^i \right) dt = [\mathbf{T} : \delta\mathbf{F}^i]_0^{t_f} - \int_0^{t_f} \dot{\mathbf{T}} : \delta\mathbf{F}^i dt \quad (4.29)$$

$$\int_0^{t_f} \left(\mathbf{A} : \delta\dot{\mathbf{Q}} \right) dt = [\mathbf{A} : \delta\mathbf{Q}]_0^{t_f} - \int_0^{t_f} \dot{\mathbf{A}} : \delta\mathbf{Q} dt \quad (4.30)$$

Substituindo (4.29) e (4.30) em (4.28) resulta

$$\delta\Psi = [\mathbf{P} : \delta\mathbf{F}]_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i - \dot{\mathbf{T}} : \delta\mathbf{F}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{A}} : \delta\mathbf{Q} \right) dt \quad (4.31)$$

Uma vez que o estado inicial $\mathbf{F}(0)$ é fixo, isto é, não varia, conclui-se que $\delta\mathbf{F}(0) = 0$. Assim, a condição necessária de mínimo de Ψ , dada por $\delta\Psi = 0$, resulta em

$$\delta\Psi = \mathbf{P}(t_f) : \delta\mathbf{F}(t_f) + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i - \dot{\mathbf{T}} : \delta\mathbf{F}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{A}} : \delta\mathbf{Q} \right) dt \quad (4.32)$$

a ser satisfeita para todo $\delta\mathbf{F}(t_f)$, $\delta\mathbf{F}^i$, $\delta\mathbf{A}$, $\delta\mathbf{Q}$, $\delta\mathbf{T}$ admissíveis. Em particular, tomando um caso no qual $\delta\mathbf{F}(t_f) = 0$, se consegue a condição

$$\int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i - \dot{\mathbf{T}} : \delta\mathbf{F}^i \right) dt + \int_0^{t_f} \left(\delta\mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{A}} : \delta\mathbf{Q} \right) dt = 0 \quad (4.33)$$

Assim, dada a variável externa inicial $\mathbf{F}(0)$ e admitindo que a condição de mínimo de Ψ (4.33) para as direções $\delta\mathbf{F}^i$, $\delta\mathbf{A}$, $\delta\mathbf{Q}$, $\delta\mathbf{T}$ seja sempre satisfeita, a variação de Ψ em relação a $\mathbf{F}(t_f)$, na direção $\delta\mathbf{F}(t_f)$, é dada por

$$\delta\Psi = \mathbf{P}(t_f) : \delta\mathbf{F}(t_f) \quad (4.34)$$

A expressão (4.34) mostra que o potencial Ψ , avaliado num ponto tal que (4.33) é satisfeita, é efetivamente um potencial para \mathbf{P} no intervalo $[0, t_f]$, isto é,

$$\mathbf{P}(t_f) = \frac{\partial\Psi_{eff}}{\partial\mathbf{F}(t_f)} \left(\mathbf{F}(t_f); \mathbf{F}(0), \mathbf{F}^i(0), \mathbf{Q}(0) \right) \quad (4.35)$$

sendo

$$\Psi_{eff} = \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}} \Psi \quad (4.36)$$

onde a condição de mínimo em relação a $\dot{\mathbf{F}}^i$, $\dot{\mathbf{Q}}$ garante a satisfação de (4.33). Mostra-se a seguir que o potencial dado pela equação (4.20) está associado ao conceito de caminho minimizante. De fato, substituindo (4.16) e (4.17) em (4.27), obtém-se a expressão

$$\Psi = \int_0^{t_f} \left(\dot{W} + \mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}}^i + \mathbf{A} : \dot{\mathbf{Q}} \right) dt = \int_0^{t_f} \left(\dot{W} + \frac{\partial\psi^*}{\partial\dot{\mathbf{F}}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial\psi^*}{\partial\dot{\mathbf{Q}}} : \dot{\mathbf{Q}} \right) dt \quad (4.37)$$

Considera-se, por simplicidade, que a função ψ^* é homogênea de ordem 1 em relação a $\dot{\mathbf{Q}}$ e $\dot{\mathbf{F}}^i$ e portanto tem a propriedade

$$\psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}) = \frac{\partial\psi^*}{\partial\dot{\mathbf{Q}}} : \dot{\mathbf{Q}} + \frac{\partial\psi^*}{\partial\dot{\mathbf{F}}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i \quad (4.38)$$

Substituindo esta na expressão do potencial Ψ em (4.37) obtém-se

$$\Psi = \int_0^{t_f} \left(\dot{W}(\mathcal{E}) + \psi^*(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{\mathbf{Q}}; \mathcal{E}) \right) dt \quad (4.39)$$

onde o integrando tem a mesma forma de \mathcal{D} (4.19) a menos do termo ϕ^* , excluído por simplicidade na apresentação do conceito de caminho minimizante. Deve-se notar que este integrando deve ser avaliado para $\dot{\mathbf{F}}^i$, $\dot{\mathbf{Q}}$ que minimiza Ψ .

4.2 Modelo de viscoelasticidade

O modelo viscoelástico proposto em [5] segue os princípios mostrados na seção anterior, e é apresentado em detalhe nesta. Sua concepção mecânica reside no modelo reológico da Fig.4.1, onde o amortecedor representa uma parcela viscosa inelástica.

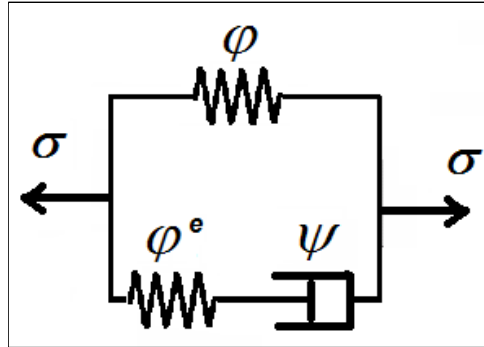


Figura 4.1: Modelo reológico para o modelo visco-hiperelástico.

A parcela inelástica \mathbf{F}^i da formulação variacional apresentada anteriormente é reescrita como \mathbf{F}^v , onde o índice v indica os componentes associados à viscosidade.

4.2.1 Conjunto de potenciais

Admite-se a existência de um potencial de energia W definido por

$$W(\mathcal{E}) = \varphi(\mathbf{F}) + \varphi^e(\mathbf{F}^e) \quad (4.40)$$

onde, φ é um potencial elástico em função da deformação total \mathbf{F} e φ^e é um potencial elástico isocórico em função da deformação elástica \mathbf{F}^e sobre a mola no braço viscoelástico.

Realiza-se uma separação do potencial associado ao gradiente de deformação total $\varphi(\mathbf{F})$, em uma parte isocórica $\varphi(\hat{\mathbf{C}})$ e uma parte volumétrica $U(J)$, e faz-se a hipótese que toda a contribuição volumétrica associada ao modelo está contida na parcela volumétrica obtida da separação de $\varphi(\mathbf{F})$. Para isto, são definidos os tensores cinemáticos:

$$\hat{\mathbf{F}} = \frac{1}{J^{\frac{1}{3}}}\mathbf{F}, \quad J = \det(\mathbf{F}), \quad \hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^T \hat{\mathbf{F}} \quad (4.41)$$

onde J é o Jacobiano, $\hat{\mathbf{F}}$ é o gradiente de deformação isocórico e $\hat{\mathbf{C}}$ o tensor de Cauchy-Green a direita isocórico.

Esta separação permite propor a existência de um potencial de energia W definido por

$$W(\mathcal{E}) = \varphi(\hat{\mathbf{C}}) + U(J) + \varphi^e(\mathbf{F}^e) \quad (4.42)$$

Também admite-se a existência de um potencial dissipativo ψ^* , responsável pelo comportamento inelástico dissipativo do amortecedor. O detalhamento destes potenciais é realizado a seguir:

Braço elástico

A parcela isocórica do potencial $\varphi(\mathbf{F})$ é uma função isotrópica das deformações isocóricas totais $\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^T \hat{\mathbf{F}} = \sum_{j=1}^3 c_j \mathbf{E}_j$, segundo

$$\varphi(\hat{\mathbf{C}}) = \varphi(c_1, c_2, c_3) \quad (4.43)$$

onde c_j e \mathbf{E}_j são, respectivamente, os autovalores e autoprojeções de $\hat{\mathbf{C}}$.

A função elástica $U(J)$ contabiliza a parcela volumétrica das deformações totais e pode ser definida por

$$U(J) = \frac{K}{2} [\ln J]^2 \quad (4.44)$$

onde K é um parâmetro volumétrico do material.

Braço viscoelástico

O braço conectado em paralelo, correspondente ao braço de Maxwell, leva em conta uma separação multiplicativa da deformação viscosa e elástica. A parcela viscosa é admitida sendo isocórica:

$$\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^v \implies \hat{\mathbf{F}}^e = \hat{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{v-1}, \quad \hat{\mathbf{C}}^e = \hat{\mathbf{F}}^{eT} \hat{\mathbf{F}}^e = \sum_{j=1}^3 c_j^e \mathbf{E}_j^e, \quad \det \mathbf{F}^v = 1 \quad (4.45)$$

onde c_j^e e \mathbf{E}_j^e são respectivamente os autovalores e as autoprojeções de $\hat{\mathbf{C}}^e$, $\hat{\mathbf{F}}^e$ é o gradiente de deformação elástico, que representa a deformação da mola, enquanto \mathbf{F}^v é o gradiente de deformação viscoelástico, que representa a deformação do amortecedor e $\hat{\mathbf{C}}^e$ é o tensor de Cauchy-Green a direita elástico e isocórico.

A taxa de deformação viscosa \mathbf{D}^v é definida por

$$\mathbf{D}^v = \text{sym}(\mathbf{L}^v) = \mathbf{L}^v = \dot{\hat{\mathbf{F}}}^v \mathbf{F}^{v-1} \quad (4.46)$$

que por construção, é deviatórica. A simetria do gradiente de deformação viscoso \mathbf{L}^v vem de uma suposição que o tensor de rotação é nulo ($\text{skew}(\mathbf{L}^v) = \mathbf{W}^v = 0$). Rearranjando (4.46), obtém-se uma lei de escoamento (4.47) para a variável interna \mathbf{F}^v

$$\dot{\mathbf{F}}^v = \mathbf{D}^v \mathbf{F}^v \quad (4.47)$$

Restrições adicionais em \mathbf{D}^v definem características específicas da lei de escoamento. Admite-se a seguinte decomposição:

$$\mathbf{D}^v = \sum_{j=1}^3 d_j^v \mathbf{M}_j^v \quad (4.48)$$

$$d_j^v \in K_Q = \{p_j \in \mathbb{R} : p_1 + p_2 + p_3 = 0\} \quad (4.49)$$

$$\mathbf{M}_j^v \in K_M = \{\mathbf{N}_j \in \text{Sym} : \mathbf{N}_j \cdot \mathbf{N}_j = 1, \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j\} \quad (4.50)$$

onde d_j^v e \mathbf{M}_j^v , $j = 1, 2, 3$, são autovalores e autoprojeções de \mathbf{D}^v . A condição de traço nulo é assegurada pelo conjunto K_Q enquanto K_M restringe as autoprojeções para serem tensores de segunda ordem ortonormais simétricos. Os escalares d_j^v representam a amplitude de \mathbf{D}^v e são escolhidos para serem as variáveis internas $\dot{\mathbf{Q}} = \{d_1, d_2, d_3\}$.

As deformações inelásticas são atualizadas incrementalmente baseados no mapeamento exponencial [5] que permite calcular uma aproximação de \mathbf{D}^v em função de \mathbf{F}_{n+1}^v .

$$\Delta \mathbf{F}^v = \mathbf{F}_{n+1}^v \mathbf{F}_n^{v-1} = \Delta \mathbf{R} \exp[\Delta t \mathbf{D}^v] \quad (4.51)$$

$$\Delta \mathbf{C}^v = (\Delta \mathbf{F}^v)^T \Delta \mathbf{F}^v = \mathbf{F}_n^{v-T} \mathbf{C}_{n+1}^v \mathbf{F}_n^{v-1} = \exp[\Delta t \mathbf{D}^v]^2 \quad (4.52)$$

$$\Rightarrow \Delta t \mathbf{D}^v = \frac{1}{2} \ln(\Delta \mathbf{C}^v) = \Delta t \sum_{j=1}^3 (d_j^v \mathbf{M}_j^v) = \sum_{j=1}^3 \Delta q_j^v \mathbf{M}_j^v \quad (4.53)$$

$$\Rightarrow \mathbf{D}^v = \frac{1}{2\Delta t} \ln(\Delta \mathbf{C}^v) = \sum_{j=1}^3 (d_j^v \mathbf{M}_j^v) = \sum_{j=1}^3 \frac{\Delta q_j^v}{\Delta t} \mathbf{M}_j^v \quad (4.54)$$

onde $\Delta \mathbf{R}$ vem da decomposição polar de $\Delta \mathbf{F}^v$ (note que este é simplificado no cálculo de $\Delta \mathbf{C}^v$). A Expressão (4.54) mostra que \mathbf{D}^v é aproximada pela expressão incremental de $\Delta \mathbf{C}^v$. As quantidades de $\Delta \mathbf{F}^v$ e $\Delta \mathbf{F}$ são representadas na Fig.4.2 que mostra a decomposição multiplicativa de deformação considerada nesta aproximação.

A partir destas definições, os potenciais elástico φ^e e o viscoso ψ^* , associados a este braço de Maxwell, são admitidas como funções isotrópicas de $\hat{\mathbf{C}}^e$ e \mathbf{D}^v , e então dependem

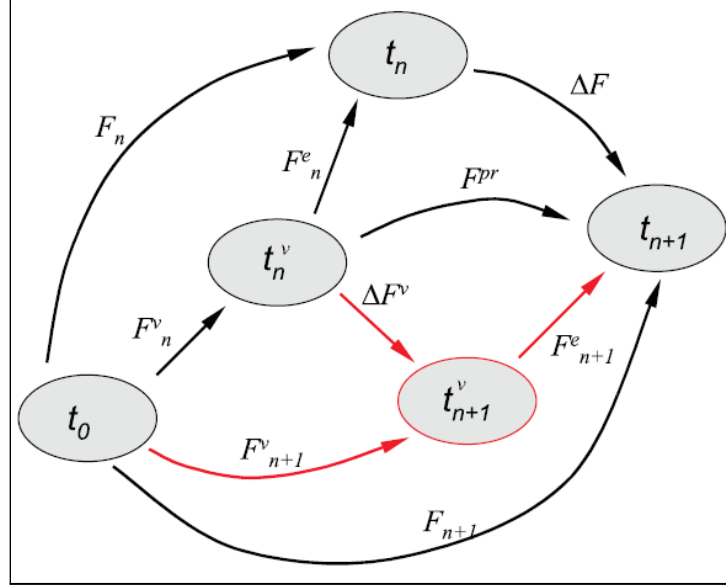


Figura 4.2: Decomposição Multiplicativa de Deformação [5].

respectivamente de seus autovalores c_j^e e d_j^v :

$$\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e) = \varphi^e(c_1^e, c_2^e, c_3^e) \quad (4.55)$$

$$\psi^*(\mathbf{D}^v) = \psi^*(d_1^v, d_2^v, d_3^v) \quad (4.56)$$

4.2.2 O problema de minimização

Devido à inclusão da relação (4.54), as variáveis de minimização $\mathbf{Q}_{n+1}, \mathbf{F}_{n+1}^v$ em (4.23) são substituídas pelas novas variáveis incrementais $\Delta q_j^v, \mathbf{M}_j^v$. O problema de minimização é reescrito por

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathcal{E}_n) &= \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = \Delta\varphi(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}) + \Delta U(J_{n+1}) \\ &+ \min_{\mathbf{M}_j^v, \Delta q_j^v} \left\{ \Delta\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) + \Delta t \psi \left(\frac{\Delta q_j^v}{\Delta t} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.57)$$

tal que

$$\Delta\varphi(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}) = \varphi(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}) - \varphi(\hat{\mathbf{C}}_n) \quad (4.58)$$

$$\Delta\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) = \varphi(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) - \varphi(\hat{\mathbf{C}}_n^e) \quad (4.59)$$

$$\Delta U(J_{n+1}) = U(J_{n+1}) - U(J_n) \quad (4.60)$$

onde

$$\Delta q_j^v \in K_Q = \{p_j \in \mathbb{R}^1 : p_1 + p_2 + p_3 = 0\} \quad (4.61)$$

$$\mathbf{M}_j^v \in K_M = \{\mathbf{N}_j \in Sym : \mathbf{N}_j \cdot \mathbf{N}_j = 1, \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j\} \quad (4.62)$$

O conjunto K_Q força o traço nulo de \mathbf{D}^v , enquanto o conjunto K_M leva em conta as propriedades usuais de autoprojeção. Adicionalmente, é fácil verificar que ambos conjuntos são convexos em suas respectivas variáveis.

Admitindo convexidade (ao menos local) no problema (4.57), as condições de otimalidade de primeira ordem (4.63) e (4.64) são suficientes para obter os valores das variáveis que minimizam o problema, isto é, encontrar $\Delta q_j^v \in K_Q$ e $\mathbf{M}_j^v \in K_M$ que satisfazem

$$\frac{\partial \Psi(\Delta q_j^v, \mathbf{M}_j^v)}{\partial \mathbf{M}_j^v} [\delta \mathbf{M}] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{M} \in K_M \quad (4.63)$$

$$\frac{\partial \Psi(\Delta q_j^v, \mathbf{M}_j^v)}{\partial \Delta q_j^v} [\delta q] = 0 \quad \forall \delta q \in K_Q \quad (4.64)$$

Levando em consideração a propriedade isotrópica das funções de energia, a minimização em (4.57) pode ser feita analiticamente. Para isto, uma importante relação entre a deformação elástica e inelástica deve ser mostrada:

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{v-1} = \hat{\mathbf{F}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^v])^{-1}, \quad \hat{\mathbf{F}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{v-1} \quad (4.65)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{eT} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{C}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^v])^{-2}, \quad \hat{\mathbf{C}}^{pr} = \mathbf{F}_n^{v-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{v-1} \quad (4.66)$$

$$\epsilon_{n+1}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \epsilon^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^v, \quad \epsilon^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^{pr} \quad (4.67)$$

Na equação (4.66), é feita a suposição de colineariedade entre $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^v para permitir permutação entre ambos tensores. Isto significa que $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$, $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^v devem possuir as mesmas autoprojeções, ou seja, $\mathbf{E}_j^e = \mathbf{E}_j^{pr} = \mathbf{M}_j^v$ (Apêndice A.1).

O argumento de mínimo do potencial $\Psi(\Delta q_j^v, \mathbf{M}_j^v)$ deve satisfazer as restrições fornecidas por (4.61) e (4.62). Para reforçar isto, as condições de otimalidade (4.63) e (4.64) são calculadas com o auxílio da função Lagrangiana \mathcal{L} , que adiciona ao potencial original todas as restrições de igualdade

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\epsilon_j^e, d_j^v, \beta) &= \Delta \varphi^e(\epsilon_j^e) + \Delta t \psi(d_j^v) \\ &+ \lambda_1 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_a^v - 1) + \lambda_2 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_b^v) + \lambda_3 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_c^v) \\ &+ \lambda_4 (\mathbf{M}_b^v \cdot \mathbf{M}_b^v - 1) + \lambda_5 (\mathbf{M}_b^v \cdot \mathbf{M}_c^v) + \lambda_6 (\mathbf{M}_c^v \cdot \mathbf{M}_c^v - 1) \\ &+ \beta (d_a^v + d_b^v + d_c^v) \end{aligned} \quad (4.68)$$

onde λ_k e β são os multiplicadores de Lagrange.

A condição de estacionariedade de \mathcal{L} em relação as autoprojeções \mathbf{M}_j^v é apresentada no Apêndice A.1. O principal resultado é a demonstração da propriedade de colinearidade entre $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$, $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^v . Em função deste resultado, pode se concluir que

$$\epsilon_j^e = \ln(c_j^e)/2 = \epsilon_j^{pr} - \Delta q_j^v \quad (4.69)$$

A condição de estacionariedade de \mathcal{L} em relação a Δq_j^v , apresentada no Apêndice A.2,

permite a obtenção do conjunto de equações para $\epsilon_1^e, \epsilon_2^e, \epsilon_3^e$:

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} - \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v} + \beta = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.70)$$

$$\epsilon_1^e + \epsilon_2^e + \epsilon_3^e = 0 \quad (4.71)$$

A existência de solução deste sistema é garantida se os potenciais φ^e e ψ possuem propriedades convenientes de convexidade. Usando o método de Newton para encontrar as raízes $\bar{\mathbf{x}} = \{\epsilon_1^e, \epsilon_2^e, \epsilon_3^e, \beta\}$, temos a fórmula recursiva

$$\bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k - \mathbf{K}^{k-1} \mathbf{r}^k \quad (4.72)$$

ou

$$\mathbf{K}^k \Delta \bar{\mathbf{x}} = -\mathbf{r}^k, \quad \bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k + \Delta \bar{\mathbf{x}} \quad (4.73)$$

Simplificações podem ser feitas admitindo que:

$$\varphi^e(\epsilon_j^e) = \sum_{j=1}^3 w^e(\epsilon_j^e), \quad \psi(d_j^v) = \sum_{j=1}^3 w^v(d_j^v) \quad (4.74)$$

como é o caso do modelo proposto de Hencky ou Ogden. A matriz \mathbf{K} é então definida por

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial \epsilon_1^e} & \frac{\partial r_1}{\partial \epsilon_2^e} & \frac{\partial r_1}{\partial \epsilon_3^e} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta} \\ \frac{\partial r_2}{\partial \epsilon_1^e} & \frac{\partial r_2}{\partial \epsilon_2^e} & \frac{\partial r_2}{\partial \epsilon_3^e} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta} \\ \frac{\partial r_3}{\partial \epsilon_1^e} & \frac{\partial r_3}{\partial \epsilon_2^e} & \frac{\partial r_3}{\partial \epsilon_3^e} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta} \\ \frac{\partial r_4}{\partial \epsilon_1^e} & \frac{\partial r_4}{\partial \epsilon_2^e} & \frac{\partial r_4}{\partial \epsilon_3^e} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & K_{22} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & K_{33} & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.75)$$

$$K_{jj} = \frac{\partial r_j}{\partial \epsilon_j^e} = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v \partial d_j^v}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.76)$$

No caso do modelo viscoelástico aqui proposto, depois de alguma álgebra, obtêm-se as seguintes expressões explícitas para o processo de atualização de Newton:

$$\Delta \epsilon_j^e = -(r_j + \Delta \beta) / K_{ii} \quad (4.77)$$

$$\Delta \beta = \left(r_4 - \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{K_{jj}} \right) \left(\sum_{s=1}^3 \frac{1}{K_{ss}} \right)^{-1} \quad (4.78)$$

4.2.3 Cálculo de tensão

Depois de realizada a minimização do potencial em relação às suas variáveis internas, é preciso calcular a derivada de Ψ em relação a \mathbf{C} com o objetivo de obter o valor do tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} . Devido à decomposição isocórica/volumétrica do potencial W , o tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} é calculado por [18]:

$$\mathbf{P}_{n+1} = 2\mathbf{F}_{n+1} \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n)}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \mathbf{F}_{n+1} \left[2J_{n+1}^{-2/3} \text{DEV} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right] \quad (4.79)$$

De forma resumida, as derivadas de φ e φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}$, apresentadas em detalhe no Apêndice A.3, e a derivada de U em relação a J , são dadas por:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} \frac{\partial c_j}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} \mathbf{E}_j \quad (4.80)$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \frac{\partial c_j^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{v-1} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{v-T} \quad (4.81)$$

$$\frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} = K \frac{\ln J_{n+1}}{J_{n+1}} \quad (4.82)$$

Para finalizar, cabem as seguintes observações:

- i. O Potencial φ é desacoplado, ou seja, não faz parte das operações de minimização. Então, sua escolha não afeta a decomposição elástica/inelástica do braço de Maxwell.
- ii. As quatro equações escalares não lineares representadas por (A.15,A.16) são suficientes para permitir qualquer escolha dos potenciais φ^e e ψ . Expressões convenientes de φ^e e ψ podem simplificar ainda mais o sistema (A.15,A.16).
- iii. Uma simples extensão deste modelo pode ser obtida considerando um conjunto de N braços de Maxwell, como visto na Fig.4.3. Neste caso, o potencial incremental (4.57) é escrito como:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n) &= \Delta \varphi(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}) + \Delta U(J_{n+1}) \\ &+ \sum_{k=1}^N \min_{\mathbf{M}_{jk}^v, \Delta q_{jk}^v} \left\{ \Delta \varphi_k^e(\hat{\mathbf{C}}_{k \ n+1}^e) + \Delta t \psi_k \left(\frac{\Delta q_{jk}^v}{\Delta t} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.83)$$

que significa que a minimização deveria ser feita para cada módulo k , então obtêm-se os pares correspondentes Δq_{jk}^v , \mathbf{M}_{jk} .

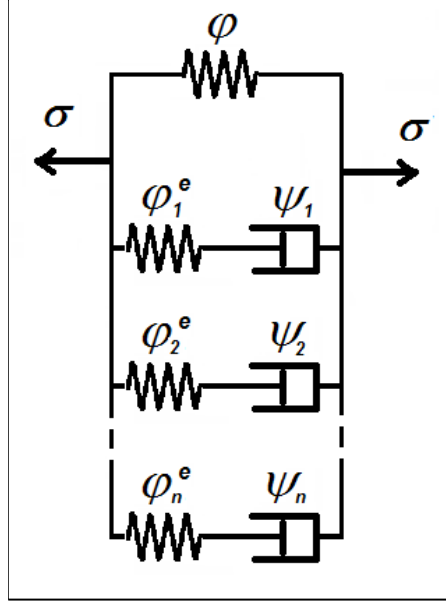


Figura 4.3: Modelo de Maxwell generalizado.

4.2.4 Tensor material

Um importante aspecto do ponto de vista da implementação numérica é a determinação da matriz tangente, consistente com o algoritmo de atualização incremental constitutivo. Usando a notação $\frac{d(\cdot)}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}}$ como a derivada total do argumento em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$, define-se o tensor material \mathcal{C} por (4.84).

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) = \frac{d^2 \varphi}{(d\hat{\mathbf{C}}_{n+1})^2} + \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \\ &= \mathcal{C}^\varphi + \mathcal{C}^{\varphi^e} \end{aligned} \quad (4.84)$$

O primeiro membro é facilmente calculado. De fato, desde que φ seja uma função isotrópica de $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$, sua segunda derivada é facilmente calculada com o sistema de coordenadas espectral [16]. O segundo termo precisa de uma operação preliminar. Considerando $\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} = \hat{\mathbf{F}}_n^{\text{v}-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_n^{\text{v}-1}$, chamando $\mathbf{f}^{\text{vn}} = \hat{\mathbf{F}}_n^{\text{v}-1}$ e suprimindo o índice $n+1$, temos (usando a notação

de Einstein):

$$\begin{aligned}
 C_{ijkl}^{\varphi^e} &= \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{kl}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{kl}} \\
 &= \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \left(\mathbf{f}_{pu}^{\mathbf{pn}T} \hat{\mathbf{C}}_{uv} \mathbf{f}_{vq}^{\mathbf{pn}} \right)}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{kl}} \frac{\partial \left(\mathbf{f}_{mr}^{\mathbf{pn}T} \hat{\mathbf{C}}_{rs} \mathbf{f}_{st}^{\mathbf{pn}} \right)}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \\
 &= \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}} \mathbf{f}_{pu}^{\mathbf{pn}T} \mathcal{I}_{uvkl} \mathbf{f}_{vq}^{\mathbf{pn}} \mathbf{f}_{mr}^{\mathbf{pn}T} \mathcal{I}_{rsij} \mathbf{f}_{st}^{\mathbf{pn}} \\
 &= \mathbf{f}_{rm}^{\mathbf{pn}} \mathbf{f}_{st}^{\mathbf{pn}} \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}} \mathbf{f}_{up}^{\mathbf{pn}} \mathbf{f}_{vq}^{\mathbf{pn}} \mathcal{I}_{uvkl} \mathcal{I}_{rsij} \\
 &= \mathbf{f}_{im}^{\mathbf{pn}} \mathbf{f}_{jt}^{\mathbf{pn}} \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\mathbf{pr}}} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\mathbf{pr}}} \mathbf{f}_{kp}^{\mathbf{pn}} \mathbf{f}_{lq}^{\mathbf{pn}} = C_{jikl}^{\varphi^e} \tag{4.85}
 \end{aligned}$$

$$C_{ijkl}^{\varphi^e} = C_{klij}^{\varphi^e}, \quad C_{ijkl}^{\varphi^e} = C_{jikl}^{\varphi^e} \tag{4.86}$$

O ponto crítico é a obtenção da derivada de φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}^{\mathbf{pr}} = c_j^{\mathbf{pr}} \mathbf{E}_j^{\mathbf{pr}}$. Nas coordenadas espectrais, é necessário o cálculo das funções

$$y_j = \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{\mathbf{pr}}} = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{\mathbf{pr}}} \tag{4.87}$$

$$y_{j,i} = \frac{d}{dc_i^{\mathbf{pr}}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{\mathbf{pr}}} \right) = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_i^e} \frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{\mathbf{pr}}} \frac{1}{4c_j^{\mathbf{pr}} c_i^{\mathbf{pr}}} - \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2(c_j^{\mathbf{pr}})^2} \tag{4.88}$$

Os termos $\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e}$ e $\frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_i^e}$ são claros. De outro lado, a derivada $\frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{\mathbf{pr}}}$ é calculada pela derivação do sistema não linear (A.15,A.16), apresentada em detalhes no Apêndice A.4. Usando a notação

$$\psi_{,j} = \frac{\partial \psi}{\partial d_j}, \quad \varphi_{,j} = \frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_j^e}, \quad K_{jj} = \varphi_{,jj} + \frac{1}{\Delta t} \psi_{,jj} \tag{4.89}$$

seu valores são dados por

$$\frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{\mathbf{pr}}} = \frac{\psi_{,jj}}{\Delta t K_{jj}} \delta_{ij} - \frac{\psi_{,ii}}{\Delta t K_{ii} K_{jj}} \left(\sum_{s=1}^3 \frac{1}{K_{ss}} \right)^{-1} \tag{4.90}$$

4.2.5 Exemplos de modelos de materiais

Os exemplos aqui apresentados foram extraídos de [5]. Estes têm por objetivo apresentar os potenciais de Hencky e Ogden que possuem as características necessárias (4.74) para serem utilizados nesta formulação.

Modelo de Hencky

Este modelo utiliza potenciais baseados na forma quadrática de tensores de deformação logarítmica (4.91) e (4.92) (Potenciais de Hencky [16], [18]).

$$\varphi = \mu \sum_{j=1}^3 (\epsilon_j)^2 \quad (4.91)$$

$$\varphi^e = \mu^e \sum_{j=1}^3 (\epsilon_j^e)^2, \quad \psi = \eta^v \sum_{j=1}^3 (d_j^v)^2 \quad (4.92)$$

Da definição dos potenciais, obtêm-se suas derivadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_j} &= 2\mu \epsilon_j, & \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} &= 2\mu^e \epsilon_j^e, & \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v} &= 2\mu^v d_j^v \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \epsilon_j \partial \epsilon_j} &= 2\mu, & \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} &= 2\mu^e, & \frac{\partial^2 \psi}{\partial d_j^v \partial d_j^v} &= 2\mu^v \end{aligned} \quad (4.93)$$

De (4.67) tem-se que $\epsilon_j^e = \epsilon_j^{pr} - \Delta t d_j^v = \epsilon_j^{pr} - \Delta q_j^v$. Usando (4.92), as condições de otimalidade (A.15,A.16) são:

$$-2\mu^e (\epsilon_j^{pr} - \Delta q_j^v) + 2\eta^v \frac{\Delta q_j^v}{\Delta t} + \beta = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.94)$$

$$\Delta q_j^v + \Delta q_j^v + \Delta q_j^v = 0 \quad (4.95)$$

Somando as três equações lineares (4.94), a restrição (4.95) e usando o fato que $\epsilon_1^{pr} + \epsilon_2^{pr} + \epsilon_3^{pr} = 0$, temos $\beta = 0$. Assim, desacopla-se o sistema e finalmente chega-se a expressão (4.96),

$$\Delta q_j^v = \frac{\mu^e}{\frac{\eta^v}{\Delta t} + \mu^e} \epsilon_j^{pr} \quad (4.96)$$

para cada direção principal j , que é a clássica expressão para o modelo viscoelástico linear infinitesimal.

Modelo de Ogden

Uma importante vantagem da utilização deste modelo, é que este tipo de potencial hiperelástico pode representar o comportamento não linear elástico de materiais poliméricos que exibem propriedades viscoelásticas. O modelo de Ogden também tem a propriedade de generalizar outros modelos como o neo-Hookean e Mooney-Rivlin.

Os potenciais de Ogden são definidos por

$$\varphi = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\alpha_i} ([\exp(\epsilon_j)]^{\alpha_i} - 1) \quad (4.97)$$

$$\varphi^e = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i^e}{\alpha_i} ([\exp(\epsilon_j^e)]^{\alpha_i} - 1) \quad (4.98)$$

$$\psi = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i^v}{\alpha_i} ([\exp(d_j^v)]^{\alpha_i} - 1) \quad (4.99)$$

Derivando, obtêm-se:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_j} = \sum_{i=1}^N \mu_i [\exp(\epsilon_j)]^{\alpha_i}; \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \epsilon_j \partial \epsilon_j} = \sum_{i=1}^N \mu_i \alpha_i [\exp(\epsilon_j)]^{\alpha_i} \quad (4.100)$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} = \sum_{i=1}^N \mu_i^e [\exp(\epsilon_j^e)]^{\alpha_i}; \quad \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} = \sum_{i=1}^N \mu_i^e \alpha_i [\exp(\epsilon_j^e)]^{\alpha_i} \quad (4.101)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial d_j^v} = \sum_{i=1}^N \eta_i^v [\exp(d_j^v)]^{\alpha_i}; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial d_j^v \partial d_j^v} = \sum_{i=1}^N \eta_i^v \alpha_i [\exp(d_j^v)]^{\alpha_i} \quad (4.102)$$

Substituindo as derivadas em (A.15),(A.16) obtemos o seguinte conjunto de equações não lineares:

$$\sum_{i=1}^N \eta_i^e \exp(\alpha_i d_j^v) - \sum_{i=1}^N \mu_i^e \exp(\alpha_i \epsilon_j^e) + \beta = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.103)$$

$$d_1^v + d_2^v + d_3^v = 0 \quad (4.104)$$

Variáveis d_j^v, β podem ser resolvidas pelo método de Newton, como mostrado anteriormente. As derivadas $\frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_j}, \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e}, \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v}$ e derivadas de alta-ordem necessárias para substituir em (4.80), (A.23), (A.31) são facilmente obtidas. Lembrando ainda que $c_j = \exp(2\epsilon_j)$, $c_j^e = \exp(2\epsilon_j^e)$, $\exp(d_j) = (\Delta c_j)^{\frac{1}{2\Delta t}}$, tem-se para o modelo de Ogden:

$$\varphi = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\alpha_i} ([\exp(\epsilon_j)]^{\alpha_i} - 1) = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{\alpha_i} \left((c_j)^{\frac{\alpha_i}{2}} - 1 \right) \quad (4.105)$$

$$\varphi^e = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i^e}{\alpha_i} ([\exp(\epsilon_j^e)]^{\alpha_i} - 1) = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i^e}{\alpha_i} \left((c_j^e)^{\frac{\alpha_i}{2}} - 1 \right) \quad (4.106)$$

4.3 Modelo de elasto-viscoplasticidade

Mesmo na região de deformação elástica (ou viscoelástica), os polímeros possuem comportamento diferente do clássico linear (modelo tipo Hencky) dos metais. Assim, a presente abordagem propõe uma alteração (extensão) do já tratado em [3] para modelos de viscoplasticidade isotrópica. Na presente abordagem é enfatizada a possibilidade de incorporar

modelos constitutivos hiperelásticos isotrópicos arbitrários, de forma a poder modelar em forma apropriada esta região do comportamento de materiais poliméricos. Isto é realizado seguindo os mesmos princípios de decomposição espectral da taxa de deformação inelástica, já utilizado no modelo de viscoelasticidade acima.

A representação do modelo viscoplástico aqui estudado é dado pela Fig.4.4. O modelo é capaz de representar um comportamento plástico ou viscoplástico através da contribuição de seu componente inelástico de atrito. A parcela inelástica \mathbf{F}^i da formulação variacional

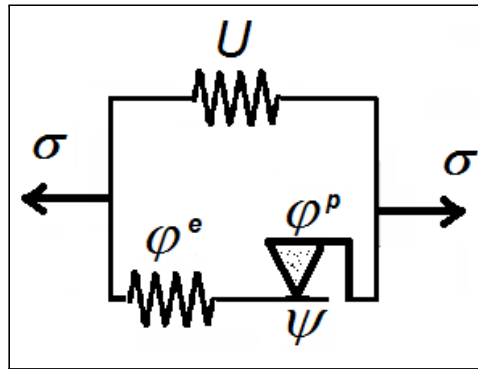


Figura 4.4: Modelo reológico para o modelo elasto-viscoplástico.

apresentada anteriormente é reescrita como \mathbf{F}^p , onde o índice p indica uma parcela plástica.

4.3.1 Conjunto de potenciais

Utilizam-se basicamente as mesmas formas dos potenciais do modelo viscoelástico com algumas mudanças para incorporar o comportamento de plastificação. Agora admite-se a existência de um potencial de energia W definido por

$$W(\mathcal{E}) = \varphi(\mathbf{F}) + \varphi^e(\mathbf{F}^e) + \varphi^p(\mathbf{F}^p, \mathbf{Q}) \quad (4.107)$$

onde \mathbf{F}^e é a deformação sobre a mola do braço viscoplástico, \mathbf{F}^p é a deformação sobre o componente inelástico, \mathbf{Q} é um conjunto de variáveis internas, φ é um potencial elástico em função da deformação total e φ^e é um potencial elástico em função da deformação sobre a mola no braço viscoplástico (braço de Maxwell) e φ^p é um potencial plástico responsável pelo encruamento não viscoso do material.

Como proposto no modelo anterior, realiza-se uma separação do potencial associado ao gradiente de deformação total $\varphi(\mathbf{F})$, em uma parte isocórica $\varphi(\hat{\mathbf{C}})$ e uma parte volumétrica

$U(J)$. Faz-se a hipótese que toda a contribuição volumétrica associada ao modelo está contida na parcela volumétrica $U(J)$ e toda contribuição isocórica na parcela elástica isocórica da mola $\varphi^e(\mathbf{F}^e)$, assim tem-se que $\varphi(\hat{\mathbf{C}}) = 0$ e reescreve-se (4.107) por

$$W(\mathcal{E}) = U(J) + \varphi^e(\mathbf{F}^e) + \varphi^p(\mathbf{F}^p, \mathbf{Q}) \quad (4.108)$$

Também admite-se a existência de um potencial dissipativo ψ^* , responsável pelo comportamento viscoso inelástico do componente de atrito viscoso. O detalhamento destes potenciais é realizado a seguir.

A função elástica $U(J)$ contabiliza a parcela volumétrica das deformações totais e pode ser definida por

$$U(J) = \frac{K}{2} [\ln J]^2 \quad (4.109)$$

onde K é um parâmetro volumétrico do material.

A mola conectada em série com o componente de atrito viscoso simboliza uma separação multiplicativa da deformação plástica e elástica. A parcela plástica possui, por hipótese, um comportamento isocórico. Assim, tem-se que:

$$\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^p \implies \hat{\mathbf{F}}^e = \hat{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{p-1}, \quad \hat{\mathbf{C}}^e = \hat{\mathbf{F}}^{eT} \hat{\mathbf{F}}^e = \sum_{j=1}^3 c_j^e \mathbf{E}_j^e, \quad \det \mathbf{F}^p = 1 \quad (4.110)$$

onde c_j^e e \mathbf{E}_j^e são respectivamente os autovalores e as autoprojeções de $\hat{\mathbf{C}}^e$, $\hat{\mathbf{F}}^e$ é o gradiente de deformação elástico, \mathbf{F}^p é o gradiente de deformação plástica e $\hat{\mathbf{C}}^e$ é o tensor de Cauchy-Green à direita elástico e isocórico.

A taxa de deformação plástica \mathbf{D}^p é definida por

$$\mathbf{D}^p = \text{sym}(\mathbf{L}^p) = \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \quad (4.111)$$

que é deviatórica, e a simetria do gradiente de deformação plástico \mathbf{L}^p vem da suposição que o tensor de rotação plástica é nulo ($\text{skew}(\mathbf{L}^p) = \mathbf{W}^p = 0$). Rearranjando a equação (4.111), obtém-se uma lei de escoamento

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p \quad (4.112)$$

Neste trabalho propõe-se realizar a decomposição espectral de \mathbf{D}^p da seguinte maneira¹

$$\mathbf{D}^p = \dot{q}\mathbf{M} = \dot{q} \sum_{j=1}^3 q_j \mathbf{M}_j \quad (4.113)$$

$$q_j \in K_Q = \left\{ p_j \in \mathbb{R} : \sum_{j=1}^3 p_j = 0; \sum_{j=1}^3 p_j^2 = 3/2 \right\} \quad (4.114)$$

$$\mathbf{M}_j \in K_M = \{ \mathbf{M}_j \in Sym : \mathbf{M}_j \cdot \mathbf{M}_j = 1, \mathbf{M}_i \cdot \mathbf{M}_j = 0, i \neq j \} \quad (4.115)$$

$$\dot{q} \geq 0 \quad (4.116)$$

onde q é um acumulador plástico, \mathbf{M} é a direção de escoamento, o conjunto K_Q assegura a condição de traço nulo de \mathbf{M} com a norma fixa, enquanto o conjunto K_M leva em conta as propriedades das autoprojeções.

A equação (4.112) tem um significado especial, que é definir a regra de escoamento para $\dot{\mathbf{F}}^p$ e fazer uma restrição entre \mathbf{F}^p e q através das direções de escoamento $q_j \mathbf{M}_j$. Devido a esta restrição, \mathbf{F}^p torna-se uma variável interna dependente das variáveis internas $\{q, q_j, \mathbf{M}_j\}$, que por sua vez são independentes entre si.

Uma aproximação incremental de \mathbf{D}^p é obtida pelo mapeamento exponencial:

$$\Delta \mathbf{F}^p = \mathbf{F}_{n+1}^p \mathbf{F}_n^{p-1} = \Delta \mathbf{R} \exp[\Delta t \mathbf{D}^p] \quad (4.117)$$

$$\Delta \mathbf{C}^p = (\Delta \mathbf{F}^p)^T \Delta \mathbf{F}^p = \mathbf{F}_n^{p-T} \mathbf{C}_{n+1}^p \mathbf{F}_n^{p-1} = \exp[\Delta t \mathbf{D}^p]^2 \quad (4.118)$$

$$\Rightarrow \mathbf{D}^p = \frac{1}{2\Delta t} \ln(\Delta \mathbf{C}^p) = \dot{q} \sum_{j=1}^3 q_j \mathbf{M}_j = \frac{\Delta q}{\Delta t} \sum_{j=1}^3 q_j \mathbf{M}_j \quad (4.119)$$

Uma vez identificadas as novas variáveis internas $\{q, q_j, \mathbf{M}_j\}$ pode-se definir os potenciais φ^p e ψ . Do mesmo modo que no modelo de viscoelasticidade, o potencial elástico φ^e é admitido ser uma função isotrópica de $\hat{\mathbf{C}}^e$ e, portanto, dependente dos seus correspondentes autovalores:

$$\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e) = \varphi^e(c_1^e, c_2^e, c_3^e) \quad (4.120)$$

Esta função também pode ser representada em termos da deformação natural $\boldsymbol{\epsilon}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^e$, que tem as mesmas autoprojeções de $\hat{\mathbf{C}}^e$ e com autovalores dados por $\epsilon_j^e = \frac{1}{2} \ln c_j^e$. Assim,

$$\varphi^e(\boldsymbol{\epsilon}^e) = \varphi^e(\epsilon_1^e, \epsilon_2^e, \epsilon_3^e) \quad (4.121)$$

¹É importante ressaltar que esta escolha de decomposição permite a incorporação formal de potenciais hiperelásticos arbitrários. Na forma de decomposição clássica, separa-se $\mathbf{D}^p = \dot{q}\mathbf{M}$ onde \dot{q} representa amplitude e \mathbf{M} direção. Isto dá lugar ao clássico modelo de retorno radial que, no presente contexto só é consistente com os modelos hiperelásticos de tipo Hencky, para o qual a direção \mathbf{M} satisfaz a condição de minimização no potencial incremental (ver [3])

O potencial plástico φ^p é responsável pela contribuição plástica do encruamento do material. Neste caso considera-se um encruamento isotrópico dependendo da variável interna q de forma tal que:

$$\varphi^p = \varphi^p(q) \quad (4.122)$$

$$q(t) = \int_0^t \dot{q} dt, \quad q_{n+1} = q_n + \Delta t \dot{q} = q_n + \Delta q \quad (4.123)$$

O potencial viscoplástico isotrópico dissipativo ψ depende de \mathbf{D}^p através de \dot{q} segundo

$$\psi(\mathbf{D}^p) = \psi\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right) = \psi(\dot{q}) = \begin{cases} \bar{\psi}(\dot{q}) & \text{se } \dot{q} \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{q} < 0 \end{cases} \quad (4.124)$$

onde este tipo de definição de ψ tem o objetivo de incorporar uma penalização para valores negativos de \dot{q} .

Exemplos de potenciais viscoplásticos O termo dissipativo ψ define o limite entre o domínio elástico e o domínio plástico, e sua definição não é diferenciável para todo o domínio. Pode ser expressa pela lei de Perzyna

$$\psi(\dot{q}) = \begin{cases} \frac{mY_0\dot{q}_0}{m+1} \left(\frac{\dot{q}}{\dot{q}_0}\right)^{\frac{m+1}{m}} & \text{se } \dot{q} \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{q} < 0 \end{cases} \quad (4.125)$$

onde m , Y_0 e \dot{q}_0 são parâmetros do material. A lei de Perzyna define dependência ou independência da velocidade de deformação. Quando $m \rightarrow \infty$ o potencial torna-se $\psi(\dot{q}) = \begin{cases} Y_0\dot{q} & \text{se } \dot{q} \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{q} < 0 \end{cases}$, estabelecendo uma independência da taxa de deformação plástica \mathbf{D}^p .

O potencial plástico φ^p pode ser expresso por uma função quadrática

$$\varphi^p(q) = \Sigma_0 q + \frac{H}{2} (q)^2 \quad (4.126)$$

que representa a regra de encruamento linear clássica para metais. Porém, para simular materiais poliméricos é necessária a utilização de uma função não linear, como por exemplo o potencial genérico

$$\varphi^p(q) = \Sigma_0 q + \frac{1}{2} H q^2 + \mu^p \left(q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p q) \right) + \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j^p}{\alpha_j^p + 1} (q)^{\alpha_j^p + 1} \quad (4.127)$$

onde Σ_0 , H , μ^p , α^p , μ_j^p e α_j^p , são parâmetros do material e $N = 1, \dots, j$ é o número de termos da função de potências.

Existem diversos potenciais para modelos de encruamento plástico não linear. O potencial (4.127) é apresentado por ser um potencial generalizado que pode representar outros modelos de encruamento mais conhecidos e é capaz de representar o comportamento de amolecimento ou endurecimento não linear com maior flexibilidade. Para o modelo elastoplástico perfeito considera-se apenas o termo que contém o parâmetro Σ_0 , onde Σ_0 é a tensão de escoamento. Para o modelo de encruamento linear consideram-se apenas os termos com os parâmetros Σ_0 e H , onde H é o módulo plástico. Para o modelo de encruamento de Ramberg-Osgood, consideram-se apenas os termos com os parâmetros Σ_0 , μ_p e α_p e $N = 1$, onde μ_p e α_p são os parâmetros da função de potência. Para o modelo de encruamento com saturação consideram-se apenas os termos com os parâmetros Σ_0 , μ e α , onde μ e α são os parâmetros da função exponencial.

4.3.2 O problema de minimização

Em função dos tipos de potenciais escolhidos, as variáveis internas são reduzidas a $\{\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j\}$, que substituem as variáveis minimizantes $\mathbf{Q}_{n+1}, \mathbf{F}_{n+1}^p$. O potencial incremental Ψ é reescrito por

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n) &= \Delta U(J_{n+1}) \\ &+ \min_{\Delta q, \mathbf{M}_j, q_j} \left\{ \Delta \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) + \Delta \varphi^p(q_{n+1}) + \Delta t \bar{\psi} \left(\frac{\Delta q}{\Delta t} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.128)$$

tal que

$$\Delta \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) = \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) - \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_n^e) \quad (4.129)$$

$$\Delta \varphi^p(q_{n+1}) = \varphi^p(q_{n+1}) - \varphi^p(q_n) \quad (4.130)$$

$$\Delta U(J_{n+1}) = U(J_{n+1}) - U(J_n) \quad (4.131)$$

onde

$$q_j \in K_Q = \left\{ p_j \in \mathbb{R} : \sum_{j=1}^3 p_j = 0; \sum_{j=1}^3 p_j^2 = 3/2 \right\} \quad (4.132)$$

$$\mathbf{M}_j \in K_M = \{ \mathbf{N}_j \in Sym : \mathbf{N}_j \cdot \mathbf{N}_j = 1, \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j \} \quad (4.133)$$

$$\Delta q > 0 \quad (4.134)$$

A operação de minimização só faz sentido quando há deformação plástica no incremento, isto é, quando $\Delta q > 0$. Neste caso, são consideradas somente as restrições (4.132) e (4.133).

Pelo contrário, se o material está em regime elástico tem-se que $\Delta q = 0$. A operação de identificação se o material está em um ou outro regime, é tratado com maior detalhe no Apêndice C.

Admitindo-se propriedade de convexidade para os termos de (4.128) e admitindo que o mínimo se encontra num ponto tal que $\Delta q > 0$, as condições de otimalidade de primeira ordem (4.135), (4.136) e (4.137) são suficientes para obter os valores das variáveis que minimizam o problema, ou seja, encontrar $\Delta q \in \mathbb{R}^+$, $q_j \in K_Q$ e $\mathbf{M}_j \in K_M$ que satisfazem

$$\frac{\partial \Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j)}{\partial \mathbf{M}_j} [\delta \mathbf{M}] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{M} \in K_M \quad (4.135)$$

$$\frac{\partial \Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j)}{\partial q_j} [\delta q] = 0 \quad \forall \delta q \in K_Q \quad (4.136)$$

$$\frac{\partial \Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j)}{\partial \Delta q} [\delta \Delta q] = 0 \quad \forall \delta \Delta q \in \mathbb{R} \quad (4.137)$$

A minimização pode ser feita analiticamente. Para isto, apresentam-se as relações entre as deformações plástica e elástica, de forma análoga às equações (4.65), (4.66) e (4.67) do caso viscoelástico,

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{p-1} = \hat{\mathbf{F}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-1}, \quad \hat{\mathbf{F}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (4.138)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{eT} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{C}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-2}, \quad \hat{\mathbf{C}}^{pr} = \mathbf{F}_n^{p-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (4.139)$$

$$\epsilon_{n+1}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \epsilon^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^p, \quad \epsilon^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^{pr} \quad (4.140)$$

Na equação (4.139), supõe-se colineariedade entre $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^p para permitir permutação entre ambos tensores. Isto significa que $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$, $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^p devem possuir os mesmos autovetores, exatamente como no modelo viscoelástico, ou seja, $\mathbf{E}_j^e = \mathbf{E}_j^{pr} = \mathbf{M}_j$. A verificação desta suposição é realizada na minimização de Ψ com relação a \mathbf{M}_j apresentada no Apêndice B.1.

Os valores de Δq , q_j e \mathbf{M}_j que minimizam o potencial $\Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j)$ devem satisfazer as restrições (4.132) e (4.133). Para incorporá-las, as condições de otimalidade (4.135), (4.136) e (4.137) são calculadas com o auxílio da função Lagrangiana \mathcal{L} (4.141),

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j, \lambda_k, \beta_1, \beta_2) = & \Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j) \\ & + \lambda_1 (\mathbf{M}_a \cdot \mathbf{M}_a - 1) + \lambda_2 (\mathbf{M}_a \cdot \mathbf{M}_b) + \lambda_3 (\mathbf{M}_a \cdot \mathbf{M}_c) \\ & + \lambda_4 (\mathbf{M}_b \cdot \mathbf{M}_b - 1) + \lambda_5 (\mathbf{M}_b \cdot \mathbf{M}_c) + \lambda_6 (\mathbf{M}_c \cdot \mathbf{M}_c - 1) \\ & + \beta_1 (q_a + q_b + q_c) + \beta_2 (q_a^2 + q_b^2 + q_c^2 - 3/2) \end{aligned} \quad (4.141)$$

onde λ_k, β_1 e β_2 são multiplicadores de Lagrange.

A estacionariedade do Lagrangeano em relação as autoprojeções \mathbf{M}_j é apresentada no Apêndice B.1 e o principal resultado desta condição é a colinearidade entre $\hat{\mathbf{C}}^e$, $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^p , já mencionada. Como consequência desta colinearidade, pode se escrever que

$$\epsilon_j^e = \ln(c_j^e)/2 = \epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j \quad (4.142)$$

Da estacionariedade do Lagrangeano em relação a Δq e q_j , apresentada no Apêndice B.2, obtêm-se o conjunto de equações

$$-\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_j = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.143)$$

$$-\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} q_j + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \psi}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (4.144)$$

$$\sum_{j=1}^3 q_j = 0 \quad (4.145)$$

$$\sum_{j=1}^3 q_j^2 - 3/2 = 0 \quad (4.146)$$

Em ambos os casos, o método de Newton é usado para encontrar as raízes $\bar{\mathbf{x}} = \{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\}$ usando a fórmula recursiva

$$\bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k - \mathbf{K}^{k-1} \mathbf{r}^k \quad (4.147)$$

ou

$$\mathbf{K}^k \Delta \bar{\mathbf{x}} = -\mathbf{r}^k, \quad \bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k + \Delta \bar{\mathbf{x}} \quad (4.148)$$

Simplificações podem ser feitas se é admitido novamente que

$$\varphi^e(\epsilon_j^e) = \sum_{j=1}^3 w_j^e(\epsilon_j^e) \quad (4.149)$$

Neste caso, temos:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial q_1} & \frac{\partial r_1}{\partial q_2} & \frac{\partial r_1}{\partial q_3} & \frac{\partial r_1}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_2}{\partial q_1} & \frac{\partial r_2}{\partial q_2} & \frac{\partial r_2}{\partial q_3} & \frac{\partial r_2}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_3}{\partial q_1} & \frac{\partial r_3}{\partial q_2} & \frac{\partial r_3}{\partial q_3} & \frac{\partial r_3}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_4}{\partial q_1} & \frac{\partial r_4}{\partial q_2} & \frac{\partial r_4}{\partial q_3} & \frac{\partial r_4}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_5}{\partial q_1} & \frac{\partial r_5}{\partial q_2} & \frac{\partial r_5}{\partial q_3} & \frac{\partial r_5}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_6}{\partial q_1} & \frac{\partial r_6}{\partial q_2} & \frac{\partial r_6}{\partial q_3} & \frac{\partial r_6}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.150)$$

$$K_{jj} = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} \Delta q^2 + 2\beta_2 \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.151)$$

$$H_j = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} q_j \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.152)$$

$$H_4 = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_j^e} q_j^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} \quad (4.153)$$

4.3.3 Cálculo da tensão

Uma vez que a minimização é feita, pode-se calcular o tensor tensão de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} . Devido a separação do potencial Ψ em uma contribuição isocórica e volumétrica, o tensor tensão \mathbf{P} é dado por

$$\mathbf{P}_{n+1} = 2\mathbf{F}_{n+1} \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n)}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \mathbf{F}_{n+1} \left[J_{n+1}^{-2/3} \text{DEV} \left(2 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right] \quad (4.154)$$

De forma resumida, a derivada de φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}$, apresentada em detalhe no Apêndice B.3, e a derivada de U em relação a J são dadas por:

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \frac{\partial c_j^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{p-1} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{p-T} \quad (4.155)$$

$$\frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} = K \frac{\ln J_{n+1}}{J_{n+1}} \quad (4.156)$$

4.3.4 Tensor material

Usando a notação $\frac{d(\cdot)}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}}$ como a derivada total do argumento em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$. Define-se o tensor \mathcal{C} por (4.157).

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}^{\varphi^e} = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \quad (4.157)$$

Considerando $\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} = \left(\hat{\mathbf{F}}^p \right)_n^{-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \left(\hat{\mathbf{F}}^p \right)_n^{-1}$, chamando $\mathbf{f}^{\text{pr}} = \left(\hat{\mathbf{F}}^p \right)_n^{-1}$ e suprimindo o índice $n+1$, de forma resumida, temos que

$$\mathcal{C}_{ijkl}^{\varphi^e} = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{kl}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) = \sum_{m,t,p,q=1}^3 \mathbf{f}_{im}^{\text{vn}} \mathbf{f}_{jt}^{\text{vn}} \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{\text{pr}}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{\text{pr}}} \right) \mathbf{f}_{kp}^{\text{vn}} \mathbf{f}_{lq}^{\text{vn}} = \mathcal{C}_{klij}^{\varphi^e} = \mathcal{C}_{jikl}^{\varphi^e} \quad (4.158)$$

Nas coordenadas espectrais é necessário o cálculo das funções

$$y_j = \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \quad (4.159)$$

$$y_{j,i} = \frac{d}{dc_i^{pr}} \left(\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \right) = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e \partial \epsilon_i^e} \frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{pr}} \frac{1}{4c_j^{pr} c_i^{pr}} - \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2(c_j^{pr})^2} \quad (4.160)$$

O termo $\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_k^e}$ e $\frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_k^e \partial \epsilon_i^e}$ são claros. Novamente, o ponto crítico é a obtenção das derivadas de $\frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{pr}}$, que é obtida derivando o sistema não linear (B.8-B.11). Considerando que neste caso temos

$$\epsilon_j^e = \epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j \Rightarrow \frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{pr}} = \delta_{ij} - \frac{d\Delta q}{dc_i^{pr}} q_j - \Delta q \frac{dq_j}{dc_i^{pr}} \quad (4.161)$$

a sua solução é dada em notação compacta por:

$$\mathbf{K} \bar{\mathbf{x}}_j = \mathbf{y}_j \quad (4.162)$$

$$\mathbf{x}_j = \left[\frac{dq_1^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{dq_2^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{dq_3^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} \right]^T \quad (4.163)$$

$$\mathbf{y}_j = [\varphi_{,11}^e \delta_{1j} \Delta q \quad \varphi_{,22}^e \delta_{2j} \Delta q \quad \varphi_{,33}^e \delta_{3j} \Delta q \quad \varphi_{,jj}^e q_j \quad 0 \quad 0]^T \quad (4.164)$$

onde \mathbf{K} é a matriz tangente (B.15). A solução do sistema (B.33) para $(j = 1, 2, 3)$ resulta o vetor $\bar{\mathbf{x}}_j$, que por sua vez resolve $\frac{d\epsilon_j^e}{dc_i^{pr}}$ em (4.161). A obtenção do sistema (B.33) é apresentado em detalhe no Apêndice B.4.

4.3.5 Exemplos de modelos de material

Modelo de Hencky

Utilizam-se os potenciais baseados na forma quadrática de tensores de deformação logarítmica para o potencial elástico.

$$\varphi^e = \mu \sum_{j=1}^3 (\epsilon_j^e)^2 \quad (4.165)$$

Os potenciais ψ e φ^p tem a forma (4.125) com $m \rightarrow \infty$ e (4.126) respectivamente. Então as derivadas de seus potenciais são dadas por:

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} = 2\mu^e \epsilon_j^e = 2\mu^e (\epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j) \quad (4.166)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \dot{q}} = Y_0 \quad \text{se } \dot{q} \geq 0 \quad (4.167)$$

$$\frac{\partial \varphi^p}{\partial \Delta q} = \Sigma_0 + H q_{n+1} \quad (4.168)$$

O resíduo para os potenciais de Hencky tem a forma:

$$r_i = -2\mu^e(\epsilon_i^{pr} - \Delta q q_i)\Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.169)$$

$$r_4 = -\sum_{j=1}^3 2\mu^e(\epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j)q_j + \Sigma_0 + Hq_{n+1} + Y_0 = 0 \quad (4.170)$$

$$r_5 = \sum_{j=1}^3 q_j = 0 \quad (4.171)$$

$$r_6 = \sum_{j=1}^3 q_j^2 = 3/2 \quad (4.172)$$

Somando todas as equações de (4.169), considerando (4.171) e usando o fato que $\epsilon_1^{pr} + \epsilon_2^{pr} + \epsilon_3^{pr} = 0$, temos que $\beta_1 = 0$.

De (4.170) e (4.172) obtêm-se

$$-\sum_{j=1}^3 2\mu^e(\epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j)q_j + \Sigma_0 + Hq_{n+1} + Y_0 = 0 \quad (4.173)$$

$$-2\mu^e \sum_{j=1}^3 \epsilon_j^{pr} q_j + 3\mu^e \Delta q + \Sigma_0 + H(q_n + \Delta q) + Y_0 = 0 \quad (4.174)$$

$$-2\mu^e \sum_{j=1}^3 \epsilon_j^{pr} q_j + \Delta q(3\mu^e + H) + \Sigma_0 + Hq_n + Y_0 = 0 \quad (4.175)$$

Denominando

$$a = 3\mu^e + H, \quad b = \Sigma_0 + Hq_n + Y_0 \quad (4.176)$$

e escrevendo em forma compacta, temos:

$$a\Delta q + b = 2\mu^e \sum_{j=1}^3 \epsilon_j^{pr} q_j \quad (4.177)$$

Somando todas equações (4.169) multiplicadas por q_j , e diminuindo (4.170) multiplicada por Δq temos que

$$\beta = \frac{1}{3}\Delta q (\Sigma_0 + Hq_n + h\Delta q + Y_0) \quad (4.178)$$

que substituído em (4.169):

$$\begin{aligned} -2\mu^e(\epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j) + \frac{2}{3}(\Sigma_0 + Hq_n + H\Delta q + Y_0)q_j &= 0, \quad j = 1, 2, 3 \\ -2\mu^e \epsilon_j^{pr} + 2\mu^e \Delta q q_j + \frac{2}{3}(\Sigma_0 + Hq_n + H\Delta q + Y_0)q_j &= 0, \quad j = 1, 2, 3 \\ -3\mu^e \epsilon_j^{pr} + (\Delta q(3\mu^e + H) + \Sigma_0 + Hq_n + Y_0)q_j &= 0, \quad j = 1, 2, 3 \\ -3\mu^e \epsilon_j^{pr} + (a\Delta q + b)q_j &= 0, \quad j = 1, 2, 3 \\ q_j &= \frac{3\mu^e \epsilon_j^{pr}}{a\Delta q + b} \end{aligned} \quad (4.179)$$

Susbtituindo (4.179) em (4.177),

$$\begin{aligned} a\Delta q + b &= 2\mu^e \left(\frac{3\mu^e}{a\Delta q + b} \right) \sum_{j=1}^3 (\epsilon_j^{pr})^2 \\ (a\Delta q + b)^2 &= \frac{3}{2} \sum_{j=1}^3 (2\mu^e \epsilon_j^{pr})^2 = \frac{3}{2} \sum_{j=1}^3 (s_j^{pr})^2 = \frac{3}{2} \|\mathbf{s}^{pr}\|^2 \end{aligned}$$

temos então

$$\Delta q = \frac{\sqrt{\frac{3}{2}} \|\mathbf{s}^{pr}\| - (Y_0 + \Sigma_0 + Hq_n)}{3\mu^e + H} \quad \text{se } \Delta q \geq 0 \quad (4.180)$$

Onde as expressões (4.179) são as expressões usuais para o retorno radial elastoplástico do modelo de von Mises. Finalmente, (4.180) permite o cálculo de $\epsilon_j^e = 2\mu^e(\epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j)$ necessário para o potencial elástico.

4.4 Modelo de visco-elastoplasticidade

Neste ítem apresenta-se uma forma simples de construir um modelo que compartilhe propriedades de viscoelasticidade e elasto-viscoplasticidade a partir da contribuição dos dois modelos já apresentados. Basta para isto utilizar a representação reológica mostrada na Fig.4.5. Nesta, cada braço de Maxwell apresenta um dos dois modelos citados. Desta forma, ambas as parcelas com e sem deformações permanentes apresentam dependência da taxa de deformação. O índices v e p foram adicionados propositalmente aos potenciais φ e ψ originais com o objetivo de diferenciá-los em seus respectivos braços de maxwell. O índice v faz menção ao modelo viscoelástico, enquanto o índice p refere-se ao modelo elasto-viscoplástico. O modelo reológico do modelo visco-elastoplástico é apresentado na Fig.4.5.

4.4.1 O problema de minimização

Assim, o potencial incremental Ψ pode ser apresentado por,

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathcal{E}_n) &= \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = \Delta U(J_{n+1}) + \\ &+ \min_{\Delta q, \mathbf{M}_j, q_j} \left\{ \Delta \varphi^{ep}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ep}) + \Delta \varphi^p(q_{n+1}) + \Delta t \psi^p \left(\frac{\Delta q}{\Delta t} \right) \right\} + \\ &+ \min_{\mathbf{M}_j^v, \Delta q_j^v} \left\{ \Delta \varphi^{ev}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ev}) + \Delta t \psi^v \left(\frac{\Delta q_j^v}{\Delta t} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.181)$$

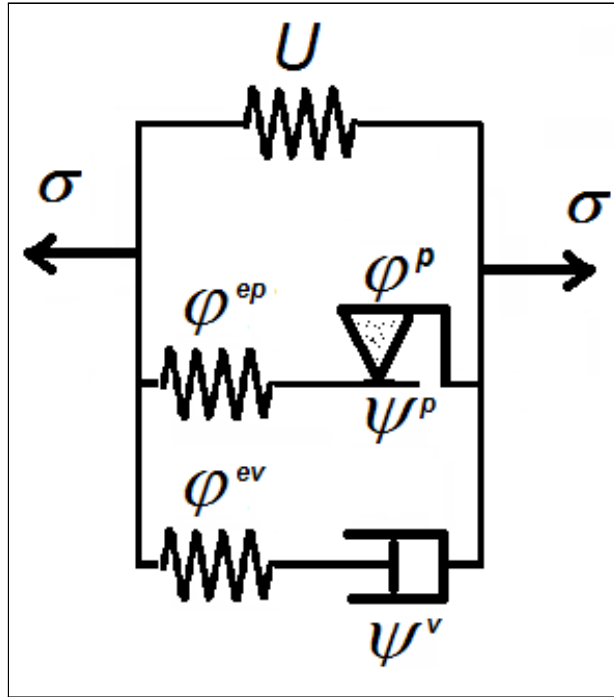


Figura 4.5: Modelo reológico para o modelo visco-elastoplástico.

onde

$$\Delta U(J_{n+1}) = U(J_{n+1}) - U(J_n) \quad (4.182)$$

$$\Delta \varphi^{ep}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ep}) = \varphi^{ep}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ep}) - \varphi^{ep}(\hat{\mathbf{C}}_n^{ep}) \quad (4.183)$$

$$\Delta \varphi^p(q_{n+1}) = \varphi^p(q_{n+1}) - \varphi^p(q_n) \quad (4.184)$$

$$\Delta \varphi^{ev}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ev}) = \varphi^{ev}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{ev}) - \varphi^{ev}(\hat{\mathbf{C}}_n^{ev}) \quad (4.185)$$

Os problemas de minimização são desacoplados e, portanto, os cálculos são feitos de forma independente, seguindo os mesmos procedimentos já apresentados. A tensão é obtida como a contribuição de cada um dos braços.

4.4.2 Tensor material

Finalmente, o tensor material necessário na implementação numérica para a determinação da matriz tangente, é também calculado mediante a simples adição das parcelas de cada braço. Usando a notação $\frac{d(\cdot)}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}}$ como a derivada total do argumento em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$,

define-se o tensor material \mathcal{C} por (4.84).

$$\mathcal{C} = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \varphi^{ep}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \varphi^{ev}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \quad (4.186)$$

$$= \mathcal{C}^{\varphi^{ep}} + \mathcal{C}^{\varphi^{ev}} \quad (4.187)$$

onde $\mathcal{C}^{\varphi^{ep}}$ é o tensor material do modelo elasto-viscoplástico (4.157) e $\mathcal{C}^{\varphi^{ev}}$ é o tensor material calculado no braço viscoelástico do modelo viscoelástico (4.85).

Capítulo 5

Exemplos numéricos

Com o objetivo de analisar a capacidade dos modelos propostos de representar o comportamento de certos materiais poliméricos, este capítulo apresenta um conjunto de exemplos numéricos.

Inicialmente, mostra-se uma particularização da formulação para o problema de tração uniaxial, implementada no código GNU Octave [26]. Os exemplos ilustram diversos casos de carga com diferentes potenciais para todos os modelos tratados. Na segunda seção mostra-se o comportamento para deformações de cisalhamento. Finalmente, a última seção é destinada a mostrar casos numéricos tridimensionais do modelo visco-elastoplástico, onde a formulação foi implementada no software acadêmico de elementos finitos METAFOR [27]. Os valores atribuídos aos parâmetros materiais de todos os exemplos numéricos são meramente ilustrativos e não tem relação com nenhum material específico.

5.1 Problema uniaxial

A formulação apresentada no Capítulo 5 pode ser particularizada para o caso de tensão uniaxial sem modificar sua estrutura tridimensional [28]. O tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} é então definido por

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_{n+1} &= 2\mathbf{F}_{n+1} \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}_{n+1})}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \\ &= \mathbf{F}_{n+1} \left[2J_{n+1}^{-2/3} \mathbf{DEV} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right] \quad (5.1)\end{aligned}$$

onde $\text{DEV}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\mathbf{A} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1}$. Suas derivadas são dadas por

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} \mathbf{E}_j \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{i-1} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{i-T} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} = K \frac{\ln J_{n+1}}{J_{n+1}} \quad (5.4)$$

Admite-se o ponto submetido a uma situação de esforço uniaxial, com uma simples componente de tensão de Cauchy ($\sigma_{11} = \sigma$). A deformação é considerada perfeitamente isocórica, isto é, o Jacobiano $J = 1$. Assim, o gradiente de deformações e o tensor deformação são dados respectivamente por

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{F}} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{B} = \hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{B}} = \mathbf{F}^2 \quad (5.6)$$

Devido a hipótese de perfeita incompressibilidade, a relação constitutiva volumétrica pode ser definida por

$$p_{n+1} = \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} = \frac{\sigma}{3} \quad (5.7)$$

Substituindo estas expressões em (5.1) e considerando que $\boldsymbol{\sigma} = J^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}^T$, obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{n+1} &= \mathbf{C}_{n+1} \left[2 \text{DEV} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + p_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right] \\ &= 2 \text{dev} \left[\mathbf{C}_{n+1} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \right] + p_{n+1} \mathbf{I} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Os termos de (5.8) ainda podem ser simplificados considerando as decomposições espectrais [28]:

$$\mathbf{C}_{n+1} \frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} c_j \mathbf{E}_j = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_j} \mathbf{E}_j \quad (5.9)$$

$$\mathbf{C}_{n+1} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \left(\sum_{k=1}^3 c_k^e \mathbf{E}_k^e \right) \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^e} \mathbf{E}_j^e \right) = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e \quad (5.10)$$

$$\mathbf{C}_{n+1} \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \left(\sum_{k=1}^3 c_k \mathbf{M}_k \right) \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \phi}{\partial d_j} \frac{1}{2\Delta t \Delta c_j} \mathbf{M}_j \right) = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial d_j} \mathbf{M}_j \quad (5.11)$$

Substituindo (5.9), (5.10) e (5.11) em (5.8), obtemos a expressão (5.12), que pode ser utilizada em qualquer um dos modelos apresentados.

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \text{dev} \left[\sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_j} \mathbf{E}_j + \frac{\partial \varphi^e}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_j^e} \mathbf{E}_j^e + \frac{\partial \psi}{\partial d_j} \mathbf{M}_j \right) \right] + p_{n+1} \mathbf{I} \quad (5.12)$$

Esta expressão foi implementada no código GNU Octave, permitindo realizar os cálculos de testes das equações constitutivas, e posteriormente compará-las com resultados análogos em simulações com elementos finitos.

5.1.1 Modelo viscoelástico

No modelo viscoelástico proposto em [5], pode-se escolher qualquer tipo de potencial para φ , φ^e e ψ . Porém, é conveniente e usual escolher os mesmos potenciais e realizar uma redução na quantidade de parâmetros. Isto pode ser feito relacionando os parâmetros dos potenciais segundo a definição das relações

$$\varphi^e(\boldsymbol{\epsilon}^e) = \beta^e \varphi(\boldsymbol{\epsilon}) \quad (5.13)$$

$$\psi(d^v) = \tau^e \varphi^e(\boldsymbol{\epsilon}^e) \quad (5.14)$$

onde o parâmetro adimensional $\beta^e = \mu_i^e / \mu_i$ é um fator de proporcionalidade entre a mola do braço viscoelástico e a mola do braço elástico. O parâmetro $\tau^e = \eta_i^v / \mu_i^e$, por sua vez, é a relação entre o componente elástico e o dissipativo do braço viscoelástico. Os parâmetros α_i (no caso do modelo de Ogden) são os mesmos para todos os potenciais.

Apresentam-se dois casos de tração uniaxial, um com o modelo de Hencky e outro com o Modelo de Ogden. Os parâmetros de φ são dados pela Tabela 5.1 e os parâmetros de φ^e e ψ são obtidos dos valores dos parâmetros adimensionais $\beta^e = 2$ e $\tau^e = 2.5$. Ambos os corpos foram alongados até $\lambda = 3$ ($\varepsilon = \ln \lambda = 1.0986$) com uma velocidade de deformação logarítmica constante de $1/s$, $0.1/s$ e $0.01/s$.

Tabela 5.1: Parâmetros materiais para o potencial elástico φ^e .

Potencial	Ogden				Hencky
Elástico	μ_i	20	-15	30	$\mu = 30.0$
φ	α_i	0.2	0.8	1.5	

Os gráficos obtidos através da implementação do problema uniaxial no software GNU Octave, para os potenciais de Hencky e Ogden, são apresentados respectivamente na Fig.5.1 e na Fig.5.2, onde pode-se notar claramente a dependência da velocidade de deformação.

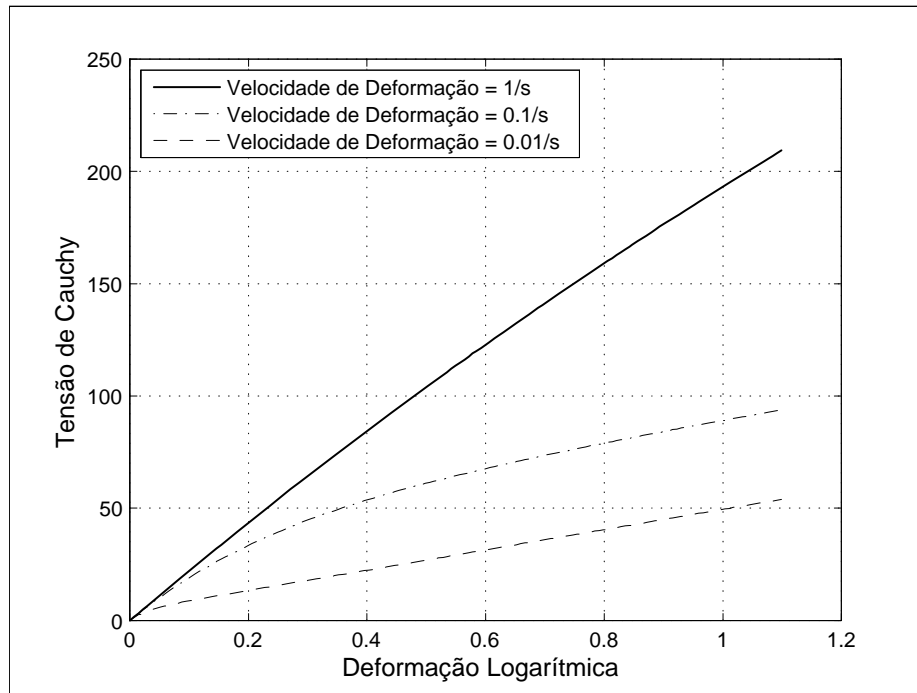


Figura 5.1: Teste de tração uniaxial. Modelo viscoelástico com potencial de Hencky.

5.1.2 Modelo elasto-viscoplástico

Inicialmente, apresentam-se dois casos de tração uniaxial mudando apenas o potencial elástico φ^e , onde estes são tratados com o modelo de Ogden (CASO I) e o modelo de Hencky (CASO II). Ambos possuem encruamento linear, representado pela escolha de uma função linear para o potencial plástico φ^p . O potencial viscoplástico ψ é dado pela lei de Perzyna. No modelo de Ogden foram usados três parâmetros $N = 3$. Os parâmetros do material usados para ambos casos são apresentados na Tabela 5.2. Os corpos foram alongados até $\lambda = 3$ ($\varepsilon = \ln \lambda = 1.0986$) com uma velocidade de deformação logarítmica constante de $1/s$, $0.5/s$ e $0.1/s$ e descarregados com a mesma velocidade de deformação. Os resultados obtidos para o modelo de Ogden e Hencky são mostrados respectivamente na Fig.5.3 e na Fig.5.4, onde também apresentaram as esperadas dependências da velocidade de deformação. Deve-se notar, no entanto, que a região elástica não apresenta alguma sensibilidade à velocidade, como era esperado.

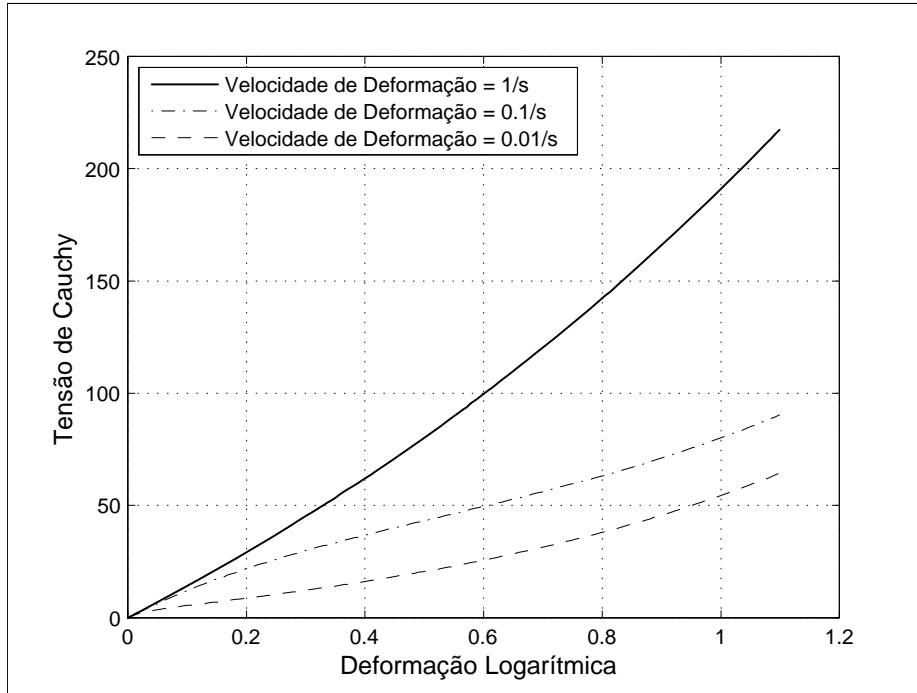


Figura 5.2: Teste de tração uniaxial. Modelo viscoelástico com potencial de Ogden.

Tabela 5.2: Parâmetros materiais para estudo do potencial elástico φ^e .

Potencial	CASO I				CASO II		
Elástico φ^e	Ogden				Hencky		
	μ_i	-94.22	140.42	35.21	$\mu = 30.0$		
	α_i	3.0559	1.3328	3.8812			
Plástico φ^p	Linear				Linear		
	Σ_0	H		Σ_0	H		
	20	20		20	20		
Viscoplástico ψ	Perzyna				Perzyna		
	Y_0	\dot{q}_0	m		Y_0	\dot{q}_0	m
	20	0.1	0.8		20	0.1	0.8

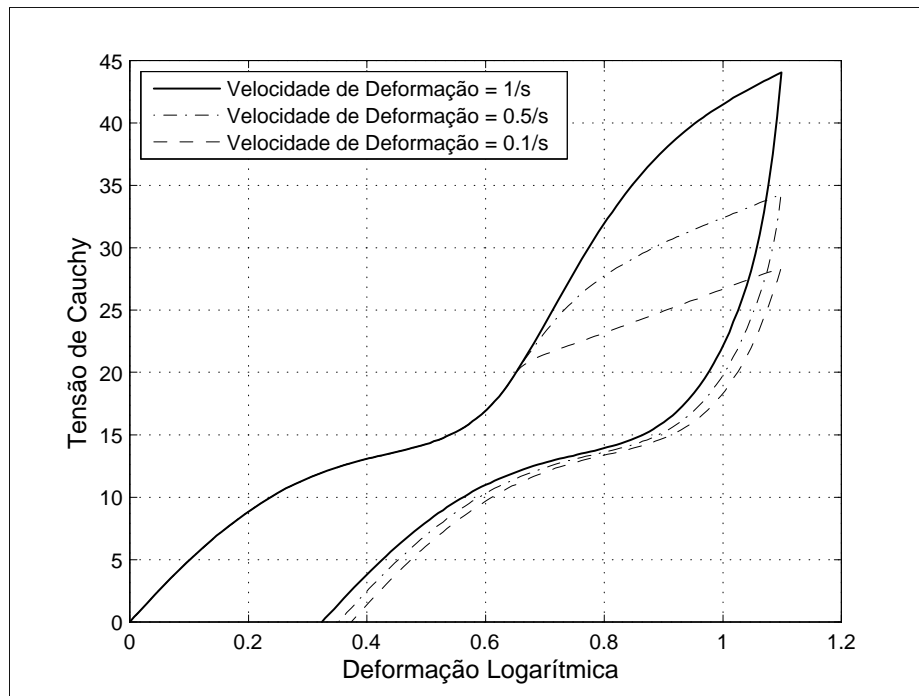


Figura 5.3: Teste de tração uniaxial. Modelo de Ogden (CASO I).

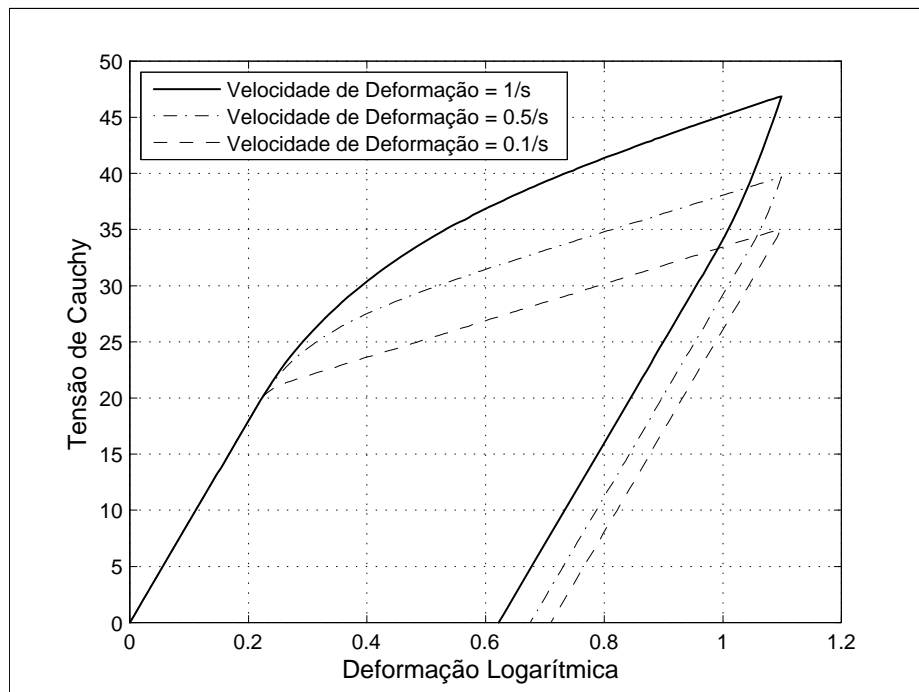


Figura 5.4: Teste de tração uniaxial. Modelo de Hencky (CASO II).

A escolha do tipo de potencial elástico φ^e define o comportamento elástico do material. O potencial de Hencky possui apenas um parâmetro e é capaz de representar um comportamento elástico linear em relação à deformação logarítmica. O potencial de Ogden, dentre outros, é usado para representar comportamentos não lineares da parte elástica, necessidade que depende do polímero analisado. Um número apreciável de termoplásticos apresenta forte comportamento não linear no regime de deformações permanentes, depois do início do escoamento. Cabe ao potencial viscoplástico prever este comportamento, utilizando um potencial φ^p adequado.

Para demonstrar a capacidade do modelo representar o comportamento plástico não linear, apresenta-se dois casos com o modelo de Hencky para potencial elástico φ^e e a lei de Perzyna para o potencial viscoplástico ψ , mudando somente o potencial plástico φ^p . Em ambos os casos os corpos foram alongados até $\lambda = 2.5$ ($\varepsilon = \ln \lambda = 0.91629$) com uma velocidade de deformação logarítmica constante de 50/s, 5/s e 0.5/s e descarregados com a mesma velocidade de deformação.

Tabela 5.3: Parâmetros materiais para estudo do potencial plástico φ^p .

Potencial	CASO III					CASO IV							
Elástico φ^e	Hencky $\mu = 760$					Hencky $\mu = 820$							
Plástico φ^p	Não Linear					Não Linear							
	Σ_0	μ^p	α^p	$\mu_i^p =$	382	Σ_0	H	μ^p	α^p	$\mu_i^p =$	1940	350	-22
	25	5	80800	$\alpha_i^p =$	3.6	22	-224	41	150	$\alpha_i^p =$	10	1.4	0.01
Viscoplástico ψ	Perzyna					Perzyna							
	Y_0		\dot{q}_0	m		Y_0		\dot{q}_0	m				
	25		0.01	9		22		0.01					8.5

No primeiro caso (CASO III), utiliza-se a função não linear generalizada para o potencial plástico φ^p , com um parâmetro ($N = 1$) na função de potência. Em um segundo caso (CASO IV), utiliza-se novamente a função não linear generalizada para o potencial plástico φ^p , porém desta vez com todos os parâmetros, sendo utilizado três parâmetros ($N = 3$) na função de potência. Os parâmetros são apresentados na Tabela 5.3 e os resultados na Fig.5.5 e na Fig.5.6, onde notam-se as esperadas dependências da velocidade de deformação.

No primeiro caso (CASO III) utiliza-se o número mínimo de parâmetros do potencial

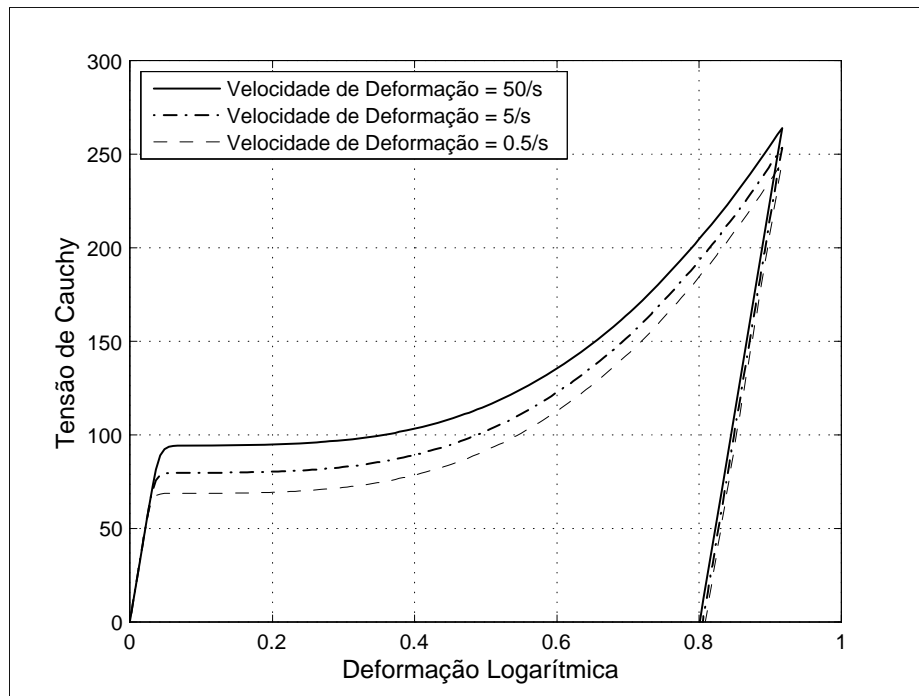


Figura 5.5: Teste de tração uniaxial com potencial plástico não linear (CASO III).

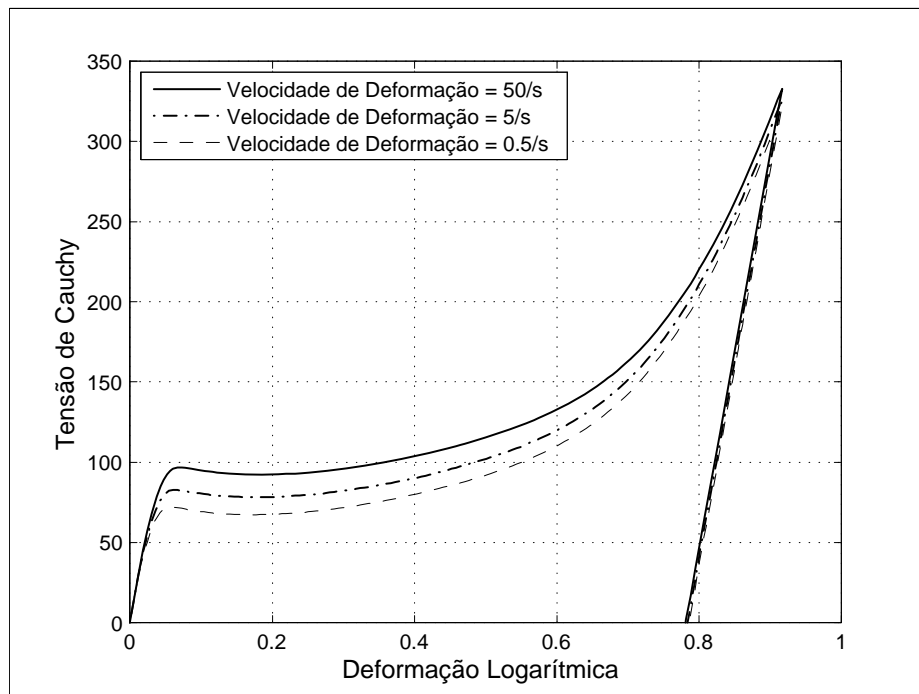


Figura 5.6: Teste de tração uniaxial com potencial plástico não linear (CASO IV).

plástico φ^p para prever o comportamento endurecimento não linear, típico de alguns termoplásticos rígidos. Com o número de parâmetros mínimo não é possível obter o comportamento de amolecimento com posterior endurecimento, a tensão permanece constante, devido contribuição da função de saturação, e depois apresenta endurecimento, devido a contribuição da função de potência. No segundo caso, que possui mais parâmetros, é possível obter o comportamento de amolecimento com posterior endurecimento.

A lei de Perzyna representa uma contribuição da parcela de viscosa do modelo viscoplástico e seu comportamento é muito sensível a seus parâmetros Y_0 , \dot{q}_0 e m . Aqui, escolheu-se estudar o comportamento do potencial viscoplástico ψ mudando somente \dot{q}_0 e m . É usual em procedimentos de ajuste de curva atribuir-se um valor constante a Y_0 , geralmente o valor da tensão de escoamento do material. Isto é feito para reduzir a quantidade de parâmetros a serem identificados, uma vez que é possível obter o mesmo comportamento alterando somente Y_0 e m ou \dot{q}_0 e m .

Usam-se os parâmetros do CASO II como referência. Analisando a influência dos parâmetros na lei de Perzyna, pode-se concluir que diminuindo o valor de m , tomando como exemplo $m = 7$, obtêm-se uma maior contribuição viscosa sendo esta proporcional potencialmente à velocidade de deformação. Diferente do que acontece para \dot{q}_0 que se comporta de modo oposto, ou seja, aumentando seu valor, tomando como exemplo $\dot{q}_0 = 0.1$, diminui-se a contribuição viscosa dada pela lei de Perzyna. Estes comportamentos são apresentados respectivamente nas Fig.5.7 e Fig.5.8, onde são confrontados com o CASO II.

Nos casos com potencial plástico não linear, nota-se que em altos valores de deformação, as curvas tendem a se unir. Este comportamento foi encontrado em todos os testes feitos com o modelo e deve-se ao comportamento viscoso da lei de Perzyna. Nos casos onde se utilizou a função potencial plástica linear, verificou-se que este comportamento não se apresenta, o que nos leva a concluir que a lei de Perzyna possui limitações para representar o comportamento de plastificação não linear em altas deformações, sendo aconselhável o uso de um outro potencial viscoso.

5.1.3 Modelo visco-elastoplástico

Para visualizar o comportamento do modelo visco-elastoplástico apresenta-se um caso que utiliza o modelo de Ogden, com três parâmetros ($N = 3$), para os potenciais elásticos φ^{ep} ,

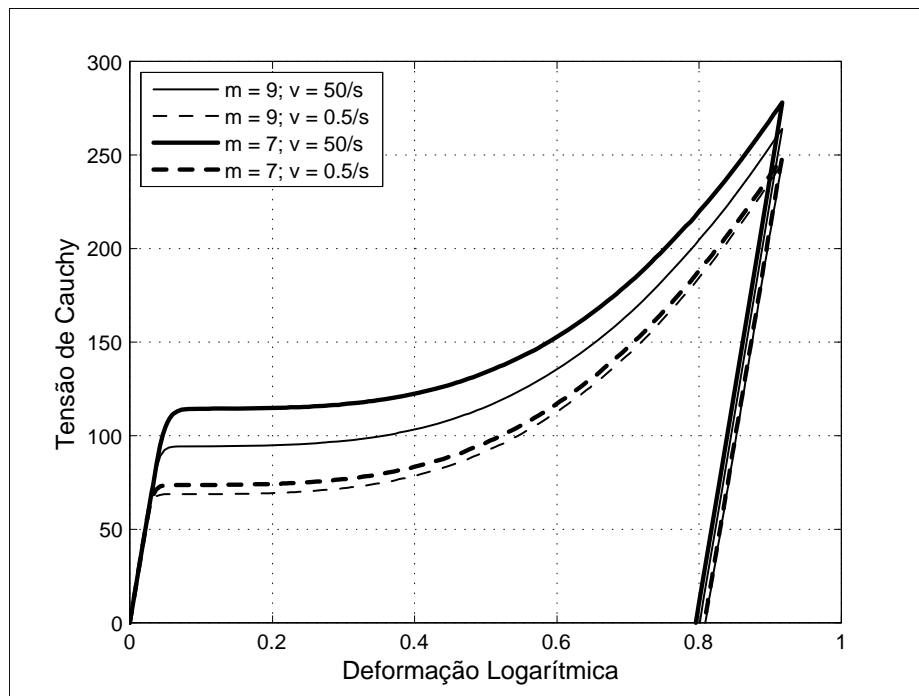


Figura 5.7: Efeito da mudança do parâmetro m na lei de Perzyna.

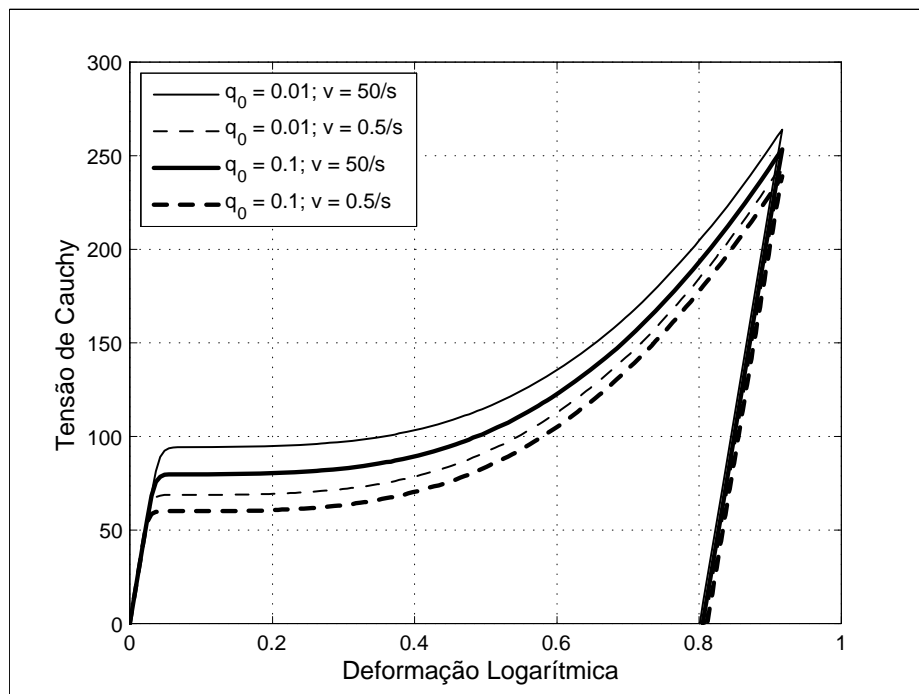


Figura 5.8: Efeito da mudança do parâmetro q_0 na lei de Perzyna.

φ^{ev} e e para o potencial viscoelástico ψ^v . Para o potencial plástico φ^p utilizou-se a função não linear generalizada com ($N = 1$) na parcela da função potencial, com parâmetros $\Sigma_0 = 10$, $\mu_1^p = 20$ e $\alpha_1^p = 4.5$. Para o potencial viscoplástico ψ^p , utilizou-se a lei de Perzyna, onde os parâmetros utilizados são $Y_0 = 5$, $m = 3$, $\dot{q}_0 = 5$. Como os potenciais $\varphi^{ep}, \varphi^{ev}$ e ψ^v utilizam o mesmo modelo de Ogden, é possível realizar novamente uma redução da quantidade de parâmetros, relacionando o comportamento de cada modelo segundo as relações

$$\varphi^{ev}(\epsilon^{ev}) = \beta \varphi^{ep}(\epsilon^{ep}) \quad (5.15)$$

$$\psi^v(d^v) = \tau \varphi^{ev}(\epsilon^{ev}) \quad (5.16)$$

O parâmetro adimensional $\beta = \mu_i^{ev} / \mu_i^{ep}$ é um fator de proporcionalidade entre a mola do modelo viscoelástico e a mola do modelo elasto-viscoplástico. O parâmetro $\tau = \eta_i^v / \mu_i^{ev}$, por sua vez, é a relação entre o componente elástico e o dissipativo do modelo viscoelástico. Os parâmetros de φ^{ep} são dados pela Tabela 5.4 e os parâmetros de φ^{ev} e ψ^v são obtidos pelos valores dos parâmetros adimensionais $\beta = 0.5$ e $\tau = 0.5$. Na Fig.5.9, apresentam-se as

Tabela 5.4: Parâmetros materiais para o potencial elástico do modelo elasto-viscoplástico φ^{ep} .

Potencial	Ogden			
Elástico	μ_i^{ep}	-131.925	196.588	49.294
φ^{ep}	α_i^{ep}	3.0559	1.3328	3.8812

contribuições no modelo visco-elastoplástico devido às parcelas de tensão do modelo elasto-viscoplástico e do modelo viscoelástico. O corpo foi alongado até $\lambda = 3$ com uma velocidade de deformação logarítmica constante de $0.5/s$ e descarregados com a mesma velocidade de deformação. Pode-se notar na Fig.5.9 que a tensão do modelo visco-elastoplástico é exatamente a soma das contribuições de tensão dos modelos elasto-viscoplástico e viscoelástico, como era esperado.

Na Figura 5.10, apresenta-se o comportamento do modelo visco-elastoplástico ao variar a velocidade de deformação. O corpo é novamente alongado até $\lambda = 3$ com uma velocidade de deformação logarítmica constante de $1/s$, $0.5/s$ e $0.1/s$ e descarregados com a mesma velocidade.

O modelo visco-elastoplástico apresenta-se como uma alternativa muito atrativa para aplicação em materiais poliméricos pois combina as características dos modelos viscoelástico e

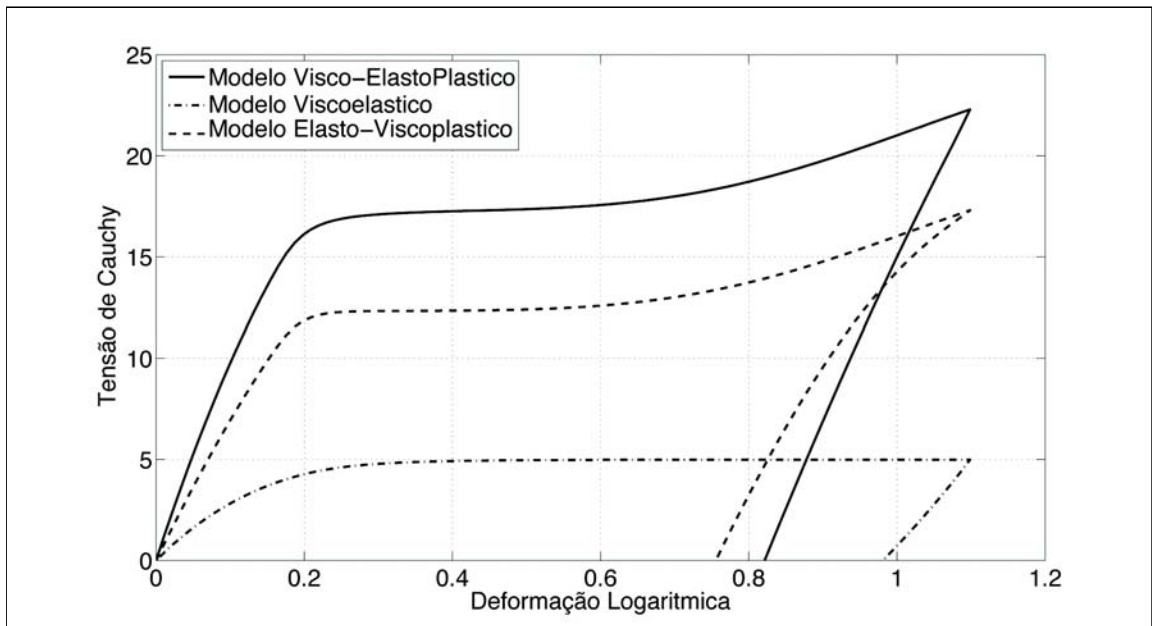


Figura 5.9: Teste de tração uniaxial. Contribuições no modelo visco-elastoplástico.

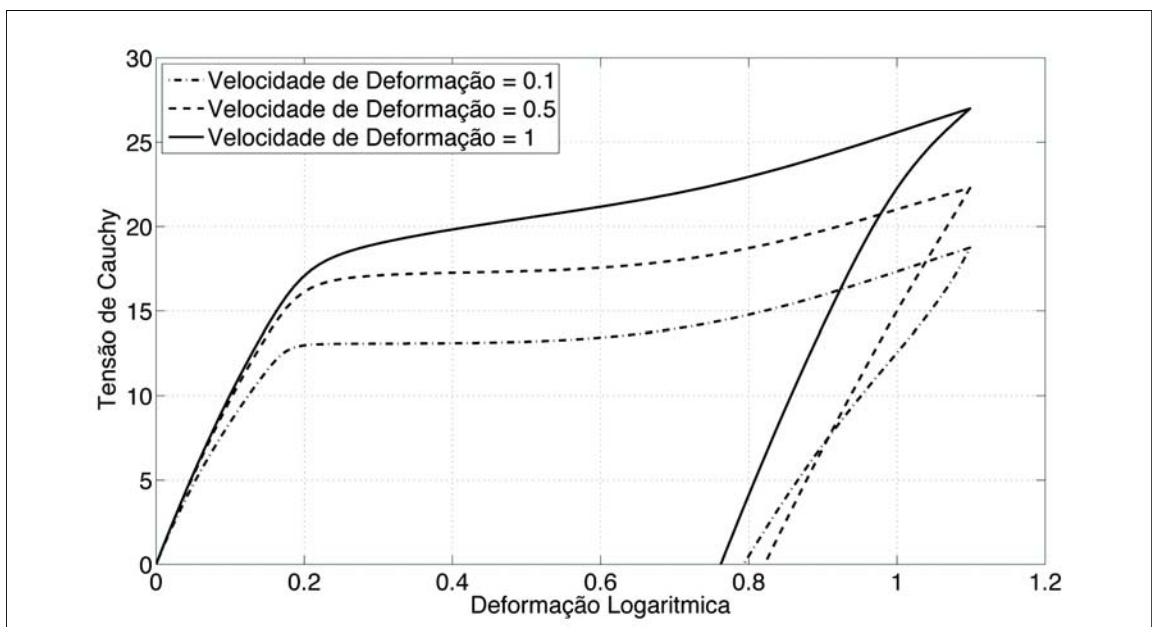


Figura 5.10: Teste de tração uniaxial do modelo visco-elastoplástico.

elasto-viscoplástico, apresentando dependência da velocidade tanto no regime elástico quanto no plástico.

5.2 Problema de cisalhamento

Apresentam-se a seguir dois exemplos analisando o cisalhamento de um cubo de dimensão unitária (Fig.5.11). Nestes casos admite-se novamente, por simplicidade, um comportamento perfeitamente isocórico ($J = 1$). O gradiente de deformações \mathbf{F} é dado por

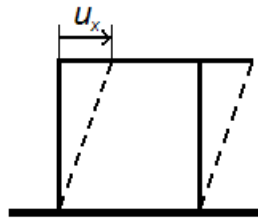


Figura 5.11: Problema de cisalhamento

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & u_x & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.17)$$

Estes exemplos são analisados nas mesmas condições dos Casos I e II de elasto-viscoplasticidade uniaxial apresentados na seção anterior. O parâmetros do material são os mesmo da Tabela 5.2. O cubo de dimensão unitária é deslocados até $u_x = 2$ com uma velocidade de deslocamento constante de $1/s$, $0.5/s$ e $0.1/s$. Os comportamentos a cisalhamento para o Caso I e o Caso II são apresentados respectivamente nas Fig.5.12 e Fig.5.13.

Em problemas de cisalhamento com grandes deformações, como este aqui apresentado, o tensor tensão torna-se mais complexo que nos problemas de pequenas deformações, possuindo termos não nulos em sua diagonal. Por este motivo foi escolhida a tensão equivalente de von Mises para ser apresentada nos gráficos a seguir.

As curvas de tensão-deformação do teste de cisalhamento do caso II, com amplitude de deslocamento de $u_x = 2$ e $u_x = 3$, são apresentadas respectivamente nas Fig.5.14 e Fig.5.15. Em ambos os casos foram aplicados dez ciclos de deformação de 0 a u_x e de volta a 0 com uma velocidade de deslocamento constante de $2/s$.

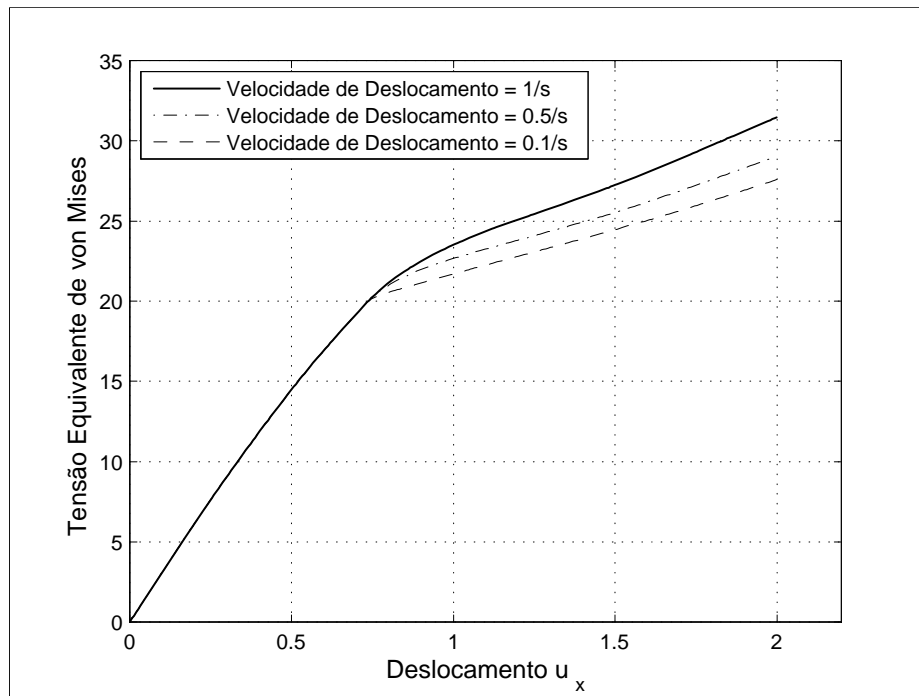


Figura 5.12: Teste de cisalhamento com potencial elástico de Ogden (CASO I).

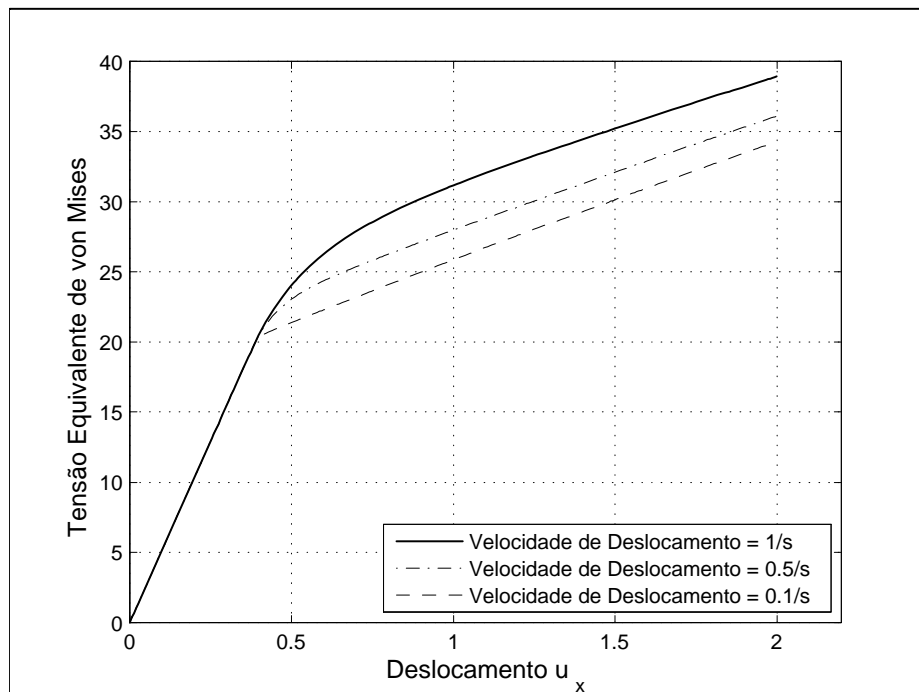


Figura 5.13: Teste de cisalhamento com potencial elástico de Hencky (CASO II).

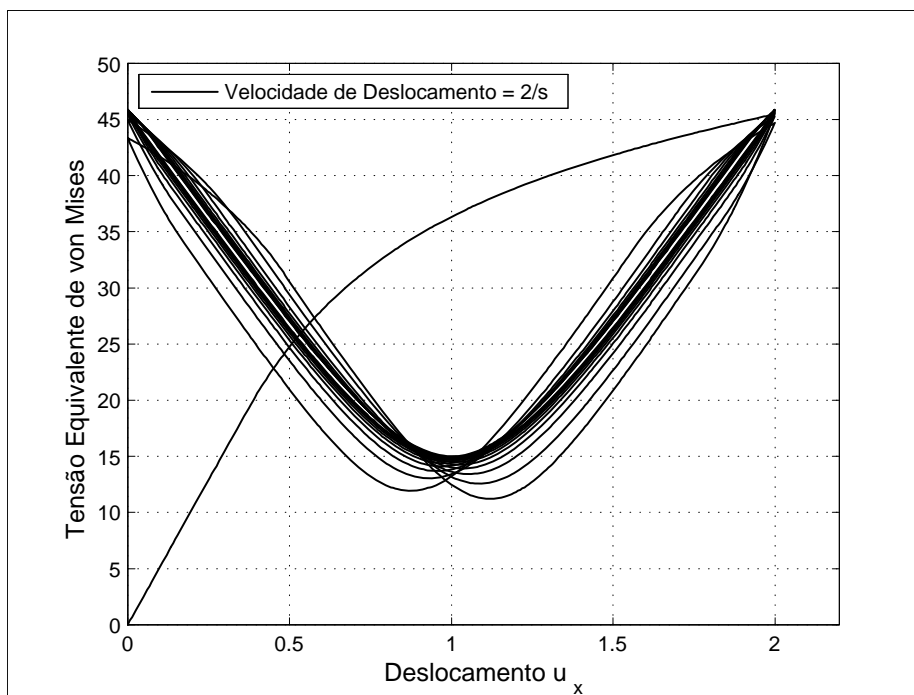


Figura 5.14: Ciclo de cisalhamento para deslocamento de $u_x = 2$.

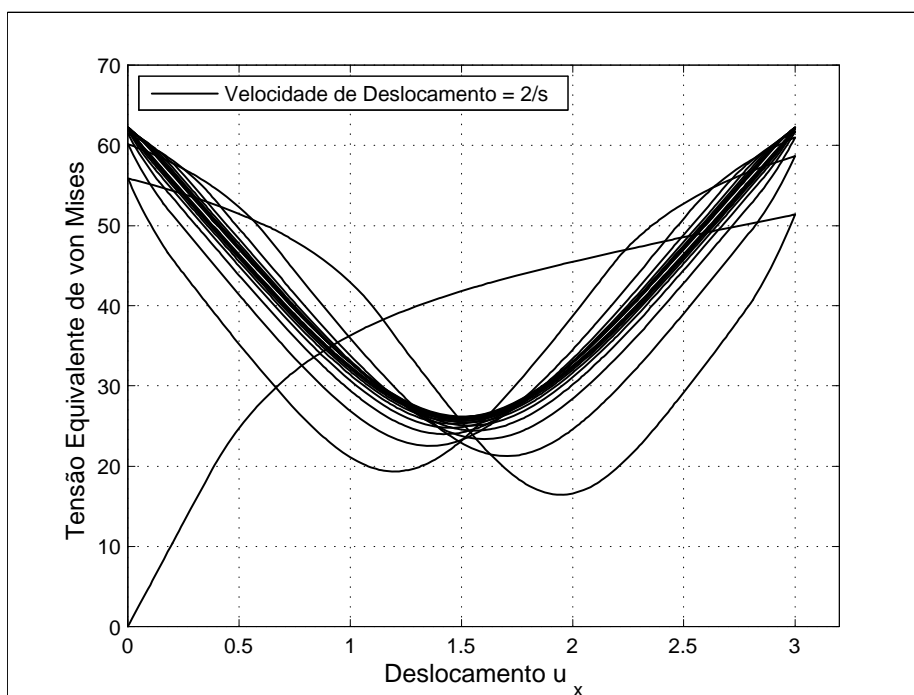


Figura 5.15: Ciclo de cisalhamento para deslocamento de $u_x = 3$.

Devido à plastificação e ao estado de tensões complexo, as representações gráficas da resposta não é de fácil interpretação, pois são feita com a tensão equivalente de von Mises. Nestas últimas pode-se notar que é possível representar um fenômeno de histerese do material.

5.3 Ensaio de tração

Com o objetivo de avaliar a formulação para casos tridimensionais, fez-se a implementação da formulação em um software de elementos finitos. Dentro de uma vasta gama de opções comerciais e educacionais, optou-se pela utilização do software METAFOR [27] que foi desenvolvido para aplicações acadêmicas e possui como grande vantagem o código aberto. O software é feito sobre uma base de linguagem C++ e já incorpora modelos de hiperelasticidade, tratamento de locking volumétrico, discretização da geometria e tratamento gráfico.

A geometria discretizada do corpo de prova segue a norma para ensaios de plástico ASTM D638-03 [29]. Os parâmetros de material são valores meramente ilustrativos, não tem relação com nenhum material específico e são tomados por conveniência para demonstrar o comportamento do modelo para os diferentes casos.

Motivado pela discussão proposta por [2] sobre o real comportamento da curva tensão-deformação dos polímeros (ver Capítulo 2), serão apresentados dois casos com o modelo visco-elastoplástico. Para o primeiro caso, utilizam-se parâmetros com os quais se obtém um comportamento viscoelástico, seguido de escoamento sem amolecimento, e posterior encruamento viscoplástico. No segundo caso, apresenta-se o comportamento com o amolecimento.

Em ambos casos utiliza-se o modelo de Ogden, com três parâmetros ($N = 3$), para os potenciais φ^{ep} , φ^{ev} e ψ^v , e para o potencial ψ^p a lei de Perzyna. Como os potenciais φ^{ep} , φ^{ev} e ψ^v utilizam o mesmo modelo de Ogden, novamente realiza-se a redução da quantidade de parâmetros apresentada precedentemente.

Para o primeiro caso, com comportamento de encruamento sem amolecimento, os parâmetros de φ^{ep} são dados pela Tabela 5.5 e os parâmetros de φ^{ev} e ψ^v são obtidos pelos valores dos parâmetros adimensionais $\beta = 0.02$ e $\tau = 50$. Para o potencial plástico φ^p utilizou-se a função não linear generalizada com um parâmetro ($N = 1$) na parcela da função potencial, onde os parâmetros são $\Sigma_0 = 10$, $\mu_1^p = 20$ e $\alpha_1^p = 4.5$. Na lei de Perzyna os parâmetros são $Y_0 = 5$, $m = 3$, $\dot{q}_0 = 5$. A curva de tensão-deformação para o problema uniaxial do

Tabela 5.5: Parâmetros materiais para o potencial elástico do modelo elasto-viscoplástico φ^{ep} .

Potencial	Ogden			
Elástico	μ_i^{ep}	-942.25	1404.2	352.1
φ^{ep}	α_i^{ep}	3.0559	1.3328	3.8812

primeiro caso em diferentes velocidades de deslocamento é apresentada na Fig.5.16, onde a representação gráfica da tensão é feita em relação ao deslocamento de um corpo uniaxial com comprimento unitário, ou seja, em relação a deformação de engenharia. O comportamento

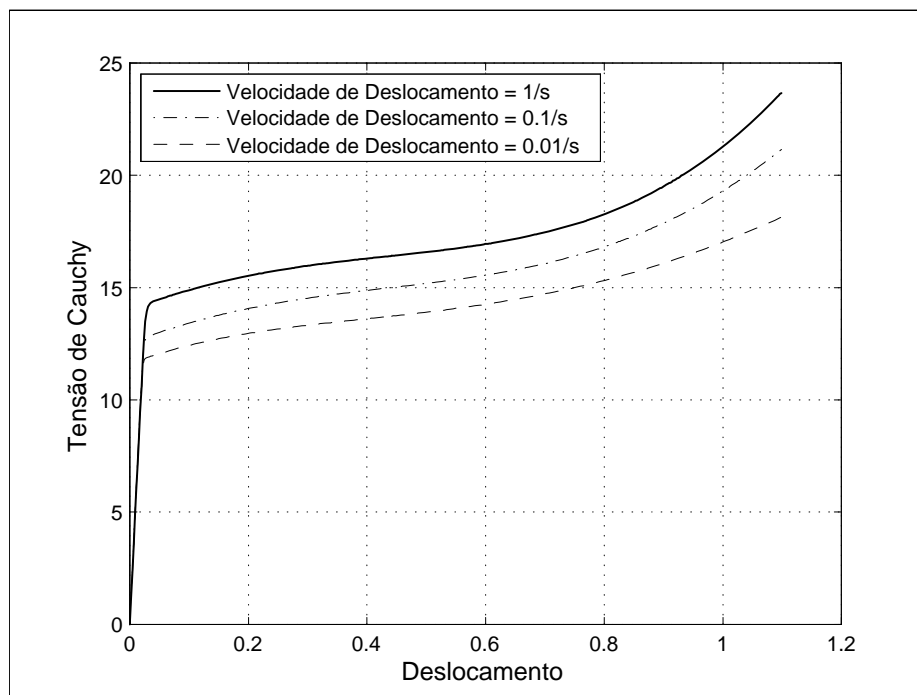


Figura 5.16: Ensaio de tração uniaxial para um comportamento de encruamento sem amolecimento.

tridimensional do corpo de prova submetido a tração é apresentado na Fig.5.17.

Para o segundo caso, com comportamento de encruamento com amolecimento, os parâmetros de φ^{ep} são dados pela Tabela 5.6 e os parâmetros de φ^{ev} e ψ^v são obtidos pelos valores dos parâmetros adimensionais $\beta = 0.15$ e $\tau = 0.5$. Para o potencial plástico φ^p utilizou-se a função não linear generalizada com três parâmetros ($N = 3$) na parcela da função potencial, onde os parâmetros são $\Sigma_0 = 10$, $\mu_1^p = -38.845$, $\mu_2^p = 38.084$, $\mu_3^p = 10000$, $\alpha_1^p = 1.1559$, $\alpha_2^p = 1.7328$ e $\alpha_3^p = 10.8812$. Na lei de Perzyna os parâmetros são $Y_0 = 5$, $m = 3$, $\dot{q}_0 = 5$. A

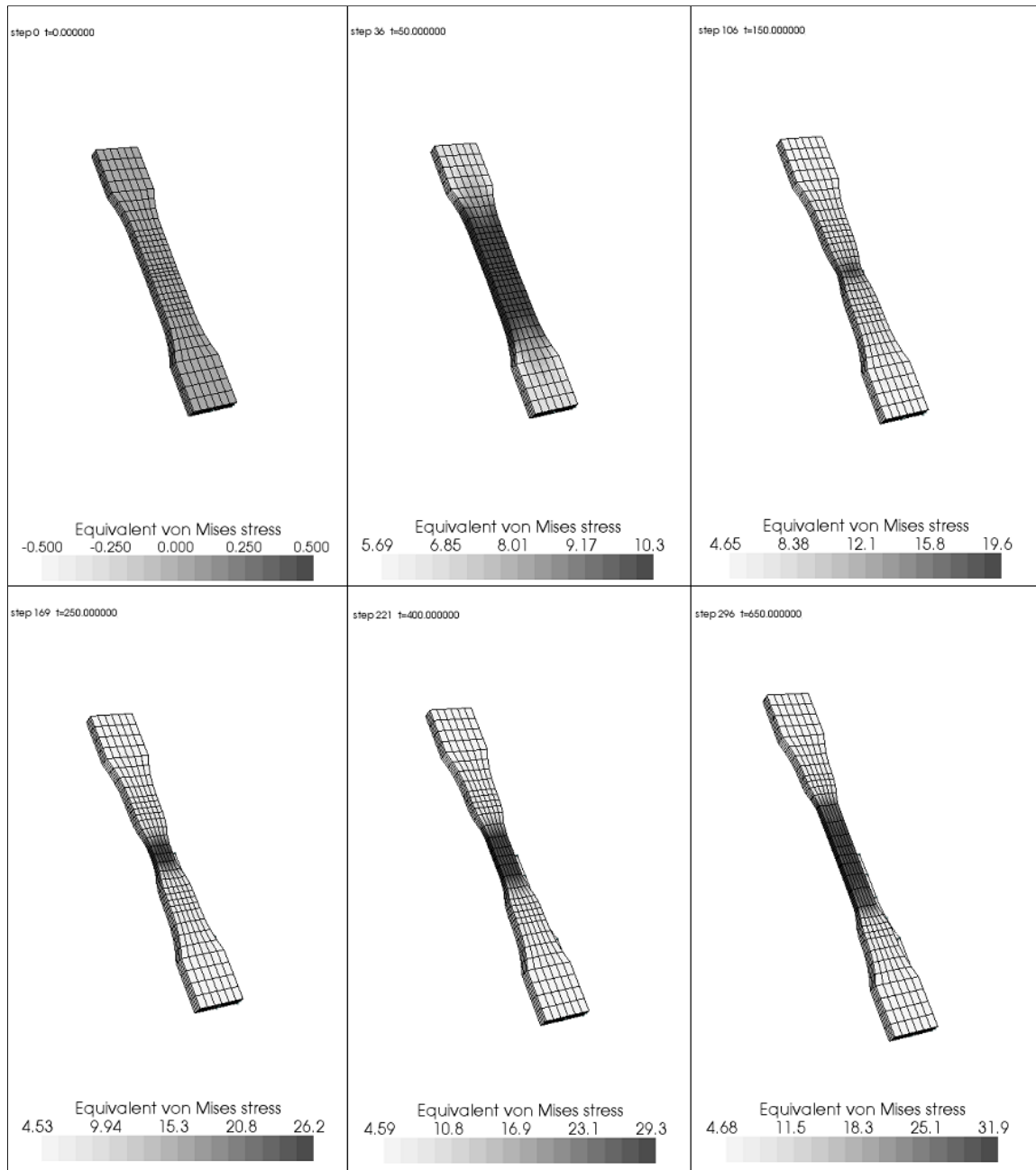


Figura 5.17: Comportamento do corpo de prova para o caso de encruamento sem amolecimento.

Tabela 5.6: Parâmetros materiais para φ^{ep} (com amolecimento).

Potencial	Ogden			
Elástico	μ_i^{ep}	-131.915	196.588	49.294
φ^{ep}	α_i^{ep}	3.0559	1.3328	3.8812

curva de tensão-deformação para o problema uniaxial do primeiro caso em diferentes velocidades de deslocamento é apresentada na Fig.5.18, onde novamente a representação gráfica da tensão é feita em relação ao deslocamento de um corpo uniaxial com comprimento unitário, ou seja, em relação a deformação de engenharia. O comportamento tridimensional do corpo

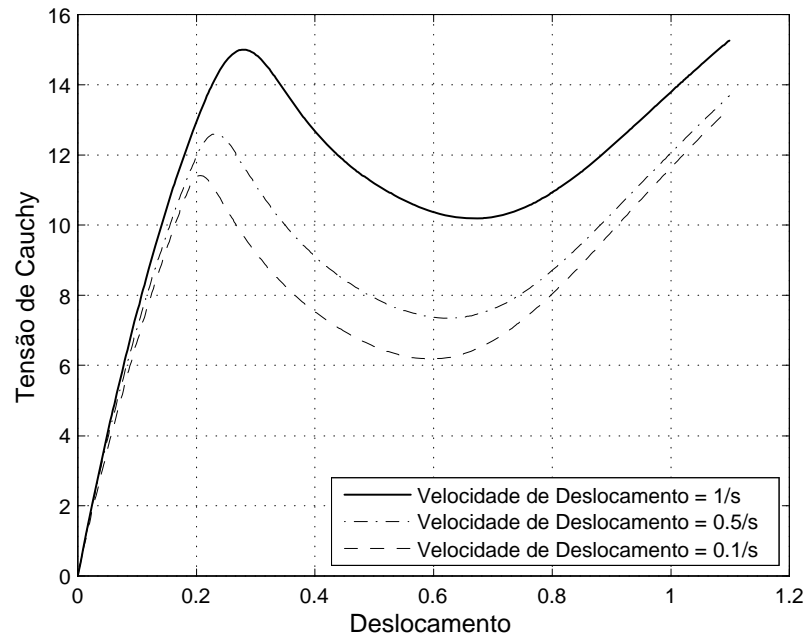


Figura 5.18: Ensaio de tração uniaxial para um comportamento de encruamento com amolecimento.

de prova submetido a tração é apresentado na Fig.5.19.

Em ambos comportamentos ocorre o fenômeno de estrição seguido de uma extensão da região plastificada. Observa-se que no caso apresentado do material com amolecimento, a seção transversal na região de estrição é levemente superior que no caso sem amolecimento. Note-se que materiais com encruamento quase linear, como o aço, a diminuição de área da região de estrição é, em geral, progressiva até o momento de ruptura. Assim, mais que a existência de amolecimento, nota-se que o *deslocamento* da estrição está mais vinculado ao endurecimento pronunciado frente a grandes deformações que à existência de amolecimento logo após o escoamento para deslocar o início da estrição a ponto desta extender-se a todo corpo. Assim, é possível que apenas o alto grau de encruamento, que encontra-se em altos valores de deformação, seja responsável por este fenômeno. Como o fenômeno ocorre em ambos os casos não é possível verificar se Brockman [2] está correto ao afirmar que na

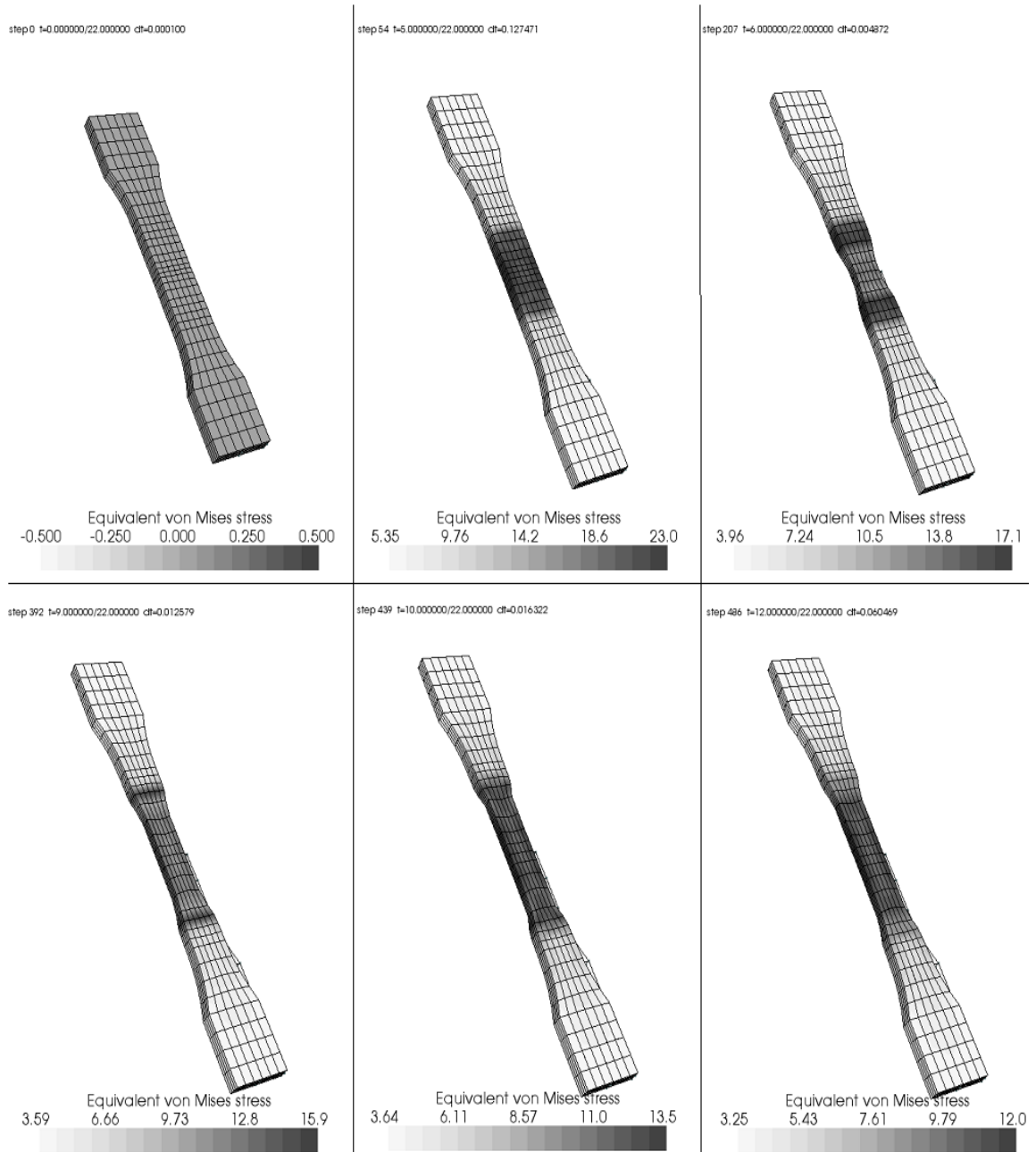


Figura 5.19: Comportamento do corpo de prova para o caso de encruamento com amolecimento.

realidade não acontece o amolecimento dos polímeros amorfos no estado vítreo, sendo este um erro de medida que acontece com mudança da posição da formação da estrição do corpo de prova.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho foram estudados e desenvolvidos um conjunto de modelos constitutivos capazes de simular o comportamento não linear de termoplásticos submetidos a deformações finitas a diferentes velocidades de deformação. A principal característica dos modelos aqui tratados é a sua estrutura variacional, isto é, o estado de tensão é obtido a partir das condições de minimização de uma função potencial definida para cada incremento de carga. Assim, mesmo envolvendo fenômenos dissipativos, a formulação se comporta como hiperelástica dentro de cada incremento de carga.

Devido à escolha de utilizar modelos com a mesma estrutura variacional com variáveis internas, decomposição espectral nas quantidades de medida de deformação e potenciais isotrópicos, foi possível combinar a dependência da velocidade de deformação tanto na parte elástica (viscoelasticidade) como na parcela de fluxo plástico (viscoplasticidade). Assim, pôde-se obter um modelo visco-elastoplástico da combinação (adição) do modelo viscoelástico de [5], que já possuía todas as características citadas acima, com uma adaptação do modelo elasto-viscoplástico proposto por [3], onde foram adicionadas as decomposições espectrais e o uso dos potenciais isotrópicos.

Através da possibilidade de construção dos potenciais, o modelo é capaz de reproduzir outros modelos encontrados em literatura através da escolha apropriada de seus potenciais elásticos e dissipativos. A formulação ainda permite atualizar as variáveis internas e a tensão através da solução de um sistema de equações não linear sem muito custo computacional pelo método de Newton e possui um tensor material que pode ser calculado analiticamente.

A formulação foi implementada no software acadêmico de elementos finitos METAFOR [27] para avaliação dos modelos em exemplos numéricos tridimensionais, apresentando re-

sultados satisfatórios. Esta foi validada com os resultados obtidos para casos de deformação simples (tração uniaxial/ cisalhamento). Durante a implementação e realização de exemplos numéricos foram encontradas algumas dificuldades no problema de minimização devido à não incorporação da restrição $\Delta q \geq 0$ no modelo elasto-viscoplástico. Os problemas ocorriam próximo ao ponto de início da plastificação, principalmente em problemas que envolviam cisalhamento. Este inconveniente foi resolvido com a incorporação de uma técnica (Apêndice C) para identificar *a priori* se o mínimo é alcançado para um valor $\Delta q > 0$ (existe plastificação) ou $\Delta q = 0$ (processo elástico).

Nos exemplos numéricos tridimensionais foram testados diversos potenciais e parâmetros, onde foi possível representar o típico fenômeno de estricção com propagação a todo o corpo de prova. Os mesmos bons resultados foram obtidos para os exemplos numéricos de tração uniaxial e cisalhamento, implementados no código GNU Octave, onde foi possível verificar a representatividade do típico comportamento de amolecimento e encruamento simplesmente alterando os potenciais e seus parâmetros. Porém, para uma correta representação de seu comportamento, é necessária uma caracterização dos parâmetros do material com uma curva de tensão-deformação experimental, tarefa fora do escopo do presente trabalho.

Um outro aspecto importante a ser ressaltado é que o presente trabalho limitou-se as expressões para modelos de encruamento isotrópico. Não há, porém, restrições teóricas para a incorporação de variáveis internas de encruamento cinemático. Por motivos de volume de trabalho, este assunto foi deixado fora do escopo da presente dissertação.

Para futuros desenvolvimentos, ainda é possível estudar uma melhor combinação dos componentes, incorporar dano, sensibilidade a pressão, extensão ao problema termomecânico e materiais não isotrópicos, onde a formulação *a priori* não apresentaria dificuldades matemáticas.

Referências Bibliográficas

- [1] P.A. Du Bois, S. Kolling, M. Kösters & T. Frank, *Material behaviour of polymers under impact loading*, International Symposium "Crashworthiness of Light-Weight Automotive Structures" Trondheim, Norway, 2004.
- [2] G.J. Frank, R.A. Brockman, *A viscoelastic–viscoplastic constitutive model for glassy polymers*, International Journal of Solids and Structures, Volume 38, Issues 30-31, July 2001, pp 5149-5164.
- [3] M. Ortiz, L. Stainier, *The variational formulation of viscoplastic constitutive updates*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 171, num. 3-4, 1999, pp 419-444.
- [4] R. Radovitzky, M. Ortiz, *Error estimation and adaptive meshing in strongly nonlinear dynamic problems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 172, 1999, pp 203-240.
- [5] E. Fancello, J. P. Ponthot, L. Stainier, *A variational formulation of constitutive models and updates in nonlinear finite viscoelasticity*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2006, 65, pp. 1831-1864.
- [6] E. Fancello, J.M. Vassoler, L. Stainier, *A variational framework for a set of hyperelastic-viscoplastic isotropic models*, Mechanics of solids in Brasil 2007.
- [7] J. Crawford, *Plastics Engineering*, 3rd ed., Oxford, Butterworth-Heinemann, 1998, 506pp.
- [8] S. Brückner, G. Allegra, M. Pegoraro, F. P. La Mantia, *Scienza e tecnologia dei materiali polimerici*, EdiSES s.r.l, Napoli, 2001.

-
- [9] Y. Duan, A. Saigal, R. Greif and M.A. Zimmerman, *Modeling Multiaxial Impact Behavior of a Glassy Polymer*, Materials Research Innovations, Volume. 7, pp 10-18, January 2003.
- [10] Y. Duan, A. Saigal, R. Greif, M. A. Zimmerman, *A uniform phenomenological constitutive model for glassy and semicrystalline polymers*, Polymer Engineering & Science, Volume 41, Issue 8, 2001, pp 1322-1328.
- [11] J. C. Simo, R. J. R. Hughes, *Computational Inelasticity*, Singer Verlag, Berlin, 1999, 392pp. ISBN 3540975209.
- [12] J.C. Simo, *On a fully three dimensional finite-strain viscoelastic damage model: formulation and computational aspects*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 60, 1987, pp 153 –173.
- [13] G. Holzapfel, J. Simo, *A new viscoelastic constitutive model for continuous media at finite thermomechanical changes*, International Journal of Solids and Structures, vol. 33, 1996, pp 3019-3034.
- [14] J. Bonet, *Large viscoelastic constitutive models*. International Journal of Solids and Structures, vol 38, 2001, pp 2953-2968.
- [15] J. Lemaitre, J.-L. Chaboche, *Mechanics of solid materials*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994, 556pp. ISBN 0521477581.
- [16] E. A. de Souza Neto, D. Peric, D.R.J. Owen, *Computational Methods for Plasticity*, in press.
- [17] T. Belytschko, W. K. Liu, B. Moran, *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*, J. Wiley & Sons, New York, 2000, 600pp. ISBN 0471987735.
- [18] G. Holzapfel, *Non Linear Solid Mechanics*, Wiley, 2000.
- [19] L. Stainier, *Une formulation variationnelle des algorithmes de calcul des contraintes pour les modèles élastoviscoplastiques et viscoélastiques en grandes transformations*. 6ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens, France, 2003.

- [20] M. Ortiz, Q. Yang, L. Stainier, *A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 74(2), 2006, pp 401–424.
- [21] K. Weinberg, A. Mota, M. Ortiz, *A variational constitutive model for porous metal plasticity*, Computational Mechanics, Volume 37, Issue 2, pp.142-152
- [22] G. Dean, B. Read, *Modeling the behaviour of plastics for design under impact*, Polymer Testing, Volume 20, Issue 6, 2001, pp 677-683.
- [23] G. Dean, L. Wright, *An Evaluation of the Use of Finite Element Analysis for Predicting the Deformation of Plastics under Impact Loading*, Polymer Testing, Volume 22, Issue 6, September 2003, pp 625-631.
- [24] M. Ortiz, E.A. Repetto, *Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999, 47, pp 397-462.
- [25] M. Ortiz, J.B. Martin, *Symmetry-preserving return mapping algorithms and incrementally extremal paths: a unification of concepts*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1989, 28, pp 1839-1853.
- [26] J. W. Eaton, *GNU Octave Manual*, Network Theory Limited, 2002.
- [27] Dépt. AéroSpatiale, Mécanique et Matériaux (ASMA/LTAS-MC&T), Université de Liege, Belgium. METAFOR – Software for thermo-mechanical analysis of structures in large strain regime. http://garfield.ltas.ulg.ac.be/oo_meta/.
- [28] E. Fancello, J. P. Ponthot, L. Vigneron, L. Stainier, *A viscoelastic Formulation for finite strains: Application to brain soft tissue*, XXVII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Brazil, 2006.
- [29] ASTM D638: *Standart Test Method for Tensile Properties of plastics*.

Apêndice A

Modelo viscoelástico

A.1 Minimização de Ψ em relação a \mathbf{M}_a^v

O argumento que minimiza $\Psi(\Delta q_j^v, \mathbf{M}_j^v)$ deve ser tal que $\Delta t \mathbf{D}^v = \sum_{j=1}^3 \Delta q_j^v \mathbf{M}_j^v$ tenha traço nulo e sua decomposição seja a soma de tensores ortonormais simétricos. Isto significa que

$$\Delta q_j^v \in K_Q = \{p_j \in \mathbb{R}^1 : p_1 + p_2 + p_3 = 0\} \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{M}_j^v \in K_M = \{\mathbf{N}_j \in Sym : \mathbf{N}_j \cdot \mathbf{N}_j = 1, \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j\} \quad (\text{A.2})$$

Assim, a minimização restrita pode ser calculada utilizando a função Lagrangeana, que adiciona ao potencial original as restrições de igualdade:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\epsilon_j^e, d_j^v, \beta) &= \Delta \varphi^e(\epsilon_j^e) + \Delta t \psi(d_j^v) \\ &+ \lambda_1 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_a^v - 1) + \lambda_2 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_b^v) + \lambda_3 (\mathbf{M}_a^v \cdot \mathbf{M}_c^v) \\ &+ \lambda_4 (\mathbf{M}_b^v \cdot \mathbf{M}_b^v - 1) + \lambda_5 (\mathbf{M}_b^v \cdot \mathbf{M}_c^v) + \lambda_6 (\mathbf{M}_c^v \cdot \mathbf{M}_c^v - 1) \\ &+ \beta (d_a^v + d_b^v + d_c^v) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dado que d_j^v não depende de \mathbf{M}_j^v , as condições necessárias de otimalidade em relação à variável \mathbf{M}_a são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}_a^v} [\delta \mathbf{M}] &= \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_a^v} \cdot \delta \mathbf{M} + 2\lambda_1 (\mathbf{M}_a^v \cdot \delta \mathbf{M}) + \lambda_2 (\mathbf{M}_b^v \cdot \delta \mathbf{M}) + \lambda_3 (\mathbf{M}_c^v \cdot \delta \mathbf{M}) = 0 \quad (\text{A.4}) \\ &\forall \delta \mathbf{M} \in Sym \end{aligned}$$

Tomando $\delta\mathbf{M}$ igual a $\mathbf{M}_a^v, \mathbf{M}_b^v, \mathbf{M}_c^v$ respectivamente, obtemos as equações

$$2\lambda_1 = -\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_a^v} \cdot \mathbf{M}_a^v \quad (\text{A.5})$$

$$\lambda_2 = -\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_b^v} \cdot \mathbf{M}_b^v \quad (\text{A.6})$$

$$\lambda_3 = -\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_c^v} \cdot \mathbf{M}_c^v \quad (\text{A.7})$$

Substituindo estas em (A.4), tem-se

$$\left[\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_a^v} - \left(\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_a^v} \cdot \mathbf{M}_a^v \right) \mathbf{M}_a^v - \left(\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_b^v} \cdot \mathbf{M}_b^v \right) \mathbf{M}_b^v - \left(\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_c^v} \cdot \mathbf{M}_c^v \right) \mathbf{M}_c^v \right] \cdot \delta\mathbf{M} = 0 \quad (\text{A.8})$$

$\forall \delta\mathbf{M} \in \text{Sym}$

Recordando as relações

$$\boldsymbol{\epsilon}^e = \sum_{j=1}^3 \epsilon_j^e \mathbf{E}_j^e = \boldsymbol{\epsilon}^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^v, \quad \frac{\partial\epsilon_a^e}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^e} = \mathbf{E}_a^e \quad (\text{A.9})$$

obtem-se que

$$\frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\mathbf{M}_a^v} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} \frac{\partial\epsilon_j^e}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^e} \frac{\partial\boldsymbol{\epsilon}^e}{\partial\mathbf{M}_a^v} = - \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e \right) \Delta q_a^v \quad (\text{A.10})$$

Substituindo este último resultado em (A.8),

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_a^v) \mathbf{M}_a^v - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_b^v) \mathbf{M}_b^v + \right. \\ & \left. - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial\Delta\varphi^e}{\partial\epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_c^v) \mathbf{M}_c^v \right] \cdot \delta\mathbf{M} = 0 \quad (\text{A.11}) \\ & \forall \delta\mathbf{M} \in \text{Sym} \end{aligned}$$

Esta última equação é satisfeita se $\mathbf{E}_j^e = \mathbf{M}_j^v$, que é a condição necessária e suficiente para haver colinearidade entre os tensores \mathbf{C}^e e \mathbf{D}^v .

A.2 Minimização de Ψ em relação a Δq_a^v

Uma vez que a colinearidade entre os tensores \mathbf{C}^e e \mathbf{D}^v é verificada, pode-se escrever

$$\epsilon_i^e = \ln(c_i^e)/2 = \epsilon_i^{pr} - \Delta q_i^v \quad (\text{A.12})$$

Neste caso, é equivalente minimizar Ψ em relação a Δq_i^v ou d_i^v . Da função Lagrangeana obtêm-se

$$\begin{aligned} r_i &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta q_i^v} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \epsilon_j^e} \frac{\partial \epsilon_j^e}{\partial \Delta q_i^v} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \epsilon_i^e} = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} + \Delta t \frac{\partial \psi}{\partial d_i^v} \frac{\partial d_i^v}{\partial \epsilon_i^e} + \beta \\ &= \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} - \frac{\partial \psi}{\partial d_i^v} + \beta = 0, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$r_4 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \beta} = d_1^v + d_2^v + d_3^v = \epsilon_1^e + \epsilon_2^e + \epsilon_3^e = \Delta q_1^v + \Delta q_2^v + \Delta q_3^v = 0 \quad (\text{A.14})$$

que fornece um conjunto de equações não lineares para $\Delta q_1^v, \Delta q_2^v, \Delta q_3^v$:

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} - \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v} + \beta = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (\text{A.15})$$

$$\Delta q_1^v + \Delta q_2^v + \Delta q_3^v = 0, \quad (\text{A.16})$$

onde β é um Multiplicador Lagrangiano e $\epsilon_j^e = \ln(c_j^e)/2$ são autovalores de ϵ_{n+1}^e . Equivalentemente, devido a relação linear $\epsilon_j^e = \epsilon_j^{pr} - \Delta q_j^v$, as condições de otimalidade (A.15) e (A.16) podem ser reescritas como funções não lineares de $\epsilon_1^e, \epsilon_2^e, \epsilon_3^e$:

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} - \frac{\partial \psi}{\partial d_j^v} + \beta = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (\text{A.17})$$

$$\epsilon_1^e + \epsilon_2^e + \epsilon_3^e = 0 \quad (\text{A.18})$$

A.3 Derivadas de φ e φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$

A derivada de φ em relação a $\hat{\mathbf{C}}$ é dada por

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} \frac{\partial c_j}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial c_j} \mathbf{E}_j \quad (\text{A.19})$$

Para calcular a derivada de φ^e usa-se a relação

$$\hat{\mathbf{C}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}^{prT} \hat{\mathbf{F}}^{pr} = \mathbf{F}_n^{v-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{v-1} \quad (\text{A.20})$$

Usando a regra da cadeia, obtêm-se ([5])

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{v-1} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \mathbf{F}_n^{v-T} \quad (\text{A.21})$$

Falta assim calcular

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \frac{\partial c_j^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \quad (\text{A.22})$$

de onde obtêm-se finalmente

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{v-1} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{v-T}. \quad (\text{A.23})$$

A.4 Derivada de ϵ_i^e em relação a ϵ_i^{pr}

A relação $\epsilon_i^e(\epsilon_1^{pr}, \epsilon_2^{pr}, \epsilon_3^{pr})$ é obtida do sistema não linear

$$r_i = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} - \frac{\partial \psi}{\partial d_i^v} + \beta = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A.24})$$

$$r_4 = \epsilon_1^e + \epsilon_2^e + \epsilon_3^e = 0. \quad (\text{A.25})$$

Assim, a derivação de cada membro é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial r_i}{\partial \epsilon_j^{pr}} &= \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial d_i^v \partial d_i^v} \frac{d(d_i^v)}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \\ &= \varphi_{,ii}^e \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} - \psi_{,ii} \left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta t} \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} \right) + \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} = 0, \\ &= \left(\varphi_{,ii}^e + \frac{\psi_{,ii}}{\Delta t} \right) \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} - \left(\psi_{,ii} \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} - \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} \right) = 0, \\ &= K_{ii} \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} - \left(\psi_{,ii} \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} - \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} \right) = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

$$\frac{\partial r_4}{\partial \epsilon_j^{pr}} = \frac{d\epsilon_1^e}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\epsilon_2^e}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\epsilon_3^e}{d\epsilon_j^{pr}} = 0. \quad (\text{A.27})$$

onde utilizou-se a notação

$$\psi_{,i} = \frac{\partial \psi}{\partial d_i^v}, \quad \varphi_{,i} = \frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon_i^e}, \quad K_{ii} = \varphi_{,ii} + \frac{1}{\Delta t} \psi_{,ii} \quad (\text{A.28})$$

Isolando $\frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}}$ de (A.26) e substituindo em (A.27), obtêm-se os resultados

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon_i^e}{\partial \epsilon_j^{pr}} &= \left(\psi_{,ii} \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} - \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} \right) \frac{1}{K_{ii}}, \quad (\text{A.29}) \\ \sum_{i=1}^3 \psi_{,ii} \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} K_{ii} - \sum_{i=1}^3 \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} \frac{1}{K_{ii}} &= 0, \\ \frac{\psi_{,jj}}{\Delta t K_{jj}} &= \frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{K_{ii}} = 0, \end{aligned}$$

concluindo que

$$\frac{d\beta}{d\epsilon_j^{pr}} = \frac{\psi_{,jj}}{\Delta t K_{jj}} \left(\sum_{s=1}^3 \frac{1}{K_{ss}} \right)^{-1} \quad (\text{A.30})$$

Finalmente, substituindo (A.30) em (A.29), se chega a expressão (A.31).

$$\frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} = \frac{\psi_{,ii}}{\Delta t K_{ii}} \delta_{ij} - \frac{\psi_{,jj}}{\Delta t K_{jj} K_{ii}} \left(\sum_{s=1}^3 \frac{1}{K_{ss}} \right)^{-1}. \quad (\text{A.31})$$

Apêndice B

Modelo elasto-viscoplástico

B.1 Minimização de Ψ em relação a \mathbf{M}_a

Seguem-se aqui os mesmos passos que no Apêndice A. O único termo de $\Psi(\Delta q, q_j, \mathbf{M}_j)$ que depende de \mathbf{M}_j é potencial elástico $\varphi^e(\epsilon_j^e)$ através do tensor elástico

$$\boldsymbol{\epsilon}^e = \sum_{j=1}^3 \epsilon_j^e \mathbf{E}_j^e = \boldsymbol{\epsilon}^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^p = \boldsymbol{\epsilon}^{pr} - \Delta q \sum_{j=1}^3 q_j \mathbf{M}_j; \quad \frac{\partial \epsilon_a^e}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^e} = \mathbf{E}_a^e, \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{M}_a} = \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_a} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{\partial \epsilon_j^e}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^e} \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}^e}{\partial \mathbf{M}_a} = - \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e \right) \Delta q q_a \quad (\text{B.2})$$

Substituindo (B.1) e (B.2) em (A.8), obtém-se

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_a) \mathbf{M}_a + \right. \\ & \left. - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_b) \mathbf{M}_b - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_c) \mathbf{M}_c \right] \cdot \delta \mathbf{M} = 0 \quad (\text{B.3}) \\ & \forall \delta \mathbf{M} \in Sym \end{aligned}$$

A equação (B.3) é satisfeita se $\mathbf{E}_j^e = \mathbf{M}_j$, verificando a hipótese de colineariedade suposta anteriormente.

B.2 Minimização de Ψ em relação a q_a e Δq

Novamente, são seguidos passos similares do Apêndice A. Lembra-se a relação

$$\epsilon_j^e = \ln(c_j^e)/2 = \epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j$$

As condições de otimalidade de primeira ordem são obtidas pelas derivadas parciais em relação às variáveis q_i , Δq , β_1 e β_2

$$r_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \frac{\partial \epsilon_i^e}{\partial q_i} + \beta_1 + 2\beta_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.4})$$

$$r_4 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta q} = \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_1^e} \frac{\partial \epsilon_1^e}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_2^e} \frac{\partial \epsilon_2^e}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_3^e} \frac{\partial \epsilon_3^e}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \Delta t \frac{\partial \psi}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$r_5 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \beta_1} = q_1 + q_2 + q_3 = 0 \quad (\text{B.6})$$

$$r_6 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \beta_2} = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 3/2 \quad (\text{B.7})$$

Operando com as equações acima, obtêm-se as seguintes condições de otimalidade de primeira ordem

$$r_i = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.8})$$

$$r_4 = -\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} q_j + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \psi}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (\text{B.9})$$

$$r_5 = \sum_{j=1}^3 q_j = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$r_6 = \sum_{j=1}^3 q_j^2 - 3/2 = 0 \quad (\text{B.11})$$

Em ambos os casos, o método de Newton é usado para encontrar as raízes $\bar{\mathbf{x}} = \{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\}$ usando a fórmula recursiva

$$\bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k - \mathbf{K}^{k-1} \mathbf{r}^k. \quad (\text{B.12})$$

ou

$$\mathbf{K}^k \Delta \bar{\mathbf{x}} = -\mathbf{r}^k, \quad \bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k + \Delta \bar{\mathbf{x}}. \quad (\text{B.13})$$

Simplificações podem ser feitas supondo que

$$\varphi^e(\epsilon_i^e) = \sum_{i=1}^3 w_i^e(\epsilon_i^e) \quad (\text{B.14})$$

Neste caso, temos:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial q_1} & \frac{\partial r_1}{\partial q_2} & \frac{\partial r_1}{\partial q_3} & \frac{\partial r_1}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_2}{\partial q_1} & \frac{\partial r_2}{\partial q_2} & \frac{\partial r_2}{\partial q_3} & \frac{\partial r_2}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_3}{\partial q_1} & \frac{\partial r_3}{\partial q_2} & \frac{\partial r_3}{\partial q_3} & \frac{\partial r_3}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_4}{\partial q_1} & \frac{\partial r_4}{\partial q_2} & \frac{\partial r_4}{\partial q_3} & \frac{\partial r_4}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_5}{\partial q_1} & \frac{\partial r_5}{\partial q_2} & \frac{\partial r_5}{\partial q_3} & \frac{\partial r_5}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_6}{\partial q_1} & \frac{\partial r_6}{\partial q_2} & \frac{\partial r_6}{\partial q_3} & \frac{\partial r_6}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

$$K_{ii} = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} \Delta q^2 + 2\beta_2 \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.16})$$

$$H_i = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} q_i \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.17})$$

$$H_4 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} \quad (\text{B.18})$$

B.3 Derivada de φ^e em relação a $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$

Para calcular a derivada de φ^e usa-se a relação

$$\hat{\mathbf{C}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}^{prT} \hat{\mathbf{F}}^{pr} = \mathbf{F}_n^{p-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (\text{B.19})$$

assim a derivada de φ^e é dada por (B.23), onde:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} [\delta \mathbf{C}] &= \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} [\delta \mathbf{C}] \\ &= \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \cdot \mathbf{F}_n^{p-T} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} [\delta \mathbf{C}] \right) \mathbf{F}_n^{p-1} = \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \cdot \mathbf{F}_n^{p-T} \frac{1}{2} (\delta \mathbf{C} + \delta \mathbf{C}^T) \mathbf{F}_n^{p-1} \\ &= \mathbf{F}_n^{p-1} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \mathbf{F}_n^{p-T} \cdot \delta \mathbf{C} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{p-1} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \mathbf{F}_n^{p-T}, \quad (\text{B.21})$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \frac{\partial c_j^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr}. \quad (\text{B.22})$$

$$\frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial c_j^{pr}} \frac{\partial c_j^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{p-1} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \mathbf{E}_j^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{p-T}. \quad (\text{B.23})$$

B.4 Derivada de ϵ_i^e em relação a ϵ_i^{pr}

A derivada total de φ^e em relação a ϵ_j^{pr} deve ser calculada a partir do sistema não linear

$$-\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.24})$$

$$-\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_j^e} q_j + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \psi}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (\text{B.25})$$

$$\sum_{j=1}^3 q_j = 0 \quad (\text{B.26})$$

$$\sum_{j=1}^3 q_j^2 - 3/2 = 0 \quad (\text{B.27})$$

Admitindo por simplicidade que $\varphi^e(\epsilon_i^e) = \sum_{i=1}^3 w_i^e(\epsilon_i^e)$ e observando que

$$\epsilon_i^e = \epsilon_i^{pr} - \Delta q q_i \Rightarrow \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} = \delta_{ij} - \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} q_i - \Delta q \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} \quad (\text{B.28})$$

obtêm-se os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i}{d\epsilon_j^{pr}} &= -\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_j^e} \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} + 2\beta_2 \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + 2q_i \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \\ &= -\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_j^e} \left(\delta_{ij} - \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} q_i - \Delta q \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} \right) \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} + 2\beta_2 \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + 2q_i \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \\ &= (\varphi_{,ii}^e \Delta q^2 + 2\beta_2) \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + (\varphi_{,ii}^e q_i \Delta q - \varphi_{,i}^e) \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} + 2q_i \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} - \varphi_{,ii}^e \delta_{ij} \Delta q = 0 \\ &\Rightarrow K_{ii} \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + H_i \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} + \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} + 2q_i \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} = \varphi_{,ii}^e \delta_{ij} \Delta q, \quad i, j = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

$$\begin{aligned} \frac{dr_4}{d\epsilon_j^{pr}} &= -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_j^e} \frac{d\epsilon_i^e}{d\epsilon_j^{pr}} q_i - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \dot{q}^2} \frac{\partial \dot{q}}{\partial \Delta q} \right) \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \\ &= -\sum_{i=1}^3 \varphi_{,ii}^e \left(\delta_{ij} - \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} q_i - \Delta q \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} \right) q_i - \sum_{i=1}^3 \varphi_{,i}^e \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \dot{q}^2} \right) \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \\ &= -\varphi_{,jj}^e q_j + \sum_{i=1}^3 (\varphi_{,ii}^e \Delta q q_i - \varphi_{,i}^e) \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + \left(\sum_{i=1}^3 \varphi_{,ii}^e q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \dot{q}^2} \right) \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \\ &\Rightarrow \sum_{i=1}^3 H_i \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} + H_4 \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} = \varphi_{,jj}^e q_j, \quad i, j = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

$$\frac{dr_5}{d\epsilon_j^{pr}} = \sum_{i=1}^3 \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \quad (\text{B.31})$$

$$\frac{dr_6}{d\epsilon_j^{pr}} = \sum_{i=1}^3 2q_i \frac{dq_i}{d\epsilon_j^{pr}} = 0 \quad (\text{B.32})$$

ou em notação compacta:

$$\mathbf{K}\mathbf{x}_j = \mathbf{y}_j \quad (\text{B.33})$$

$$\mathbf{x}_j = \left[\frac{dq_1^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{dq_2^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{dq_3^e}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\Delta q}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\beta_1}{d\epsilon_j^{pr}} \quad \frac{d\beta_2}{d\epsilon_j^{pr}} \right]^T \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbf{y}_j = [\varphi_{,11}^e \delta_{1j} \Delta q \quad \varphi_{,22}^e \delta_{2j} \Delta q \quad \varphi_{,33}^e \delta_{3j} \Delta q \quad \varphi_{,jj}^e q_j \quad 0 \quad 0]^T \quad (\text{B.35})$$

onde \mathbf{K} é a matriz tangente já obtida anteriormente,

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.36})$$

$$K_{ii} = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} \Delta q^2 + 2\beta_2 \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.37})$$

$$H_i = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} q_i \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.38})$$

$$H_4 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \dot{q}^2} \quad (\text{B.39})$$

A solução do sistema (B.33) para $(j = 1, 2, 3)$ resulta o vetor \mathbf{x}_j , que por sua vez resolve $\frac{d\epsilon_j^e}{d\epsilon_j^{pr}}$ em (B.28).

Apêndice C

Tópicos na minimização do modelo elasto-viscoplástico

Deve-se notar que no Lagrangeano definido no Apêndice B, a restrição $\Delta q \geq 0$ não foi incorporada e admite-se que o mínimo é atingido para um valor Δq positivo, isto é, um ponto interior a esta restrição. Neste apêndice apresenta-se a técnica utilizada para identificar *a priori* se o mínimo é alcançado para um valor $\Delta q > 0$ (existe plastificação), ou este é atingido para $\Delta q = 0$ (processo elástico).

Quando a única variável interna é o incremento plástico Δq [3] basta verificar se a derivada do funcional Ψ em relação a esta variável é negativa, o que garante um mínimo local para $\Delta q > 0$ (incremento plástico). Caso contrário, o mínimo local é atingido para $\Delta q = 0$, garantindo um incremento elástico. O problema neste caso é que as novas variáveis q_i podem tornar a busca mais complexa. De fato, foi observado que se a derivada parcial de $\partial\Psi/\partial\Delta q$ é avaliada para uma terna arbitrária q_i , podem se atingir mínimos locais que não correspondem à solução do problema. Uma representação esquemática desta situação é apresentada na Figura C.1 e C.2. Por simplicidade o potencial Ψ é apresentado dependente de duas variáveis Δq e q_i . Nota-se que a região $\Delta q = 0$ apresenta dois segmentos que são minimizadores locais do potencial, mas não são solução do mínimo desejado, representado pelo ponto interior a região viável.

A técnica aqui utilizada para driblar este inconveniente consiste em calcular $\partial\Psi/\partial\Delta q$ sobre a curva tal que $\partial\Psi/\partial q_i = 0$, isto é, que minimiza o potencial em relação às variáveis q_i . A seguir mostra-se em detalhes o procedimento.

A colinearidade entre $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^p traz como consequência que

$$\epsilon_j^e = \ln(c_j^e)/2 = \epsilon_j^{pr} - \Delta q q_j$$

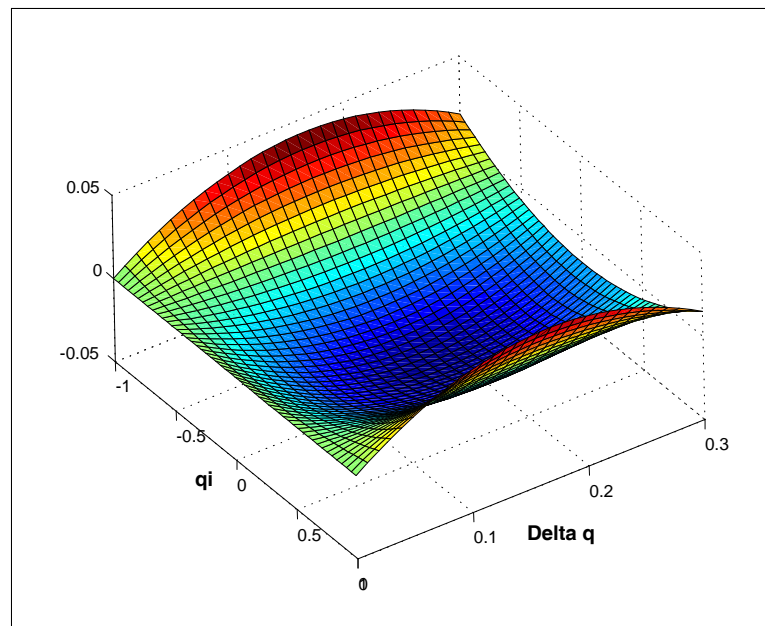


Figura C.1: Representação esquemática do potencial Ψ .

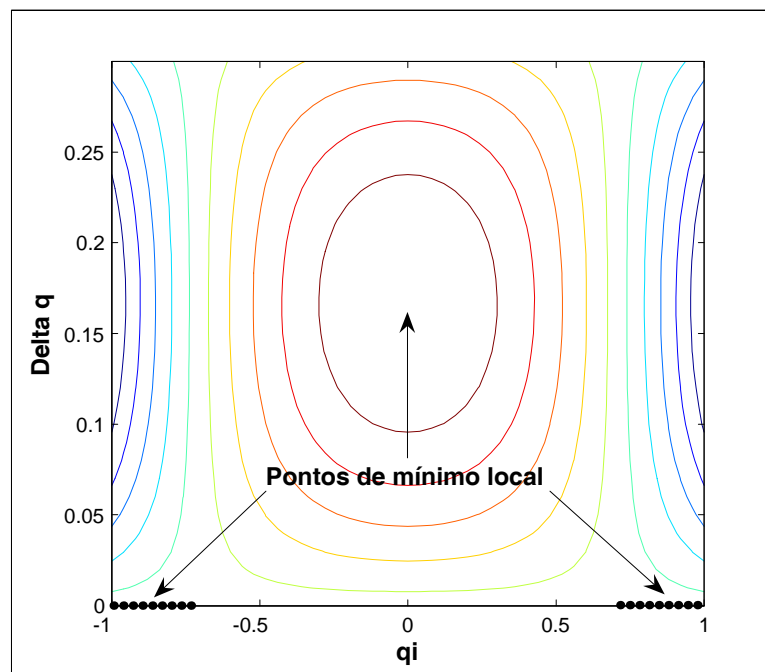


Figura C.2: Curvas de nível do potencial Ψ .

Assim, é possível escrever o problema de minimização de Ψ em relação a q_i e Δq como

$$\Psi = \min_{q_j \in K_Q; \Delta q \geq 0} \left\{ \Delta\varphi^e(\epsilon_j^e(q_j, \Delta q)) + \Delta\varphi^p(\Delta q) + \Delta t\psi\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right) \right\} \quad (\text{C.1})$$

$$K_Q = \left\{ p_j \in \mathbb{R} : \sum_{j=1}^3 p_j = 0; \sum_{j=1}^3 p_j^2 = 3/2 \right\}$$

Caso se fixe um valor arbitrário $\Delta q > 0$ o problema de minimização anterior se reduz a

$$\Psi = \min_{q_j \in K_Q} \left\{ \Delta\varphi^e(\epsilon_j^e(q_j, \Delta q)) + \Delta\varphi^p(\Delta q) + \Delta t\psi\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right) \right\} \quad (\text{C.2})$$

A função Lagrangeana para definir as condições de otimalidade do problema (C.2) é agora dada por

$$\mathcal{L}(q_j, \beta_1, \beta_2) = \Delta\varphi^e + \beta_1 (q_a + q_b + q_c) + \beta_2 (q_a^2 + q_b^2 + q_c^2 - 3/2) \quad (\text{C.3})$$

cujas condições de estacionariedade são dadas por

$$r_i = -\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} \Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

$$r_4 = \sum_{j=1}^3 q_j = 0$$

$$r_5 = \sum_{j=1}^3 q_j^2 = 3/2 \quad (\text{C.4})$$

Assim, para um dado $\Delta q > 0$ é preciso determinar $\bar{\mathbf{x}} = \{q_1, q_2, q_3, \beta_1, \beta_2\}$ que resolve (C.4). Note-se que a solução deste sistema não muda caso se dividam as primeiras três equações por $\Delta q > 0$, obtendo

$$\hat{r}_i = -\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \epsilon_i^e} + \hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

$$\hat{r}_4 = \sum_{j=1}^3 q_j = 0$$

$$\hat{r}_5 = \sum_{j=1}^3 q_j^2 = 3/2 \quad (\text{C.5})$$

O sistema de Newton deste problema adaptado é

$$\hat{\mathbf{x}}^{k+1} = \hat{\mathbf{x}}^k + \delta \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{K}^k \delta \hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{r}}^k \quad (\text{C.6})$$

onde

$$\hat{\mathbf{x}} = \{q_1, q_2, q_3, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2\}; \quad \delta\hat{\mathbf{x}} = \{\delta q_1, \delta q_2, \delta q_3, \delta\hat{\beta}_1, \delta\hat{\beta}_2\}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & 1 & 2q_3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$K_{ii} = \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial \epsilon_i^e \partial \epsilon_i^e} \Delta q + 2\hat{\beta}_2 \quad i = 1, 2, 3$$

Finalmente, interessa encontrar este conjunto minimizador para $\Delta q \rightarrow 0$. Este limite é tomado em (C.5) e (C.6). Neste último, a matriz \mathbf{K} fica

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2\hat{\beta}_2 & 0 & 0 & 1 & 2q_1 \\ 0 & 2\hat{\beta}_2 & 0 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & 2\hat{\beta}_2 & 1 & 2q_3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Assim, a solução de (C.5) mediante (C.6) permite a determinação do minimizador de Ψ em relação a q_i para $\Delta q = 0$. Realizada esta operação e definidos os minimizadores q_i , avalia-se $\partial\Psi/\partial\Delta q$. Se este valor é positivo, o mínimo local é $\Delta q = 0$ e não há plastificação. Caso contrário haverá um mínimo para $\Delta q > 0$ (incremento plástico) que é calculado mediante o procedimento apresentado no Apêndice B. Cabe notar, no entanto, que o mínimo obtido nesta primeira etapa é um excelente ponto de partida para a determinação do mínimo interior, diminuindo os custos computacionais.