

AUGUSTO EMMEL SELKE

**MODELO CONSTITUTIVO VARIACIONAL DE VISCOPLASTICIDADE
EM REGIME DE GRANDES DEFORMAÇÕES PARA UM PROBLEMA
ADIABÁTICO TERMOMECHANICAMENTE ACOPLADO**

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, do Centro Tecnológico da Universidade Federal de Santa Catarina, na área de Análise e Projeto Mecânico

Orientador:

Eduardo Alberto Fancello

Co-orientador:

Laurent Stainier (École Centrale de Nantes, França)

Florianópolis

2009

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

MODELO CONSTITUTIVO VARIACIONAL DE VISCOPLASTICIDADE
EM REGIME DE GRANDES DEFORMAÇÕES PARA UM PROBLEMA
ADIABÁTICO TERMOMECHANICAMENTE ACOPLADO

AUGUSTO EMMEL SELKE

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. Eduardo Alberto Fancello, D.Sc. – Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Clovis Sperb de Barcellos, Ph.D.

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

Prof. Miguel Vaz Júnior, Ph.D.

À minha mãe e ao meu pai

Agradecimentos

Este trabalho foi construído com o apoio e a ajuda de muitos, a quem estendo meus agradecimentos:

Primeiramente, ao CNPq, pelo auxílio financeiro durante o mestrado.

Ao meu orientador Eduardo Alberto Fancello, sempre presente ao longo dessa caminhada, agradeço pelas incontáveis horas de dedicação, pela enorme paciência, pelo apoio e incentivo constantes, mas principalmente pela amizade.

Ao meu co-orientador Laurent Stainier, agradeço a disponibilidade para tirar dúvidas e indicar caminhos, mesmo à distância.

Ao Departamento de Engenharia Aeroespacial e Mecânica (LTAS) da Université de Liège, na Bélgica, que, através de convênio com o GRANTE, permitiu a utilização da estrutura de elementos finitos de código aberto METAFOR neste trabalho.

Dedico também um agradecimento sincero a toda equipe do GRANTE, dos professores que proporcionam cursos e palestras de qualidade e se mostram sempre dispostos a auxiliar – em especial ao Lauro Cesar Nicolazzi, presente na minha caminhada desde que me entendo por gente e grande incentivador da minha entrada no GRANTE –, aos colegas alunos de iniciação científica, mestrado e doutorado, companheiros do café da tarde e do futebol.

Aos amigos e à família, entre os quais tenho a felicidade de não saber nem precisar distinguir, companheiros de todas as caminhadas, agradeço pelo apoio. Peço desculpas pela lista que segue, inevitavelmente incompleta, mas que inclui alguns dos principais responsáveis por tudo que me acontece: Daniel, Duca e Thadeu (verdadeiros irmãos deste filho único), Tia Berê, Tia Miriam, Tia Cóqui e Tia Hecka (meias-mães), Tio Teixeira, Tio Zica e meu avô (meios-pais), além da Juju, Gabi, Cado, Petra, Anna, Otavinho, Ingrid, Petra, Marco, Yeda, Rolt, Jorge, Cláudia, Júlia, Adão, Cláudia, Lion, Jordana, Paula, Naka, Pingüim, Felipe, Renee, Anderson, Rafael, amigos do basquete da UFSC, Tobias, Nara, Stellinha, Caio, Guido, Dani, Aninha...

À Romara, agradeço pelo companheirismo, ternura, compreensão e torcida, mas acima de tudo, pelo amor, pelo carinho e pela cumplicidade.

Ao meu pai, Carlos Alberto de Campos Selke, agradeço por ter me ensinado as primeiras “continhas de letrinhas” e por ter corrido tantas vezes atrás dos chutes da minha canhota às vezes desregulada. Acredito que ele gostaria de ler este trabalho.

E finalmente à minha mãe, Ina Emmel, entre tantas outras coisas, agradeço pelos almoços a quatro mãos, pelos bib’s compartilhados e pelos carinhos com mãos de papel.

Resumo

A separação total dos efeitos térmicos e mecânicos é razoável para a maioria das aplicações em mecânica dos sólidos. Contudo, alguns problemas requerem modelos mais complexos. Temperaturas de transição vítrea de borrachas e a experiência diária com o amolecimento térmico de plásticos provam a necessidade de se considerar acoplamento termomecânico no tratamento de polímeros. Também os metais, quando sujeitos a grandes deformações ou grandes taxas de deformação, exibem aquecimento perceptível. A necessidade clara de modelos termo-mecanicamente acoplados levou à extensa exploração de efeitos como tensões térmicas e aquecimento (e resfriamento) termoelástico para uma grande variedade de materiais e aplicações. O objetivo deste trabalho é formular um problema termomecânico totalmente acoplado em uma estrutura variacional, na qual derivam-se atualizações constitutivas de um pseudo-potencial incremental. Consideram-se materiais hiperelásticos viscoplásticos. A utilização de potenciais baseados em grandezas espectrais de deformação permite a representação de uma grande variedade de materiais isotrópicos. O problema é considerado adiabático, sem fluxo ou geração de calor, o que permite que a temperatura seja considerada uma variável interna adicional. O problema local de balanço de calor é derivado do pseudo-potencial incremental acoplado, junto com as equações descrevendo aspectos mecânicos. Discute-se a dependência de temperatura em todos os potenciais que compõem o pseudo-potencial incremental. A solução do problema não-linear com relação às variáveis internas permite a previsão da temperatura e da conversão de trabalho plástico em calor durante o processo de deformação. O modelo desenvolvido é implementado em código livre GNU Octave, representando casos de deformação simples, e posteriormente em um código acadêmico de elementos finitos em C++, permitindo a extensão para aplicações em geometrias e carregamentos mais complexos. São utilizados parâmetros materiais encontrados em literatura.

Palavras-chave: acoplamento termomecânico, formulação variacional, atualizações constitutivas.

Abstract

The total separation of mechanical and thermal is a reasonable assumption for most applications in solid mechanics. However, some problems require more complex models. Glass transition temperatures for rubber-like polymers and everyday experience with thermal softening of plastics constitute evidence of the need for considering thermo-mechanical coupling, when dealing with these materials. Even metals, when subjected to large strains or strain rates, exhibit macroscopic heating effects. The clear need for coupled thermo-mechanical models has led to the extensive study of such effects as thermal stresses and thermoelastic heating and cooling for a wide range of materials and applications. The aim of this dissertation is to formulate a fully coupled thermo-mechanical problem in a variational structure, where constitutive updates are derived from an incremental pseudo-potential. Hyperelastic-viscoplastic materials are considered. The use of potentials based on spectral quantities of strain allows for the representation of a wide variety of isotropic materials. The problem is assumed adiabatic (no heat flux) and with no local heat generation, which allows the temperature to be considered as an additional internal variable. The local heat balance equation is derived from the coupled incremental pseudo-potential, together with the equations related to essentially mechanical aspects. Temperature dependence on all the parts of the incremental pseudo-potential is discussed. Solving the nonlinear problem with respect to internal variables leads to the prediction of temperature and the conversion of plastic work to heat. The proposed model is implemented in GNU Octave, for simple deformation cases, and in C++ within an educational finite element structure, enabling the extension to more complex geometries and loading cases. Material parameters found in literature are used.

Keywords: thermo-mechanical coupling, variational formulation, constitutive updates.

Lista de figuras

Figura 1.1 - Diagrama de fases para ferro-carbono, indicando a formação de diferentes microestruturas para diferentes temperaturas de processamento. Fonte: Callister (2007).....	19
Figura 1.2 - Evolução do módulo de elasticidade para diferentes temperaturas para o tungstênio, o aço e o alumínio. Fonte: Callister (2007).....	20
Figura 1.3 - Influência da temperatura sobre o comportamento de tensão-deformação do ferro - desde a fragilidade a -200°C até a ductilidade a 25°C (tensão de engenharia). Fonte: Callister (2007).....	20
Figura 1.4 - Influência da variação de temperatura e de taxa de deformação sobre o comportamento mecânico de materiais poliméricos termoplásticos. Fonte: Vassoler (2007).....	24
Figura 1.5 - Representação do processo de conformação térmica de polímeros. Identificação da janela de temperaturas entre as quais o processamento é possível, com representação de uma curva tensão-deformação dependente do tempo de processamento. Fonte: Thorne, em Encyclopedia of Polymer Science and Technology (2002).	25
Figura 1.6 - Influência da temperatura de ensaio sobre o comportamento mecânico de PVC. Alterações evidentes no comportamento de escoamento e encruamento para variações de temperatura relativamente pequenas. Fonte: Arruda <i>et al</i> (1995).....	26
Figura 2.1 - Movimento do corpo entre configurações de referência e deformada. Fonte: Vassoler (2007). ..	30
Figura 2.2 - Vetores tração nas configurações de referência e deformada, com suas respectivas normais. Fonte: Vassoler (2007).....	32
Figura 3.1 - Representação da decomposição multiplicativa da deformação em parcelas elástica e plástica. Destaque para o estado preditor.	57
Figura 3.2 - Modelo reológico viscoplástico.....	61
Figura 4.1 - Curvas de tensão-deformação e variação de temperatura para uma liga de alumínio 2024-T3 ($T_0 = 293\text{K}$).	94
Figura 4.2 - Influência da taxa de deformação no comportamento termomecânico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293\text{K}$).	95
Figura 4.3 - Influência da temperatura inicial no comportamento termomecânico do alfa-titânio ($\dot{\epsilon} = 0,001\text{s}^{-1}$).	96
Figura 4.4 - Influência de temperatura inicial de ensaio para o tântalo policristalino puro ($\dot{\epsilon} = 0,001\text{s}^{-1}$). ..	97
Figura 4.5 - Influência da taxa de deformação no comportamento do tântalo policristalino puro ($T_0 = 298\text{K}$).	98

Figura 4.6 - Influência da temperatura para um material polimérico sem amolecimento ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$). ...	99
Figura 4.7 - Influência da taxa de deformação no comportamento de um material polimérico sem amolecimento ($T_0 = 293K$).....	100
Figura 4.8 - Influência da temperatura inicial de ensaio de um material polimérico com amolecimento ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).	101
Figura 4.9 - Influência da taxa de deformação no comportamento de um material polimérico com amolecimento ($T_0 = 293K$).....	101
Figura 4.10 - Sensibilidade da tensão e da temperatura finais de ensaio para variações do coeficiente de expansão volumétrica.	103
Figura 4.11 - Sensibilidade da variação de entropia e da deformação plástica acumulada finais de ensaio para variações de K_1	104
Figura 4.12 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de μ_1	105
Figura 4.13 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de ω_0	106
Figura 4.14 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de C_0	108
Figura 4.15 - Composição do termo dissipativo linear com a taxa de deformação plástica.	109
Figura 4.16 - Composição do pseudo-potencial dissipativo completo, com termo linear e de Perzyna.....	110
Figura 4.17 - Sensibilidade de tensão e temperatura ao final do ensaio para variações de ω_v	111
Figura 4.18 - Sensibilidade de aumento de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de $\dot{\epsilon}_0$	112
Figura 4.19 - Sensibilidade de temperatura e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de m	112
Figura 4.20 - Comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293K$).....	113
Figura 4.21 - Influência da temperatura inicial no comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).	114
Figura 4.22 - Influência da taxa de deformação no comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293K$)..	115
Figura 4.23 - Tensão equivalente de von Mises para taxas de deformação de 10^7 mm/s (1 – máx = 634 MPa), 10^4 mm/s (2 – máx = 548 MPa), 10 mm/s (3 – máx = 498 MPa) e 10^{-2} mm/s (4 – máx = 486 MPa), para extensões de 10 mm do corpo de prova.	117
Figura 4.24 – Aumento de entropia para uma extensão de 10 mm do corpo de prova a 10^7 mm/s (1 – máx = 0,255 J/kg.K) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 8,84 J/kg.K).	117

Figura 4.25 – Deformação plástica acumulada ao fim de uma extensão de 10 mm do corpo de prova a 10^7 mm/s (1 – máx = 0,000618) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 0,0355). 118

Figura 4.26 – Temperatura do corpo de prova ao fim de uma extensão de 10 mm a 10^7 mm/s (1 – máx = 298 K) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 303 K)..... 118

Figura 4.27 - Comportamento de estrição entre 40 mm (a) e 45 mm (b) de alongamento total do espécime para temperaturas iniciais de ensaio de 93 K (1), 293 K (2) e 793 K (3). Representação dos valores de tensão equivalente de von Mises..... 119

Lista de tabelas

Tabela 4.1 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais da liga de alumínio 2024-T3, independente da taxa de deformação ($T_0 = 293\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].....	86
Tabela 4.2 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais da liga alfa-titânio, dependente da taxa de deformação ($T_0 = 293\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].....	88
Tabela 4.3 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais para o tântalo policristalino puro ($T_0 = 298\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].	89
Tabela 4.4 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais do material polimérico sem amolecimento mecânico na faixa plástica ($T_0 = 293\text{K}$).....	91
Tabela 4.5 - Parâmetros para o material polimérico com amolecimento mecânico na faixa plástica ($T_0 = 293\text{K}$).	92
Tabela 4.6 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial volumétrico.	103
Tabela 4.7 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial elástico isocórico.....	104
Tabela 4.8 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial plástico.	106
Tabela 4.9 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial de acumulação térmica.	107
Tabela 4.10 - Análise de sensibilidade de termos de acoplamento do pseudo-potencial dissipativo.....	111

Lista de símbolos

Alfabeto Grego

Ω, Ω_0	Domínio do corpo nas configurações deformada e de referência, respectivamente
Γ, Γ_0	Fronteira do corpo nas configurações deformada e de referência, respectivamente
χ	Mapeamento do deslocamento do corpo
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tensor deformação logarítmico
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor tensão de Cauchy
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor de tensão de Kirchhoff
$\boldsymbol{\Sigma}$	Tensor de tensão de Mandel
θ	Temperatura interna
ρ, ρ_0	Massa específica nas configurações deformada e de referência, respectivamente
η	Entropia específica
Λ	Produção total de entropia
$\bar{\Psi}$	Pseudo-potencial dissipativo
Ψ	Pseudo-potencial incremental
λ, β, γ_i	Multiplicadores de Lagrange
φ^e	Parcela elástica isocórica da energia livre de Helmholtz
φ^p	Parcela plástica da energia de energia livre de Helmholtz
φ^h	Parcela de acumulação térmica da energia livre de Helmholtz
φ^{vol}	Parcela volumétrica da energia livre de Helmholtz
μ	Módulo de elasticidade no modelo de Hencky
μ_i^e, α_i	Parâmetros do modelo de Ogden
Σ_0	Tensão de escoamento
μ_i^e, α_i	Parâmetros de encruamento exponencial
μ_i^p, α_i^p	Parâmetros de encruamento potencial
$m, \sigma_v, \dot{\varepsilon}_0, \omega_v$	Parâmetros da parcela de Perzyna de viscoplasticidade

$\sigma_y, \sigma_1, \hat{\sigma}_1,$ $\omega_1, \hat{\omega}_1$	Parâmetros de viscoplasticidade
---	---------------------------------

Alfabeto Latino

a	Aceleração
b, B	Vetor de forças de corpo nas configurações deformada e de referência, respectivamente
C, B	Tensor de deformação de Cauchy-Green à direita e à esquerda, respectivamente
C_0	Capacidade térmica específica
D	Tensor velocidade de deformação
e_c, e	Energia interna específica nas configurações deformada e de referência, respectivamente
E	Tensor de deformação de Green-Lagrange
df, df₀	Vetores de força externa nas configurações deformada e de referência, respectivamente
F	Tensor gradiente de deformação
H	Fator de encruamento linear
I	Tensor identidade de segunda ordem
J	Jacobiano
K	Módulo de compressibilidade
L	Tensor gradiente espacial de deformação
M_i	Autovetores do tensor velocidade de deformação plástica
n, N	Vetores normais nas configurações deformada e de referência, respectivamente
P	Primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff
q	Deformação plástica acumulada
q_i	Autovalores da direção de plastificação
\dot{q}	Taxa de deformação plástica
q, Q	Vetores fluxo de calor nas configurações deformada e de referência, respectivamente

r, R	Fontes de calor internas por unidade de volume nas configurações deformada e de referência, respectivamente
\mathbf{R}	Tensor de rotação
S	Quantidade total de entropia do sistema termodinâmico
\mathbf{S}	Segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff
t	Tempo
$\mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}$	Forças de superfície atuantes na fronteira do corpo nas configurações deformada e de referência, respectivamente
T	Temperatura externa
\mathbf{u}	Vetor de deslocamento do corpo
\mathbf{U}, \mathbf{V}	Tensores de alongamento direito e esquerdo, respectivamente
\mathbf{v}	Vetor de velocidade do corpo
W	Energia livre de Helmholtz
\mathbf{W}	Tensor velocidade de rotação ou vorticidade
\mathbf{x}, \mathbf{X}	Vetores de posição do corpo nas configurações deformada e de referência, respectivamente
\mathbf{Y}	Força termodinâmica associada às variáveis internas
\mathbf{Z}	Representação geral das variáveis internas

Escritas Especiais

\mathcal{C}	Tensor material de quarta ordem
\mathcal{D}_{int}	Dissipação interna
\mathcal{E}	Energia interna total do sistema
\mathcal{H}	Função potencial
\mathcal{I}	Tensor identidade de quarta ordem
\mathcal{K}	Energia cinética do sistema
\mathcal{L}	Função Lagrangeana
\mathcal{P}_{ext}	Potência mecânica das forças externas
\mathcal{P}_{int}	Potência de tensão
\mathcal{Q}	Potência térmica

Operadores e Notações

$[\]^{-1}$	Inversa
$[\]^T$	Transposta
$[\]^{-T}$	Inversa da transposta
$[\]^e$	Parcela elástica
$[\]^p$	Parcela plástica
$[\]^{vol}$	Parcela volumétrica
$[\]^{\widehat{\quad}}$	Parcela isocórica
$[\]^{\dot{\quad}}$	Taxa temporal
$[\]^{pr}$	Tensor preditor
$[\]_{n+1}$	Final do passo no tempo
$[\]_n$	Início do passo no tempo
$D_{\mathbf{A}}[\](\delta\mathbf{A})$	Derivada de Gâteaux com relação a \mathbf{A}
a_i, \mathbf{A}_i	Autovalores e autovetores do tensor \mathbf{A} , respectivamente
$\nabla, \nabla_{\mathbf{X}}$	Gradientes com relação às configurações deformada e de referência, respectivamente

Sumário

1. Introdução.....	17
1.1. <i>Materiais metálicos</i>	18
1.2. <i>Materiais poliméricos</i>	22
1.3. <i>Proposta de trabalho – objetivos e organização</i>	27
2. Revisão de mecânica do contínuo.....	29
2.1. <i>Medidas de deformação</i>	29
2.2. <i>Medidas de tensão.....</i>	32
2.3. <i>Princípios de balanço – equilíbrio mecânico e leis da termodinâmica</i>	34
2.4. <i>Hiperelasticidade</i>	41
2.5. <i>Princípios variacionais.....</i>	43
2.5.1. <i>Elasticidade quase-estática</i>	43
2.5.2. <i>Termoelasticidade quase-estática</i>	45
2.5.3. <i>Problemas dissipativos</i>	48
3. Formulação do problema adiabático termomecanicamente acoplado.....	54
3.1. <i>Hipóteses básicas e definições – cinemática</i>	54
3.2. <i>Hipóteses básicas e definições – hipóteses do problema térmico.....</i>	59
3.3. <i>Composição do potencial de energia livre de Helmholtz (W).....</i>	60
3.3.1. <i>Potencial volumétrico (φ^{vol}).....</i>	62
3.3.2. <i>Potencial elástico isocórico (φ^e).....</i>	63
3.3.3. <i>Potencial plástico (φ^p)</i>	64
3.3.4. <i>Potencial de acumulação de energia térmica (φ^h).....</i>	65
3.4. <i>Pseudo-potencial dissipativo ($\bar{\Psi}$).....</i>	66
3.5. <i>Formulação variacional do problema – extremização do pseudo-potencial incremental</i>	68
3.5.1. <i>Minimização com respeito às autoprojeções \mathbf{M}_i.....</i>	70
3.5.2. <i>Extremização com respeito a \mathbf{q}_i, $\Delta\mathbf{q}$ e T</i>	72
3.5.3. <i>Identificação de passo plástico</i>	74
3.5.4. <i>Identificação dos valores ótimos das variáveis internas.....</i>	77
3.6. <i>Cálculo da tensão.....</i>	79

3.7. Tensor material	81
3.8. Resumo das operações.....	84
4. Resultados numéricos – aplicação do modelo.....	85
4.1. Propriedades materiais.....	86
4.1.1. Liga de alumínio 2024-T3	86
4.1.2. Liga alfa-titânio.....	87
4.1.3. Tântalo policristalino puro	87
4.1.4. Material polimérico sem amolecimento.....	90
4.1.5. Material polimérico com amolecimento	92
4.2. Tração uniaxial – curvas de tensão-deformação.....	93
4.2.1. Liga de alumínio 2024-T3	93
4.2.2. Liga alfa-titânio.....	94
4.2.3. Tântalo policristalino puro	97
4.2.4. Material polimérico sem amolecimento.....	98
4.2.5. Material polimérico com amolecimento	100
4.3. Análise de sensibilidade do modelo	102
4.3.1. Potencial volumétrico	102
4.3.2. Potencial elástico isocórico	104
4.3.3. Potencial plástico	105
4.3.4. Potencial de acumulação de energia térmica.....	107
4.3.5. Pseudo-potencial dissipativo	108
4.4. Carregamentos cíclicos – histerese	112
4.5. Caso 3D – corpo de prova de tração	115
5. Discussão e conclusões	120
6. Referências bibliográficas	125
Apêndice 1 – Cálculo do termo $\partial\tilde{\mathcal{L}}/\partial\mathbf{q}_i$	128
Apêndice 2 – Derivadas das parcelas componentes do pseudo-potencial incremental	130
Apêndice 3 – Derivada de ϵ_i^e com relação a ϵ_j^{pr}	133
Apêndice 4 – Cotas do corpo de prova de tração	137

1. Introdução

A separação total de efeitos térmicos de efeitos mecânicos é uma hipótese sensata para diversas aplicações em mecânica dos sólidos. Contudo, características específicas podem exigir a consideração de comportamentos termomecanicamente acoplados para uma descrição adequada do comportamento material em determinadas circunstâncias.

De forma geral, pode-se atribuir a necessidade de consideração de fenômenos de acoplamento termomecânico à combinação de dois fatores primordiais: características da excitação externa (carregamento) e propriedades do material em análise.

Para aplicações em que se observam pequenas deformações, muitas vezes a hipótese de independência de comportamentos mecânicos da evolução de temperatura ao longo do processo de carregamento é bastante razoável. Na ausência de carregamentos térmicos externos, pode-se considerar um processo isotérmico. Contudo, à medida que crescem os níveis de deformação, especialmente quando em combinação com altas taxas de deformação, os efeitos térmicos crescem em importância, tornando cada vez menos precisa a descrição isotérmica do comportamento material.

Problemas de grandes deformações, em especial quando são observadas grandes deformações plásticas, raramente podem ser considerados isotérmicos. A conversão de trabalho plástico em calor é um fenômeno bem conhecido e muito estudado para diversas classes de materiais. Exceto por quando o carregamento pode ser considerado quase estático (hipótese não realista para um grande número de aplicações de engenharia), quando haveria tempo suficiente para a dissipação do calor gerado durante a plastificação para fora do corpo, um modelamento adequado das variações de temperatura no interior do material é necessário.

A taxa de deformação é também um fator de influência sobre a necessidade de consideração de efeitos de acoplamento termomecânico. Altas taxas de deformação estão associadas a processos de deformações mais rápidos, para os quais o tempo necessário para que ocorra dissipação de calor é reduzido. Além disso, o comportamento material também pode ser influenciado pela taxa de deformação. Materiais de características viscoelásticas e viscoplásticas são aqueles que apresentam uma elevação dos níveis de tensão com o aumento

da taxa de deformação nas faixas de comportamento elástico e plástico, respectivamente. A velocidade de carregamento pode, assim, implicar na alteração das respostas de tensão, deformação e temperatura de determinados materiais, requerendo um modelamento termomecanicamente acoplado.

Na presença de carregamentos térmicos a forma mais usual de abordagem consiste em realizar uma análise puramente térmica definindo o campo de temperaturas do corpo e transportar esta informação para influenciar as propriedades de material na análise mecânica. Neste caso é dito que se trata de uma análise termomecânica desacoplada. O acoplamento, assunto que é objeto de estudo neste trabalho, se completa quando a ação mecânica influencia sobre o fenômeno térmico e vice-versa.

Além das características do carregamento, as especificidades do material analisado têm influência na decisão de utilizar um modelo de acoplamento termomecânico. Uma das principais características é a sensibilidade do comportamento do material a variações de temperatura. O estudo de influência de temperatura sobre o comportamento mecânico é uma área vinculada a ensaios experimentais com ampla bibliografia associada. Caracterizações do comportamento material usualmente apresentam famílias de curvas que detalham o comportamento mecânico do material e de suas propriedades mecânicas para diferentes valores de temperatura.

Contudo, a consideração de um verdadeiro acoplamento termomecânico está associada a variação do estado térmico do corpo frente a ações mecânicas. Isto pode se apresentar tanto em fenômenos mecânicos não dissipativos (termoelasticidade) quanto em fenômenos envolvendo dissipação mecânica. Estes últimos são freqüentes em aplicações em grandes deformações, associadas a mecanismos de plasticidade, viscoplasticidade, viscoelasticidade, dano, etc. Neste panorama geral, entre as classes materiais de uso mais intenso em aplicações de engenharia, destacam-se os materiais metálicos e poliméricos.

1.1. Materiais metálicos

Os materiais metálicos são caracterizados pelo arranjo atômico de seus átomos através de ligações metálicas, em que os íons metálicos se arranjam em um reticulado organizado em

meio a uma nuvem de elétrons livres. Devido às condições de processamento e fabricação, é comum que estas redes cristalinas estejam distribuídas em grãos dentro do material, sendo o tamanho de grão, tanto quanto o tipo de arranjo cristalino assumido pelos íons metálicos, um fator determinante do comportamento mecânico e térmico dos materiais metálicos.

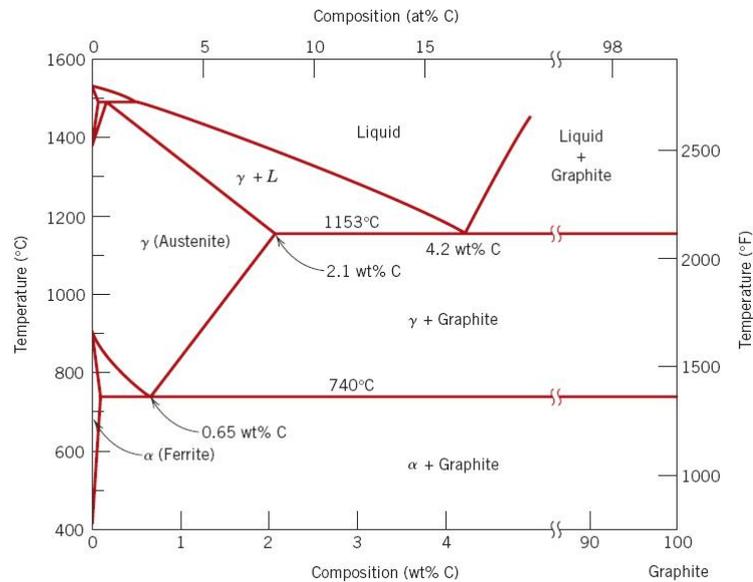


Figura 1.1 - Diagrama de fases para ferro-carbono, indicando a formação de diferentes microestruturas para diferentes temperaturas de processamento. Fonte: Callister (2007).

Os diagramas de fase de ligas metálicas são representações claras da influência da temperatura sobre o comportamento dos metais, consequência do arranjo microestrutural (como indica a Figura 1.1, o conhecido diagrama de fases ferro-carbono, onde se indicam as regiões em que se formam as diferentes microestruturas possíveis para o aço). O uso de procedimentos de recozimento, por exemplo, para facilitar o trabalho posterior de ligas metálicas como o aço é uma das aplicações deste tipo de comportamento dependente de temperatura.

Mesmo sem mudanças microestruturais, é conhecido o efeito da variação de temperatura sobre as propriedades térmicas e mecânicas dos materiais metálicos. Desde a massa específica, até os valores de tensão de escoamento, limite de escoamento, capacidade térmica específica, entre outros, todos os parâmetros materiais variam com a temperatura. Apenas a título de ilustração, a Figura 1.2 mostra a variação do módulo de elasticidade com a variação de temperatura para três materiais metálicos diferentes, enquanto a Figura 1.3 mostra

a mudança do comportamento tensão-deformação do ferro a diferentes temperaturas, desde a fragilidade até a grande ductilidade.

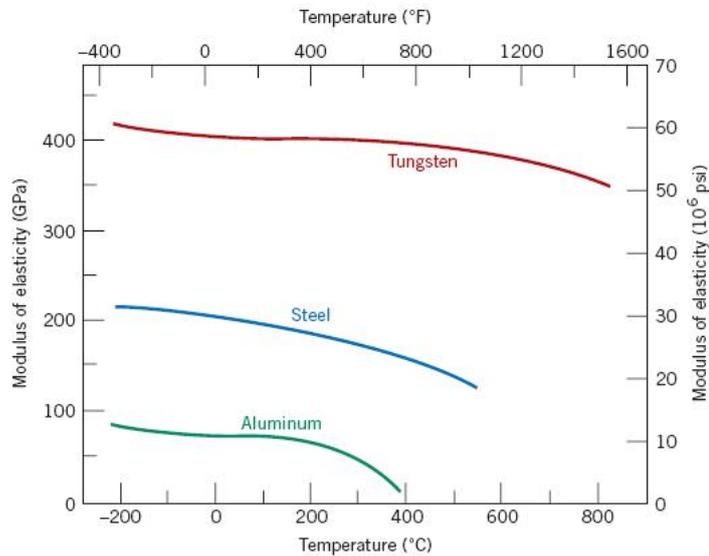


Figura 1.2 - Evolução do módulo de elasticidade para diferentes temperaturas para o tungstênio, o aço e o alumínio. Fonte: Callister (2007).

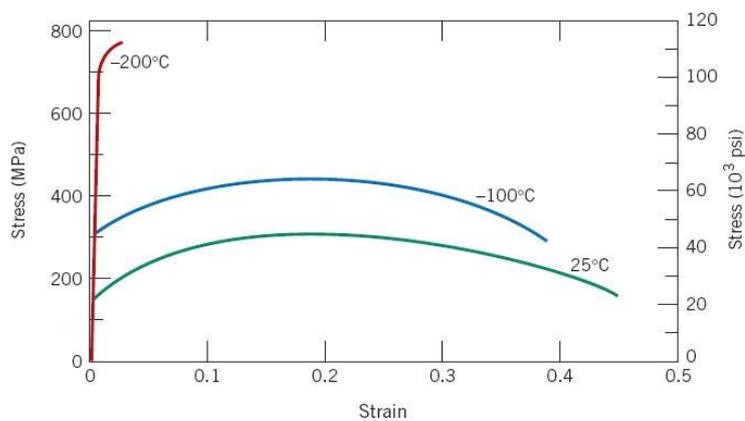


Figura 1.3 - Influência da temperatura sobre o comportamento de tensão-deformação do ferro - desde a fragilidade a -200°C até a ductilidade a 25°C (tensão de engenharia). Fonte: Callister (2007).

Muitos são os trabalhos que buscam a adequada descrição termomecânica acoplada do comportamento de materiais metálicos. Dentro da proposta do presente trabalho, de propor uma formulação do acoplamento termomecânico em grandes deformações para

comportamentos viscoplásticos, podem ser destacadas as descrições de materiais metálicos presentes nos recentes trabalhos de Helm (2006), Yang *et al* (2006) e Stainier e Ortiz (2008).

Helm (2006) apresenta um modelo termomecanicamente acoplado para grandes deformações, com encruamento não-linear isotrópico. A representação da faixa elástica é feita através de modelos quadráticos (de Hencky), adequados à representação de materiais metálicos. Na faixa plástica, é empregado um modelo quadrático com as variáveis internas de encruamento com coeficientes dependentes da temperatura. A atualização da temperatura ao longo do processo de deformação é realizada a partir da determinação da fração de trabalho plástico convertido em calor, em uma adaptação do procedimento clássico proposto originalmente por Taylor e Quinney (apud Stainier e Ortiz (2008)). A taxa de conversão de trabalho plástico em calor é, portanto, determinada pela definição de um fator conhecido *a priori*, e não um resultado do modelo implementado. Simulações numéricas do modelo são apresentadas para materiais de comportamento semelhante ao aço.

O trabalho de Yang *et al* (2006) apresenta uma formulação variacional termomecanicamente acoplada para sólidos dissipativos. O foco do trabalho está em demonstrar a construção dos potenciais que permitem a adequada descrição do problema de dissipação acoplado, empregando a distinção entre temperatura interna do material e temperatura externa de equilíbrio. Aspectos necessários para a formulação consistente do modelo variacional são apresentados em detalhe, como a escolha de regras de escoamento para as variáveis internas, a formulação da dependência de taxa de deformação através de potenciais viscosos e construção de potenciais para o problema de condução de calor. A partir de uma formulação para materiais termoelásticos (análoga à encontrada em muitos outros trabalhos, entres os quais o livro de Holzapfel (2000)), é incorporado o fenômeno de dissipação, permitindo a determinação da evolução de temperatura *a posteriori*, e não como consequência de um fator de conversão de trabalho plástico. Resultados numéricos para o comportamento de uma liga de alumínio independente de taxa de deformação e da liga alfa-titânio dependente de taxa de deformação são apresentados, em ótima correlação com resultados experimentais.

Seguindo a mesma abordagem proposta no trabalho de Yang *et al* (2006), Stainier e Ortiz (2008) formulam variacionalmente o problema termomecanicamente acoplado de viscoplasticidade adiabática. Os detalhes da construção do problema incremental são apresentados, aproveitando a simplificação de fluxo calor e geração local de calor nulos para

abordar a temperatura como uma variável interna do problema. Os potenciais plásticos e viscosos empregados permitem a incorporação de uma grande gama de comportamentos diferentes, conferindo versatilidade ao modelo, ainda que essencialmente restrito a comportamentos metálicos pela escolha de potenciais elásticos, volumétrico e isocórico, quadráticos. Além do alfa-titânio e da liga de alumínio apresentadas no trabalho de Yang *et al* (2006), também é modelado o tântalo policristalino, de comportamento fortemente dependente da temperatura.

1.2. Materiais poliméricos

Assim como para os metais, o comportamento termomecânico dos polímeros é determinado por sua microestrutura. Compostos por longas cadeias (macromoléculas) de unidades mais simples ligadas entre si por uniões covalentes, os polímeros podem apresentar uma grande variedade de arranjos microestruturais dando origem a comportamentos termomecânicos diversos. É possível, por exemplo, o aparecimento de estruturas cristalinas ordenadas dentro de polímeros, com as macromoléculas arranjadas de maneira alinhada, à semelhança do que acontece para os materiais metálicos. Contudo, é bastante comum também o aparecimento de estruturas altamente aleatórias no arranjo das cadeias poliméricas, com entrelaçamento e aparecimento de ligações cruzadas entre macromoléculas.

As classificações dos polímeros são um reflexo do reconhecimento de similaridades entre microestruturas. Com relação às tecnologias de transformação, distinguem-se os polímeros termoplásticos dos termorrígidos. Os últimos são caracterizados pelo processo de cura, no qual a elevação da temperatura durante o processamento induz a formação de reticulados cristalinos com muitas ligações cruzadas entre macromoléculas, com conseqüente enrijecimento do material (ligações cruzadas do reticulado impõem limites ao movimento das macromoléculas). Já os termoplásticos são polímeros que não passam pelo processo de cura, respondendo ao aumento de temperatura de maneira inversa, com amolecimento do material e aumentada facilidade de escoamento. Este comportamento também é reflexo de uma microestrutura com macromoléculas em arranjos mais aleatórios, com menos ligações cruzadas.

Outra classificação de interesse dos polímeros é feita quanto às características de comportamento mecânico. Os elastômeros (borrachas) são caracterizados pela baixa rigidez e longa faixa elástica, praticamente com ausência de comportamentos plásticos. Isto ocorre em decorrência do processo de vulcanização, no qual se induz a formação de ligações cruzadas entre as macromoléculas, o que restringe a possibilidade de escoamento plástico. Já as fibras são uma classe de polímeros com comportamento bastante diverso, com alta rigidez na direção longitudinal, muito usadas em materiais compostos. Nas fibras, as macromoléculas altamente alinhadas, oferecendo grande resistência à extensão. Por fim, os plásticos apresentam características intermediárias entre fibras e elastômeros. Com arranjos de macromoléculas mais aleatórios, os plásticos exibem menor rigidez que as fibras e uma larga faixa plástica, permitida pelo relativamente baixo número de ligações cruzadas entre macromoléculas.

A influência da temperatura e da taxa de deformação sobre o comportamento mecânico dos polímeros é uma de suas características principais. De uma forma geral, pode-se afirmar que para os polímeros termoplásticos exista uma equivalência de efeitos entre variações de temperatura e de taxa de deformação. Temperaturas baixas e taxas de deformação altas levam a comportamentos marcadamente rígidos e frágeis (curva a da Figura 1.4). Temperaturas altas e baixas taxas de deformação acarretam comportamentos cada vez mais dúcteis, até o escoamento viscoso puro (curva d da Figura 1.4). A representação esquemática do efeito de aumento de temperatura e de taxa de deformação encontra-se na Figura 1.4. Destaca-se, na curva c, com grande faixa plástica após o escoamento, a ocorrência inicial de amolecimento após a tensão de escoamento (associado ao movimento de orientação das cadeias poliméricas na direção de sollicitação após rompidas as primeiras ligações entre macromoléculas) e posterior encruamento já mais perto da fratura (associado ao aumento da rigidez do material a deformações na direção das macromoléculas agora alinhadas com o carregamento).

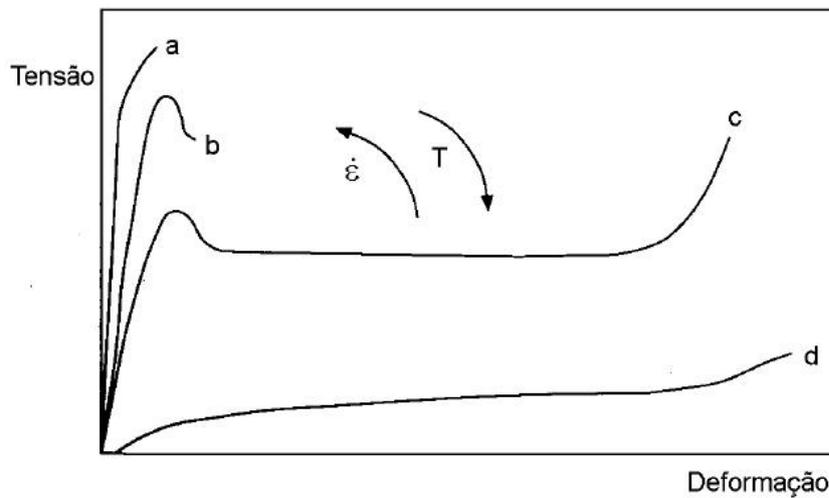


Figura 1.4 - Influência da variação de temperatura e de taxa de deformação sobre o comportamento mecânico de materiais poliméricos termoplásticos. Fonte: Vassoler (2007).

Assim, fica claro que, em decorrência das características do arranjo das macromoléculas poliméricas, os polímeros termoplásticos devam muitas vezes ser analisados dentro de formulações de viscoplasticidade termomecanicamente acoplada para caracterizar corretamente as influências cruzadas de fenômenos térmicos sobre comportamentos mecânicos e vice-versa. Os contextos possíveis de aplicação desse tipo de modelamento são variados, dado que grandes plastificações e altas taxas de deformação estão associadas a vários aspectos da vida de materiais poliméricos.

Tomando o processamento de polímeros como exemplo, fica clara a necessidade de descrever adequadamente o comportamento termomecanicamente acoplado dos polímeros que passam por processos de termo-conformação (*thermoforming*). Dada o limite de pressão estática disponível no equipamento e o nível de deformação desejado para a peça final, define-se a região útil de trabalho, dentro da qual a curva de tensão-deformação ao longo do processamento deve estar incluída.

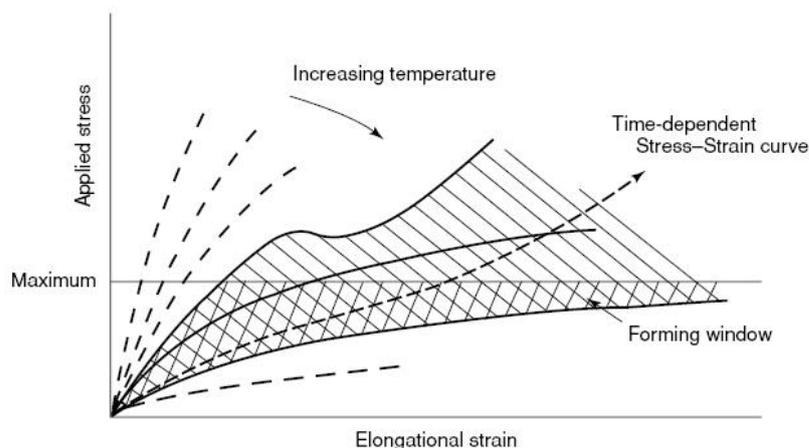


Figura 1.5 - Representação do processo de conformação térmica de polímeros. Identificação da janela de temperaturas entre as quais o processamento é possível, com representação de uma curva tensão-deformação dependente do tempo de processamento. Fonte: Thorne, em Encyclopedia of Polymer Science and Technology (2002).

Muitos trabalhos têm sido desenvolvidos para representar o comportamento termomecânico acoplado de polímeros. A termoelasticidade dos elastômeros é bastante estudada por apresentar peculiaridades com relação à termoelasticidade dos metais (por exemplo, em Holzapfel (2000)). Dentro de regimes de viscoplasticidade, o foco do presente trabalho, destacam-se, entre muitos outros, trabalhos como os de Arruda *et al* (1995) e Richeton *et al* (2007).

Arruda *et al* (1995) partem de um modelo baseado em características da microestrutura dos polímeros (dependente do número de ligações cruzadas entre macromoléculas e das energias de ligação envolvidas, por exemplo) para descrever as características de dependência de temperatura e taxa de deformação, além de comportamentos termomecanicamente acoplados. A partir de experimentos, são separados inicialmente os efeitos térmicos (representados na Figura 1.6, a partir de ensaios quase-estáticos de PVC a diferentes temperaturas iniciais) dos viscosos, através de ensaios quase-estáticos (isotérmicos) e dinâmicos (adiabáticos), respectivamente. Comportamentos acoplados são então acompanhados para taxas de deformação intermediárias, consideradas as características de condução de calor do arranjo experimental. Passa-se, então ao modelamento do comportamento material. É usada uma decomposição multiplicativa do tensor gradiente de deformação em partes elástica, plástica e térmica. São consideradas as evoluções das propriedades materiais com a temperatura. O problema é considerado totalmente acoplado, ou

seja, a solução em temperatura é buscada junto com a solução do problema mecânico. Os resultados obtidos são apresentados para polimetilmetacrilato (PMMA).

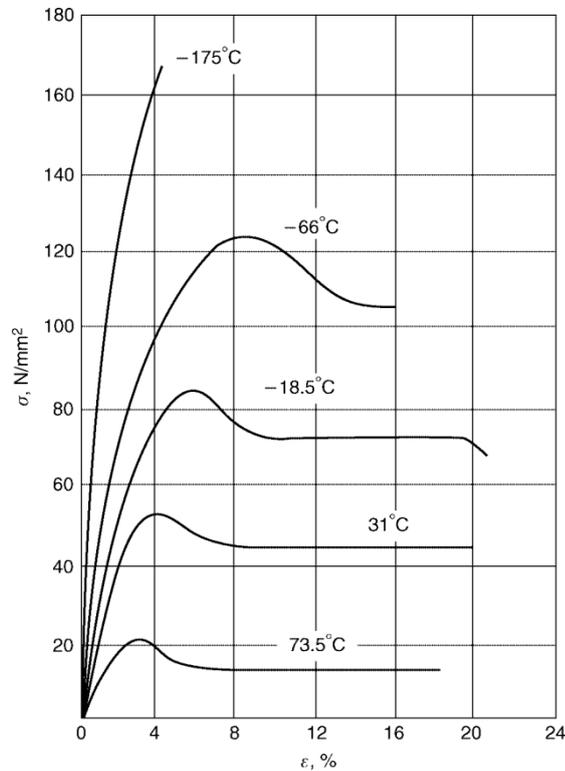


Figura 1.6 - Influência da temperatura de ensaio sobre o comportamento mecânico de PVC. Alterações evidentes no comportamento de escoamento e encruamento para variações de temperatura relativamente pequenas. Fonte: Arruda *et al* (1995).

O trabalho de Richeton *et al* (2007) considera as diferentes respostas dos polímeros a compressão, tração e estados planos de tensão. Incorpora ainda as características de transformação vítrea dos polímeros, permitindo a passagem para um estágio sólido borrachoso semelhante ao representado na curva d da Figura 1.4. Para tanto, elabora leis de escoamento para as variáveis internas para as diferentes faixas de temperatura. Os resultados da aplicação do modelo são apresentados para PMMA e para policarbonato (PC) para uma grande variedade de temperaturas iniciais e taxas de deformação, com comparação com resultados experimentais.

1.3. Proposta de trabalho – objetivos e organização

As vantagens oferecidas pelas formulações variacionais, como discutidas em Yang *et al* (2006) e Stainier e Ortiz (2008), incluem a utilização das ferramentas de cálculo variacional, a garantia de unicidade de solução, simetria nas matrizes tangentes em abordagens implícitas e a possibilidade de implementação de algoritmos de estimação de erro, entre outras. Constituem, portanto, uma estrutura bastante desejável de modelamento de problemas complexos, como a viscoplasticidade termomecanicamente acoplada.

Este trabalho parte da formulação variacional geral para análise termomecânica de materiais dissipativos proposta em (Yang *et al* (2006) e Stainier e Ortiz (2008)) e incorpora o tratamento dado em Fancello *et al* (2006), Vassoler (2007) e Fancello *et al* (2008) para permitir a análise de um variado espectro de materiais isotrópicos de viscoelasticidade e viscoplasticidade. Naturezas tão diversas de comportamento quanto as faixas elásticas essencialmente lineares de alguns materiais metálicos e completamente não-lineares de alguns materiais poliméricos podem, assim, ser modeladas a partir de uma mesma estrutura matemática, como se busca demonstrar através de aplicações numéricas do modelo elaborado para diversos materiais.

O problema é aqui formulado de forma totalmente acoplada, com a resolução conjunta das variáveis mecânicas e térmicas, sem recurso a fatores de conversão de trabalho plástico em calor para o cômputo *a posteriori* da parte térmica. Toda a formulação é feita em um quadro termodinamicamente consistente. Busca-se uma estrutura variacional com propriedades hiperelásticas, de modo que o estado de tensões possa ser determinado a partir da derivada de uma função potencial.

A fim de alcançar estes objetivos, o texto é organizado da seguinte forma.

O Capítulo 2 consiste de uma breve revisão de aspectos da mecânica do contínuo, incluída a fim de contextualizar o trabalho e unificar a notação utilizada em todo o trabalho. São abordados aspectos cinemáticos e dinâmicos inicialmente, para então serem apresentados alguns princípios de balanço, mecânicos e termodinâmicos, que devem ser respeitados durante o processo de deformação. Passa-se, então, à apresentação breve do conceito de hiperelasticidade, característica que se busca manter no modelo ora desenvolvido. Alguns

princípios variacionais utilizados na resolução de problemas mecânicos e térmicos, culminando com a proposta de uma estrutura adequada à resolução do problema de viscoplasticidade adiabática termomecanicamente acoplada.

No Capítulo 3, passa-se ao detalhamento do modelo variacional proposto. São exploradas em detalhes as escolhas do conjunto de variáveis internas e dos potenciais responsáveis pela representação das diversas facetas do comportamento termomecânico acoplado de materiais viscoplásticos. A estrutura incremental da solução é destacada, com detalhes da construção do problema de minimização e da resolução do correspondente sistema não-linear que leva à determinação dos valores das variáveis internas ao fim de cada passo de tempo. Explora-se ainda a estrutura do tensor material consistente, importante na implementação computacional.

O Capítulo 4 inclui os resultados numéricos de uma série de simulações realizadas com o modelo proposto no Capítulo 3 para uma série de materiais metálicos e poliméricos. Destaque é dado para a versatilidade em descrever diversos tipos de comportamento material. São apresentados resultados de simulações uniaxiais e tridimensionais, programadas em GNU-Octave e dentro de um programa de código aberto de elementos finitos, METAFOR, desenvolvido dentro do Departamento de Engenharia Aeroespacial e Mecânica (LTAS) em seu Laboratório de Mecânica Não-Linear (LTAS-MN²L), da Université de Liège, na Bélgica.

Por fim, o Capítulo 5 traz as conclusões do trabalho, onde se apresenta um encerramento do documento, assim como discussões sobre possibilidades e limitações do modelo proposto e possíveis desdobramentos do presente trabalho para estudos futuros.

2. Revisão de mecânica do contínuo

A fim de unificar a notação utilizada no presente trabalho, e como forma de embasar teoricamente o texto, este capítulo traz uma revisão de alguns aspectos da mecânica do contínuo. Para referências mais detalhadas, entre diversas obras de introdução à mecânica do contínuo, são indicadas as obras de Holzapfel (2000), de Souza Neto (2008) e Malvern (1969), nas quais o presente capítulo é baseado.

2.1. Medidas de deformação

Seja um corpo \mathcal{B} , que no instante inicial t_0 ocupa a região Ω_0 do espaço euclidiano com fronteira Γ_0 . A posição p de suas partículas é dada pelo vetor \mathbf{X} . Convenciona-se por chamar esta configuração “original” do corpo como configuração de referência.

Considera-se agora que o corpo \mathcal{B} sofre um movimento que o leva à região Ω em um instante $t > 0$, com fronteira Γ . Considera-se que este movimento possa ser descrito por um mapeamento um a um (χ), de forma que a posição das partículas possa ser descrita pelo vetor $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$. Assim sendo, o deslocamento de cada partícula num dado instante t , é dado por $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}$.

Os campos de velocidade e aceleração das partículas podem então ser dados por:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t^2} \quad (2.2)$$

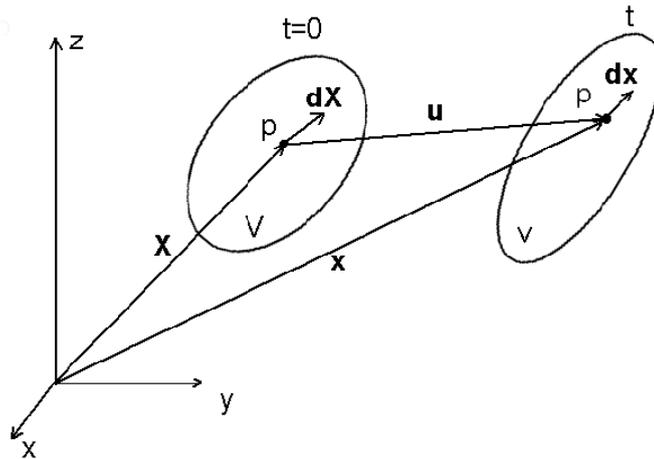


Figura 2.1 - Movimento do corpo entre configurações de referência e deformada. Fonte: Vassoler (2007).

Define-se o **tensor gradiente de deformação (F)** como o tensor responsável por transformar um vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração de referência em um vetor $d\mathbf{x}$ na configuração deformada.

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t)d\mathbf{X} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \quad (2.4)$$

Em notação indicial, temos:

$$F_{aB} = \frac{\partial x_a}{\partial X_B} \quad (2.5)$$

Como indicado na Figura 2.1., o tensor gradiente de deformação tem a capacidade de alterar tamanho e rotacionar vetores. Não é, portanto, necessariamente um tensor simétrico. Pode-se separar as influências em comprimento e rotação dos vetores na chamada decomposição polar. Os tensores \mathbf{U} e \mathbf{V} (simétricos, positivos definidos) são conhecidos como tensores de alongamento direito e esquerdo, respectivamente, enquanto o tensor \mathbf{R} é o tensor de rotação (ortogonal).

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad (2.6)$$

A relação entre duas porções de volume infinitesimais, nas configurações deformada e de referência, é dada pelo determinante do tensor gradiente de deformação (J , chamado de Jacobiano).

$$J = \det \mathbf{F} = \frac{dv}{dV} = \frac{d\rho}{d\rho_0} \quad (2.7)$$

É também bastante freqüente discernir entre parcelas isocórica e volumétrica da deformação do corpo. Para tanto, o tensor gradiente de deformação é decomposto multiplicativamente, com \mathbf{F}^{vol} e $\hat{\mathbf{F}}$ tendo as seguintes propriedades:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{vol}} \hat{\mathbf{F}} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{F}^{\text{vol}} = (\det \mathbf{F})^{1/3} \mathbf{I} \quad (2.9)$$

$$\hat{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})^{-1/3} \mathbf{F} \quad (2.10)$$

Para muitas aplicações, são necessárias medidas de deformação que não incluam informações quanto a rotações de corpo rígido. Os **tensores de deformação de Cauchy-Green**, à direita (\mathbf{C} , Lagrangeano) e à esquerda (\mathbf{B} , Euleriano), ambos simétricos, são definidos como:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \Rightarrow C_{AB} = F_{aA} F_{aB} \quad (2.11)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \Rightarrow B_{ab} = F_{aA} F_{bA} \quad (2.12)$$

Outra medida de deformação corriqueira é o **tensor de deformação de Green-Lagrange** (\mathbf{E}), estreitamente associado à mudança de comprimento de um vetor infinitesimal entre as configurações de referência e deformada. Como \mathbf{C} e \mathbf{I} são simétricos, \mathbf{E} também o é, sendo definido como:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (2.13)$$

Define-se, ainda, o **tensor de deformação logarítmico** ($\boldsymbol{\epsilon}$) a partir do tensor \mathbf{C} . Observe-se que os tensores $\boldsymbol{\epsilon}$ e \mathbf{C} são colineares, tendo portanto as mesmas direções principais.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \ln \mathbf{C} \quad (2.14)$$

Nenhuma das medidas de deformação apresentadas até aqui levam em consideração a velocidade. A construção de modelos viscoplásticos, porém, objetivo central do presente trabalho, envolve necessariamente taxas de deformação. O **tensor gradiente espacial de deformação** é definido como:

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \quad (2.15)$$

As partes simétrica e anti-simétrica do tensor \mathbf{L} são conhecidas, respectivamente, por **tensor velocidade de deformação** (\mathbf{D}) e **tensor velocidade de rotação** ou **vorticidade** (\mathbf{W}).

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \Rightarrow D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.16)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \Rightarrow W_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.17)$$

Estes tensores serão posteriormente utilizados na formulação apresentada neste trabalho, quando da construção de leis de escoamento (Capítulo 3).

2.2. Medidas de tensão

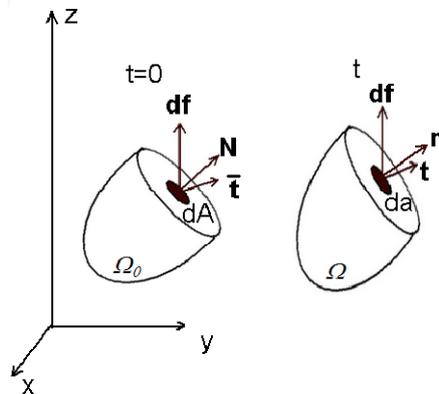


Figura 2.2 - Vetores tração nas configurações de referência e deformada, com suas respectivas normais. Fonte: Vassoler (2007).

A Figura 2.2. mostra o corpo em suas configurações de referência e deformada, com vetores tração $\bar{\mathbf{t}}$ e \mathbf{t} atuando sobre áreas de normal \mathbf{N} e \mathbf{n} , respectivamente. O vetor tração \mathbf{t} , atuando na configuração deformada, é chamado de **vetor tração de Cauchy**. O vetor $\bar{\mathbf{t}}$, conhecido como **primeiro vetor tração de Piola-Kirchhoff**, aponta na mesma direção do vetor tração de Cauchy, mas age na configuração de referência. Trata-se de uma idealização, uma forma de representar \mathbf{t} de forma Lagrangeana.

A partir desses dois vetores tração, definem-se as duas primeiras medidas de tensão: o **tensor de tensão de Cauchy** ($\boldsymbol{\sigma}$) e o **primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff** (\mathbf{P}).

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} \quad (2.18)$$

$$\bar{\mathbf{t}}(\mathbf{X}, t, \mathbf{N}) = \mathbf{P}(\mathbf{X}, t)\mathbf{N} \quad (2.19)$$

Considerando que a força externa aplicada $d\mathbf{f}$ é a mesma, já que os vetores tração $\bar{\mathbf{t}}$ e \mathbf{t} são as representações Lagrangeana e Euleriana da mesma quantidade, pode-se encontrar a relação entre os tensores $\boldsymbol{\sigma}$ e \mathbf{P} , utilizando a fórmula de Nanson (relação entre áreas nas configurações de referência e deformada).

$$\mathbf{n}da = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1}\mathbf{N}dA \quad (2.20)$$

$$d\mathbf{f} = \mathbf{P}\mathbf{N}dA = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}da \Rightarrow \mathbf{P} = \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad (2.21)$$

Prova-se que o tensor de Cauchy é simétrico. Porém, por causa da operação com o tensor gradiente de deformação \mathbf{F} , o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff não é simétrico. É da necessidade de se ter uma medida de tensão na configuração de referência que conserva a propriedade de simetria que se define o **segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff** (\mathbf{S}). Define-se agora uma força fictícia $d\mathbf{f}_0$ (resultado da operação da força real $d\mathbf{f}$ com o tensor \mathbf{F}^{-1} , que a traz de volta para a configuração de referência), agindo sobre a área dA na configuração de referência e se relacionando com o tensor \mathbf{S} da seguinte forma:

$$d\mathbf{f}_0 = \mathbf{S}\mathbf{N}dA \quad (2.22)$$

$$d\mathbf{f}_0 = \mathbf{F}^{-1}d\mathbf{f} \quad (2.23)$$

$$\mathbf{S}\mathbf{N}dA = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{N}dA \Rightarrow \mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} \quad (2.24)$$

Outra medida de tensão corriqueira é o **tensor de tensão de Kirchhoff** ($\boldsymbol{\tau}$), definido como:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} \quad (2.25)$$

Finalmente, uma medida de tensão muito usada na descrição de materiais que apresentam plasticidade, definida numa configuração intermediária, entre a de referência e a deformada, é o **tensor de tensão de Mandel** ($\boldsymbol{\Sigma}$).

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma} \quad (2.26)$$

2.3. Princípios de balanço – equilíbrio mecânico e leis da termodinâmica

Durante todo processo de deformação, um contínuo deve respeitar uma série de princípios de balanço. Dentro do escopo do presente trabalho, foca-se nesta seção nas equações de equilíbrio mecânico (em configuração de referência e deformada) e nas leis da termodinâmica (que impõem o equilíbrio de energia e restringem as formas possíveis de troca de energia).

A conservação de momento linear em configuração deformada para o corpo \mathcal{B} em um instante t , considerando forças de superfície \boldsymbol{t} atuantes em sua fronteira Γ e forças de corpo \boldsymbol{b} agindo sobre seu volume, assume a forma:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} dv = \int_{\Gamma} \boldsymbol{t} ds + \int_{\Omega} \boldsymbol{b} dv \quad (2.27)$$

Tomando a definição do tensor tensão de Cauchy e aplicando o teorema da divergência, pode-se transformar o termo com integral na fronteira do corpo em um termo com integral em seu volume:

$$\int_{\Gamma} \boldsymbol{t} ds = \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} dv \quad (2.28)$$

Assim, como o princípio de conservação de momento linear deve ser válido para qualquer porção de volume do material, chega-se a sua forma final:

$$\int_{\Omega} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} - \rho \dot{\mathbf{v}}) dv = 0, \quad \forall dv \quad (2.29)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \rho \dot{\mathbf{v}} \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ab}}{\partial x_b} + b_a = \rho \dot{v}_a \quad (2.30)$$

Com:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \quad \text{em } \Gamma_f \text{ (região de forças externas prescritas)}$$

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}} \quad \text{em } \Gamma_u \text{ (região de deslocamentos externos prescritos)}$$

Pode-se escrever o princípio de equilíbrio de momento linear em configuração de referência, usando o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff. A dedução é omitida, mas a forma final, onde \mathbf{B} são forças de corpo definidas na configuração de referência e \mathbf{V} é a velocidade em configuração de referência, segue:

$$\operatorname{Div} \mathbf{P} + \mathbf{B} = \rho_0 \dot{\mathbf{V}} \Rightarrow \frac{\partial P_{aB}}{\partial X_B} + B_a = \rho_0 \dot{V}_a \quad (2.31)$$

Com:

$$\bar{\mathbf{t}} = \mathbf{P} \mathbf{N} \quad \text{em } \Gamma_{of} \text{ (região de forças externas prescritas)}$$

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}} \quad \text{em } \Gamma_{ou} \text{ (região de deslocamentos externos prescritos)}$$

De forma análoga ao apresentado para o momento linear, o momento angular também deve ser conservado, levando a outro conjunto de equações de conservação, omitidas aqui por estarem fora do escopo deste capítulo. Um resultado clássico do princípio de conservação de momento angular é a simetria do tensor tensão de Cauchy.

O próximo princípio de balanço de interesse é a **primeira lei da termodinâmica**, que impõe a conservação da energia durante um processo termodinâmico. Expressa a possibilidade da interconversão entre diferentes tipos de energia.

Define-se a **energia interna** do material como uma variável termodinâmica de estado que corresponde à soma de todas as formas microscópicas de energia, medida na configuração deformada no instante t ($e_c(\mathbf{x}, T, t)$) ou na configuração de referência ($e(\mathbf{X}, T, t)$). Destaca-se a dependência da energia interna de aspectos essencialmente mecânicos, representados por \mathbf{x} e

\mathbf{X} , nas configurações deformada e de referência respectivamente, e de aspectos essencialmente térmicos, representados pela temperatura absoluta (T).

$$\mathcal{E}(t) = \int_{\Omega} e_c(\mathbf{x}, T, t) dv = \int_{\Omega_0} e(\mathbf{X}, T, t) dV \quad (2.32)$$

A **potência mecânica das forças externas** é a taxa de trabalho externo introduzido no sistema pelas forças de superfície (\mathbf{t}) e de corpo (\mathbf{b}).

$$\mathcal{P}_{\text{ext}}(t) = \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} ds + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dv = \int_{\Gamma_0} \mathbf{T} \cdot \mathbf{V} dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dV \quad (2.33)$$

A **energia cinética** do sistema está relacionada à velocidade do corpo:

$$\mathcal{K}(t) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} dv = \int_{\Omega_0} \frac{1}{2} \rho_0 \mathbf{V} \cdot \mathbf{V} dV \quad (2.34)$$

A cada medida de tensão, existe uma taxa de deformação conjugada, que fornece a **potência de tensão** desenvolvida durante a deformação. A variedade de medidas em abordagem Lagrangeana e Euleriana permite a expressão da potência de tensão $\mathcal{P}_{\text{int}}(t)$ também nas configurações de referência e deformada, como se mostra a seguir:

$$\mathcal{P}_{\text{int}}(t) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} dv = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} dV = \int_{\Omega} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} dV = \int_{\Omega} \mathbf{S} : \frac{\dot{\mathbf{C}}}{2} dV \quad (2.35)$$

A potência das forças externas poderá alterar a energia cinética das partículas do corpo, ou gerar campos de tensão e deformação. Isso resulta na seguinte expressão de balanço de energia:

$$\mathcal{P}_{\text{ext}}(t) = \frac{D}{Dt} \mathcal{K}(t) + \mathcal{P}_{\text{int}}(t) \quad (2.36)$$

Considerando, além de grandezas puramente mecânicas, as grandezas puramente térmicas, tem-se que incluir ainda, no balanço de energia, a **potência térmica** ($Q(t)$). Inclui fontes de calor internas por unidade de volume (r , em configuração deformada, e R , em configuração de referência) e fluxos de calor (\mathbf{q} e \mathbf{Q}):

$$\mathcal{Q}(t) = \int_{\Gamma} -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dv + \int_{\Omega} r dv = \int_{\Gamma_0} -\mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS + \int_{\Omega_0} R dV \quad (2.37)$$

Como a energia interna é definida como a soma de todas as formas microscópicas de energia, considerando energias mecânica e térmica, chega-se à expressão para sua taxa de variação.

$$\frac{D}{Dt} \mathcal{E}(t) = \mathcal{P}_{\text{int}}(t) + \mathcal{Q}(t) \quad (2.38)$$

Substituindo esta expressão na equação de balanço acima, chega-se à forma geral da **primeira lei da termodinâmica**:

$$\frac{D}{Dt} \mathcal{K}(t) + \frac{D}{Dt} \mathcal{E}(t) = \mathcal{P}_{\text{ext}}(t) + \mathcal{Q}(t) \quad (2.39)$$

Usando as expressões apresentadas para cada um dos termos, tem-se, na configuração deformada:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + e_c \right) dv = \int_{\Gamma} (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) ds + \int_{\Omega} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + r) dv \quad (2.40)$$

Usando a expressão de balanço de energia e o teorema da divergência, chega-se à forma remanejada mais usual:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} e_c dv = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \text{div } \mathbf{q} + r) dv \quad (2.41)$$

Na configuração de referência, expressa-se a primeira lei da termodinâmica como segue. Observe-se que em t_0 o volume é constante, e a variação no tempo da primeira integral pode ser tomada como a integral da taxa de variação de e . Além disso, como dV é arbitrário, pode-se eliminar as integrais e expressar uma forma local da primeira lei da termodinâmica.

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega_0} e dV = \int_{\Omega_0} (\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \text{Div } \mathbf{Q} + R) dV, \quad \forall dV \quad (2.42)$$

$$\int_{\Omega_0} \dot{e} dV = \int_{\Omega_0} (\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \text{Div } \mathbf{Q} + R) dV, \quad \forall dV \quad (2.43)$$

$$\dot{\epsilon} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \text{Div } \mathbf{Q} + R \quad (2.44)$$

Enquanto a possibilidade de conversão entre diferentes formas de energia fica garantida na primeira lei da termodinâmica, a **segunda lei da termodinâmica** impõe limites às direções em que estas conversões podem ocorrer. Começa-se introduzindo o conceito de **entropia**. Trata-se de uma variável interna que representa o grau de desordem microscópica, podendo ser avaliada em versão Euleriana (η_c) ou Lagrangeana (η), ambas por unidade de volume.

A quantidade total de entropia do sistema termodinâmico (S) pode, então, ser expressa como segue:

$$S(t) = \int_{\Omega} \eta_c dv = \int_{\Omega_0} \eta dV \quad (2.45)$$

Os processos de transferência e geração de calor também influenciam na quantidade de entropia do sistema termodinâmico. A mudança de entropia introduzida por fluxo de calor a temperatura constante é somada àquela introduzida pela geração local de calor a temperatura constante, no que se define como o fluxo de entropia para dentro do sistema (Q):

$$Q(t) = - \int_{\Gamma} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\Omega} \frac{r}{T} dv = - \int_{\Gamma_0} \frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \mathbf{N} dS + \int_{\Omega_0} \frac{R}{T} dV \quad (2.46)$$

A forma geral da segunda lei da termodinâmica determina que a produção total de entropia (Λ) em um processo termodinâmico seja não-negativa. Considera-se a diferença entre a taxa de mudança de entropia do sistema termodinâmico e o fluxo de entropia. Se o processo é reversível, a produção total de entropia deve ser nula. Havendo produção de entropia maior que zero, o processo não poderá ser reversível. A temperatura absoluta é denotada por T.

$$\Lambda(t) = \frac{D}{Dt} S(t) - Q(t) \geq 0 \quad (2.47)$$

$$\Lambda(t) = \frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \eta_c dv + \int_{\Gamma} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} ds - \int_{\Omega} \frac{r}{T} dv \geq 0 \quad (2.48)$$

$$\Lambda(t) = \frac{D}{Dt} \int_{\Omega_0} \eta dV + \int_{\Gamma_0} \frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \mathbf{N} dS - \int_{\Omega_0} \frac{R}{T} dV \geq 0 \quad (2.49)$$

Usando o teorema da divergência, chega-se à forma local da segunda lei da termodinâmica, na configuração de referência:

$$\dot{\eta} - \frac{R}{T} + \frac{1}{T} \text{Div } \mathbf{Q} - \frac{1}{T^2} \mathbf{Q} \cdot \text{Grad } T \geq 0 \quad (2.50)$$

Substituindo a forma local da primeira lei da termodinâmica, chega-se à chamada **desigualdade de Clausius-Duhem**, outra forma local para a segunda lei da termodinâmica.

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{e} + T\dot{\eta} - \frac{1}{T} \mathbf{Q} \cdot \text{Grad } T \geq 0 \quad (2.51)$$

Como o calor sempre flui naturalmente de regiões mais quentes para regiões mais frias, o termo $\mathbf{Q} \cdot \text{Grad } T$ será sempre menor ou igual a zero. Assim sendo, uma forma mais exigente da segunda lei da termodinâmica, conhecida como **desigualdade de Clausius-Planck**, pode ser expressa como segue, introduzindo o conceito de dissipação interna (\mathcal{D}_{int}):

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{e} + T\dot{\eta} \geq 0 \quad (2.52)$$

A dissipação interna pode ser introduzida na forma local da primeira lei da termodinâmica (2.44), o que leva a uma forma entrópica para a expressão, que constitui uma equação de evolução de entropia.

$$T\dot{\eta} = -\text{Div } \mathbf{Q} + \mathcal{D}_{\text{int}} + R \quad (2.53)$$

A descrição dos princípios de balanço e dos processos termodinâmicos em função apenas das variáveis de deslocamento \mathbf{x} ou \mathbf{X} (e de grandezas diretamente delas derivadas, como por exemplo o tensor gradiente de deformação \mathbf{F}) e de variáveis térmicas como a temperatura T é bastante geral. A descrição de comportamentos dissipativos, por exemplo, exige uma descrição mais detalhada dos mecanismos internos desenvolvidos durante os processos de deformação, uma vez que são envolvidos efeitos de histórico de deformações e temperaturas.

Com o problema de considerar o histórico de deformações em mente, de Souza Neto (2009), retomando trabalhos e autores clássicos como Truesdell, Rivlin, Green e outros, argumenta que para problemas de interesse prático sempre é necessário admitir hipóteses simplificativas nas dependências de relações constitutivas, de forma que o estado termodinâmico de um corpo possa ser determinado pelo valor instantâneo de um número

finito de variáveis. Esta é a hipótese básica do que se convencionou chamar de **termodinâmica de variáveis internas**, cujas linhas gerais se apresentam a partir de agora.

Um possível conjunto de variáveis representativas de um problema dissipativo geral pode incluir variáveis externas representando deformações (aqui se escolhe o tensor gradiente de deformação \mathbf{F}) e aspectos térmicos (por exemplo, a entropia específica η), além de variáveis internas denotadas, genericamente, por \mathbf{Z} . Diferentes processos dissipativos implicam no uso de diferentes tipos de variáveis internas, que podem ser de natureza escalar, vetorial ou tensorial.

Dentro deste contexto, pode-se redefinir a energia interna de um ponto material em função de \mathbf{F} , η e \mathbf{Z} , como feito por Coleman e Gurtin (1967):

$$e = e(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) \quad (2.54)$$

Tomando a variação da energia interna com relação às variáveis externas e internas e substituindo na desigualdade de Clausius-Duhem apresentada na Equação (2.51), chega-se à seguinte expressão:

$$\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial e}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial e}{\partial \eta} : \dot{\eta} - \frac{\partial e}{\partial \mathbf{Z}} : \dot{\mathbf{Z}} + T\dot{\eta} - \frac{1}{T} \mathbf{Q} \cdot \text{Grad } T \geq 0 \quad (2.55)$$

Observa-se que para que a equação acima seja satisfeita em processos termodinâmicos em que não ocorram variações de entropia ($\dot{\eta} = 0$), temperatura ($\text{Grad } T$) ou de variáveis internas ($\dot{\mathbf{Z}} = 0$), deve valer a seguinte relação:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial e}{\partial \mathbf{F}} \quad (2.56)$$

Da mesma forma, em processos em que não ocorram deformações ($\dot{\mathbf{F}} = 0$) nem mudanças das variáveis internas ($\dot{\mathbf{Z}} = 0$), deve-se ter:

$$T = \frac{\partial e}{\partial \eta} \quad (2.57)$$

Diz-se que as tensões \mathbf{P} e a temperatura T são as forças termodinâmicas associadas às variáveis de deformação \mathbf{F} e entropia η , respectivamente. Define-se ainda uma força termodinâmica (\mathbf{Y}) associada às variáveis internas, onde o sinal negativo é usado como forma de indicar o caráter dissipativo:

$$\mathbf{Y} = -\frac{\partial e}{\partial \mathbf{Z}} \quad (2.58)$$

Substituindo as equações (2.56-58) na expressão (2.55), e admitindo a existência de um funcional de dissipação térmica ($\chi(\mathbf{Q}, T)$), associado a uma força termodinâmica dissipativa $G = -\frac{\text{Grad } T}{T} = \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Q}}$, tem-se:

$$\mathbf{Y} : \dot{\mathbf{Z}} + G \cdot \mathbf{Q} \geq 0 \quad (2.59)$$

Onde o primeiro termo representa a dissipação interna do material (denotada anteriormente por \mathcal{D}_{int}) e o segundo termo representa a dissipação térmica por fluxo de calor.

Mostra-se, assim, que a energia interna serve como uma função potencial para as tensões \mathbf{P} e para a temperatura T , ou seja, suas derivadas com relação às variáveis que descrevem um problema geral fornecem as respostas em tensão e temperatura para cada ponto material.

2.4. Hiperelasticidade

Os chamados materiais hiperelásticos, uma subdivisão dos materiais elásticos, são caracterizados pela existência de uma função de energia livre (W , chamada **energia livre de Helmholtz**), dependente exclusivamente do estado de deformação do corpo. O estado de tensão do corpo pode ser determinado pela derivada da energia livre de Helmholtz.

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad (2.60)$$

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad (2.61)$$

Em materiais isotrópicos, rotações puras na configuração de referência não geram alteração do comportamento durante a deformação, e portanto não devem alterar o estado de tensão final do corpo. Assim, admite-se que a energia livre de Helmholtz deva ser dependente do tensor de Cauchy-Green à direita, simétrico e imune a rotações de corpo rígido, tornando-a uma grandeza objetiva. Pode-se ainda representar a energia livre de Helmholtz, para materiais

isotrópicos, como função apenas dos alongamentos principais (λ) dos tensores de alongamento (\mathbf{U} e \mathbf{V}).

Retomando a separação entre parcelas volumétrica e isocórica de deformação, pode-se geralmente admitir que a energia livre é decomposta aditivamente entre parcelas volumétrica e isocórica.

$$W(\mathbf{C}) = \widehat{W}(\widehat{\mathbf{C}}) + W^{\text{vol}}(J) \quad (2.62)$$

A expressão para o estado de tensão, fica então:

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} = 2\mathbf{F} \left(\frac{\partial \widehat{W}(\widehat{\mathbf{C}})}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} \frac{\partial \widehat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W^{\text{vol}}(J)}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} \right) \quad (2.63)$$

Usando as expressões a seguir, onde \mathcal{I} é o tensor identidade de quarta ordem:

$$\frac{\partial \widehat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right] \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} = \frac{J}{2} \mathbf{C}^{-1} \quad (2.65)$$

Chega-se à expressão para o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff a seguir:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= 2\mathbf{F} \left(J^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{\partial \widehat{W}(\widehat{\mathbf{C}})}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial \widehat{W}(\widehat{\mathbf{C}})}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} : \mathbf{C} \right) \mathbf{C}^{-1} \right] + \frac{\partial W^{\text{vol}}(J)}{\partial J} \frac{J}{2} \mathbf{C}^{-1} \right) \\ &= \mathbf{F} \left(J^{-\frac{2}{3}} \text{DEV} \left(2 \frac{\partial \widehat{W}(\widehat{\mathbf{C}})}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} \right) + \frac{\partial W^{\text{vol}}(J)}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1} \right) \end{aligned} \quad (2.66)$$

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

A relação entre variações de deformação e tensão é dada pelo chamado **tensor material** (\mathcal{C} , um tensor de quarta ordem), importante na implementação numérica de modelos, especialmente quando se usa processo de Newton para resolver sistemas não-lineares. O tensor material também pode ser obtido a partir da energia livre de Helmholtz.

$$d\mathbf{S} = \mathcal{C} : d\mathbf{E} \quad (2.67)$$

$$\mathcal{C} = 4 \frac{\partial^2 W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} \quad (2.68)$$

O tensor material apresenta algumas simetrias:

$$\mathcal{C}_{abcd} = \mathcal{C}_{cdab} = \mathcal{C}_{abdc} \quad (2.69)$$

Modelos de viscoplasticidade, foco deste trabalho, não são, por definição, hiperelásticos. Existe dissipação envolvida durante o processo de deformação, de forma que a energia livre de Helmholtz não depende exclusivamente do estado de deformação, mas também de outras variáveis internas e suas taxas. O objetivo deste trabalho, seguindo a linha adotada, entre outros, por Fancello (2006) e Vassoler (2007), por exemplo, é desenvolver um modelo para materiais dissipativos que conserve propriedades hiperelásticas, de forma que se obtenha uma função cuja derivada forneça o estado de tensão do corpo em um dado momento. Para tanto, busca-se uma formulação variacional, cujos princípios são explorados na seção seguinte.

2.5. Princípios variacionais

Formulações variacionais se baseiam na derivação de todas as equações responsáveis pelo comportamento material de um funcional expresso em função de um número conveniente de variáveis independentes. O trabalho de Stainier (2006), revisado a seguir em linhas gerais, apresenta um panorama completo dos princípios variacionais que levam à formulação incremental do problema termomecânico.

2.5.1. Elasticidade quase-estática

Considerando, inicialmente, apenas o problema mecânico de elasticidade estática, pode-se formular, a partir dos campos independentes \mathbf{x} (configuração deformada), \mathbf{F} (tensor gradiente de deformação) e \mathbf{P} (primeiro tensor de Piola-Kirchhoff), o princípio variacional de Hu-Washizu-Fraeijs de Veubeke. O funcional \mathcal{H} relativo a ele é da forma:

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P}) = \int_{\Omega_0} [W(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) + \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} - \mathbf{F})] dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{x} dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{x} dS \quad (2.70)$$

Onde a energia livre de Helmholtz é expressa em função de $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ para ficar imune a rotações de corpo rígido e mudanças de referencial.

A resolução do problema é obtida a partir da extremização deste potencial com relação às variáveis \mathbf{x} , \mathbf{F} e \mathbf{P} admissíveis (respeitando, respectivamente, as condições de deslocamento prescrito na fronteira Γ_{of} e de determinante maior que zero, evitando o colapso volumétrico), expresso como:

$$\inf_{\mathbf{x}, \mathbf{F} \text{ adm}} \sup_{\mathbf{P}} \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P}) \quad (2.71)$$

As condições de otimalidade com relação a cada uma das variáveis internas, representadas pelas derivadas de Gâteaux, fornecem as equações que regem o problema:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{x}}[\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P})](\delta \mathbf{x}) &= \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{x} dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \delta \mathbf{x} dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{x} dS \\ &= 0, \quad \forall \delta \mathbf{x} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.72)$$

$$D_{\mathbf{F}}[\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P})](\delta \mathbf{F}) = \int_{\Omega_0} \left(2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} - \mathbf{P} \right) \cdot \delta \mathbf{F} dV = 0, \quad \forall \delta \mathbf{F} \text{ adm.} \quad (2.73)$$

$$D_{\mathbf{P}}[\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P})](\delta \mathbf{P}) = \int_{\Omega_0} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} - \mathbf{F}) \cdot \delta \mathbf{P} dV = 0, \quad \forall \delta \mathbf{P} \text{ adm.} \quad (2.74)$$

Aplicando o teorema da divergência sobre a condição de otimalidade com relação à configuração deformada \mathbf{x} (Equação 2.72), chega-se à equação de equilíbrio de momento linear, sujeita às restrições de forças prescritas fronteira Γ_{of} :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{P} + \mathbf{B} = 0, \quad \text{com } \bar{\mathbf{t}} \text{ em } \Gamma_{of} \quad (2.75)$$

A derivada de Gâteaux com relação à variável independente \mathbf{F} (Equação 2.73) fornece a relação constitutiva entre tensão e deformação.

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad (2.76)$$

A condição de compatibilidade é derivada da derivada de Gâteaux com relação a \mathbf{P} (Equação 2.74):

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{x} \quad (2.77)$$

Se a condição de compatibilidade e a relação constitutiva são admitidas satisfeitas *a priori*, é possível reduzir o funcional a apenas uma variável independente (\mathbf{x}), no que se chama de **princípio variacional da energia potencial**, do qual se deriva a equação de equilíbrio do momento linear.

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_0} W(\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{x}^T\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{x})dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{x}dS \quad (2.78)$$

A condição de otimalidade com relação ao campo de deslocamentos \mathbf{x} fornece:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{x}}[\mathcal{H}(\mathbf{x})](\delta\mathbf{x}) &= \int_{\Omega_0} 2\mathbf{F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} : \nabla_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x}dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \delta\mathbf{x}dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\mathbf{x}dS \\ &= 0, \quad \forall \delta\mathbf{x} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.79)$$

Aplicando o teorema da divergência, chega-se à equação de equilíbrio mecânico:

$$\nabla_{\mathbf{x}} \left(2\mathbf{F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \right) + \mathbf{B} = 0, \quad \text{com } \bar{\mathbf{t}} \text{ em } \Gamma_{of} \quad (2.80)$$

2.5.2. Termoelasticidade quase-estática

Considere-se agora a inclusão de variáveis térmicas no problema de elasticidade de um campo, apresentado sob a forma do princípio variacional de energia potencial na Equação (2.78) com dependência com relação ao campo de deslocamentos \mathbf{x} , alternativamente (mas equivalentemente) representado a seguir em taxas de deformação:

$$\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}) = \int_{\Omega_0} \dot{W}(\nabla_{\mathbf{x}}\dot{\mathbf{x}}^T\nabla_{\mathbf{x}}\dot{\mathbf{x}})dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{x}}dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{x}}dS \quad (2.81)$$

É conveniente ainda reintroduzir a energia interna de um ponto material como uma transformada de Legendre-Fenchel da energia livre de Helmholtz, marcando a passagem da

dependência explícita da temperatura para a dependência explícita da entropia. Para o caso geral, usando o conjunto de variáveis internas \mathbf{Z} , de forma a incluir tanto os casos conservativos quanto dissipativos, pode-se escrever:

$$e(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) = \sup_{\eta} [W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) + T\eta] \quad (2.82)$$

O uso da energia interna em potenciais para descrição de efeitos térmicos, ao usar a entropia específica como variável térmica, permite que se faça uma distinção entre uma temperatura dita externa ou mensurada de um ponto material (denotada por T), e uma temperatura dita interna, variável de estado derivada da energia interna (denotada por θ):

$$\theta(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) = \frac{\partial e(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z})}{\partial \eta} \quad (2.83)$$

A condição de equilíbrio térmico local pode, então, ser obtida *a posteriori* como a igualdade entre T e θ .

A evolução de um processo termodinâmico termoelástico (portanto conservativo, e independente do conjunto de variáveis internas \mathbf{Z}) pode ser descrita com o auxílio do seguinte funcional:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \mathbf{Q}, T) = & \int_{\Omega_0} \left[\dot{e} - T \left(\dot{\eta} + \text{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} \right) + \chi \left(\frac{T}{\theta} \mathbf{Q}; \theta \right) \right] dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{x}} dV \\ & - \int_{\Gamma_{\text{of}}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{x}} dS + \int_{\Omega_0} R \frac{T}{\theta} dV + \int_{\Gamma_{\text{of}}} \bar{T} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} \cdot \mathbf{N} dS \end{aligned} \quad (2.84)$$

Onde se reintroduz o potencial χ de dissipação térmica, usado na Equação (2.59) para representar a dissipação térmica pelo fluxo de calor. Considera-se também uma região de fronteira (Γ_{of}) de temperatura imposta (\bar{T}).

A condição necessária de otimalidade com relação a $\dot{\mathbf{x}}$ fornece a condição de equilíbrio mecânico equivalente à Equação (2.80), lembrando que a energia interna é um funcional para o estado de tensões (2.56):

$$\begin{aligned} D_{\dot{\mathbf{x}}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \mathbf{Q}, T)](\delta \dot{\mathbf{x}}) &= \int_{\Omega_0} \frac{\partial e}{\partial \mathbf{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \dot{\mathbf{x}} dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \delta \dot{\mathbf{x}} dV - \int_{\Gamma_{\text{of}}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \dot{\mathbf{x}} dS \\ &= 0, \quad \forall \delta \dot{\mathbf{x}} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.85)$$

Já a derivada de Gâteaux com relação à taxa de variação da entropia específica ($\dot{\eta}$) fornece a condição de equilíbrio térmico local em todo o corpo como resultado:

$$\begin{aligned} D_{\dot{\eta}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \mathbf{Q}, T)](\delta\dot{\mathbf{x}}) &= \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial e}{\partial \eta} - T \right) \cdot \delta\dot{\eta} dV = \int_{\Omega_0} (\theta - T) \cdot \delta\dot{\eta} dV \\ &= 0, \quad \forall \delta\dot{\eta} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.86)$$

A condição de otimalidade com relação ao fluxo de calor (\mathbf{Q}) fornece:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{Q}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \mathbf{Q}, T)](\delta\mathbf{Q}) &= \int_{\Omega_0} \left[-T \text{Div} \frac{\delta\mathbf{Q}}{\theta} + \frac{T}{\theta} \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \delta\mathbf{Q} \right] dV + \int_{\Gamma_{0T}} \frac{\bar{T}}{\theta} \delta\mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS \\ &= 0, \quad \forall \delta\mathbf{Q} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.87)$$

Por fim, a condição de otimalidade com relação à temperatura externa T resulta em:

$$\begin{aligned} D_T[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \mathbf{Q}, T)](\delta T) &= \int_{\Omega_0} \left[-\left(\dot{\eta} + \text{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} \right) + \frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Q}} \mathbf{Q} + R \right) \right] \delta T dV \\ &= 0, \quad \forall \delta T \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.88)$$

Usando o teorema de Gauss sobre a Equação (2.87), e admitindo a condição de equilíbrio térmico local, obtém-se a expressão de dissipação térmica dada pela lei de Fourier, bem como a condição de contorno em temperatura.

$$\frac{\partial \chi \left(\frac{T}{\theta} \mathbf{Q}; \theta \right)}{\partial \mathbf{Q}} = - \frac{\text{Grad } T}{T} \quad \text{em } \mathcal{B}_0 \quad (2.89)$$

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_{0T} \quad (2.90)$$

Substituindo as expressões acima na condição necessária de otimalidade com relação à temperatura (2.88), chega-se a uma forma entrópica para a primeira lei da termodinâmica:

$$\theta \dot{\eta} = - \text{Div } \mathbf{Q} - \frac{\text{Grad } T}{T} \mathbf{Q} + R \quad (2.91)$$

Esta forma é equivalente àquela dada pela Equação (2.53), quando considerada a condição de equilíbrio térmico local ($\theta = T$). Observe-se que, no caso termoelástico, a dissipação interna é dada apenas pela parcela térmica por fluxo de calor.

Quando o problema é puramente térmico, com equilíbrio mecânico satisfeito, fica claro que o potencial passa a depender apenas da produção líquida de entropia ($\dot{\eta}$), do fluxo de calor (\mathbf{Q}) e da temperatura externa (T). Em outras palavras, o problema puramente térmico é um caso especial do problema termoelástico, quando o equilíbrio mecânico é satisfeito.

2.5.3. Problemas dissipativos

A inclusão de comportamentos mecânicos dissipativos no modelo faz com que o estado do corpo não possa mais ser completamente determinado por seu estado de deformação \mathbf{x} e sua temperatura T (ou entropia η), mas dependa também de variáveis internas e de suas leis de evolução (considerando que a dissipação se dá durante comportamentos viscosos). A formulação variacional passa a incluir, além da energia livre de Helmholtz, pseudo-potenciais de dissipação ($\bar{\Psi}$), ambos dependentes das variáveis internas \mathbf{Z} que descrevem a história dos processos dissipativos no sistema.

O funcional em taxas escreve-se agora como segue, incluindo as dependências das variáveis internas \mathbf{Z} e a representação de todos os comportamentos dissipativos, térmicos e mecânicos, dentro de um pseudo-potencial dissipativo único $\bar{\Psi}$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T) &= \int_{\Omega_0} \left[\dot{e}(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) - T \left(\dot{\eta} + \text{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} \right) \right. \\
&+ \bar{\Psi} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\mathbf{F}}, \frac{T}{\theta} \mathbf{Q}, \frac{T}{\theta} \dot{\mathbf{Z}}; \mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z} \right) \left. \right] dV + \int_{\Omega_0} R \frac{T}{\theta} dV + \int_{\Gamma_{oT}} \frac{\bar{T}}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS \\
&- \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{x}} dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{x}} dS
\end{aligned} \tag{2.92}$$

As condições de otimalidade fornecerão todas as equações envolvidas no problema. A possibilidade de comportamentos termomecanicamente acoplados aparece na dependência da evolução da energia interna tanto de variáveis térmicas (entropia) quanto mecânicas (variáveis internas e gradiente de deformações).

O pseudo-potencial dissipativo inclui todos os comportamentos dissipativos, térmicos e mecânicos. Todas as taxas de variáveis independentes aparecem multiplicadas por um fator $\frac{T}{\theta}$, o que permite que derivadas em relação à temperatura T possam ser expressas por derivadas com relação a variáveis internas. A dependência do pseudo-potencial com relação a \mathbf{F} , η e \mathbf{Z} representa a possibilidade do comportamento dissipativo variar de acordo com o estado atual do material, não dependendo apenas das taxas de variação das variáveis independentes.

A condição de otimalidade com relação a $\dot{\mathbf{x}}$ fornece a equação de equilíbrio de momento linear em nova forma. Surge o conceito de força termodinâmica (derivadas de potenciais com relação às variáveis independentes) na parte não-conservativa da força $\frac{T}{\theta} \bar{\Psi}_{,\mathbf{F}}$.

$$\begin{aligned} D_{\dot{\mathbf{x}}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T)](\delta\dot{\mathbf{x}}) \\ = \int_{\Omega_0} \left[\mathbf{e}_{,\mathbf{F}} + \frac{T}{\theta} \bar{\Psi}_{,\mathbf{F}} \right] : \nabla_{\mathbf{x}} \delta\dot{\mathbf{x}} dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \delta\dot{\mathbf{x}} dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\dot{\mathbf{x}} dS \\ = 0, \quad \forall \delta\dot{\mathbf{x}} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.93)$$

Onde pode-se definir o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff como:

$$\mathbf{P} = \left[\mathbf{e}_{,\mathbf{F}} + \frac{T}{\theta} \bar{\Psi}_{,\mathbf{F}} \right] \quad (2.94)$$

A condição de otimalidade com relação à taxa de variação de entropia fornece a condição de equilíbrio térmico local.

Já a condição de otimalidade com relação a $\dot{\mathbf{Z}}$ leva à definição de força termodinâmica interna relacionada às variáveis internas. Como são forças internas, sua resultante é nula, levando à definição a seguir:

$$D_{\dot{\mathbf{Z}}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T)](\delta\dot{\mathbf{Z}}) = \int_{\Omega_0} \left[\mathbf{e}_{,\mathbf{Z}} + \frac{T}{\theta} \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{Z}}} \right] : \delta\dot{\mathbf{Z}} dV = 0, \quad \forall \delta\dot{\mathbf{Z}} \text{ adm.} \quad (2.95)$$

A dissipação de energia na forma de fluxo de calor irreversível é o resultado da condição de otimalidade do potencial com relação à variável \mathbf{Q} . Aparece também como uma força termodinâmica do potencial dissipativo relacionada ao vetor fluxo.

$$\begin{aligned}
D_{\mathbf{Q}}[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T)](\delta\mathbf{Q}) \\
&= \int_{\Omega_0} \left[-T \operatorname{Div} \frac{\delta\mathbf{Q}}{\theta} + \frac{T}{\theta} \bar{\Psi}_{,\mathbf{Q}} \cdot \delta\mathbf{Q} \right] dV + \int_{\Gamma_{\text{OT}}} \frac{\bar{T}}{\theta} \delta\mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS \quad (2.96) \\
&= 0, \quad \forall \delta\mathbf{Q} \text{ adm.}
\end{aligned}$$

Por fim, a condição de otimalidade do potencial termomecânico com relação à temperatura T fornece a equação do calor em forma entrópica, onde a dissipação interna é a soma da dissipação associada a cada uma das variáveis independentes. Inclui, portanto, dissipação mecânica (comportamentos viscosos e deformações irreversíveis, como plastificação) e térmica (fluxo irreversível de calor).

$$\begin{aligned}
D_T[\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T)](\delta T) \\
&= \int_{\Omega_0} \left[-\dot{\eta} - \operatorname{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} + \frac{1}{\theta} (\bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{F}}} : \dot{\mathbf{F}} + \bar{\Psi}_{,\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{Q} + \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{Z}}} \cdot \dot{\mathbf{Z}}) + \frac{R}{\theta} \right] \delta T dV \quad (2.97) \\
&= 0, \quad \forall \delta T \text{ adm.}
\end{aligned}$$

Como a Equação (2.97) é válida para qualquer variação de temperatura admissível, a partir dela pode-se chegar a uma forma alternativa para a primeira lei da termodinâmica, onde fica clara a identificação das forças termodinâmicas associadas ao pseudo-potencial dissipativo com a dissipação interna do material:

$$\dot{\eta} = - \operatorname{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} + \frac{1}{\theta} (\bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{F}}} : \dot{\mathbf{F}} + \bar{\Psi}_{,\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{Q} + \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{Z}}} \cdot \dot{\mathbf{Z}}) + \frac{R}{\theta} = - \operatorname{Div} \frac{\mathbf{Q}}{\theta} + \mathcal{D}_{\text{int}} + \frac{R}{\theta} \quad (2.98)$$

Como os problemas dissipativos dependem do histórico de deformações e temperaturas, representado através das variáveis internas e suas leis de evolução, os funcionais de onde se derivam as equações que regem as respostas do sistema termodinâmico devem ser construídos a cada passo de carga. Os funcionais mudam com a evolução das variáveis internas.

Os chamados pseudo-potenciais incrementais, válidos dentro de seu respectivo passo de carga, se baseiam na aproximação por diferenças finitas de todas as taxas do potencial $\mathcal{H}(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, \mathbf{Q}, T)$. Assim, a taxa de entropia $\dot{\eta}$, por exemplo, é substituída pela diferença entre os valores de entropia no fim e no início do passo de tempo (de agora em diante denotados, respectivamente, como instantes $n+1$ e n) dividida pelo tamanho do passo de tempo (denotado Δt). A fim de eliminar o vetor fluxo de calor \mathbf{Q} da lista de variáveis independentes, a lei de

Fourier é novamente admitida *a priori*. Como o potencial muda a cada passo de tempo, ele passa a ser denotado \mathcal{H}_n , fazendo referência a sua dependência do estado inicial no passo, sempre totalmente conhecido, sendo proposto por Stainier (2006) na forma da Equação (2.99):

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \eta_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \eta_n, \mathbf{Z}_n, T_n) \\
&= \int_{\Omega_0} \left[e(\mathbf{x}_{n+1}, \eta_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}) - e(\mathbf{x}_n, \eta_n, \mathbf{Z}_n) - T_{n+1}(\eta_{n+1} - \eta_n) \right. \\
&+ \Delta t \bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, -\frac{\text{Grad } T_{n+1}}{T_{n+1}}, \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \eta_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha} \right) \left. \right] dV \\
&+ \int_{\Omega_0} \Delta t R \frac{T_{n+1}}{T_n} dV + \int_{\Gamma_{OT}} \Delta t \frac{T_{n+1}}{T_n} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dV \\
&- \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dS
\end{aligned} \tag{2.99}$$

O pseudo-potencial dissipativo está expresso em termos de um estado intermediário genérico em $n + \alpha$. Diferentes possibilidades estão expressas por esta notação, desde um esquema totalmente explícito, quando $n + \alpha = n$, até um esquema totalmente implícito, quando $n + \alpha = n + 1$. É interessante observar, também, que como se admite que o estado em n é totalmente conhecido, o conceito de temperatura interna θ é transformado. Arbitra-se que a temperatura interna é aquela do instante n .

Reintroduzindo o conceito de energia livre de Helmholtz, agora dependente do gradiente de deformação, das variáveis internas e da temperatura, pode-se remover a entropia da lista de variáveis independentes. O funcional passa a não mais incluir a entropia ao final do passo de tempo, de forma que sua atualização é feita por fora, a partir da primeira lei da termodinâmica em forma entrópica. Tem-se, finalmente, o formato dentro do qual o modelo viscoplástico acoplado deste trabalho foi construído:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n) &= \int_{\Omega_0} \left[W(\mathbf{F}_{n+1}, T_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}) - W(\mathbf{F}_n, T_n, \mathbf{Z}_n) - \eta_n(T_{n+1} - T_n) \right. \\
&+ \Delta t \bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{T_{n+1}}{T_n} \mathbf{Q}, \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha} \right) \left. \right] dV \\
&+ \int_{\Omega_0} \Delta t R \frac{T_{n+1}}{T_n} dV + \int_{\Gamma_{0T}} \Delta t \frac{T_{n+1}}{T_n} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS \\
&- \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dS
\end{aligned} \tag{2.100}$$

A resolução do problema termomecânico é baseada no princípio variacional seguinte a cada passo de tempo. Uma vez determinado o estado ao final de um passo de tempo, um novo funcional é construído para o passo de tempo seguinte.

$$\inf_{\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}} \sup_{T_{n+1}} \mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n) \tag{2.101}$$

A implicação por trás do uso do princípio variacional (2.101) é a convexidade do potencial \mathcal{H}_n com relação às variáveis internas e às variáveis de deslocamento, e sua concavidade com relação à temperatura. Buscam-se soluções estáveis no sentido de que minimizem a energia potencial de deformação incremental e maximizem a temperatura (e a entropia).

Stainier (2006) observa que os problemas de extremização com relação às variáveis de deslocamento \mathbf{x}_{n+1} e com relação à temperatura T_{n+1} são problemas de natureza global, devido à influência de operadores de gradiente. Enquanto isto, o problema de extremização com relação às variáveis internas \mathbf{Z}_{n+1} é puramente local.

Finalmente, são apresentadas as condições de otimalidade do pseudo-potencial incremental (2.100). Com relação a \mathbf{x}_{n+1} , tem-se:

$$\begin{aligned}
D_{\mathbf{x}_{n+1}} [\mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n)] (\delta \mathbf{x}_{n+1}) &= \int_{\Omega_0} \left[W_{,\mathbf{x}_{n+1}} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \bar{\Psi}_{,\mathbf{F}} \right] \delta \mathbf{x}_{n+1} dV - \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1} dV \\
&- \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1} dS = 0, \quad \forall \delta \mathbf{x}_{n+1} \text{ adm.}
\end{aligned} \tag{2.102}$$

Fica clara a composição das tensões no que Stainier (2006) chama de partes conservativa ($W_{\mathbf{x}_{n+1}}$, força termodinâmica associada ao potencial de energia livre de Helmholtz) e dissipativa ($\frac{T_{n+1}}{T_n} \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{F}}}$, força termodinâmica associada ao pseudo-potencial dissipativo).

Com relação às variáveis internas \mathbf{Z}_{n+1} , tem-se a Equação (2.103), que demonstra a equivalência entre as forças termodinâmicas associadas às variáveis internas a partir da energia livre de Helmholtz e do pseudo-potencial dissipativo ($W_{\mathbf{z}_{n+1}} = -\frac{T_{n+1}}{T_n} \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{z}}}$).

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{z}_{n+1}}[\mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n, T_n)](\delta \mathbf{z}_{n+1}) \\ = \int_{\Omega_0} \left[W_{\mathbf{z}_{n+1}} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{z}}} \right] \delta \mathbf{z}_{n+1} dV = 0, \quad \forall \delta \mathbf{z}_{n+1} \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.103)$$

E com relação à temperatura T_{n+1} , tem-se a Equação (2.104), que consiste de um balanço incremental de energia, também com parcelas conservativa ($W_{T_{n+1}}$) e dissipativas (associadas aos mecanismos dissipativos dependentes de $\dot{\mathbf{F}}$, \mathbf{Q} e $\dot{\mathbf{z}}$):

$$\begin{aligned} D_{T_{n+1}}[\mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n, T_n)](\delta T_{n+1}) \\ = \int_{\Omega_0} \left[W_{T_{n+1}} - \eta_n + \frac{\Delta t}{T_n} (\bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{F}}} : \dot{\mathbf{F}} + \bar{\Psi}_{,\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{Q} + \bar{\Psi}_{,\dot{\mathbf{z}}} \cdot \dot{\mathbf{z}}) \right. \\ \left. + \frac{R}{T_n} \right] \delta T_{n+1} dV + \int_{\Gamma_{\text{OT}}} \frac{\Delta t}{T_n} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} dS = 0, \quad \forall \delta T \text{ adm.} \end{aligned} \quad (2.104)$$

3. Formulação do problema adiabático termomecanicamente acoplado

Neste capítulo, detalha-se o desenvolvimento do modelo matemático para o problema adiabático termomecanicamente acoplado dentro de uma formulação variacional. Começa-se apresentando as hipóteses básicas que pautam a construção do potencial que descreve o problema. As hipóteses cinemáticas acompanham o que foi feito em Vassoler (2007), enquanto as hipóteses térmicas definem o problema adiabático, como feito em Stainier e Ortiz (2008). A divisão da energia livre de Helmholtz em parcelas responsáveis por diferentes formas de energia é então detalhada. É dada atenção especial às dependências térmicas em cada uma das parcelas de energia livre, com discussões a respeito dos mecanismos de acoplamento termomecânico. A composição do pseudo-potencial de dissipação, baseada no trabalho de Stainier e Ortiz (2008), também é apresentada em detalhes, levando à montagem da expressão variacional do problema adiabático termomecanicamente acoplado. Passa-se então à discussão dos principais aspectos envolvidos no problema incremental de minimização com relação às variáveis internas, desde a inclusão das restrições sobre variáveis internas com uso de multiplicadores de Lagrange, passando pelos detalhes de verificação de plastificação e pela montagem do esquema de Newton, até a construção do tensor material do problema.

3.1. Hipóteses básicas e definições – cinemática

Uma das características de modelos clássicos que descrevem comportamentos viscoplásticos é a hipótese da decomposição multiplicativa do gradiente de deformações em partes plástica (\mathbf{F}^p) e elástica (\mathbf{F}^e).

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (3.1)$$

A porção plástica de deformação, ou seja, aquela que não é recuperada uma vez que se retorne ao estado não solicitado de tensões, é considerada isocórica. É resultado de rupturas de ligações entre macromoléculas poliméricas ou da geração e movimento de discordâncias

no reticulado cristalino dos metais, por exemplo, em oposição às deformações elásticas, que se refletem em distorções da microestrutura, recuperáveis quando as tensões aplicadas são relaxadas. Consideram-se deformações elásticas (recuperáveis com a retirada da solitação) isocóricas e volumétricas, de modo que se pode retomar a separação do gradiente de deformações em partes isocórica e volumétrica.

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{vol}} \hat{\mathbf{F}} = \mathbf{F}^{\text{vol}} \hat{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^p \quad (3.2)$$

Definições derivadas desta separação das diferentes parcelas do tensor gradiente de deformação são possíveis. Assim, define-se o tensor de Cauchy-Green à direita da parte isocórica da deformação elástica, uma medida dita objetiva, independente de rotações de corpo rígido e mudanças de referencial. Sua representação em grandezas espectrais (autovalores c_j^e e autovetores \mathbf{E}_j^e) será útil quando da montagem do pseudo-potencial incremental.

$$\hat{\mathbf{C}}^e = \hat{\mathbf{F}}^{eT} \hat{\mathbf{F}}^e = \sum_{j=1}^3 c_j^e \mathbf{E}_j^e \quad (3.3)$$

Dada a dependência dos processos dissipativos com relação à taxa de plastificação do material, torna-se importante também a definição de uma lei de escoamento. Para tanto, admitindo que as deformações plásticas sejam irrotacionais, define-se o tensor velocidade de deformação plástica (\mathbf{D}^p):

$$\mathbf{D}^p = \text{sym}(\mathbf{L}^p) = \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \quad (3.4)$$

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p \quad (3.5)$$

A exemplo da parte isocórica elástica, a decomposição espectral das deformações plásticas pautará a construção do potencial de energia livre de Helmholtz do problema adiabático. As direções de plastificação e a amplitude de plastificação são usadas como variáveis internas, representativas das deformações plásticas. Propõe-se a seguinte decomposição do tensor velocidade de deformação plástica, onde \dot{q} responde pela amplitude de plastificação, enquanto \mathbf{M} define à direção de plastificação.

$$\mathbf{D}^p = \dot{q} \mathbf{M} = \dot{q} \sum_{i=1}^3 q_i \mathbf{M}_i \quad (3.6)$$

Esta decomposição precisa das seguintes restrições adicionais sobre as variáveis envolvidas:

$$\dot{q} \in \mathbb{R}^+ \quad (3.7)$$

$$q_i \in K_Q = \left\{ p_i \in \mathbb{R}: \sum_{i=1}^3 p_i = 0; \sum_{i=1}^3 p_i^2 = \frac{3}{2} \right\} \quad (3.8)$$

$$\mathbf{M}_i \in K_M = \{ \mathbf{N}_i \in \text{Sym}: \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_i = 1; \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j \} \quad (3.9)$$

O conjunto K_Q impõe a condição de normalização da direção de plastificação com traço nulo, necessário devido à hipótese de deformações plásticas isocóricas. Já o conjunto K_M impõe as propriedades de ortogonalidade de autoprojeções. Admite-se que \dot{q} deva ser positivo, já que deformações plásticas (movimento de discordâncias do reticulado cristalino) não são recuperáveis, ou seja, não é possível “desplastificar” o material. Ainda que se mude a direção de carregamento, o acumulado de deformações plásticas não pode diminuir. Isto introduz uma medida do grau de plastificação de um ponto material, muito útil no desenvolvimento dos potenciais de energia livre, que é a deformação plástica acumulada (integral de \dot{q} no tempo).

Define-se o tensor $\Delta \mathbf{F}^P$ como aquele que leva as deformações plásticas no instante n (\mathbf{F}_n^P) até as do instante $n+1$ (\mathbf{F}_{n+1}^P). Este tensor é o resultado da integração no intervalo de tempo do tensor velocidade de deformação plástica (\mathbf{D}^P) mediante o chamado mapeamento exponencial.

$$\mathbf{F}_{n+1}^P = \Delta \mathbf{F}^P \mathbf{F}_n^P \quad (3.10)$$

$$\Delta \mathbf{F}^P = \Delta \mathbf{R} \exp[\Delta t \mathbf{D}^P] \quad (3.11)$$

$$\Delta \mathbf{C}^P = (\Delta \mathbf{F}^P)^T \Delta \mathbf{F}^P = \mathbf{F}_n^{P-T} \mathbf{C}_{n+1}^P \mathbf{F}_n^{P-1} = \exp[\Delta t \mathbf{D}^P]^2 \quad (3.12)$$

A deformação plástica acumulada até o instante n é denotada por q_n , sendo o acúmulo de plastificação no passo de tempo dado por Δq . A taxa de deformação plástica \dot{q} é aproximada por $\frac{\Delta q}{\Delta t}$. As expressões incrementais ficam dadas por:

$$q_{n+1} = q_n + \Delta q \quad \dot{q} = \frac{\Delta q}{\Delta t} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{D}^p = \frac{1}{2\Delta t} \ln(\Delta \mathbf{C}^p) = \frac{\Delta q}{\Delta t} \sum_{i=1}^3 q_i \mathbf{M}_i \quad (3.14)$$

$$\Delta \mathbf{F}^p = \exp \left[\Delta q \sum_{i=1}^3 q_i \mathbf{M}_i \right] \quad (3.15)$$

$$\mathbf{F}_{n+1}^p = \exp \left[\Delta q \sum_{i=1}^3 q_i \mathbf{M}_i \right] \mathbf{F}_n^p \quad (3.16)$$

Na Figura (3.1), ilustra-se com um esquema o modelo incremental de deformação aqui utilizado. Neste, identifica-se o tensor predictor $\hat{\mathbf{F}}^{pr}$, definido como o estado obtido se toda a deformação incremental entre n e $n+1$ for considerada elástica, de modo que em $n+1$ se tenham as mesmas deformações plásticas de n . Por conveniência, são apresentadas apenas as deformações isocóricas.

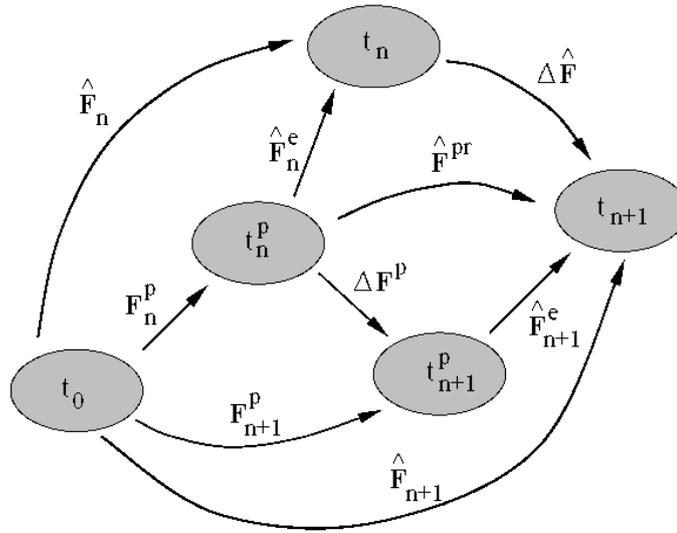


Figura 3.1 - Representação da decomposição multiplicativa da deformação em parcelas elástica e plástica. Destaque para o estado predictor.

A partir da definição do tensor predictor, podem ser obtidas expressões para as parcelas elásticas e predictoras do tensor tensão de Cauchy, utilizadas posteriormente:

$$\hat{\mathbf{F}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (3.17)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} (\mathbf{F}_{n+1}^p)^{-1} = \hat{\mathbf{F}}^{\text{pr}} (\Delta \mathbf{F}^p)^{-1} = \hat{\mathbf{F}}^{\text{pr}} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-1} \quad (3.18)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = (\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e)^T \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-2} \quad (3.19)$$

$$\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} = \mathbf{F}_n^{p-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (3.20)$$

A fim de obter o último termo da expressão (3.19) é preciso admitir a hipótese de colinearidade dos tensores \mathbf{D}^p e $\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}$ (e conseqüentemente $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$), para que seja permitida a permutação entre os tensores. Assim sendo, torna-se possível utilizar os mesmos autovetores para representar tanto a direção de plastificação, quanto as direções principais que identificam o estado preditor e o estado elástico isocórico. Posteriormente, mostra-se que esta propriedade não é uma hipótese, mas uma conseqüência do processo de minimização em relação às variáveis internas de direção de fluxo plástico. Mais aspectos quanto à colinearidade destes tensores são explorados à frente no texto, quando da discussão da escolha das variáveis independentes e da minimização do pseudo-potencial incremental.

Define-se ainda, a partir de estado preditor, o tensor deformação logarítmico elástico ($\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e$) e seu correspondente preditor ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pr}}$):

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pr}} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} \quad (3.21)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pr}} - \Delta t \mathbf{D}^p \quad (3.22)$$

Da propriedade de colinearidade entre \mathbf{D}^p , $\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}$ e $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$ (de modo que suas respectivas autoprojeções \mathbf{M}_j , \mathbf{E}_j^{pr} e \mathbf{E}_j^e são iguais), pode-se descrever relações entre seus autovalores e os do tensor deformação logarítmico e de seu preditor.

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \sum_{j=1}^3 c_j^e \mathbf{E}_j^e, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_j^e \mathbf{E}_j^e, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pr}} = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_j^{\text{pr}} \mathbf{E}_j^e \quad (3.23)$$

$$\varepsilon_j^e = \frac{1}{2} \ln(c_j^e) = \varepsilon_j^{\text{pr}} - \Delta q_j \quad (3.24)$$

3.2. Hipóteses básicas e definições – hipóteses do problema térmico

O caso geral dos problemas térmicos, considerando diversas formas de transferência de calor, é tratado em detalhes, por exemplo, em Yang *et al* (2006). Este trabalho, contudo, tem como foco os processos adiabáticos, para os quais se admite que não haja geração volumétrica de calor nem transferência de calor entre pontos materiais vizinhos. Especificamente dentro da formulação variacional desenvolvida no capítulo anterior, consideram-se nulas as variáveis Q (fluxo de calor) e R .

A hipótese de processos termomecânicos adiabáticos é adequada, segundo Stainier e Ortiz (2008), quando são considerados intervalos de tempo relativamente curtos. Isto acontece, por exemplo, quando se tratam casos com grandes taxas de deformação, como cargas de impacto ou problemas de conformação mecânica, ou casos em que se tenham materiais com baixa condutividade térmica, para os quais a condução de calor pode ser negligenciada durante o processo de deformação.

A consideração de processos adiabáticos traz simplificações técnicas de implementação, uma vez que a temperatura assume características de variável interna local, característica de cada ponto material considerado e independente dos valores em pontos vizinhos.

Deve ficar claro que a temperatura pode mudar durante processos adiabáticos. O que é impedido são as trocas de calor, seja por geração local ou por condução decorrente de gradientes de temperatura ao longo do corpo em consideração. Mudanças de temperatura são reflexo, portanto, de processos internos. Uma modelagem termomecanicamente acoplada como a desenvolvida neste trabalho, busca descrever como processos usualmente descritos como puramente mecânicos podem influenciar o campo térmico dentro do corpo.

O funcional incremental (2.100), particularizado agora para processos termodinâmicos adiabáticos e sem fontes de calor, toma a forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n) &= \int_{\Omega_0} \left[W(\mathbf{F}_{n+1}, T_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}) - W(\mathbf{F}_n, T_n, \mathbf{Z}_n) - \eta_n(T_{n+1} - T_n) \right. \\
&+ \Delta t \bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha} \right) \left. \right] dV \\
&- \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dV - \int_{\Gamma_{of}} \bar{\mathbf{t}} \cdot (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) dS
\end{aligned} \tag{3.25}$$

O detalhamento de cada termo deste potencial incremental e de sua influência no modelo é o assunto da seção seguinte.

3.3. Composição do potencial de energia livre de Helmholtz (W)

Modelos reológicos são maneiras muito comuns de representar comportamentos constitutivos dos materiais. Eles permitem realizar analogias entre molas e comportamentos elásticos, elementos de atrito seco e comportamentos plásticos, amortecedores e comportamentos viscosos, entre outros. Diferentes arranjos destes componentes fornecem diferentes modelos de comportamento material. Entre muitos outros, o livro de Simo e Hughes (1999) faz uso de modelos reológicos na descrição de variados comportamentos constitutivos.

A divisão do gradiente de deformações em parcelas volumétrica e isocórica, plástica e elástica, conduz à representação da viscoplasticidade em um modelo reológico indicado na Fig.(3.2).

Quando aplicada uma tensão σ , as deformações volumétricas contribuem para a energia elástica no braço superior (contabilizada pelo potencial φ^{vol}). No braço inferior, a energia de deformação elástica isocórica é incorporada mediante o potencial φ^e , enquanto a porção plástica da deformação isocórica é associada ao potencial φ^p , responsável pelo encruamento do material. Em se tratando de um modelo viscoplástico, deve aparecer, ainda, uma parcela de energia dissipada durante o processo de plastificação (representada pelo pseudo-potencial de dissipação $\bar{\Psi}$), dependente das taxas das variáveis internas escolhidas para o problema, assunto que será explorado em maior detalhe na seção seguinte.

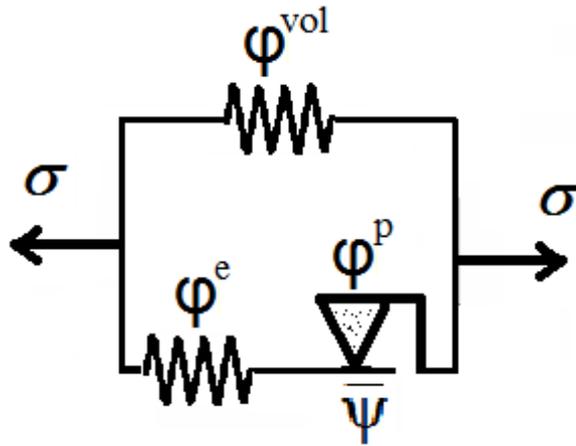


Figura 3.2 - Modelo reológico viscoplástico.

Esta representação reológica clássica de viscoplasticidade, contudo, trata apenas da parte puramente mecânica do problema. A inclusão de efeitos térmicos implica a consideração de acúmulo de energia térmica. Considera-se, por hipótese, que também a energia térmica acumulada (φ^h), associada à capacidade térmica específica do material, seja uma parcela da decomposição aditiva do potencial de energia livre de Helmholtz.

Ainda sem especificar o conjunto de variáveis internas que serão utilizadas na construção do modelo, são definidas algumas dependências básicas para cada uma das quatro parcelas da energia livre de Helmholtz, a partir de suas naturezas. Admite-se que os potenciais elásticos volumétrico e isocórico não dependam do conjunto de variáveis internas \mathbf{Z} , mas apenas das deformações \mathbf{F} . O potencial plástico, dependente do histórico de deformações para adequadamente representar o fenômeno de encruamento, inclui as variáveis internas \mathbf{Z} além de \mathbf{F} . O potencial de acumulação de energia térmica é considerado independente das deformações. Finalmente, como se está interessado em um modelo termomecânico totalmente acoplado, admite-se a dependência da temperatura em todas as parcelas de energia. Assim, o potencial de energia livre de Helmholtz fica decomposto como segue:

$$W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) = \varphi^{\text{vol}}(\mathbf{F}, T) + \varphi^e(\mathbf{F}, T) + \varphi^p(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) + \varphi^h(T) \quad (3.26)$$

O próximo passo na construção do modelo é a determinação mais precisa do formato de cada uma das parcelas de energia livre. Para fazê-lo, no entanto, é necessária a criteriosa seleção das variáveis internas que descrevem o problema. O objetivo é escolher um conjunto

mínimo de variáveis que sejam capazes de descrever completamente o problema em questão com custos de identificação e cálculo admissíveis.

A escolha das variáveis internas pode influenciar decisivamente a flexibilidade do modelo. No intuito de descrever o maior número possível de comportamentos materiais, opta-se por seguir algumas das escolhas realizadas em Fancello *et al* (2006), Fancello *et al* (2007) e Vassoler (2007). Grandezas espectrais são usadas tanto na parte elástica quanto na parte plástica da energia livre, seguindo as hipóteses básicas apresentadas na Seção 3.1. Isto representa vantagens na descrição de uma variedade de materiais isotrópicos, como se buscará evidenciar no capítulo de resultados da aplicação do modelo.

Para descrever os fenômenos de plastificação de dissipação viscoplástica, são introduzidas como variáveis internas do problema as direções principais \mathbf{M}_j do tensor velocidade de deformação plástica (\mathbf{D}^p), as direções de plastificação q_j e a deformação plástica acumulada em um passo de carga Δq . A dependência das deformações \mathbf{F} expressa na forma geral dos potenciais elásticos, volumétrico e isocórico, é dada, respectivamente, com relação ao Jacobiano (J , medida da variação de volume) e aos autovalores ε_j do tensor de deformação logarítmico elástico $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, permitindo a descrição de uma variedade de comportamentos na faixa elástica.

$$W(\mathbf{F}, q, q_i, \mathbf{M}_i, T) = \varphi^{\text{vol}}(J, T) + \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e, T) + \varphi^p(q, T) + \varphi^h(T) \quad (3.27)$$

Exploram-se, a seguir, uma a uma, as parcelas que compõem o potencial de energia livre de Helmholtz.

3.3.1. Potencial volumétrico (φ^{vol})

Dois fenômenos são representados dentro do potencial volumétrico. O primeiro é o clássico acúmulo de energia mecânica por mudanças de volume, relacionado ao módulo de compressibilidade do material (K). O segundo aparece por se estar dentro de um contexto termomecânico, equivalente ao fenômeno de expansão volumétrica do material (dependente do coeficiente de expansão volumétrica, α). A expressão do potencial volumétrico fica como segue:

$$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2} (K(T) - 3K_0\alpha(T - T_0)) (\ln(J))^2 \quad (3.28)$$

Onde a dependência do módulo de compressibilidade com a temperatura é considerada linear:

$$K(T) = K_0 - K_1(T - T_0) \quad (3.29)$$

A temperatura T_0 é uma temperatura de referência para a medição do módulo de compressibilidade K_0 , e para a qual se considera o volume não distendido por efeitos térmicos. O uso de coeficientes K_1 positivos ou negativos permite a representação de diferentes comportamentos frente à variação de temperatura, seja de enrijecimento ou amolecimento.

Observe-se que o potencial volumétrico depende da temperatura, uma das variáveis internas do problema, de forma que, ao contrário do procedimento adotado, por exemplo, por Vassoler (2007), ele não pode ser excluído da minimização do pseudo-potencial incremental.

3.3.2. Potencial elástico isocórico (φ^e)

O emprego de grandezas espectrais para representar a parcela elástica das deformações isocóricas permite a representação de uma grande variedade de comportamentos isotrópicos. Empregam-se potenciais da seguinte forma:

$$\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e, T) = \varphi^e(c_1^e, c_2^e, c_3^e, T) = \varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) \quad (3.30)$$

Nas aplicações do modelo, são empregados dois tipos clássicos de potenciais elásticos isocóricos: o modelo de Hencky e o modelo de Ogden. O modelo de Hencky, de forma quadrática, é usado na descrição de comportamentos elásticos lineares, como os apresentados por materiais metálicos. Para a representação de comportamentos elásticos não-lineares mais complexos, por outro lado, se faz necessário o uso do modelo de Ogden, de dependência exponencial com as deformações. Este modelo é frequentemente utilizado para descrever materiais poliméricos.

O modelo de Hencky aqui utilizado tem a expressão a seguir:

$$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \mu(T) \sum_{j=1}^3 (\varepsilon_j^e)^2 \quad (3.31)$$

Onde a dependência do módulo de elasticidade μ com relação à temperatura é dada em forma linear pela Equação (3.32), onde T_0 é a temperatura para a qual se obtém o valor de referência do módulo de elasticidade μ_0 :

$$\mu(T) = \mu_0 - \mu_1(T - T_0) \quad (3.32)$$

O modelo de Ogden utilizado, também expresso em função dos autovalores do tensor de deformação logarítmico elástico, é da forma:

$$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\mu_i^e(T)}{\alpha_i} ([\exp(\varepsilon_j^e)]^{\alpha_i} - 1) \quad (3.33)$$

Novamente os coeficientes μ_i^e dependem da temperatura em forma linear:

$$\mu_i^e(T) = \mu_{i_0}^e - \mu_{i_1}^e(T - T_0) \quad (3.34)$$

Nos dois modelos, a dependência da temperatura é manifesta dentro dos coeficientes clássicos, de modo a permitir, como feito no potencial volumétrico, comportamentos diversos de amolecimento (característico de materiais metálicos) ou enrijecimento (característico de borrachas abaixo da temperatura de transição vítrea, por exemplo) com o aumento de temperatura.

3.3.3. Potencial plástico (φ^P)

Como apresentado anteriormente, este modelo descreve a parcela de deformações plásticas a partir das direções principais \mathbf{M}_j do tensor velocidade de deformação plástica (\mathbf{D}^P), das direções de plastificação q_j e da deformação plástica acumulada em um passo de carga Δq .

É comum admitir que o potencial plástico em modelos de plasticidade isotrópica seja dependente de um único parâmetro. Neste caso, a deformação plástica acumulada até o

instante em que é avaliado (denotadas por q). No trabalho de Vassoler (2007) buscou reunir, em um mesmo potencial plástico, diferentes leis de encruamento isotrópico encontradas na literatura. No presente trabalho, a expressão utilizada por Vassoler (2007) é adaptada, de forma a incluir dependência de temperatura. Propõe-se o seguinte formato:

$$\begin{aligned} \varphi^p(q, T) = & \Sigma_0(T)q + \frac{1}{2}H(T)q^2 + \mu^p(T) \left[q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p q) \right] \\ & + \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j^p(T)}{\alpha_j^p + 1} (q)^{\alpha_j^p + 1} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Onde Σ_0 , H , μ^p , α^p , μ_j^p e α_j^p são parâmetros materiais que descrevem o comportamento plástico do material e N é o número de termos adotados na parte de encruamento potencial. Assim como o que foi considerado para os coeficientes dos potenciais elásticos, a dependência de temperatura dos coeficientes plásticos é considerada linear.

A representação de elastoplasticidade perfeita é feita utilizando apenas o parâmetro Σ_0 , a tensão de escoamento. Encruamento linear é obtido usando, além de Σ_0 , também o módulo plástico H . O modelo de encruamento de Ramberg-Osgood é caracterizado pelo uso de um termo potencial, além da tensão de escoamento (portanto, $N=1$ e os parâmetros envolvidos são Σ_0 , μ_1^p e α_1^p). Encruamento com saturação é descrito usando uma função exponencial, de modo que os termos do potencial genéricos envolvidos são Σ_0 , μ^p e α^p .

3.3.4. Potencial de acumulação de energia térmica (φ^h)

A variação da temperatura de um corpo requer uma quantidade de energia. A capacidade térmica específica (C_0) do material é a medida desta propriedade. Como se permite a variação de temperatura ao longo do processo de deformação, é necessária a inclusão desta forma de energia térmica acumulada (φ^h) dentro do potencial de energia livre de Helmholtz. Um formato clássico para este tipo de potencial, como usado, por exemplo, em Holzapfel (2000) e Stainier e Ortiz (2008), é o seguinte:

$$\varphi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right] \quad (3.36)$$

Considera-se que a capacidade térmica específica seja constante com variações de temperatura, por simplicidade. A temperatura de referência T_0 é aquela para a qual se considera a energia térmica acumulada como nula.

3.4. Pseudo-potencial dissipativo ($\bar{\Psi}$)

Uma vez determinada a composição do potencial de energia livre de Helmholtz, com a descrição detalhada de suas parcelas componentes e das formas em que se expressa o acoplamento termomecânico, passa-se agora à discussão das características do pseudo-potencial dissipativo viscoplástico ($\bar{\Psi}$).

Na apresentação do modelo reológico clássico de viscoplasticidade, indicou-se que a dissipação de energia se dá durante a plastificação, quando o elemento de atrito seco entra em movimento. A forma clássica de descrever a dissipação viscoplástica baseia-se em potenciais não diferenciáveis para todo domínio, tendendo para o infinito quando não ocorre plastificação, ou seja, quando $\dot{q} = 0$.

Considera-se aqui que o pseudo-potencial dissipativo depende exclusivamente da deformação plástica acumulada (q) como variável interna, de sua taxa temporal (\dot{q} , ou em contexto experimental $\frac{\Delta q}{\Delta t}$) e da temperatura (T). Assume-se que os processos dissipativos sejam independentes da taxa de deformação total ($\dot{\mathbf{F}}$) e considera-se um esquema totalmente explícito ($n + \alpha = n$).

$$\bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha} \right) = \bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta q}{\Delta t}; T_n, q_n \right) \quad (3.37)$$

Como comentado anteriormente, na Seção 2.5, durante a construção da formulação variacional para o problema viscoplástico termomecanicamente acoplado, o termo $\frac{T_{n+1}}{T_n}$ que aparece multiplicando as taxas das variáveis internas permite a expressão de derivadas com relação à temperatura a partir de derivadas com relação às outras variáveis internas (aqui, Δq).

Um modelo clássico da literatura que conserva este tipo de dependência, é a chamada lei de Perzyna, com dependência potencial da taxa de deformação plástica, introduzida por Piotr Perzyna (1966, 1971) e usada, entre outros, em Simo e Hughes (1999). No presente trabalho, entretanto, optou-se por usar o pseudo-potencial dissipativo genérico usado em Stainier e Ortiz (2008). As razões para a escolha incluem o fato de ter sido um pseudo-potencial desenvolvido para o caso termomecânico acoplado, a possibilidade de degeneração para uma forma de Perzyna clássica (como demonstrado a seguir), e principalmente a oportunidade de utilização dos parâmetros de dependência térmica já identificados para alguns materiais metálicos.

O pseudo-potencial dissipativo em forma incremental, dependente de parâmetros materiais m e $\dot{\varepsilon}_0$ e das tensões críticas $\sigma_v(T)$ e $\sigma_y(q, T)$, fica então expresso por:

$$\bar{\Psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \sigma_y(q, T) \left[\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right] + \frac{m}{m+1} \sigma_v(T) \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{\left[\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right]}{\dot{\varepsilon}_0} \right)^{\frac{1}{m}+1} \quad (3.38)$$

Onde as expressões para as tensões críticas são da seguinte forma, onde b' , d' , n' , ω_1 , $\hat{\omega}_1$ e ω_v são parâmetros materiais:

$$\sigma_y(q, T) = \sigma_1(T) (1 + b'q)^{\frac{1}{n'}} + \hat{\sigma}_1(T) [1 - \exp(-d'q)] \quad (3.39)$$

$$\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0) [1 - \omega_v(T - T_0)] \quad (3.40)$$

$$\sigma_1(T) = \sigma_1(T_0) [1 - \omega_1(T - T_0)] \quad (3.41)$$

$$\hat{\sigma}_1(T) = \hat{\sigma}_1(T_0) [1 - \hat{\omega}_1(T - T_0)] \quad (3.42)$$

Identificam-se dois termos no pseudo-potencial dissipativo. O primeiro, linear com $\frac{\Delta q}{\Delta t}$, representa um deslocamento de σ_y do limite de escoamento, como resultado de uma resistência que a característica dissipativa impõe à plastificação. O segundo termo, potencial com relação a $\frac{\Delta q}{\Delta t}$, é responsável pelo aumento do nível de tensões com o aumento da taxa de plastificação devido à característica viscosa do modelo.

Se a tensão $\sigma_y(q, T)$ for nula, eliminando o termo linear com a taxa de plastificação no passo $\frac{\Delta q}{\Delta t}$, o pseudo-potencial dissipativo assume a forma da lei de Perzyna, incluindo dependência de temperatura.

3.5. Formulação variacional do problema – extremização do pseudo-potencial incremental

Como discutido no Capítulo 2, a solução do problema termomecânico acoplado é obtida na formulação presente a partir da extremização de um funcional construído a cada passo de tempo (minimização com relação às variáveis internas mecânicas, maximização com relação à temperatura). Nas seções anteriores, foram detalhadas as expressões de todas as parcelas de energia livre (admitida uma decomposição aditiva) e do pseudo-potencial de dissipação. Retoma-se agora a expressão do princípio variacional e define-se o pseudo-potencial incremental (Ψ):

$$\Psi(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n) = \inf_{\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}} \sup_{T_{n+1}} \mathcal{H}_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}, T_{n+1}; \mathbf{x}_n, \mathbf{Z}_n, T_n) \quad (3.43)$$

Substituindo os componentes do funcional \mathcal{H}_n e retomando as dependências estabelecidas para a energia livre de Helmholtz e para o pseudo-potencial dissipativo, tem-se:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathbf{C}_n, q_n, T_n) &= \inf_{\mathbf{M}_i, q_i, \Delta q} \sup_{T_{n+1}} \left\{ \Delta W(\mathbf{F}, q, q_i, \mathbf{M}_i, T) + \rho_0 \eta_n (T_{n+1} - T_n) \right. \\ &\quad \left. + \Delta t \bar{\Psi} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\Delta q}{\Delta t}, T_n \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Onde:

$$\begin{aligned} \Delta W(\mathbf{F}, q, q_i, \mathbf{M}_i, T) &= W(\mathbf{F}_{n+1}, q_{n+1}, q_{i_{n+1}}, \mathbf{M}_{i_{n+1}}, T_{n+1}) - W(\mathbf{F}_n, q_n, q_{i_n}, \mathbf{M}_{i_n}, T_n) \\ &= \Delta \varphi^{\text{vol}}(J, T) + \Delta \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e, T) + \Delta \varphi^p(q, T) + \Delta \varphi^h(T) \end{aligned} \quad (3.45)$$

Tal que:

$$\Delta\varphi^{\text{vol}}(\mathbf{J}, T) = \varphi^{\text{vol}}(\mathbf{J}_{n+1}, T_{n+1}) - \varphi^{\text{vol}}(\mathbf{J}_n, T_n) \quad (3.46)$$

$$\Delta\varphi^e(\hat{\mathbf{C}}^e, T) = \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e, T_{n+1}) - \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_n^e, T_n) \quad (3.47)$$

$$\Delta\varphi^p(q, T) = \varphi^p(q_{n+1}, T_{n+1}) - \varphi^p(q_n, T_n) \quad (3.48)$$

$$\Delta\varphi^h(T) = \varphi^h(T_{n+1}) - \varphi^h(T_n) \quad (3.49)$$

Com as seguintes restrições sobre as variáveis internas, apresentadas anteriormente nas hipóteses cinemáticas básicas:

$$\Delta q \in \mathbb{R}^+ \quad (3.50)$$

$$q_i \in K_Q = \left\{ p_i \in \mathbb{R}: \sum_{i=1}^3 p_i = 0; \sum_{i=1}^3 p_i^2 = \frac{3}{2} \right\} \quad (3.51)$$

$$\mathbf{M}_i \in K_M = \{ \mathbf{N}_i \in \text{Sym}: \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_i = 1; \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j = 0, i \neq j \} \quad (3.52)$$

A incorporação das restrições de igualdade sobre as direções de plastificação q_i e as autoprojeções do tensor velocidade de deformação plástica \mathbf{M}_i é feita através da construção de uma função Lagrangeana (\mathcal{L}), via multiplicadores de Lagrange, como indicado abaixo:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(q_i, \Delta q, \mathbf{M}_i, T) &= \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathbf{C}_n, q_n, T_n) + \gamma_1(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_1 - 1) + \gamma_2(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2) \\ &+ \gamma_3(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_3) + \gamma_4(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{M}_2 - 1) + \gamma_5(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{M}_3) + \gamma_6(\mathbf{M}_3 \cdot \mathbf{M}_3 - 1) \\ &+ \lambda(q_1 + q_2 + q_3) + \beta \left(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 - \frac{3}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.53)$$

É necessário impor a condição de Δq positivo, uma vez que o pseudo-potencial dissipativo só é diferenciável para esta faixa de valores. Quando não ocorre plastificação, não há dissipação definida. Assim, o procedimento de extremização só faz sentido para passos de tempo em que ocorra plastificação. A solução encontrada para impor esta restrição de desigualdade sobre a variável interna Δq foi uma verificação prévia da ocorrência ou não de passo plástico no incremento, a exemplo do realizado em Fancelli *et al* (2008) para modelos de viscoplasticidade. Este procedimento é apresentado em detalhes na Seção 3.5.3.

Por ora, com o intuito de manter o foco no procedimento de extremização do pseudo-potencial incremental, assume-se que ocorra plastificação no passo. Assim sendo, as condições necessárias de otimalidade com relação às variáveis internas devem ser satisfeitas.

A análise e discussão destas condições de otimalidade de primeira ordem é o assunto dos próximos itens.

3.5.1. Minimização com respeito às autoprojeções \mathbf{M}_i

O procedimento de minimização com respeito às autoprojeções \mathbf{M}_i apresentado a seguir é análogo ao apresentado em Fancello (2006) para um modelo viscoelástico e em Vassoler (2007) também para modelos viscoplásticos.

As condições necessárias de otimalidade com relação às autoprojeções \mathbf{M}_i são dadas pela estacionariedade da função Lagrangeana \mathcal{L} em relação a estas variáveis:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}_i} [\delta \mathbf{M}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad \forall \delta \mathbf{M}_i \in \text{Sym} \quad (3.54)$$

O único termo da função Lagrangeana que depende de \mathbf{M}_i é o potencial elástico isocórico $\Delta \varphi^e$, uma vez que, como demonstrado na Seção 3.1, é possível representar o tensor de Cauchy-Green à direita isocórico elástico ($\hat{\mathbf{C}}^e$) com as mesmas autoprojeções do tensor velocidade de deformação plásticas (\mathbf{D}^p). Para tanto, retoma-se a definição do tensor logarítmico elástico:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_j^e \mathbf{E}_j^e = \boldsymbol{\varepsilon}^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^p = \boldsymbol{\varepsilon}^{pr} - \Delta q \sum_{j=1}^3 q_j \mathbf{M}_j \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_i^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} = \mathbf{E}_i^e, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e}{\partial \mathbf{M}_i} = -\Delta q q_i \quad (3.56)$$

Para a direção \mathbf{M}_1 , por exemplo, escreve-se:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}_1} [\delta \mathbf{M}_1] = \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \delta \mathbf{M}_1 + 2\gamma_1(\mathbf{M}_1 \cdot \delta \mathbf{M}_1) + \gamma_2(\mathbf{M}_2 \cdot \delta \mathbf{M}_1) + \gamma_3(\mathbf{M}_3 \cdot \delta \mathbf{M}_1) = 0 \quad (3.57)$$

$$\forall \delta \mathbf{M}_1 \in \text{Sym}$$

Como as variações $\delta \mathbf{M}_i$ são arbitrárias, desde que respeitem a condição de simetria, pode-se tomá-las iguais a \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 e \mathbf{M}_3 , de forma que se obtêm as seguintes expressões para os multiplicadores de Lagrange:

$$2\gamma_1 = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_1 \quad (3.58)$$

$$\gamma_2 = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_2 \quad (3.59)$$

$$\gamma_3 = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_3 \quad (3.60)$$

A condição de otimalidade com relação a \mathbf{M}_1 fica então reescrita:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}_1} [\delta \mathbf{M}_1] = & \left[\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} - \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_1 \right) \mathbf{M}_1 - \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_2 \right) \mathbf{M}_2 \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} \cdot \mathbf{M}_3 \right) \mathbf{M}_3 \right] \cdot \delta \mathbf{M}_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.61)$$

$$\forall \delta \mathbf{M}_1 \in \text{Sym}$$

Usando a regra da cadeia, abre-se o termo $\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1}$:

$$\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \mathbf{M}_1} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} \frac{\partial \varepsilon_j^e}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e}{\partial \mathbf{M}_1} = - \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e \right) \Delta \mathbf{q} \mathbf{q}_1 \quad (3.62)$$

E por fim, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}_1} [\delta \mathbf{M}_1] = & \left[\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} \mathbf{E}_j^e - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_1) \mathbf{M}_1 - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_2) \mathbf{M}_2 \right. \\ & \left. - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} (\mathbf{E}_j^e \cdot \mathbf{M}_3) \mathbf{M}_3 \right] \cdot \delta \mathbf{M}_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.63)$$

$$\forall \delta \mathbf{M}_1 \in \text{Sym}$$

O mesmo é feito para as direções \mathbf{M}_2 e \mathbf{M}_3 , completando as condições de otimalidade com relação a todas as autoprojeções. Fica então claro, levando em consideração as

propriedades de ortogonalidade das autoprojeções, que as equações resultantes serão satisfeitas quando $\mathbf{E}_j^e = \mathbf{M}_j$. Em outras palavras, as autoprojeções \mathbf{M}_j que otimizam a função Lagrangeana são as mesmas do tensor de Cauchy-Green à direita isocórico elástico ($\hat{\mathbf{C}}^e$), o que confirma a hipótese de colinearidade entre os tensores $\hat{\mathbf{C}}^e$, \mathbf{D}^p e $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ suposta na Seção 3.1.

3.5.2. Extremização com respeito a q_i , Δq e T

Admitindo satisfeitas as condições de otimalidade com relação às autoprojeções \mathbf{M}_j , pode-se escrever uma versão reduzida da função Lagrangeana, função apenas das variáveis internas restantes:

$$\mathcal{L}(q_i, \Delta q, T) = \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathbf{C}_n, q_n, T_n) + \lambda \left(\sum_{i=1}^3 q_i \right) + \beta \left(\sum_{i=1}^3 q_i^2 - \frac{3}{2} \right) \quad (3.64)$$

A única parcela da energia livre de Helmholtz que depende de q_j , via sua dependência com relação a ε_j^e , é energia elástica isocórica ($\Delta\varphi^e$). Assim, utilizando a Equação (3.24) que relaciona a deformação logarítmica elástica às variáveis internas, as condições de otimalidade com relação às direções de fluxo plástico q_j são dadas por:

$$r_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.65)$$

$$r_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{\partial \Delta W}{\partial q_i} + \lambda + 2\beta q_i = \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial \varepsilon_i^e}{\partial q_i} + \lambda + 2\beta q_i = 0 \quad (3.66)$$

$$r_i = -\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \Delta q + \lambda + 2\beta q_i = 0 \quad (3.67)$$

A condição necessária de otimalidade com relação ao incremento de deformação plástica acumulada Δq envolve, além do potencial elástico isocórico, também o potencial plástico ($\Delta\varphi^p$) e o pseudo-potencial dissipativo ($\bar{\Psi}$):

$$r_4 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta q} = \frac{\partial \Delta W}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{1}{\Delta t} \Delta t \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial \varepsilon_i^e}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \Delta \phi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (3.69)$$

$$r_4 = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e} q_i + \frac{\partial \Delta \phi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (3.70)$$

Como já exposto, o fato de admitir o processo adiabático traz como consequência a consideração da temperatura como variável interna adicional. Processos internos são os responsáveis pelas mudanças de temperatura. Assim, deve ficar claro que não há como considerar, dentro da formulação proposta, um carregamento térmico imposto, da mesma forma como não se pode impor um grau de plastificação a um determinado ponto do material como carregamento. Isto só seria possível se a temperatura tivesse a natureza de variável independente, porém o cômputo da temperatura é resultado do estado de deformações imposto a cada passo de tempo.

A condição necessária de otimalidade da função Lagrangeana com relação à temperatura constitui uma equação de equilíbrio térmico local, que deve ser respeitado para cada ponto. As derivadas das diferentes parcelas da energia livre de Helmholtz com relação à temperatura representam forças termodinâmicas que elas impõem a variações de temperatura. Como na ausência de fluxo de calor e geração local de calor, toda a dissipação se dá sob a forma de dissipação viscoplástica, a equação seguinte passa a ser análoga à forma entrópica da primeira lei da termodinâmica para cada ponto material:

$$r_5 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T_{n+1}} = 0 \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T_{n+1}} = \frac{\partial \Delta W}{\partial T_{n+1}} + \rho_0 \eta_n + \frac{\Delta q}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (3.72)$$

$$r_5 = \left(\frac{\partial \Delta \phi^e}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \phi^p}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \phi^h}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \phi^{vol}}{\partial T_{n+1}} \right) + \rho_0 \eta_n + \frac{\Delta q}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (3.73)$$

Finalmente, é necessário definir as condições de otimalidade com relação aos multiplicadores de Lagrange que ajudam a impor as restrições de igualdade sobre as outras variáveis internas. Assim, as condições necessárias de otimalidade com relação aos multiplicadores λ e β são:

$$r_6 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^3 q_i = 0 \quad (3.74)$$

$$r_7 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^3 q_i^2 - \frac{3}{2} = 0 \quad (3.75)$$

A representação completa do problema a partir da função Lagrangeana precisa da inclusão da restrição de desigualdade sobre Δq e uma condição de complementaridade que relaciona a plastificação ou não durante o passo com a avaliação da condição de otimalidade com relação a Δq (r_4).

$$r_8 = \Delta q \geq 0 \quad (3.76)$$

$$r_9 = r_4 \Delta q = 0 \quad (3.77)$$

Como comentado anteriormente, porém, a identificação da plastificação ou não durante o passo é feita alternativamente, a partir da avaliação da condição de otimalidade r_4 para $\Delta q = 0$. O procedimento é explicado em detalhes na Seção 3.5.3.

O conjunto das condições necessárias de otimalidade de r_1 a r_7 constituem um sistema não-linear de equações de onde se retira os valores das variáveis internas que otimizam a função Lagrangeana. A construção do procedimento de Newton usado para a resolução deste sistema, que só faz sentido quando se tem um passo plástico, é apresentada na Seção 3.5.4, fechando a descrição dos principais detalhes do procedimento de extremização do potencial que rege o problema viscoplástico termomecanicamente acoplado.

3.5.3. Identificação de passo plástico

Do ponto de vista operacional, é conveniente distinguir os incrementos de deformação puramente elásticos daqueles em que existe plastificação (produzindo $\Delta q > 0$). Quando o passo é elástico, tem-se que $\Delta q = 0$ e a extremização com relação às variáveis internas deixa de ter sentido. Resta apenas a maximização com relação à temperatura. Se, pelo contrário, o passo é plástico, sabe-se que o Δq ótimo é estritamente positivo. Para identificar qual a

natureza do incremento (elástico ou plástico), é necessário avaliar a variação do Lagrangeano em relação à variável Δq , como discutido em Fancello *et al* (2008).

Existe passo plástico se se identifica uma direção de escoamento para a qual a derivada da função Lagrangeana com relação a Δq é menor ou igual a zero ($r_4 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta q} \leq 0$), quando avaliada no ponto de incremento plástico nulo ($\Delta q = 0$). Isto indica que o mínimo do potencial é obtido para valores positivos de incremento plástico no passo. Para tanto, deve-se encontrar o menor valor de r_4 dentre todas as possíveis direções de escoamento q_i , respeitando a condição de equilíbrio térmico local (representada pela condição de otimalidade associada à temperatura, 3.73), isto é:

$$r_4|_{\Delta q=0} = \min_{q_i} \left(- \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} q_i + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} \right) \Big|_{\Delta q=0} \quad (3.78)$$

$$r_5|_{\Delta q=0} = \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^h}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^{vol}}{\partial T_{n+1}} \right) + \rho_0 \eta_n = 0 \quad (3.79)$$

As condições de otimalidade deste problema podem ser escritas com o auxílio de uma função Lagrangeana $\tilde{\mathcal{L}}$, incorporando as restrições sobre as variáveis internas q_i :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}}(q_i, \Delta q, T_{n+1}) \Big|_{\Delta q=0} &= \left(- \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} q_i + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} \right) + \tilde{\lambda} \left(\sum_{i=1}^3 q_i \right) \\ &+ \tilde{\beta} \left(\sum_{i=1}^3 q_i^2 - \frac{3}{2} \right) \\ &+ \tilde{\gamma} \left[\left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^h}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^{vol}}{\partial T_{n+1}} \right) + \rho_0 \eta_n \right] \end{aligned} \quad (3.80)$$

As condições necessárias de otimalidade desta função Lagrangeana $\tilde{\mathcal{L}}$ com relação às direções de plastificação q_i são dadas por:

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i} = - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + \tilde{\lambda} + 2\tilde{\beta}q_i - \tilde{\gamma} \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon_i^e} \Delta q \Big|_{\Delta q=0} = 0, \quad i = 1,2,3 \quad (3.81)$$

A condição (3.81) pode ser resolvida de forma analítica. Esta operação é detalhada em apêndice, e leva à determinação das direções q_i que satisfazem as condições necessárias de otimalidade do problema de verificação de plastificação.

$$q_j = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e}}{\left\| \frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e} \right\|} \quad (3.82)$$

Onde são usadas as seguintes definições:

$$\frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e} = \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} - \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} \right) \quad (3.83)$$

$$\left\| \frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e} \right\| = \sqrt{\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}^2}{\partial \varepsilon_j^e}} \quad (3.84)$$

Por outro lado, a condição (3.79) identifica a temperatura T_{n+1} consistente com o provável passo elástico, sendo resolvida a partir de um procedimento simples de Newton.

De posse de um valor de temperatura consistente com um passo elástico (lembrando que variações de temperatura na faixa elástica são permitidas devido ao acoplamento termomecânico nos potenciais volumétrico e elástico isocórico) e de expressões para as direções q_i , retorna-se à condição de otimalidade r_4 e avalia-se o seu sinal. Um passo plástico ocorre quando:

$$-\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e}}{\left\| \frac{\partial \widehat{\Delta\varphi^e}}{\partial \varepsilon_j^e} \right\|} + \frac{\partial \Delta\varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} < 0 \quad (3.85)$$

Fancello *et al* (2008) observam que o primeiro termo da equação acima corresponde ao tensor de tensão de Mandel (σ_M), de modo que na prática se está comparando a tensão gerada se o passo fosse totalmente elástico com a tensão necessária para entrar no campo plástico (que inclui contribuições do potencial de encruamento e do potencial dissipativo). Usando a seguinte definição para o tensor de Mandel, é possível reescrever a equação de avaliação de plastificação de maneira mais compacta:

$$\sigma_M = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j} \right\| \quad (3.86)$$

$$-\sigma_M + \left. \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} \right|_{\Delta q=0} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \left. \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \Delta q} \right|_{\Delta q=0} < 0 \quad (3.87)$$

Se o passo for elástico, a temperatura é atualizada e todo o incremento de deformação é considerado elástico. Se for identificado um passo plástico, entra-se no processo de extremização com relação às variáveis internas. A temperatura é então determinada junto com as restantes variáveis internas.

O procedimento detalhado nesta seção é uma forma de resolver o problema de restrição de desigualdade sobre a variável interna Δq através da separação em dois problemas mais simples: um de identificação de passo plástico e outro para o cálculo dos novos valores de variáveis internas no caso de plastificação confirmada (detalhado na seção seguinte).

3.5.4. Identificação dos valores ótimos das variáveis internas

Uma vez determinado que o passo é plástico, é possível eliminar as condições r_8 e r_9 , associadas à restrição de desigualdade sobre Δq . O conjunto de equações restantes (r_1 a r_7) pode ser resolvido mediante uma técnica simples de Newton, com o cuidado de que no processo iterativo a variável Δq nunca assuma valores não-positivos.

De forma esquemática, o passo k do procedimento de Newton utilizado para atualizar os valores das variáveis internas a partir de estimativas iniciais é expresso como segue:

$$\mathbf{K}^k \Delta \bar{\mathbf{x}} = -\mathbf{r}^k \quad (3.88)$$

$$\bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^k + \Delta \bar{\mathbf{x}} \quad (3.89)$$

Onde o vetor $\bar{\mathbf{x}}^k$ é o vetor das variáveis internas, o vetor \mathbf{r}^k é o vetor resíduo e a matriz \mathbf{K}^k é a matriz simétrica (obtida pela derivada das condições de otimalidade com relação às variáveis internas) dada como segue:

$$\mathbf{K}^k = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & N_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & N_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & N_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & N_4 & 0 & 0 \\ N_1 & N_2 & N_3 & N_4 & N_5 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.90)$$

$$K_{ii} = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \Delta q^2 + 2\beta, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.91)$$

$$K_{i4} = K_{4i} = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \Delta q q_i - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} = H_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.92)$$

$$K_{i5} = K_{5i} = -\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} \Delta q = N_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.93)$$

$$K_{i6} = K_{6i} = 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.94)$$

$$K_{i7} = K_{7i} = 2q_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.95)$$

$$K_{44} = \sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial \Delta q} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = H_4 \quad (3.96)$$

$$K_{45} = K_{54} = -\sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} q_i + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = N_4 \quad (3.97)$$

$$K_{55} = \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^{\text{vol}}}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^h}{\partial T^2} \right) + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = N_5 \quad (3.98)$$

$$\mathbf{r}^k = \begin{bmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \Gamma_4 \\ \Gamma_5 \\ \Gamma_6 \\ \Gamma_7 \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{x}}^k = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ \Delta q \\ T_{n+1} \\ \lambda \\ \beta \end{bmatrix}^k \quad (3.99)$$

Em se tratando de um procedimento iterativo, são necessárias estimativas iniciais para as variáveis internas. Uma opção conveniente é utilizar as direções q_i e a temperatura T_{n+1} calculadas na verificação de passo plástico, além de um pequeno valor inicial para Δq , permitindo a determinação das derivadas do pseudo-potencial dissipativo. Os multiplicadores de Lagrange λ e β são inicializados nulos.

Uma vez encontrados os valores ótimos das variáveis internas ao final do passo de carga, usa-se a forma entrópica da primeira lei da termodinâmica dada pela Equação (2.98), aproximada por diferenças finitas, para calcular o novo valor de entropia. Lembrando que o presente trabalho trata do caso adiabático, e que se considera que os processos dissipativos independam da taxa de deformação $\dot{\mathbf{F}}$, tem-se:

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \frac{\Delta t}{T_n} \left(\bar{\Psi}_{,\Delta q} \cdot \frac{\Delta q}{\Delta t} \right) = \eta_n + \Delta t \mathcal{D}_{\text{int}} \quad (3.100)$$

3.6. Cálculo da tensão

Todo o procedimento de determinação dos valores das variáveis internas foi detalhado na Seção 3.5. Uma vez conhecido completamente o estado do material ao final do passo de tempo, usando as propriedades hiperelásticas da formulação variacional empregada, é possível calcular o valor atualizado de tensão ao final do passo.

Assim sendo, retomando as definições (2.94) e (3.44), para o instante $n+1$, pode-se escrever a seguinte expressão para o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff:

$$\mathbf{P}_{n+1} = 2\mathbf{F}_{n+1} \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}_{n+1}; \mathbf{C}_n, q_n, T_n)}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \quad (3.101)$$

A dependência do pseudo-potencial incremental Ψ com relação à deformação total \mathbf{C}_{n+1} se manifesta apenas nos potenciais elásticos, volumétrico e isocórico. As outras parcelas foram todas definidas com relação às variáveis internas, de forma que sua influência está implícita dentro do processo de extremização expresso em (2.94). Levando em conta uma separação das deformações \mathbf{C}_{n+1} em parcelas volumétrica (representada pelo Jacobiano J) e isocórica ($\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$), desenvolve-se a expressão de atualização de tensão:

$$\mathbf{P}_{n+1} = 2\mathbf{F}_{n+1} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e(\hat{\mathbf{C}}_{n+1})}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^{\text{vol}}(J_{n+1})}{\partial J_{n+1}} \frac{\partial J_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \right) \quad (3.102)$$

Usando as expressões a seguir, apresentadas na Seção 2.4, onde \mathcal{I} é o tensor identidade de quarta ordem,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{J} - \frac{1}{3} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right] \quad (3.103)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} = \frac{J}{2} \mathbf{C}^{-1} \quad (3.104)$$

chega-se à expressão para o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff a seguir. Omitem-se as dependências de $\Delta\varphi^e$ e $\Delta\varphi^{\text{vol}}$, por simplicidade de notação:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{n+1} &= 2\mathbf{F}_{n+1} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} : \mathbf{C}_{n+1} \right) \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \Delta\varphi^{\text{vol}}}{\partial J_{n+1}} \frac{J_{n+1}}{2} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right) \\ &= \mathbf{F}_{n+1} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \text{DEV} \left(2 \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial \Delta\varphi^{\text{vol}}}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right) \end{aligned} \quad (3.105)$$

Onde se usa novamente a definição: $\text{DEV}(\mathbf{A}) = \left[\mathbf{A} - \frac{1}{3} (\mathbf{A} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \right]$.

Resta apenas abrir os termos $\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}}$ e $\frac{\partial \Delta\varphi^{\text{vol}}}{\partial J_{n+1}}$ para chegar à expressão final de atualização da tensão no instante $n+1$. Para tanto, retoma-se a definição do tensor de Cauchy-Green à direita predictor:

$$\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} = \hat{\mathbf{F}}^{\text{prT}} \hat{\mathbf{F}}^{\text{pr}} = \mathbf{F}_n^{\text{p-T}} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^{\text{p-1}} \quad (3.106)$$

A derivada do potencial elástico isocórico é dada por:

$$\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} [\delta \mathbf{C}] = \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} [\delta \mathbf{C}] = \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \cdot \mathbf{F}_n^{\text{p-T}} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} [\delta \mathbf{C}] \right) \mathbf{F}_n^{\text{p-1}}, \quad \forall \delta \mathbf{C} \text{ adm} \quad (3.107)$$

$$\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{\text{p-T}} \left(\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \right) \mathbf{F}_n^{\text{p-1}} \quad (3.108)$$

Onde:

$$\frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial c^{\text{pr}}_i} \frac{\partial c^{\text{pr}}_i}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta\varphi^e}{\partial c^{\text{pr}}_i} \mathbf{E}^{\text{pr}}_i \quad (3.109)$$

Assim, tem-se finalmente:

$$\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{\text{p-T}} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial c^{\text{pr}_i}} \mathbf{E}^{\text{pr}_i} \right) \mathbf{F}_n^{\text{p-1}} = \mathbf{F}_n^{\text{p-T}} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_i}} \frac{1}{2c^{\text{pr}_i}} \mathbf{E}^{\text{pr}_i} \right) \mathbf{F}_n^{\text{p-1}} \quad (3.110)$$

A derivada do potencial elástico volumétrico é dada por:

$$\frac{\partial \Delta \varphi^{\text{vol}}}{\partial J_{n+1}} = (K(T_{n+1}) - 3K_0 \alpha (T_{n+1} - T_0)) \frac{\ln(J_{n+1})}{J_{n+1}} \quad (3.111)$$

Esta e as outras derivadas de todas as parcelas que compõem o pseudo-potencial incremental utilizadas durante o procedimento de extremização são apresentadas em apêndice, a título de consulta.

3.7. Tensor material

Uma das principais vantagens de uma formulação variacional para o problema termo-mecânico acoplado de viscoplasticidade, como destacado por Ortiz e Stainier (2008), é a garantia de operadores tangentes (e portanto, um tensor material) simétricos. Formulações clássicas do problema termo-mecânico acoplado não apresentam esta propriedade, que proporciona uma implementação com menor custo computacional.

Admitindo uma estrutura variacional, em que se pode derivar a tensão de uma função potencial, o tensor material (\mathbf{C}) pode ser definido como a variação total da tensão com relação à medida de deformação ($\hat{\mathbf{C}}_{n+1}$):

$$\mathbf{c} = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) \quad (3.112)$$

Abrindo a expressão em notação de Einstein, considerando um estado preditor de deformação $\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}$, chega-se à Equação (3.114):

$$\hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}} = \hat{\mathbf{F}}_n^{\text{p-T}} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_n^{\text{p-1}} \quad (3.113)$$

$$c_{ijkl} = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{kl}} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{kl}} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{\text{mt}}^{\text{pr}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{\text{mt}}^{\text{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) = \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{\text{pq}}^{\text{pr}}} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{\text{mt}}^{\text{pr}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{\text{mt}}^{\text{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_{\text{pq}}^{\text{pr}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{kl}} \quad (3.114)$$

Chamando $\mathbf{f}^{pn} = \hat{\mathbf{F}}_n^{p-1}$ e suprimindo o índice $n+1$, continua-se a abrir a expressão acima.

$$\begin{aligned}
C_{ijkl} &= \frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{pr}} \frac{\partial \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{pr}} \left(\frac{\partial \left(f_{mr}^{pnT} \hat{\mathbf{C}}_{rs} f_{st}^{pn} \right)}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{ij}} \right) \left(\frac{\partial \left(f_{pu}^{pnT} \hat{\mathbf{C}}_{uv} f_{vq}^{pn} \right)}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{kl}} \right) \\
&= f_{rm}^{pn} f_{up}^{pn} \left(\frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{pr}} \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{pr}} \right) f_{st}^{pn} f_{vq}^{pn} \mathcal{J}_{rsij} \mathcal{J}_{uvkl} \\
&= f_{im}^{pn} f_{kp}^{pn} \left(\frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}_{pq}^{pr}} \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{mt}^{pr}} \right) f_{jt}^{pn} f_{lq}^{pn} \tag{3.115}
\end{aligned}$$

A avaliação da variação total com relação ao estado preditor $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ envolve então uma parcela puramente mecânica e outra mista, termo-mecânica, considerando a variação da temperatura com as deformações.

$$\frac{d}{d\hat{\mathbf{C}}^{pr}} \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} = \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} + \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \frac{\partial T}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \tag{3.116}$$

Utilizam-se coordenadas espectrais do estado preditor, e a relação entre o tensor de Cauchy-Green à direita e o tensor de deformação logarítmico:

$$\hat{\mathbf{C}}^{pr} = c^{pr}_i \mathbf{E}^{pr}_i \tag{3.117}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^{pr} = \varepsilon^{pr}_i \mathbf{E}^{pr}_i \tag{3.118}$$

$$\varepsilon^{pr}_i = \frac{1}{2} \ln c^{pr}_i \tag{3.119}$$

Assim, o argumento da derivada total na Equação (3.116) pode ser aberto usando o estado preditor usado anteriormente na construção dos potenciais (lembrando: $\varepsilon_j^{pr} = \varepsilon_j^e - \Delta q_j$):

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial c^{\text{pr}}_i} \frac{\partial c^{\text{pr}}_i}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial c^{\text{pr}}_i} \mathbf{E}^{\text{pr}}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_i} \frac{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_i}{\partial c^{\text{pr}}_i} \mathbf{E}^{\text{pr}}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{1}{2c^{\text{pr}}_i} \mathbf{E}^{\text{pr}}_i\end{aligned}\quad (3.120)$$

A parte da Equação (3.116) devida às contribuições puramente mecânicas (primeiro termo do lado direito) fica então:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial c^{\text{pr}}_j} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{1}{2c^{\text{pr}}_i} \right) &= \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i \partial c^{\text{pr}}_j} \frac{1}{2c^{\text{pr}}_i} - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{1}{2(c^{\text{pr}}_j)^2} \delta_{ij} \\ &= \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i \partial \varepsilon^e_i} \left(\frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_j} \right) \frac{1}{4c^{\text{pr}}_i c^{\text{pr}}_j} - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{1}{2(c^{\text{pr}}_j)^2} \delta_{ij}\end{aligned}\quad (3.121)$$

Enquanto a segunda parte, devida à influência das variações de temperatura sobre as variáveis de deformação, característica do modelo termo-mecânico acoplado, fica:

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial c^{\text{pr}}} \right) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_i} \frac{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_i}{\partial c^{\text{pr}}_i} \right) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon^e_i} \left(\frac{1}{2c^{\text{pr}}_i} \right)\quad (3.122)$$

Em resumo, o tensor material toma a seguinte forma:

$$\mathcal{C}_{ijkl} = f_{im}^{\text{pn}} f_{kp}^{\text{pn}} (\text{MEC} + \text{TERM}) f_{jt}^{\text{pn}} f_{lq}^{\text{pn}}\quad (3.123)$$

Onde a parcela mecânica é dada por:

$$\text{MEC} = \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \right) = \left[\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i \partial \varepsilon^e_i} \left(\frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_j} \right) \frac{1}{4c^{\text{pr}}_i c^{\text{pr}}_j} - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{1}{2(c^{\text{pr}}_j)^2} \delta_{ij} \right] \mathbf{E}^{\text{pr}}_j\quad (3.124)$$

E a parcela acoplada termo-mecânica é dada por:

$$\text{TERM} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} \right) \frac{\partial T}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{\text{pr}}} = \left[\left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon^e_i} \left(\frac{1}{2c^{\text{pr}}_i} \right) \right) \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_j} \left(\frac{1}{2c^{\text{pr}}_j} \right) \right] \mathbf{E}^{\text{pr}}_j\quad (3.125)$$

A fim de obter as derivadas $\frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_j}$ e $\frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}}_j}$, monta-se um sistema não-linear a partir das condições de otimalidade do pseudo-potencial incremental, apresentadas na seção anterior (eqs. (3.67), (3.70) e (3.73-75)). Isto é feito em detalhes em apêndice, onde se demonstra que é obtida a mesma matriz K que apareceu durante a etapa de minimização do potencial.

3.8. Resumo das operações

Recapitula-se agora, de forma “algorítmica”, as operações efetuadas para a resolução do problema viscoplástico adiabático termomecanicamente acoplado dentro do modelo proposto. De posse do conhecimento completo do estado termodinâmico do corpo em um instante n (\mathbf{F}_n , \mathbf{F}_n^p , q_n , T_n , η_n conhecidos), a partir do passo de carga (em um procedimento de deformações impostas, representado por um \mathbf{F}_{n+1} imposto), passa-se à seguinte lista de operações:

1. A partir de \mathbf{F}_{n+1} e de \mathbf{F}_n^p , determina-se $\hat{\mathbf{F}}^{pr}$;
2. Determina-se se houve ou não passo plástico através da avaliação da condição r_4 para $\Delta q = 0$ (3.78);
3. Se o passo é elástico, o tensor preditor coincide com o tensor ao final do passo ($\mathbf{F}_{n+1} = \hat{\mathbf{F}}^{pr}$, $\mathbf{F}_{n+1}^p = \mathbf{F}_n^p$), e os valores das variáveis internas de deformação não mudam. A temperatura é atualizada através da avaliação da condição r_5 para $\Delta q = 0$ (3.79) e passa-se para o incremento de carga seguinte, após o cálculo de tensões através da Equação (3.105);
4. Se, por outro lado, identifica-se a ocorrência de um passo plástico, as direções q_j da Equação (3.82) e a temperatura T_{n+1} da Equação (3.79) são usadas junto com um valor positivo arbitrário de Δq como estimativas iniciais para as variáveis internas, dentro do procedimento de Newton das Equações (3.88-99).
5. Encontrados os valores ótimos das variáveis internas, determina-se o tensor de deformações plásticas ao final do passo de carga \mathbf{F}_{n+1}^p a partir do mapeamento exponencial das variáveis internas, como indicado em (3.16);
6. Determina-se o valor da entropia ao final do passo η_{n+1} a partir de uma aproximação por diferenças finitas da primeira lei da termodinâmica em forma entrópica (Equação 3.100);
7. A tensão é calculada a partir de (3.105), e passa-se ao passo de carga seguinte, com os valores $n+1$ admitindo o lugar dos valores n .

4. Resultados numéricos – aplicação do modelo

Este capítulo apresenta resultados numéricos da aplicação do modelo proposto para o problema de viscoplasticidade termomecanicamente acoplada. O objetivo central é demonstrar a capacidade de descrição de variados comportamentos materiais. Materiais metálicos e poliméricos são simulados em diferentes casos de carregamento, e, além da caracterização mecânica via curvas tensão-deformação, as características de acoplamento termomecânico, como mudanças de temperatura e entropia durante processos de deformação controlada, são acompanhadas.

Na Seção 4.1, apresentam-se as propriedades dos materiais utilizados nas simulações. Passa-se, então, na Seção 4.2, à simulação de tração uniaxial dos materiais, gerando as curvas de tensão-deformação características. A implementação é realizada em GNU Octave. A capacidade de representação de uma variedade de comportamentos mecânicos diferentes é explorada. Na Seção 4.3, a partir de um material base, é desenvolvida uma análise da sensibilidade do modelo à variação de alguns de seus parâmetros. As características de acoplamento são evidenciadas e se busca interpretar o comportamento observado. As características de histerese dos materiais viscoplásticos termomecanicamente acoplados são exploradas brevemente na Seção 4.4, onde são apresentadas simulações de carregamentos cíclicos. Por fim, estendendo o modelo para casos tridimensionais, na Seção 4.5 apresentam-se simulações realizadas em Metafor, um software de elementos finitos educacional, desenvolvido na Université de Liège, na Bélgica. Foca-se na influência da taxa de deformação e da temperatura sobre o comportamento de estricção de um corpo de prova de tração.

4.1. Propriedades materiais

4.1.1. Liga de alumínio 2024-T3

O primeiro dos materiais metálicos simulados é a liga de alumínio 2024-T3. Caracteriza-se pela independência da taxa de deformação (não se podendo, a rigor, falar em material viscoplástico), o que é conseguido, dentro do modelo proposto, anulando um conjunto de parâmetros do pseudo-potencial dissipativo. Resta apenas a tensão característica σ_1 que introduz uma dependência linear com a deformação plástica, essencialmente um termo de encruamento linear extra. Permite-se ainda, através do parâmetro ω_1 , um comportamento de amolecimento com o aumento de temperatura.

As propriedades materiais que caracterizam a liga de alumínio 2024-T3 são apresentadas na Tabela 4.1. Adota-se o modelo de Hencky para o potencial elástico isocórico (característica de comportamento metálico). O potencial plástico é composto por uma tensão de escoamento (Σ_0) e por um comportamento de escoamento exponencial (representado pelos parâmetros μ^P e α^P).

Tabela 4.1 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais da liga de alumínio 2024-T3, independente da taxa de deformação ($T_0 = 293\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].

Potencial	Formato empregado	Coeficientes	
φ^{vol}	$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2}(K(T) - 3K_0\alpha(T - T_0))(\ln(J))^2$ $K(T) = K_0 - K_1(T - T_0)$	α [K^{-1}]	$24,7 \cdot 10^{-6}$
		K_0 [GPa]	71,7
		K_1 [GPa]	0,0
φ^e	$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \mu(T) \sum_{j=1}^3 (\varepsilon_j^e)^2$ $\mu(T) = \mu_0 - \mu_1(T - T_0)$	μ_0 [GPa]	27,5
		μ_1 [GPa/K]	0,0
φ^P	$\varphi^P(q, T) = \Sigma_0(T)q + \mu^P(T) \left[q + \frac{1}{\alpha^P} \exp(-\alpha^P q) \right]$ $\Sigma_0(T) = \Sigma_0(T_0)[1 - \omega_0(T - T_0)]$ $\mu^P(T) = \mu^P(T_0) \frac{T}{T_0}$	$\Sigma_0(T_0)$ [MPa]	255,0
		ω_0 [$1/\text{K}$]	0,0
		$\mu^P(T_0)$ [MPa]	170,0
		α^P	12,0

ϕ^h	$\phi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right]$	C_0 [J/kg.K]	875,0
		ρ [kg/m ³]	2780,0
$\bar{\psi}$	$\bar{\psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \sigma_y(q, T) \left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)$ $\sigma_y(q, T) = \sigma_1(T) (1 + b'q)^{\frac{1}{n'}} + \hat{\sigma}_1(T) [1 - \exp(-d'q)]$ $\sigma_1(T) = \sigma_1(T_0) [1 - \omega_1(T - T_0)]$	$\sigma_1(T_0)$ [MPa]	125,0
		ω_1 [1/K]	0,0007
		b'	4,0
		n'	1,0
		$\hat{\sigma}_1(T)$ [MPa]	0,0

4.1.2. Liga alfa-titânio

As características viscoplásticas do modelo começam a ser exploradas com o estudo da liga alfa-titânio. O material se caracteriza por um comportamento mecânico fortemente dependente da taxa de deformação. A completa caracterização mecânica do alfa-titânio disponível no trabalho de Stainier e Ortiz (2008) dá suporte à sua simulação no presente trabalho.

Como o material é metálico, considera-se um comportamento elástico isocórico descrito dentro de um modelo de Hencky (Eq. 3.31). O potencial plástico inclui, além da tensão de escoamento, apenas o termo de encruamento exponencial. O pseudo-potencial dissipativo inclui termos lineares com a taxa de deformação (incluídos no termo σ_y da Equação 3.38) e a parcela clássica de Perzyna (termo de σ_v). O conjunto de potenciais utilizado e os parâmetros materiais encontram-se na Tabela 4.2 (página seguinte).

4.1.3. Tântalo policristalino puro

A formulação elaborada para descrever o comportamento dissipativo dos materiais viscoplásticos (ver Seção 3.4) é restrita a alguns tipos de comportamento, como explorado na seção 4.2 na análise de sensibilidade. Alguns materiais, porém, exibem comportamentos dissipativos específicos, decorrentes muitas vezes de processos físicos característicos. Este é o

caso do comportamento do tântalo policristalino, que tem a parcela viscosa dependente de um processo termicamente ativado, como indicado por Stainier e Ortiz (2008).

O estudo do tântalo policristalino se mostra interessante, observada a grande sensibilidade com relação à temperatura de ensaio (como fica claro nas curvas de tensão-deformação da Seção 4.2), o que o torna um material que requer uma adequada descrição termomecânica acoplada.

Tabela 4.2 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais da liga alfa-titânio, dependente da taxa de deformação ($T_0 = 293\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].

Potencial	Formato empregado	Coeficientes	
φ^{vol}	$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2}(K(T) - 3K_0\alpha(T - T_0))(\ln(J))^2$ $K(T) = K_0 - K_1(T - T_0)$	α [K^{-1}]	$8,9 \cdot 10^{-6}$
		K_0 [GPa]	129,9
		K_1 [GPa]	0,0
φ^e	$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \mu(T) \sum_{j=1}^3 (\varepsilon_j^e)^2$ $\mu(T) = \mu_0 - \mu_1(T - T_0)$	μ_0 [GPa]	43,3
		μ_1 [GPa/K]	0,0
φ^p	$\varphi^p(q, T) = \Sigma_0(T)q + \mu^p(T) \left[q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p q) \right]$ $\Sigma_0(T) = \Sigma_0(T_0)[1 - \omega_0(T - T_0)]$ $\mu^p(T) = \mu^p(T_0) \frac{T}{T_0}$	$\Sigma_0(T_0)$ [MPa]	75,0
		ω_0 [$1/\text{K}$]	0,0
		$\mu^p(T_0)$ [MPa]	120,0
		α^p	10,0
φ^h	$\varphi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right]$	C_0 [$\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}$]	518,0
		ρ [kg/m^3]	
$\bar{\Psi}$	$\bar{\Psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \sigma_y(q, T) \left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)$ $+ \frac{m}{m+1} \sigma_v(T) \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)}{\dot{\varepsilon}_0} \right)^{\frac{1}{m+1}}$ $\sigma_y(q, T) = \sigma_1(T) (1 + b'q)^{\frac{1}{n'}} + \hat{\sigma}_1(T) [1 - \exp(-d'q)]$ $\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0) [1 - \omega_v(T - T_0)]$ $\sigma_1(T) = \sigma_1(T_0) [1 - \omega_1(T - T_0)]$ $\hat{\sigma}_1(T) = \hat{\sigma}_1(T_0) [1 - \hat{\omega}_1(T - T_0)]$	$\sigma_v(T_0)$ [MPa]	50,0
		ω_v [$1/\text{K}$]	0,0006
		$\dot{\varepsilon}_0$ [$1/\text{s}$]	1,0
		m	5,0
		$\sigma_1(T_0)$ [MPa]	300,0
		ω_1 [$1/\text{K}$]	0,0008
		b'	5,0
		n'	1,5
		$\hat{\sigma}_1(T)$ [MPa]	200,0
		$\hat{\omega}_1$ [$1/\text{K}$]	0,0
d'	7,0		

A fim de descrever adequadamente os processos termicamente ativados que influenciam o comportamento viscoso do tântalo, são introduzidas novas equações de evolução com a temperatura para a tensão característica σ_v e para o parâmetro $\dot{\epsilon}_0$. Destaca-se a introdução de uma temperatura característica do material ($T_c = E_a/\kappa_B$), derivada da relação entre a energia de ativação (E_a) e a constante de Boltzmann (κ_B).

$$\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0) \frac{T}{T_0} \quad (4.1)$$

$$\dot{\epsilon}_0(T) = \dot{\epsilon}_0(T_0) \exp \left[-T_c \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (4.2)$$

O tântalo policristalino puro, assim como a liga de alumínio 2024-T3 e a liga alfa-titânio, tem seu comportamento elástico isocórico descrito em modelo de Hencky e o potencial plástico composto da tensão de escoamento e de um termo exponencial de encruamento. As propriedades materiais necessárias para sua simulação dentro da formulação proposta são apresentadas na Tabela 4.3 abaixo.

Tabela 4.3 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais para o tântalo policristalino puro ($T_0 = 298\text{K}$) [Fonte: Stainier e Ortiz (2008)].

Potencial	Formato empregado	Coeficientes	
φ^{vol}	$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2} (K(T) - 3K_0 \alpha (T - T_0)) (\ln(J))^2$ $K(T) = K_0 - K_1 (T - T_0)$	α [K^{-1}]	$6,6 \cdot 10^{-6}$
		K_0 [GPa]	206,7
		K_1 [GPa]	0,0
φ^e	$\varphi^e(\epsilon_1^e, \epsilon_2^e, \epsilon_3^e, T) = \mu(T) \sum_{j=1}^3 (\epsilon_j^e)^2$ $\mu(T) = \mu_0 - \mu_1 (T - T_0)$	μ_0 [GPa]	68,9
		μ_1 [GPa/K]	0,0
φ^p	$\varphi^p(q, T) = \Sigma_0(T)q + \mu^p(T) \left[q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p q) \right]$ $\Sigma_0(T) = \Sigma_0(T_0) [1 - \omega_0 (T - T_0)]$ $\mu^p(T) = \mu^p(T_0) \frac{T}{T_0}$	$\Sigma_0(T_0)$ [MPa]	10,0
		ω_0 [$1/\text{K}$]	0,015
		$\mu^p(T_0)$ [MPa]	15,0
		α^p	80,0
φ^h	$\varphi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right]$	C_0 [$\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}$]	140,0
		ρ [kg/m^3]	16650,0
$\bar{\Psi}$	$\bar{\Psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \sigma_y(q, T) \left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)$	$\sigma_v(T_0)$ [MPa]	125,0

$+ \frac{m}{m+1} \sigma_v(T) \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)^{\frac{1}{m+1}}}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{\frac{1}{m+1}}$ $\sigma_y(q, T) = \sigma_1(T)(1 + b'q)^{\frac{1}{n'}} + \hat{\sigma}_1(T)[1 - \exp(-d'q)]$ $\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0) \frac{T}{T_0}$ $\dot{\epsilon}_0(T) = \dot{\epsilon}_0(T_0) \exp \left[-T_c \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$ $\sigma_1(T) = \sigma_1(T_0)[1 - \omega_1(T - T_0)]$	$\dot{\epsilon}_0(T_0)$ [1/s]	0,1
	T_c [K]	4200,0
	m	8,3
	$\sigma_1(T_0)$ [MPa]	210,0
	ω_1 [1/K]	0,0018
	b'	1,25
	n'	1,0
	$\hat{\sigma}_1(T)$ [MPa]	0,0

4.1.4. Material polimérico sem amolecimento

As características dos materiais poliméricos também podem ser descritas com o modelo viscoplástico termomecanicamente acoplado proposto no presente trabalho. Como comentado anteriormente, o uso de quantidades espectrais para descrever o comportamento elástico isocórico dos materiais permite o uso de potenciais de Ogden, muito usados no modelamento dos polímeros.

A fim de demonstrar as diferenças com relação ao comportamento dos metais, dois materiais de características poliméricas são usados, um sem amolecimento depois da entrada na faixa plástica e outro com (comportamento característico que decorre do fato das cadeias poliméricas muitas vezes não se encontrarem alinhadas no começo do ensaio, como discutido brevemente no Capítulo 1). Os parâmetros adotados não correspondem a nenhum polímero em específico, tendo sido escolhidos no intuito de evidenciar alguns comportamentos característicos dos polímeros em processos de grandes deformações. Procedimento semelhante foi adotado no trabalho de Vassoler (2007).

O material sem amolecimento é caracterizado por um potencial elástico isocórico de Ogden (Eq. 3.33) de três termos, considerados independentes da temperatura ($\mu_{i1}^e = 0$). O comportamento plástico do material é descrito usando uma composição de tensão limite de escoamento, encruamento linear e um termo de encruamento potencial. É permitida a redução do limite de escoamento com o aumento de temperatura (através do parâmetro ω_0). O pseudo-

potencial dissipativo segue o modelo clássico de Perzyna (sendo nulos os parâmetros σ_1 e $\hat{\sigma}_1$).

Tabela 4.4 – Conjunto de potenciais e propriedades materiais do material polimérico sem amolecimento mecânico na faixa plástica ($T_0 = 293\text{K}$).

Potencial	Formato empregado	Coeficientes	
φ^{vol}	$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2}(K(T) - 3K_0\alpha(T - T_0))(\ln(J))^2$ $K(T) = K_0 - K_1(T - T_0)$	α [K^{-1}]	$50,0 \cdot 10^{-6}$
		K_0 [GPa]	10,0
		K_1 [GPa]	0,0
φ^e	$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\mu_i^e(T)}{\alpha_i^{e_i}} ([\exp(\varepsilon_j^e)]^{\alpha_i^{e_i}} - 1)$ $\mu_i^e(T) = \mu_{i_0}^e - \mu_{i_1}^e(T - T_0)$	$\mu_{1_0}^e$ [MPa]	-130,0
		$\mu_{1_1}^e$ [MPa/K]	0,0
		α^{e_1}	3,0
		$\mu_{2_0}^e$ [MPa]	190,0
		$\mu_{2_1}^e$ [MPa/K]	0,0
		α^{e_2}	1,3
		$\mu_{3_0}^e$ [MPa]	50,0
		$\mu_{3_1}^e$ [MPa/K]	0,0
φ^p	$\varphi^p(q, T) = \Sigma_0(T)q + \frac{1}{2}H(T)q^2 + \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j^p(T)}{\alpha_j^{p_j+1}} (q)^{\alpha_j^{p_j+1}}$ $\Sigma_0(T) = \Sigma_0(T_0)[1 - \omega_0(T - T_0)]$ $H(T) = H(T_0)[1 - \omega_H(T - T_0)]$ $\mu_j^p(T) = \mu_j^p(T_0) \frac{T}{T_0}$	$\Sigma_0(T_0)$ [MPa]	10,0
		ω_0 [$1/\text{K}$]	0,01
		$H(T_0)$	0,05
		ω_H	0,0
		$\mu_1^p(T_0)$ [MPa]	100,0
		α^{p_1}	4,5
φ^h	$\varphi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right]$	C_0 [$\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}$]	1000,0
		ρ [kg/m^3]	1000,0
$\bar{\Psi}$	$\bar{\Psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \frac{m}{m+1} \sigma_v(T) \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)}{\dot{\varepsilon}_0} \right)^{\frac{1}{m+1}}$ $\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0)[1 - \omega_v(T - T_0)]$	$\sigma_v(T_0)$ [MPa]	7,5
		ω_v [$1/\text{K}$]	0,01
		$\dot{\varepsilon}_0$ [$1/\text{s}$]	5,0
		m	3,0

4.1.5. Material polimérico com amolecimento

As propriedades materiais escolhidas para representar o comportamento de amolecimento mecânico dentro da faixa plástica, característico de materiais poliméricos, seguem a mesma base das adotadas para o material sem amolecimento. A diferença está na descrição do encruamento, onde não se considera mais o termo de encruamento linear e se consideram três termos de encruamento potencial, e na inclusão de dependência de temperatura nos coeficientes da faixa elástica (μ_{21}^e), a fim de capturar um comportamento comum dos polímeros, de amolecimento elástico com o aumento de temperatura.

Tabela 4.5 - Parâmetros para o material polimérico com amolecimento mecânico na faixa plástica ($T_0 = 293\text{K}$).

Potencial	Formato empregado	Coeficientes	
φ^{vol}	$\varphi^{\text{vol}}(J, T) = \frac{1}{2}(K(T) - 3K_0\alpha(T - T_0))(\ln(J))^2$ $K(T) = K_0 - K_1(T - T_0)$	α [K^{-1}]	$50,0 \cdot 10^{-6}$
		K_0 [GPa]	10,0
		K_1 [GPa]	0,0
φ^e	$\varphi^e(\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e, T) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\mu_i^e(T)}{\alpha_i^e} ([\exp(\varepsilon_j^e)]^{\alpha_i^e} - 1)$ $\mu_i^e(T) = \mu_{i0}^e - \mu_{i1}^e(T - T_0)$	μ_{10}^e [MPa]	-130,0
		μ_{11}^e [MPa/K]	0,0
		α_{e1}	3,0
		μ_{20}^e [MPa]	190,0
		μ_{21}^e [MPa/K]	0,375
		α_{e2}	1,3
		μ_{30}^e [MPa]	50,0
		μ_{31}^e [MPa/K]	0,0
φ^p	$\varphi^p(q, T) = \Sigma_0(T)q + \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j^p(T)}{\alpha_j^p + 1} (q)^{\alpha_j^p + 1}$ $\Sigma_0(T) = \Sigma_0(T_0)[1 - \omega_0(T - T_0)]$ $\mu_j^p(T) = \mu_j^p(T_0) \frac{T}{T_0}$	$\Sigma_0(T_0)$ [MPa]	10,0
		ω_0 [$1/\text{K}$]	0,01
		$\mu_1^p(T_0)$ [MPa]	-30,0
		α_{p1}	1,2
		$\mu_1^p(T_0)$ [MPa]	40,0
		α_{p1}	1,75

φ^h	$\varphi^h(T) = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right]$	C_0 [J/kg.K]	1000,0
		ρ [kg/m ³]	1000,0
$\bar{\psi}$	$\bar{\psi} \left(\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right); q, T \right) = \frac{m}{m+1} \sigma_v(T) \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{\frac{1}{m+1}}$ $\sigma_v(T) = \sigma_v(T_0) [1 - \omega_v (T - T_0)]$	$\sigma_v(T_0)$ [MPa]	7,5
		ω_v [1/K]	0,01
		$\dot{\epsilon}_0$ [1/s]	5,0
		m	3,0

4.2. Tração uniaxial – curvas de tensão-deformação

Nesta seção, simulações de tração uniaxial são usadas no intuito de caracterizar o comportamento termomecânico dos materiais em estudo. Além de observar as curvas tensão-deformação, algumas características de acoplamento são acompanhadas, especialmente na forma de curvas temperatura-deformação correspondentes.

Os ensaios são efetuados sobre um elemento de dimensões unitárias, com um ponto de Gauss central representativo do volume, para o qual se calculam as grandezas de interesse.

4.2.1. Liga de alumínio 2024-T3

O primeiro material simulado é a liga de alumínio 2024-T3, com comportamento independente da taxa de deformação. São apresentadas as curvas tensão-deformação e variação de temperatura-deformação, que mostram boa correspondência com os resultados apresentados em Stainier e Ortiz (2008).

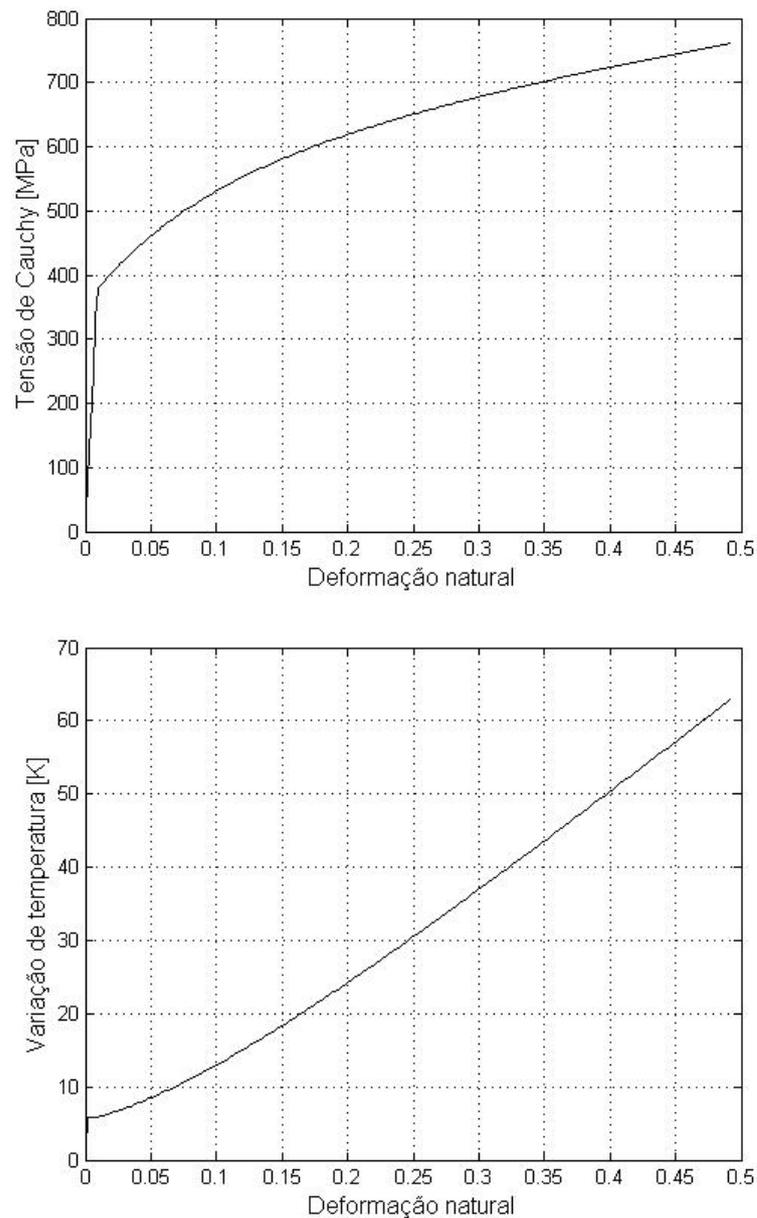


Figura 4.1 - Curvas de tensão-deformação e variação de temperatura para uma liga de alumínio 2024-T3 ($T_0 = 293\text{K}$).

4.2.2. Liga alfa-titânio

Outro material considerado por Stainier e Ortiz (2008), é a liga alfa-titânio. Ao contrário da liga de alumínio, o alfa-titânio apresenta características viscoplásticas, como fica evidenciado na família de curvas tensão-deformação (e as correspondentes de variação de temperatura-deformação) para diferentes taxas de deformação.

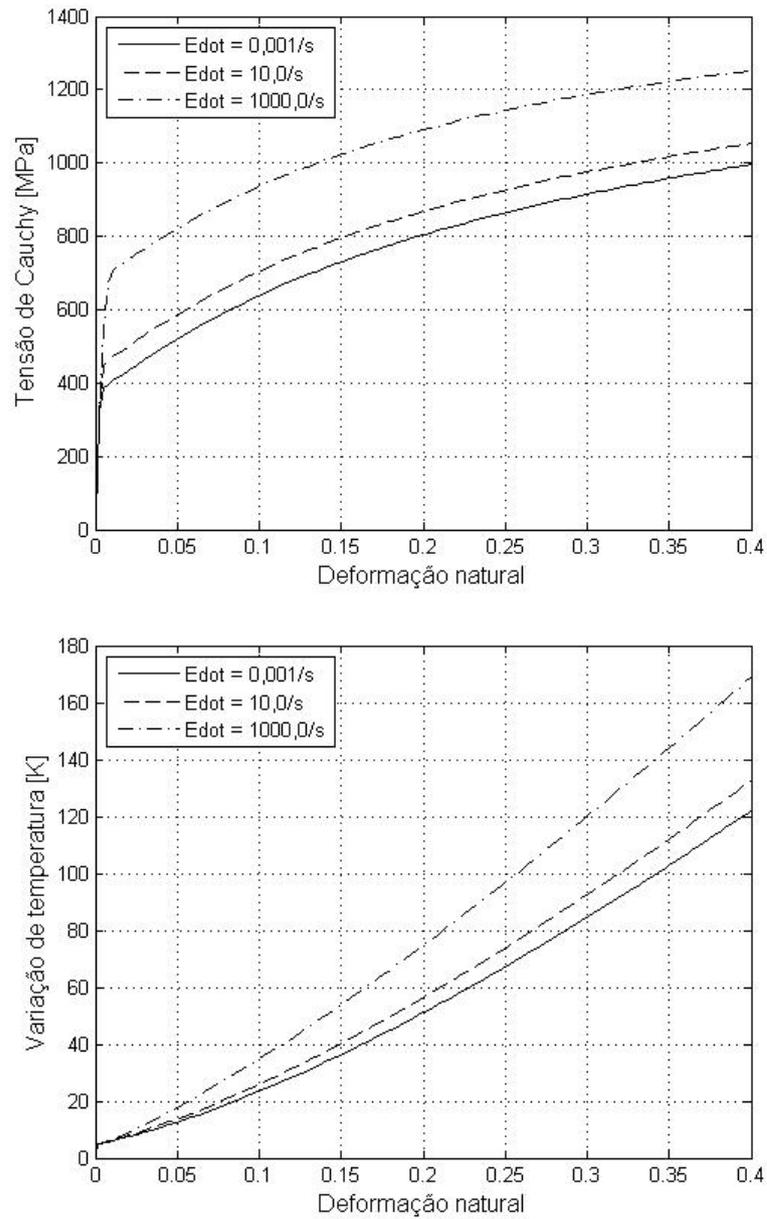


Figura 4.2 - Influência da taxa de deformação no comportamento termomecânico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293K$).

São realizadas simulações a velocidades de deformação baixa ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$), alta ($\dot{\epsilon} = 10000s^{-1}$) e intermediária ($\dot{\epsilon} = 10s^{-1}$), correspondentes a uma grande variedade de aplicações possíveis.

O comportamento termomecanicamente acoplado do alfa-titânio também é testado através de simulações a temperaturas iniciais diferentes. Como esperado, o aumento de temperatura leva à redução dos níveis de tensão.

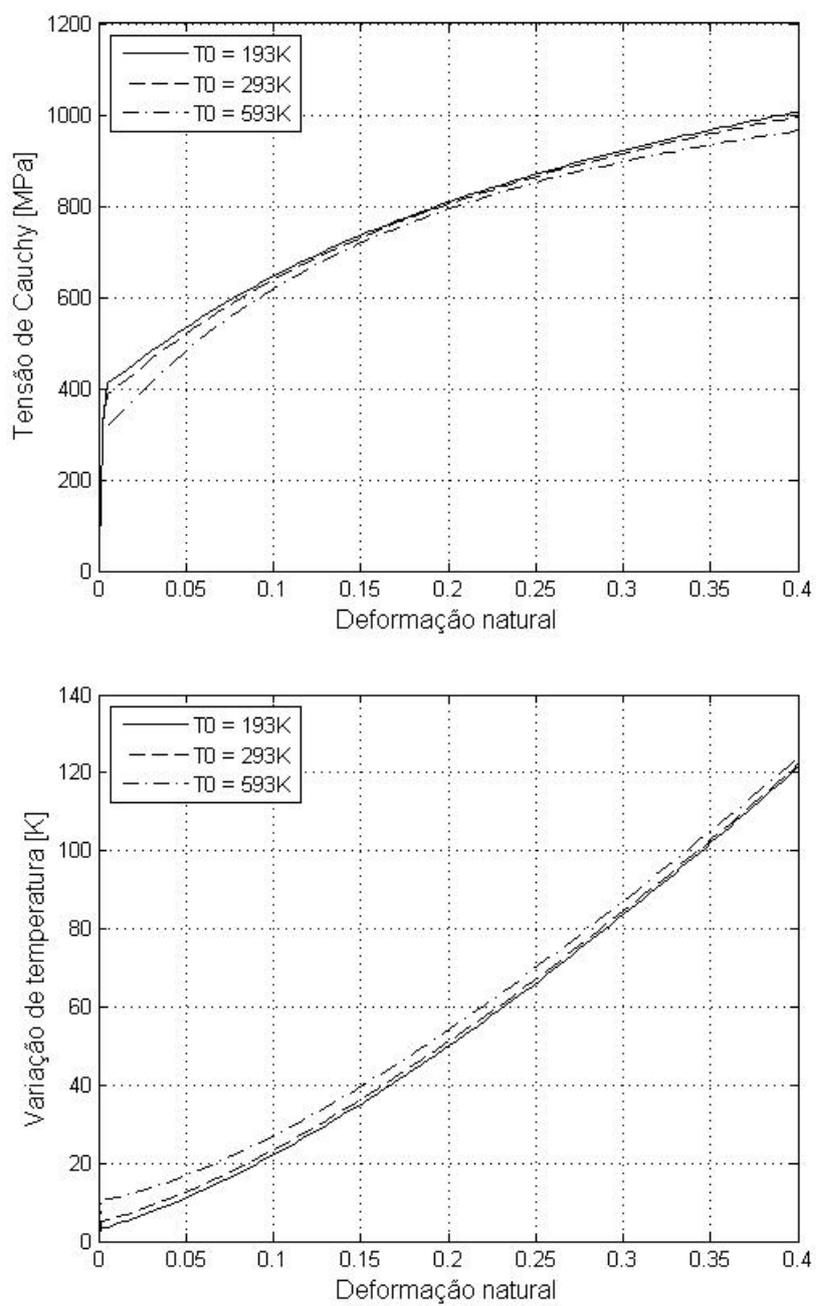


Figura 4.3 - Influência da temperatura inicial no comportamento termomecânico do alfa-titânio ($\dot{\epsilon} = 0,001\text{s}^{-1}$).

4.2.3. Tântalo policristalino puro

A dependência de temperatura no comportamento termomecânico acoplado do tântalo policristalino puro é mais pronunciada que na liga alfa-titânio. Isto fica evidenciado na família de curvas tensão-deformação para diferentes temperaturas iniciais de ensaio.

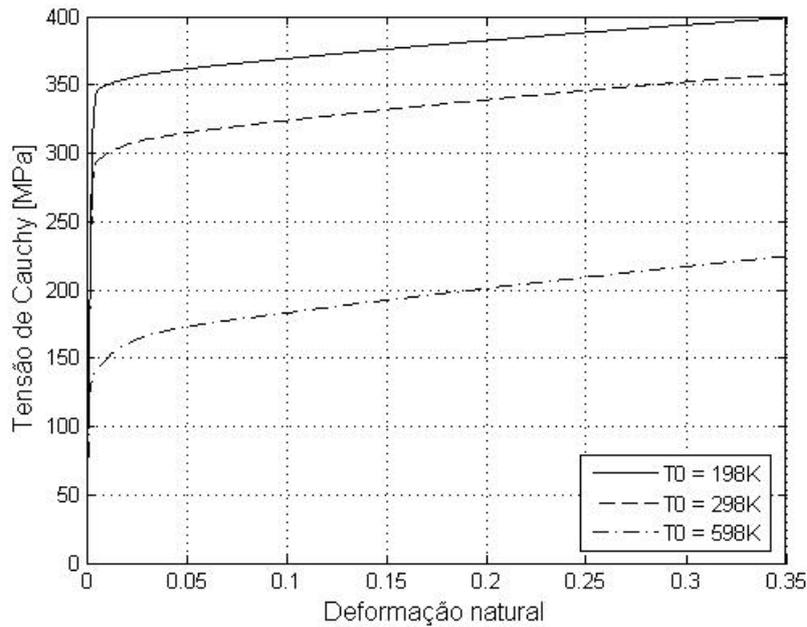


Figura 4.4 - Influência de temperatura inicial de ensaio para o tântalo policristalino puro ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).

Fica evidente também, a diferença no comportamento viscoso do tântalo policristalino puro, na comparação com o alfa-titânio. Um platô de tensão é atingido na faixa plástica, com encruamento cada vez menor à medida que sobem as taxas de deformações. Obtém-se, inclusive, um efeito de amolecimento com o aumento da deformação, para as taxas de deformação mais altas, refletindo os efeitos da crescente variação de temperatura.

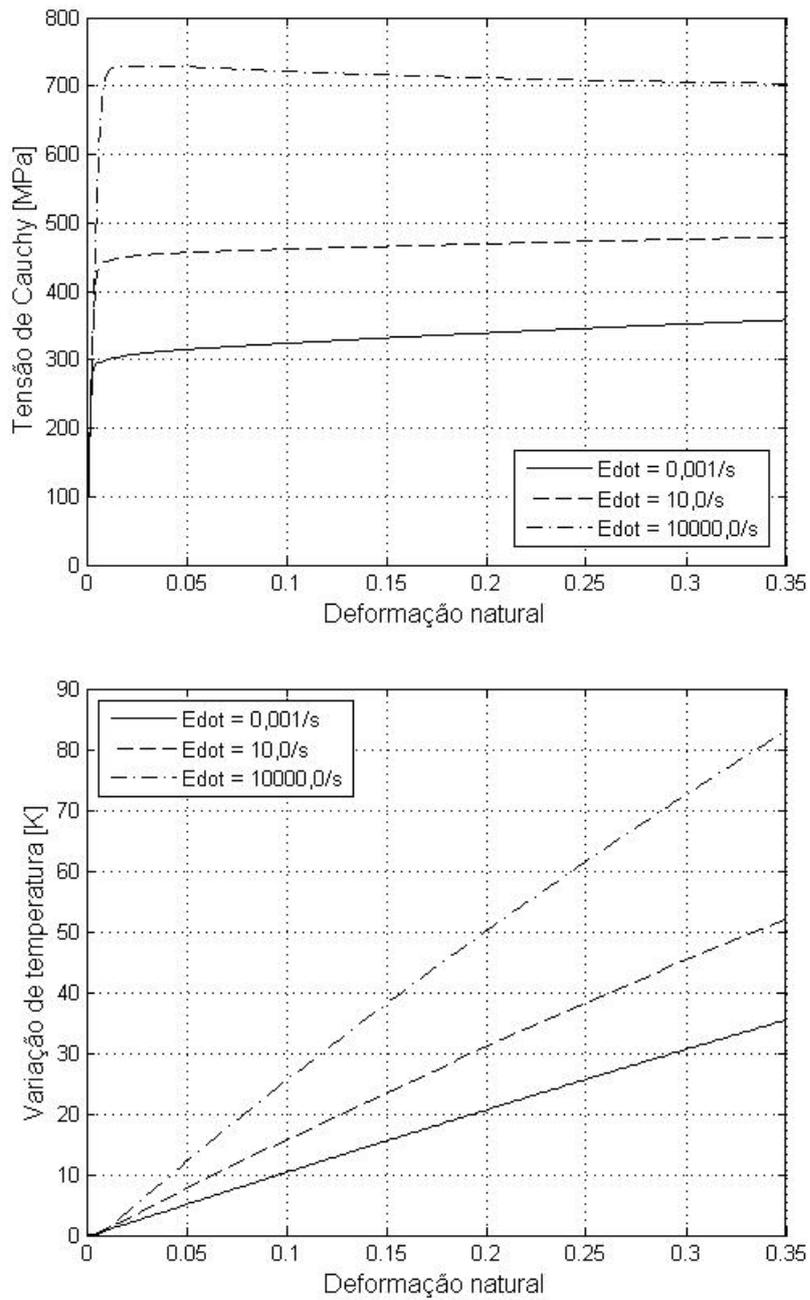


Figura 4.5 - Influência da taxa de deformação no comportamento do tântalo policristalino puro ($T_0 = 298K$).

4.2.4. Material polimérico sem amolecimento

Em contraste com os materiais metálicos apresentados até aqui, a faixa elástica de materiais poliméricos é geralmente mais longa, e de características não-lineares. A adoção de

grandezas espectrais para a descrição do comportamento elástico isocórico permite a incorporação do modelo de Ogden, muito usado no modelamento de polímeros. Apresenta-se, a seguir, um material polimérico sem amolecimento na faixa plástica. Por apresentar capacidades térmicas geralmente maiores que os metais, os polímeros tendem a apresentar menores variações de temperatura durante a deformação. A dependência do comportamento mecânico com a temperatura é bastante pronunciada, com grandes variações nas curvas de tensão-deformação com pequenas variações de temperatura dentro da faixa de aplicação dos polímeros, o que fica claro na família de curvas apresentada abaixo.

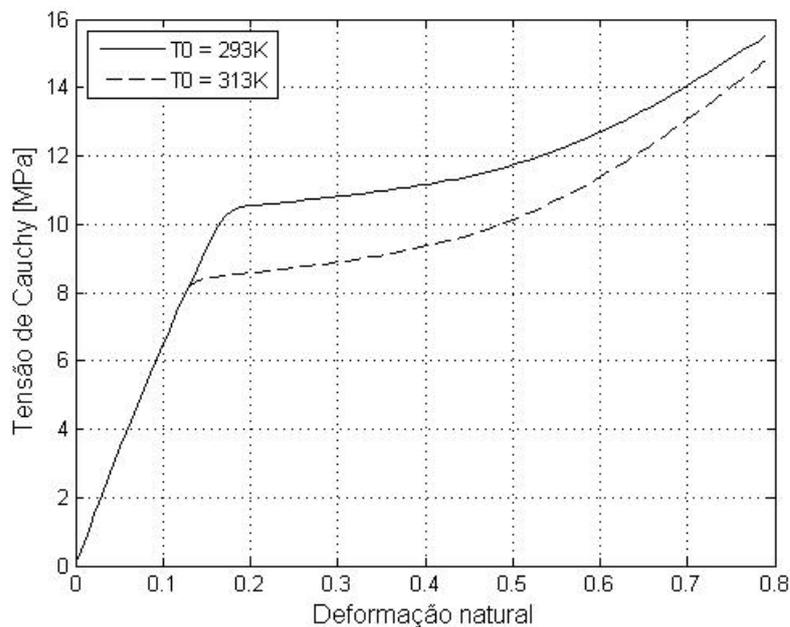


Figura 4.6 - Influência da temperatura para um material polimérico sem amolecimento ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).

A faixa elástica para as duas temperaturas ensaiadas coincide porque os coeficientes elásticos isocóricos de Ogden foram considerados independentes de temperatura.

As mudanças de comportamento devidas às características viscosas também são pronunciadas, como fica claro quando são simuladas diferentes taxas de deformação, nas curvas abaixo.

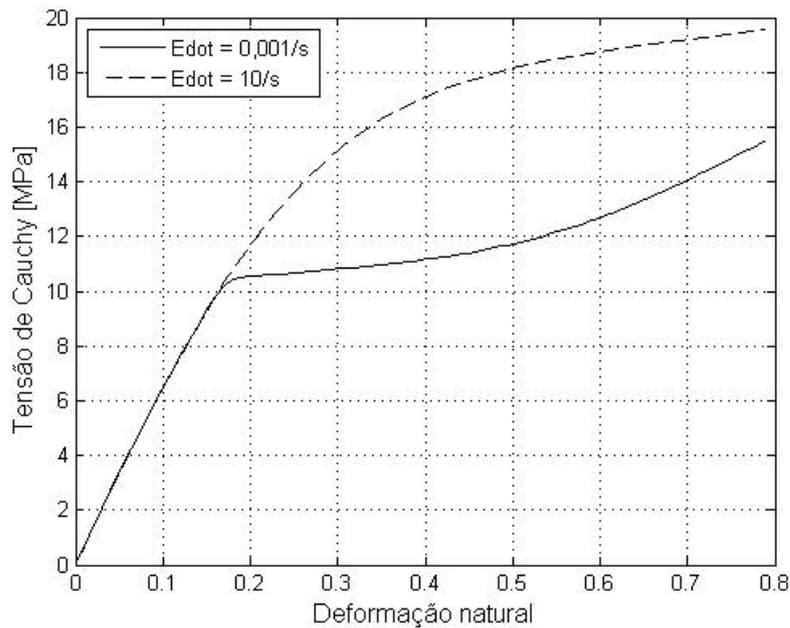


Figura 4.7 - Influência da taxa de deformação no comportamento de um material polimérico sem amolecimento ($T_0 = 293\text{K}$).

4.2.5. Material polimérico com amolecimento

Alguns materiais poliméricos apresentam um comportamento amolecido após a entrada na faixa plástica, em decorrência do desalinhamento inicial das cadeias poliméricas no interior do material. Com o crescimento da plastificação, as cadeias tendem a se alinhar, e o usual processo de encruamento passa a dominar, com o movimento de discordâncias e de ligações entre cadeias poliméricas.

Outro fenômeno comum é a dependência de temperatura dentro da faixa elástica, como foi mostrado na Figura 1.6, no capítulo introdutório. Os polímeros plásticos tendem a se tornar menos rígidos com o aumento de temperatura.

Buscou-se modelar estes tipos de comportamento alterando alguns parâmetros do material sem amolecimento. Permitiu-se a variação com a temperatura dos coeficientes elásticos de Ogden, além da introdução de um segundo termo de encruamento potencial responsável pela queda dos níveis de tensão dentro da faixa plástica.

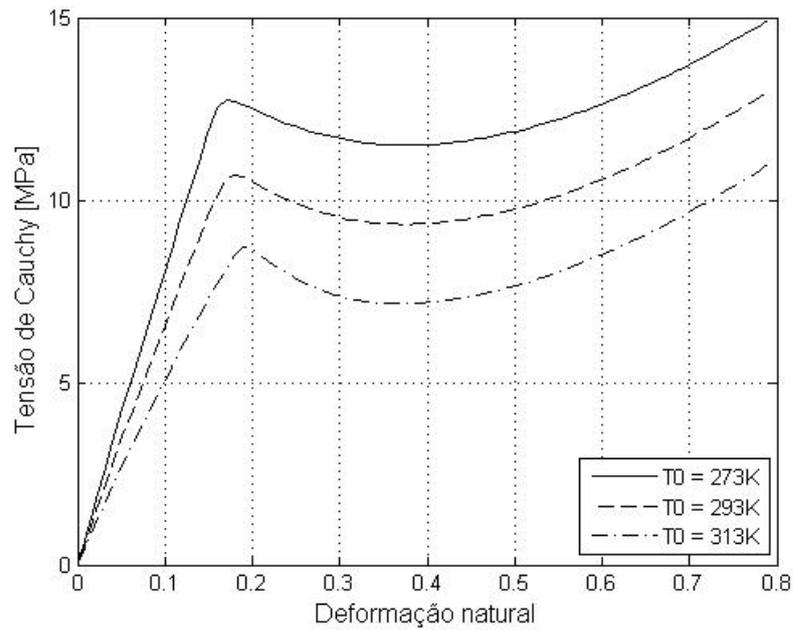


Figura 4.8 - Influência da temperatura inicial de ensaio de um material polimérico com amolecimento ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).

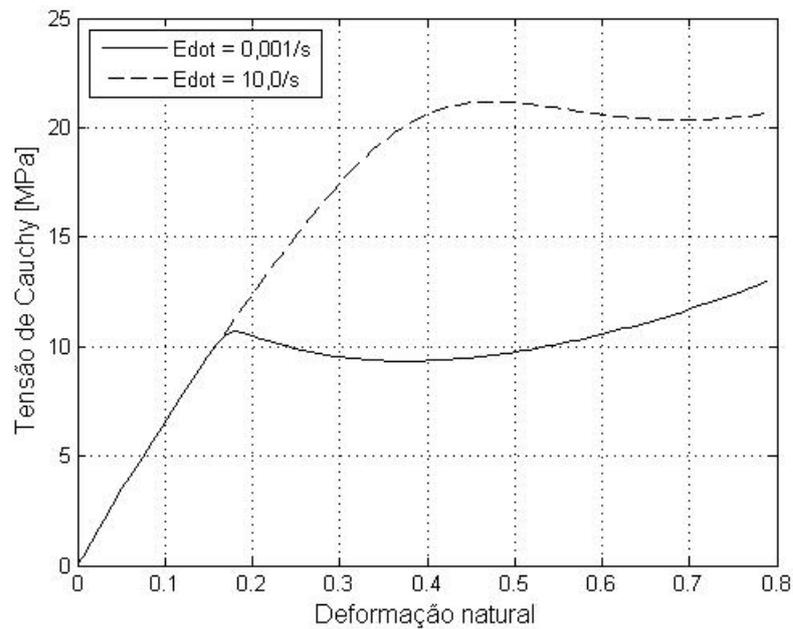


Figura 4.9 - Influência da taxa de deformação no comportamento de um material polimérico com amolecimento ($T_0 = 293K$).

4.3. Análise de sensibilidade do modelo

Os exemplos da Seção 4.2 mostraram a capacidade do modelo em descrever uma grande variedade de tipos de comportamento diferentes. Características típicas de metais e polímeros foram exploradas. Buscou-se evidenciar manifestações do acoplamento termomecânico.

Contudo, uma idéia mais profunda quanto ao comportamento do modelo proposto no presente trabalho para materiais viscoplásticos termomecanicamente acoplados em regime adiabático pode ser alcançada mediante uma análise de sensibilidade à variação de alguns de seus principais parâmetros. O enfoque principal recai sobre os parâmetros responsáveis pelo acoplamento de comportamentos térmico e mecânico. Sua influência sobre o modelo é acompanhada a partir dos resultados de simulação obtidos para algumas variáveis de natureza mecânica (tensão e deformação plástica acumulada) e outras de natureza térmica (temperatura e variação de entropia), que são então interpretados dentro de um contexto geral.

Os parâmetros materiais básicos utilizados foram os da liga alfa-titânio, apresentados na Tabela 4.2. Simulações padronizadas, com a mesma deformação final ($\epsilon = 0,4$) e taxa de deformação (um valor intermediário de $\dot{\epsilon} = 10s^{-1}$ para os parâmetros do pseudo-potencial dissipativo – evidenciando efeitos viscosos – e um valor quase-estático de $\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$ para os parâmetros dos outros potenciais), foram realizadas para os diferentes valores dos parâmetros de acoplamento. Um a um, os parâmetros foram variados dentro uma faixa, com o restante dos parâmetros mantidos constantes. A fim de organizar a apresentação de resultados, enfoca-se cada um dos potenciais que compõem o modelo separadamente.

4.3.1. Potencial volumétrico (φ^{vol})

Dois parâmetros caracterizam o acoplamento termomecânico dentro do potencial volumétrico: o coeficiente de expansão volumétrica α e o coeficiente de variação do módulo de compressibilidade com a temperatura (K_1). Em ambos os casos, embora em proporções diferentes, o aumento dos parâmetros redundam em aumento da compressibilidade do material.

Em outras palavras, são necessários menores níveis de tensão para chegar ao mesmo nível de deformação. Com a queda dos níveis de tensão, os mecanismos dissipativos acoplados são menos representativos e acabam fazendo com que os níveis de temperatura sejam menores, assim como o aumento de entropia durante a deformação. Por fim, com um material menos rígido, a recuperação elástica da deformação é maior, de forma que o resíduo plástico (deformação plástica acumulada) é reduzido.

Apresenta-se um resumo esquemático, seguido de alguns gráficos obtidos a partir dos ensaios padronizados com diferentes valores de α e K_1 (este último, ensaiado para valores positivos – amolecimento com aquecimento – e negativos – enrijecimento com aquecimento, comportamento apresentado por borrachas, por exemplo).

Tabela 4.6 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial volumétrico.

Varição do parâmetro em estudo	Tensão final de ensaio	Temperatura final de ensaio	Varição de entropia	Deformação plástica acumulada
$\alpha \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\varepsilon^P \downarrow$
$K_1 \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\varepsilon^P \downarrow$

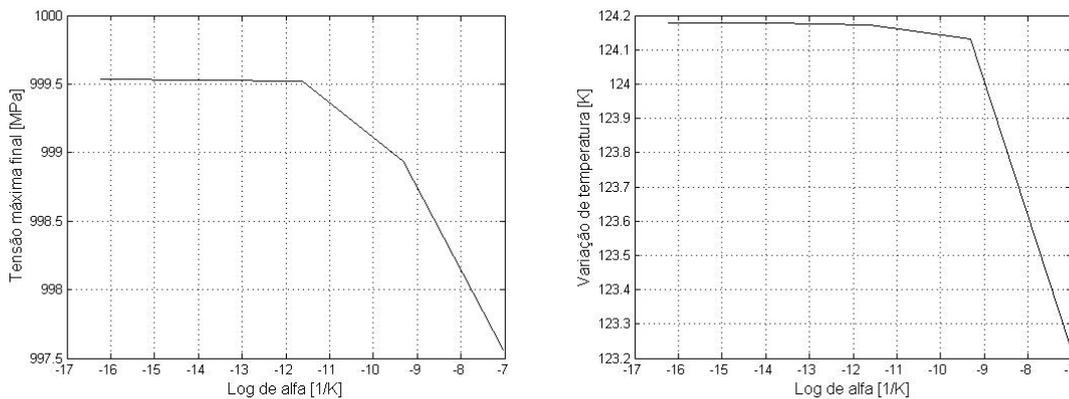


Figura 4.10 - Sensibilidade da tensão e da temperatura finais de ensaio para variações do coeficiente de expansão volumétrica.

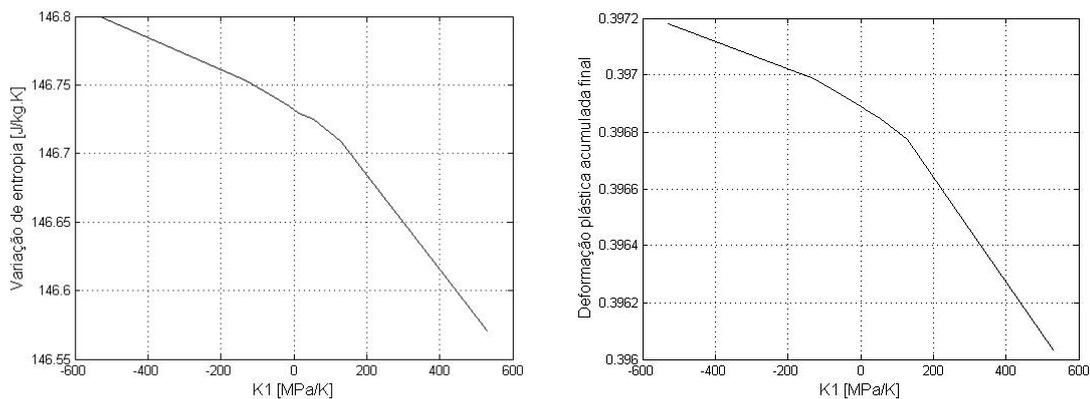


Figura 4.11 - Sensibilidade da variação de entropia e da deformação plástica acumulada finais de ensaio para variações de K_1 .

4.3.2. Potencial elástico isocórico (φ^e)

O parâmetro material do potencial elástico isocórico responsável pelo acoplamento termomecânico é o coeficiente de variação do módulo de elasticidade com a temperatura (μ_1 para os modelos de Hencky (3.32), ou $\mu_{1_1}^e$ para os modelos de Ogden (3.34)). Assim como para o parâmetro K_1 , o aumento de μ_1 redundaria em materiais menos rígidos com o aumento de temperatura. Assim, menores tensões são necessárias para se chegar ao mesmo nível de deformação. Da mesma forma, com menores tensões, os mecanismos de acoplamento e dissipação são atenuados e a temperatura final é reduzida, juntamente com a variação de entropia. Como a recuperação elástica é maior, a deformação plástica acumulada ao fim do ensaio é reduzida.

Tabela 4.7 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial elástico isocórico.

Variação do parâmetro em estudo	Tensão final de ensaio	Temperatura final de ensaio	Variação de entropia	Deformação plástica acumulada
$\mu_1 \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\epsilon^p \downarrow$

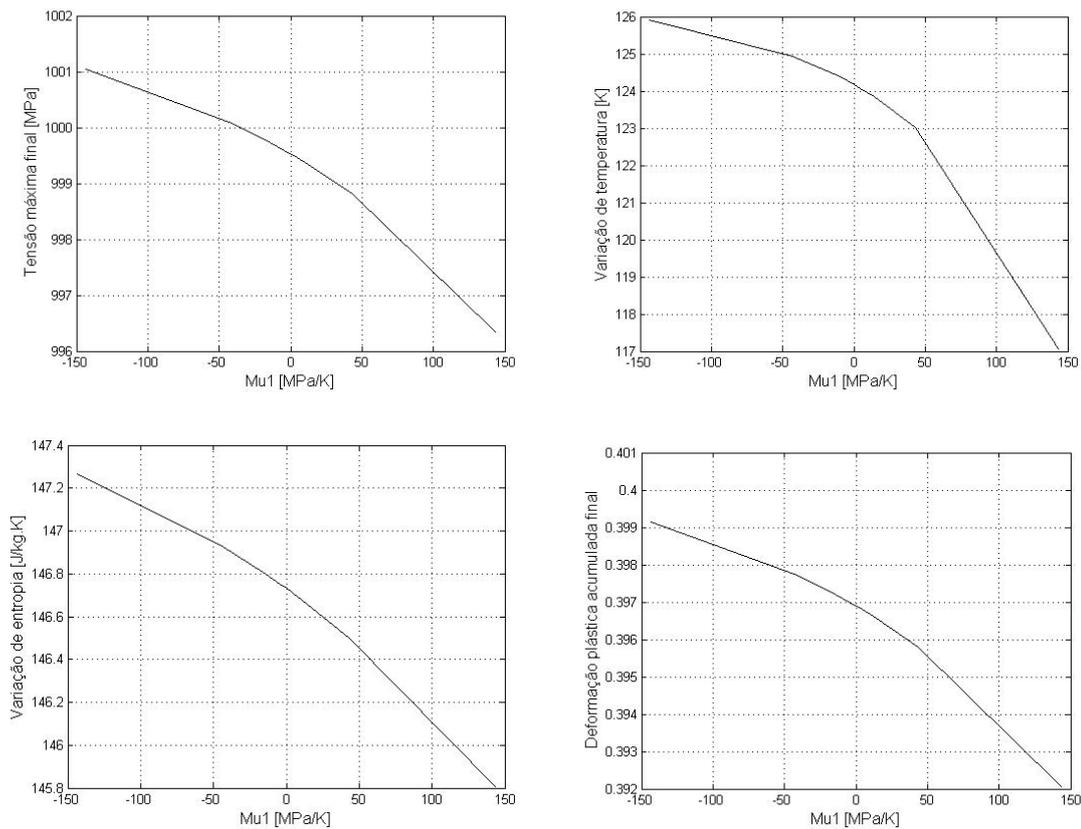


Figura 4.12 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de μ_1 .

4.3.3. Potencial plástico (ϕ^p)

O mecanismo de acoplamento termomecânico dentro do potencial plástico, à semelhança do que acontece nos potenciais elásticos volumétrico e isocórico, é a variação de coeficientes de encruamento com a mudança de temperatura. De forma geral, considerando um comportamento linear semelhante para todos os coeficientes, pode-se proceder à análise de sensibilidade do potencial plástico a partir do caso representativo do fator ω_0 , responsável por alterar o limite de escoamento Σ_0 . A idéia é entender qualitativamente a influência das variações deste tipo de parâmetro sobre a resposta geral do sistema.

O aumento do parâmetro ω_0 redonda em maiores reduções do limite de escoamento com o aumento da temperatura. Assim, à medida que o material é deformado e esquenta, fica progressivamente mais suscetível a deformações plásticas. Em outras palavras, aumenta a

deformação plástica acumulada ao final do ensaio padronizado. Como a dissipação viscosa se dá durante a plastificação, o aumento de entropia ao final do ensaio também tende a aumentar. Como o material está se tornando mais macio, os níveis de tensão caem, e com eles os mecanismos de acoplamento, redundando em menores temperaturas ao final do ensaio.

Tabela 4.8 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial plástico.

Varição do parâmetro em estudo	Tensão final de ensaio	Temperatura final de ensaio	Varição de entropia	Deformação plástica acumulada
$\omega_0 \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \uparrow$	$\epsilon^p \uparrow$

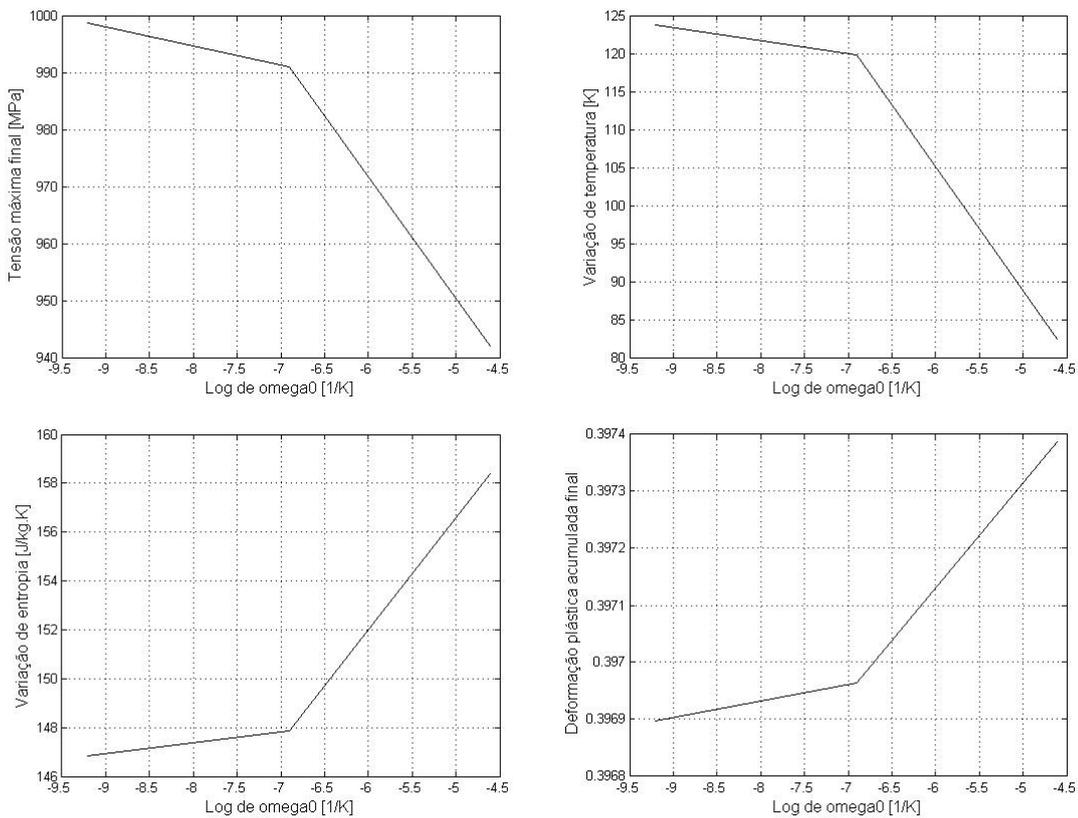


Figura 4.13 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de ω_0 .

4.3.4. Potencial de acumulação de energia térmica (φ^h)

O principal parâmetro do potencial de acumulação de energia térmica que influencia o comportamento termomecânico acoplado é a capacidade térmica específica do material (C_0). Ele indica a quantidade de energia necessária para alterar a temperatura do material. Assim, o crescimento de C_0 leva à redução da temperatura final de ensaio. Por outro lado, há um acoplamento entre a resposta mecânica e térmica. Como fica mais difícil variar a temperatura, é necessário aumentar a tensão para chegar ao mesmo nível de deformação. Como o processo se dá a maiores níveis de tensão, aumenta a dissipação de energia, de forma que a variação de entropia é maior. As tensões mais elevadas, fazem com que a parcela elástica da deformação seja maior, reduzindo a deformação plástica acumulada ao final do ensaio.

Tabela 4.9 - Análise de sensibilidade dos parâmetros de acoplamento do potencial de acumulação térmica.

Varição do parâmetro em estudo	Tensão final de ensaio	Temperatura final de ensaio	Varição de entropia	Deformação plástica acumulada
$C_0 \uparrow$	$\sigma \uparrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \uparrow$	$\varepsilon^p \downarrow$

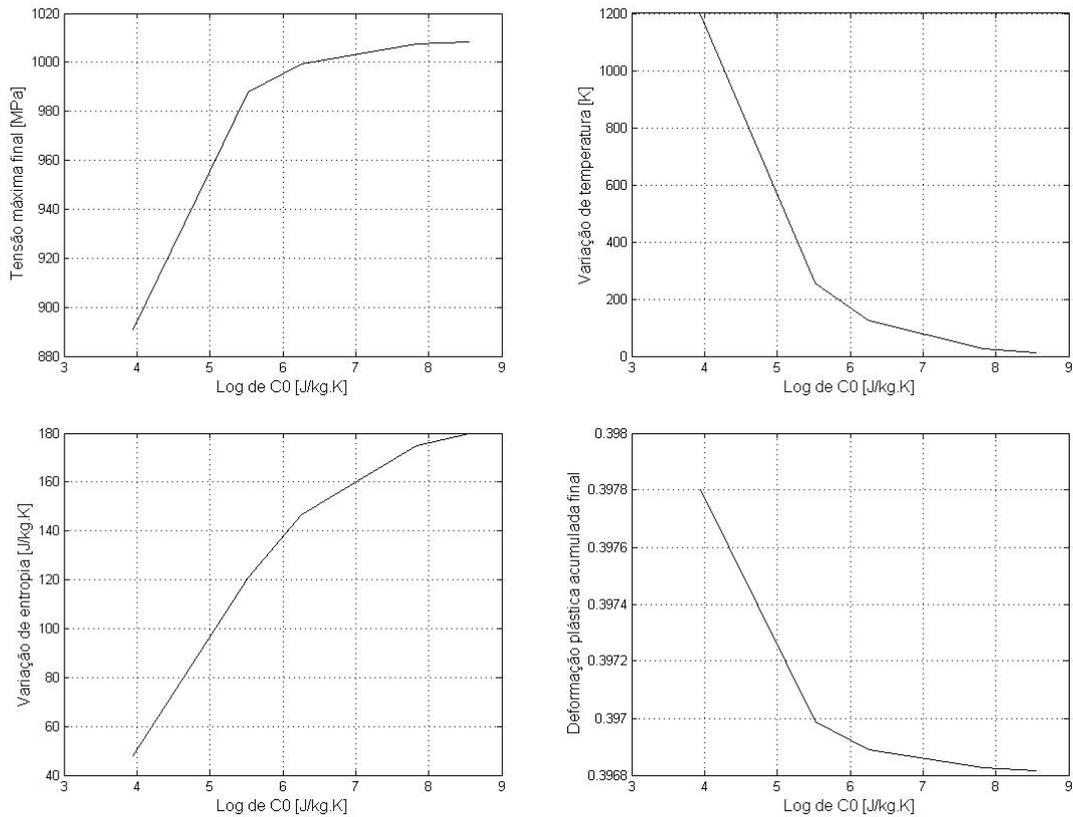


Figura 4.14 - Sensibilidade da tensão, temperatura, variação de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de C_0 .

4.3.5. Pseudo-potencial dissipativo ($\bar{\Psi}$)

O pseudo-potencial dissipativo, proposto por Stainier e Ortiz (2008) e empregado também no presente trabalho, possui vários parâmetros que influenciam o acoplamento termomecânico. Apenas alguns deles são analisados, a fim de construir um panorama geral do comportamento do pseudo-potencial.

Antes, porém, de passar à análise de sensibilidade propriamente dita, busca-se primeiramente apresentar os diferentes componentes do pseudo-potencial dissipativo. Distinguem-se dois termos na Equação (3.38): um que varia linearmente com a taxa de deformação plástica (fator σ_y) e outro na forma clássica do potencial dissipativo de Perzyna, com dependência potencial da taxa de deformação plástica (fator σ_v).

O termo linear σ_y , por sua vez, é composto por dois termos separados, que dependem do nível de plastificação acumulada potencialmente (fator σ_1) e exponencialmente (fator $\hat{\sigma}_1$). Em uma curva tensão-deformação, ficam claras as contribuições individuais e o termo de σ_y completo.

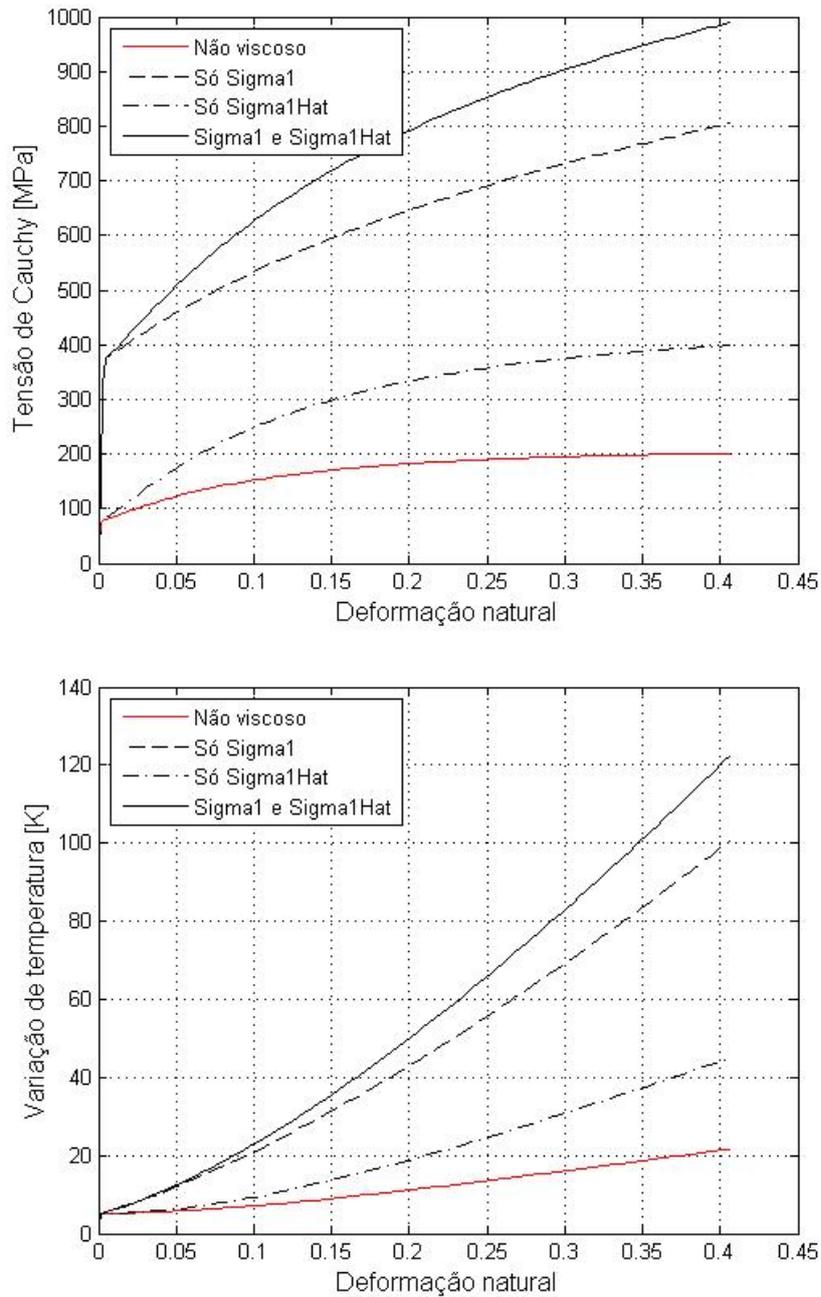


Figura 4.15 - Composição do termo dissipativo linear com a taxa de deformação plástica.

O pseudo-potencial dissipativo completo, incluindo o termo clássico de Perzyna, fica então composto como segue:

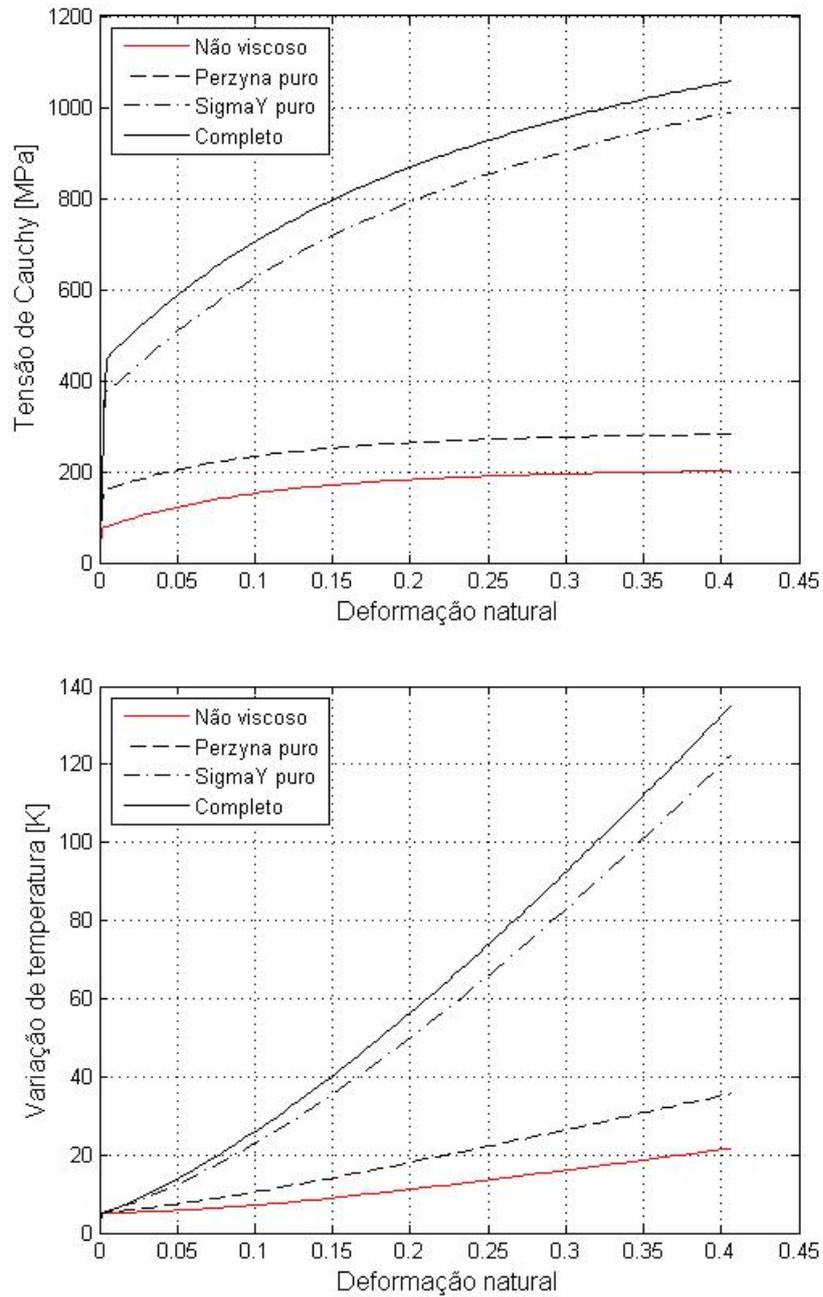


Figura 4.16 - Composição do pseudo-potencial dissipativo completo, com termo linear e de Perzyna.

Focam-se as análises de sensibilidade do modelo sobre os parâmetros da parcela de Perzyna do pseudo-potencial dissipativo. Podem-se estender as conclusões para parâmetros análogos dentro do termo σ_v .

Os termos ω_v (que varia o parâmetro σ_v com variações de temperatura), $\dot{\epsilon}_0$ e m (expoente de Perzyna), cada um a sua maneira, acabam por influenciar o comportamento do modelo da mesma forma. Em todos os casos, o aumento dos parâmetros leva a uma redução da parcela viscosa. Assim, as tensões são menores, e com elas, as temperaturas que lhes são acopladas. Como a parcela viscosa cai, cai também o aumento final de entropia ao final do ensaio. Sob níveis menores de tensão, a parcela plástica da deformação cresce.

Apesar de não apresentado aqui, o mesmo comportamento deve ser esperado para aumento dos parâmetros ω_1 , $\hat{\omega}_1$ e n' , uma vez que o aumento de cada um deles tende a reduzir o peso da parcela viscosa. Por outro lado, o aumento de b' e de d' tendem a ter os efeitos reversos, por aumentarem o peso da parcela viscosa.

Tabela 4.10 - Análise de sensibilidade de termos de acoplamento do pseudo-potencial dissipativo.

Varição do parâmetro em estudo	Tensão final de ensaio	Temperatura final de ensaio	Varição de entropia	Deformação plástica acumulada
$\omega_v \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\epsilon^p \uparrow$
$\dot{\epsilon}_0 \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\epsilon^p \uparrow$
$m \uparrow$	$\sigma \downarrow$	$T \downarrow$	$\Delta\eta \downarrow$	$\epsilon^p \uparrow$

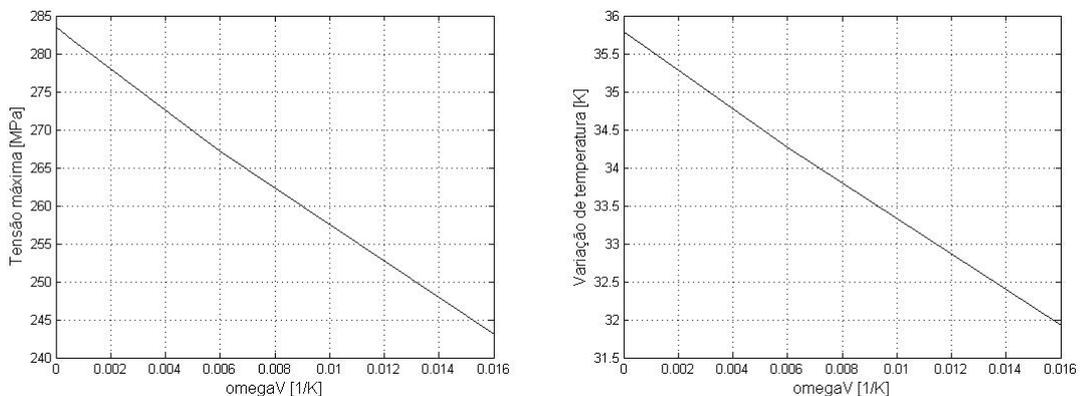


Figura 4.17 - Sensibilidade de tensão e temperatura ao final do ensaio para variações de ω_v .

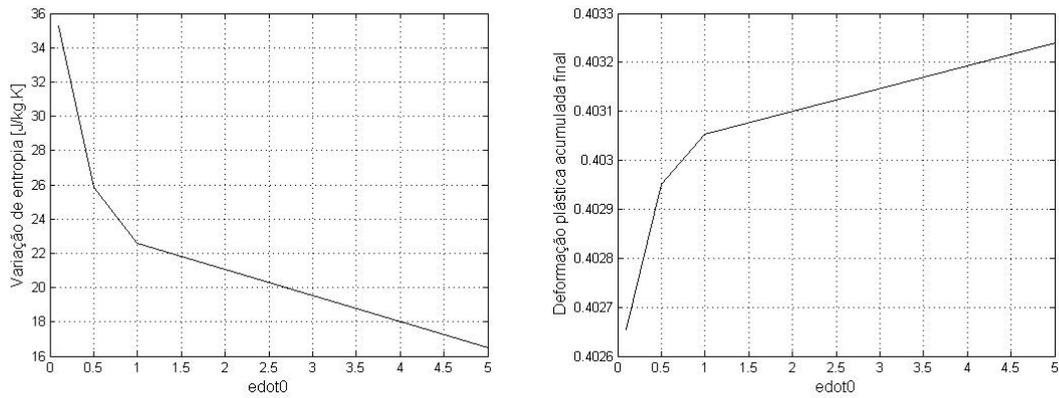


Figura 4.18 - Sensibilidade de aumento de entropia e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de $\dot{\epsilon}_0$.

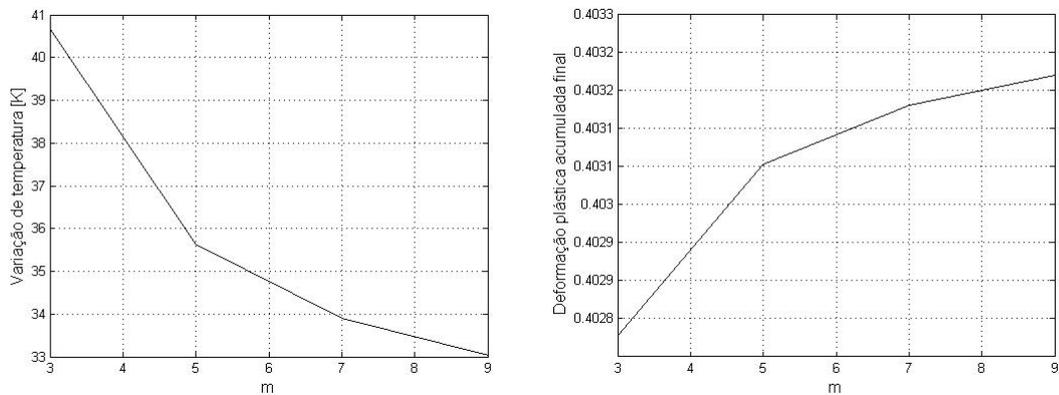


Figura 4.19 - Sensibilidade de temperatura e deformação plástica acumulada ao final do ensaio para variações de m .

4.4. Carregamentos cíclicos – histerese

Tendo em vista o caráter dissipativo complexo do modelo viscoplástico termomecanicamente acoplado, torna-se interessante o estudo do comportamento de histerese dos materiais. Carregamentos cíclicos cisalhantes e trativos foram usados para representar esta faceta. Assim como para os ensaios de tração da Seção 4.2, os ensaios foram realizados sobre um elemento de dimensões unitárias com um ponto de Gauss central. O material base adotado é novamente o alfa-titânio, cujas propriedades materiais constam da Tabela 4.2. Assim como feito na determinação das curvas tensão-deformação, são destacados os mecanismos de acoplamento.

Primeiramente, apresenta-se o caso de um carregamento cisalhante cíclico de grandes deformações. É interessante notar como, quando a plastificação atinge altos níveis, começam a ficar cada vez mais evidentes os efeitos de amolecimento com aquecimento. Assim, os níveis de tensão começam a cair progressivamente. Representa-se a tensão equivalente de Von Mises. Destacam-se as quedas bruscas de tensão quando da inversão do sentido de carregamento. Isto se dá devido ao descarregamento elástico, tendo em vista que se trata de um processo controlado por deformação.

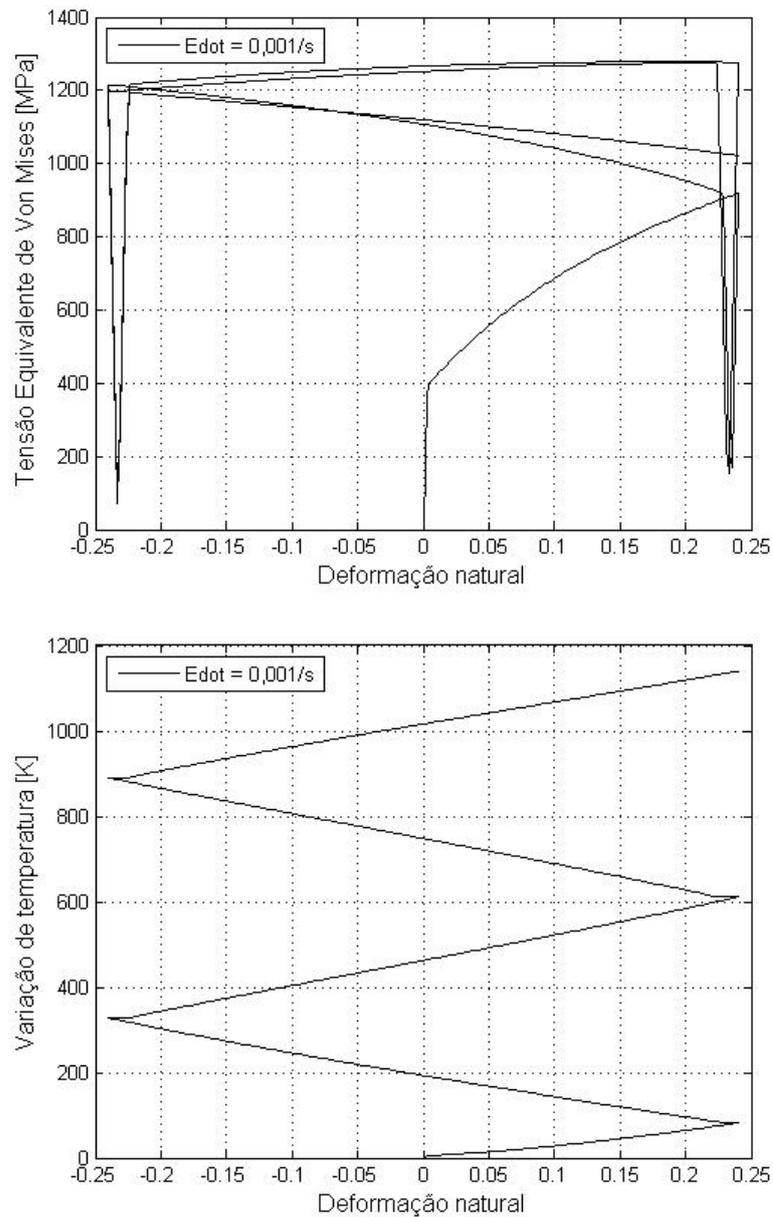


Figura 4.20 - Comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293K$).

Para casos de tração cíclica, foi investigada a influência da temperatura inicial de ensaio e da taxa de deformação. Deve ficar claro que todas as simulações cíclicas apresentadas, cisalhantes e trativas, envolvem altíssimos níveis de deformação, provavelmente fora de qualquer contexto prático, constituindo, contudo, uma boa forma de ilustrar os efeitos de acoplamento termomecânico.

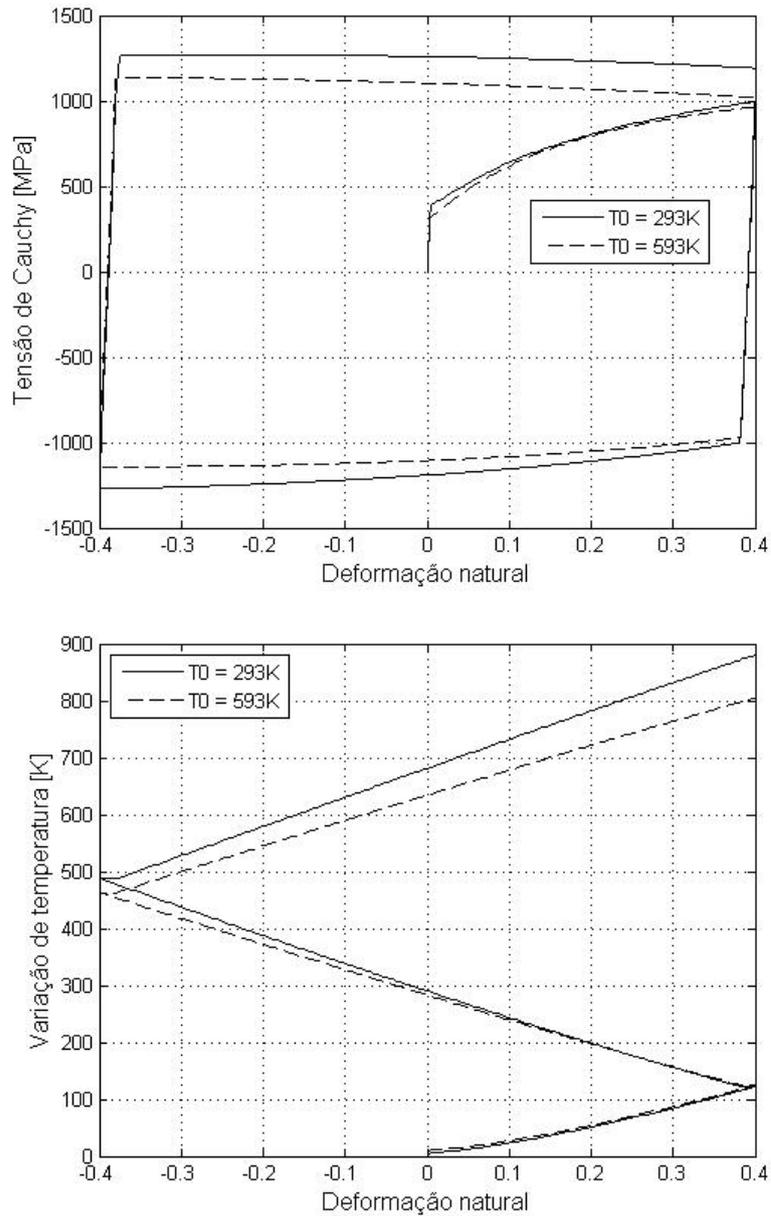


Figura 4.21 - Influência da temperatura inicial no comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($\dot{\epsilon} = 0,001s^{-1}$).

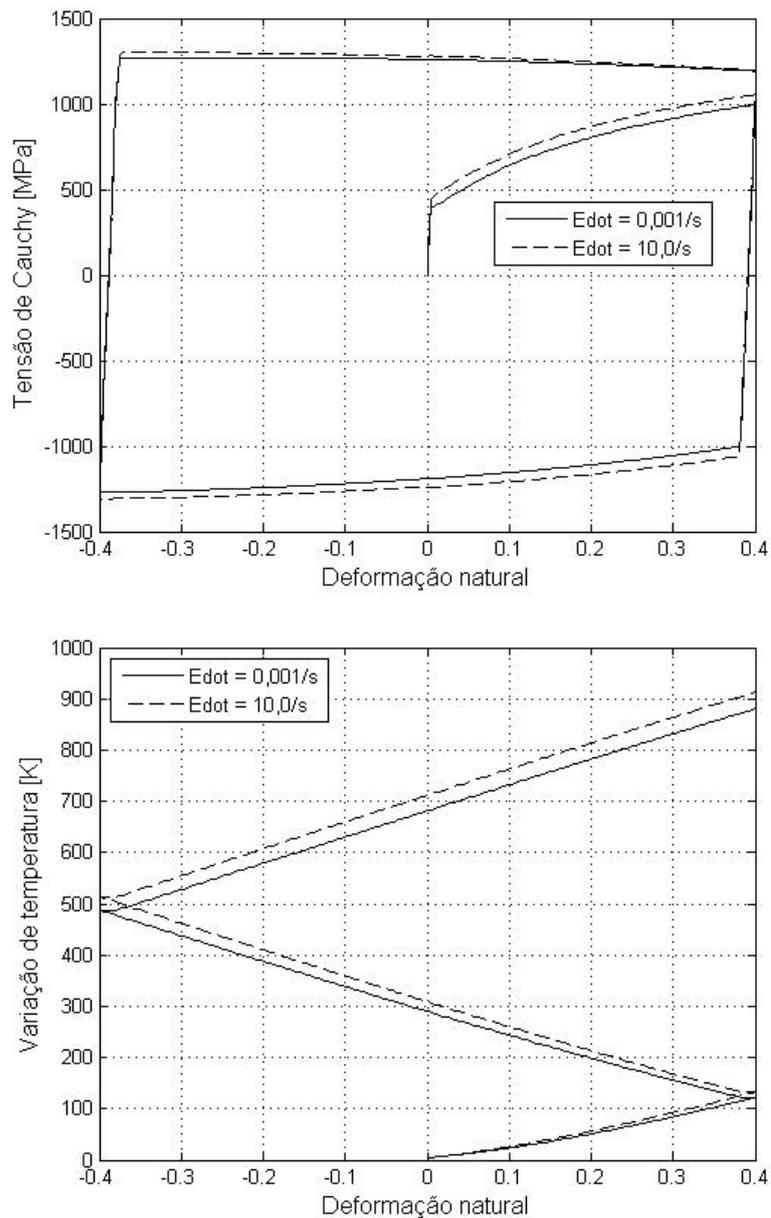


Figura 4.22 - Influência da taxa de deformação no comportamento cíclico da liga alfa-titânio ($T_0 = 293K$).

4.5. Caso 3D – corpo de prova de tração

Uma vez observadas as características do modelo em casos unidimensionais, mais simples, prossegue-se à apresentação de resultados obtidos a partir de sua implementação em um código de elementos finitos educacional. O Metafor, desenvolvido na Université de Liège, na Bélgica, baseia-se em um código em C++, dentro do qual foram implementadas as rotinas

referentes ao modelo constitutivo viscoplástico termomecanicamente acoplado para casos adiabáticos e sem geração de calor.

A geometria adotada é a de um corpo de prova padrão para ensaios de tração, cujas simetrias são aproveitadas para reduzir o tempo computacional e deixar mais clara a apresentação dos resultados. Os parâmetros materiais adotados foram os da liga alfa-titânio, constantes da Tabela 4.2.

Primeiramente, são apresentados exemplos ilustrando a sensibilidade do modelo proposto à taxa de deformação, tanto nos campos mecânicos quanto nos campos térmicos. Extensões de 10 mm do corpo de prova são simuladas a diferentes ordens de grandeza de taxa de deformação. A temperatura inicial simulada é de 293 K. Os efeitos discutidos na Seção 4.3 ficam evidenciados, com o aumento dos níveis de tensão para maiores taxas de deformação (efeitos viscosos) e conseqüente redução da plastificação acumulada, do aumento de entropia e dos níveis de temperatura ao final do ensaio.

Posteriormente, é apresentada uma investigação quanto à influência da temperatura inicial de ensaio sobre o comportamento de estrição do material. Ensaio a 10 mm por segundo são apresentados para temperaturas iniciais de 93 K, 293 K e 793 K. Identifica-se o nível de estrição em dois momentos distintos, com 40 mm e 45 mm de deslocamento total. Torna-se claro que temperaturas mais elevadas de início de ensaio resultam em início de estrição mais cedo, evidenciado pela geometria na região da estrição e pelos valores de tensão equivalente de von Mises, ali concentrados.

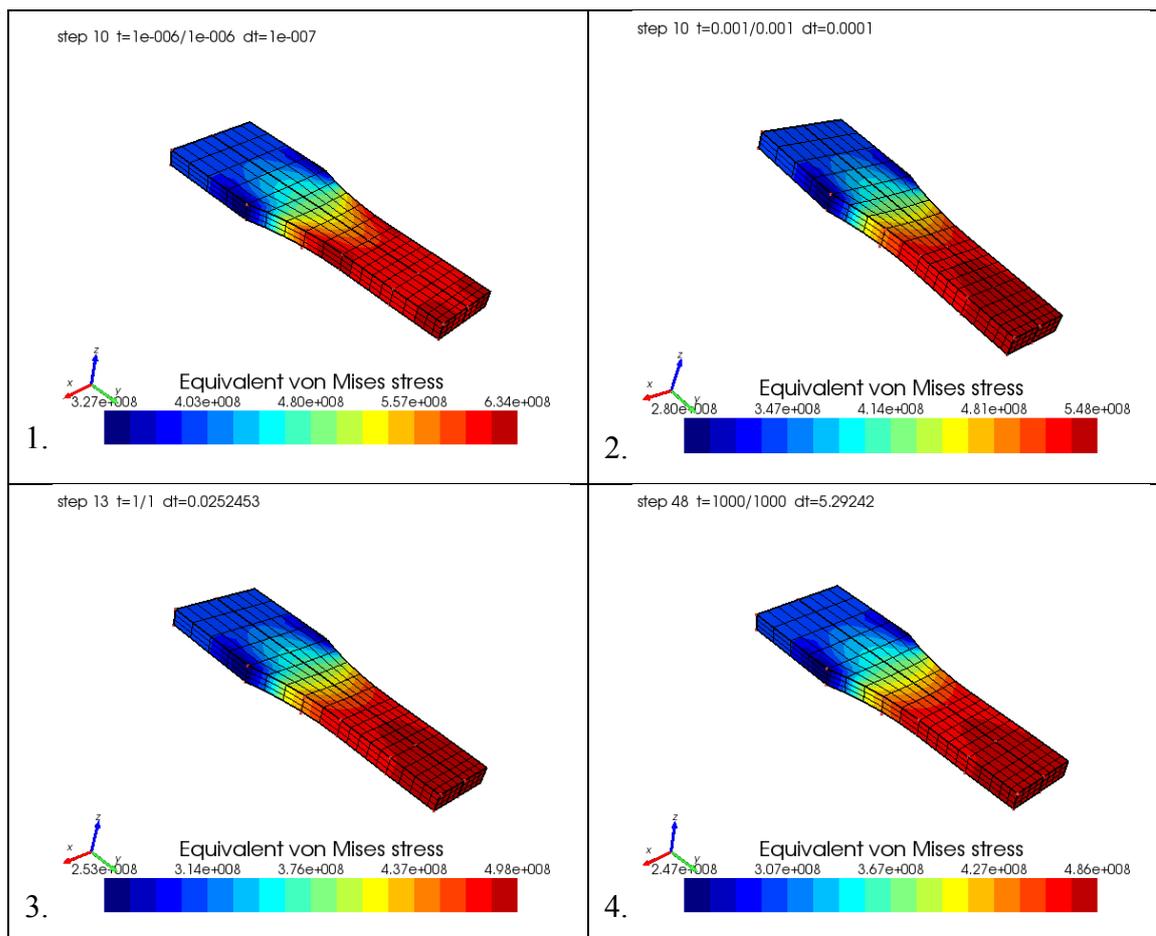


Figura 4.23 - Tensão equivalente de von Mises para taxas de deformação de 10^7 mm/s (1 – máx = 634 MPa), 10^4 mm/s (2 – máx = 548 MPa), 10 mm/s (3 – máx = 498 MPa) e 10^{-2} mm/s (4 – máx = 486 MPa), para extensões de 10 mm do corpo de prova.

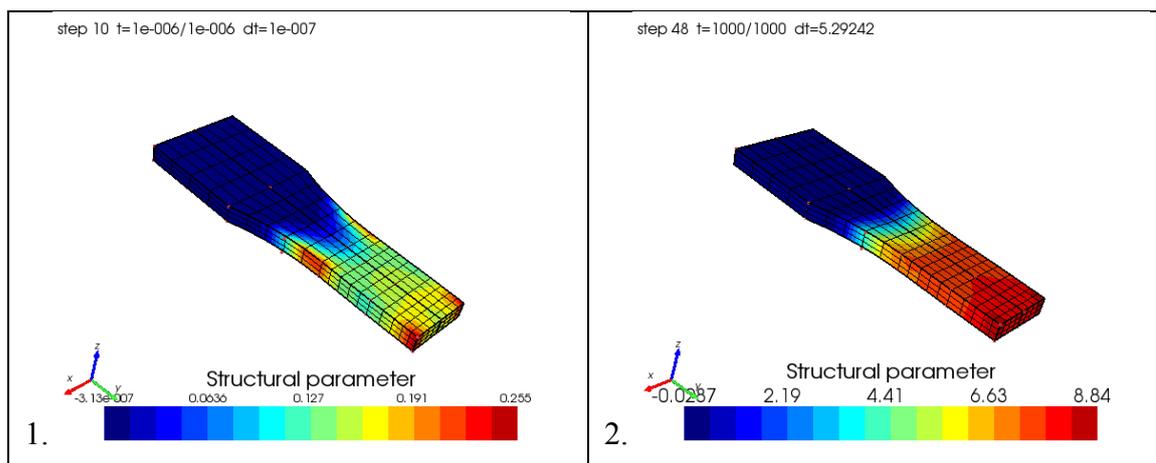


Figura 4.24 – Aumento de entropia para uma extensão de 10 mm do corpo de prova a 10^7 mm/s (1 – máx = 0,255 J/kg.K) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 8,84 J/kg.K).

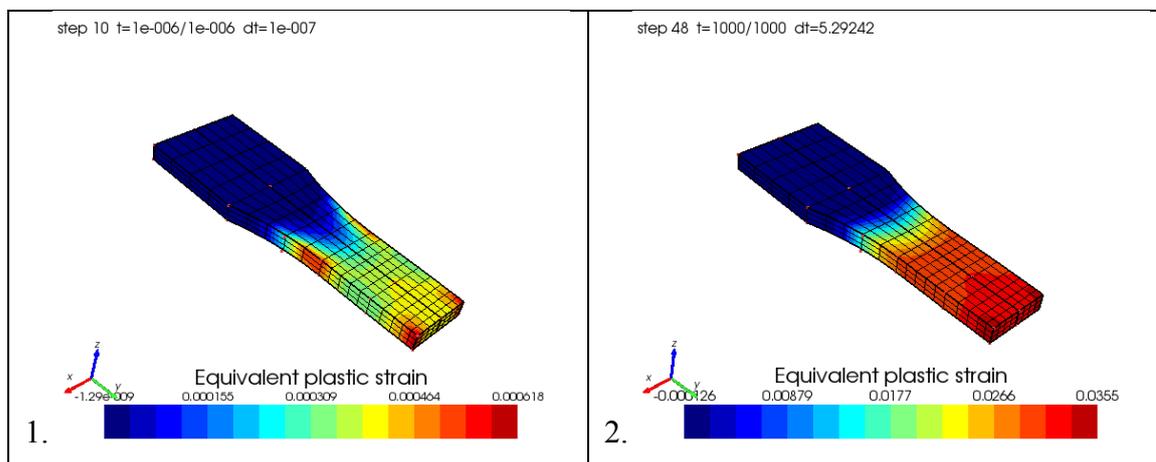


Figura 4.25 – Deformação plástica acumulada ao fim de uma extensão de 10 mm do corpo de prova a 10^7 mm/s (1 – máx = 0,000618) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 0,0355).

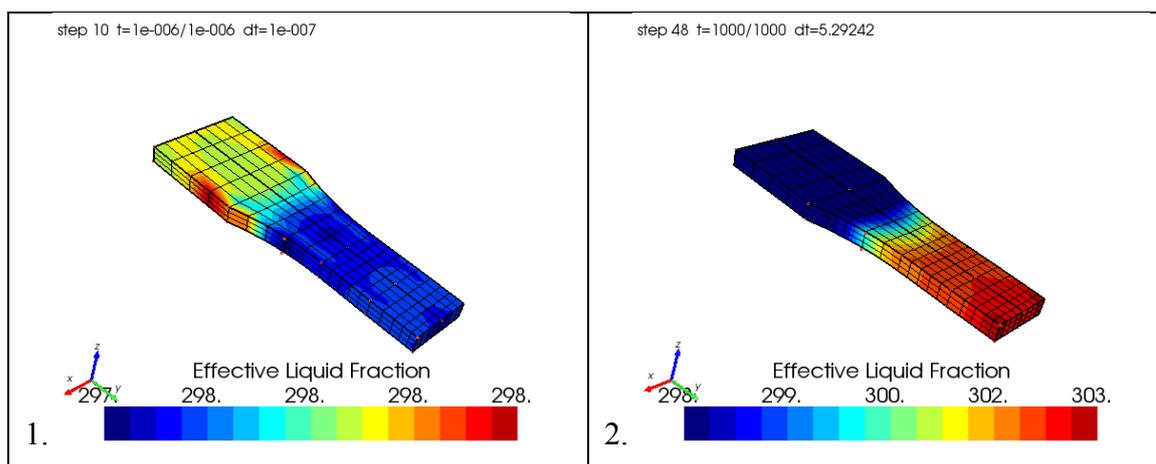


Figura 4.26 – Temperatura do corpo de prova ao fim de uma extensão de 10 mm a 10^7 mm/s (1 – máx = 298 K) e a 10^{-2} mm/s (2 – máx = 303 K).

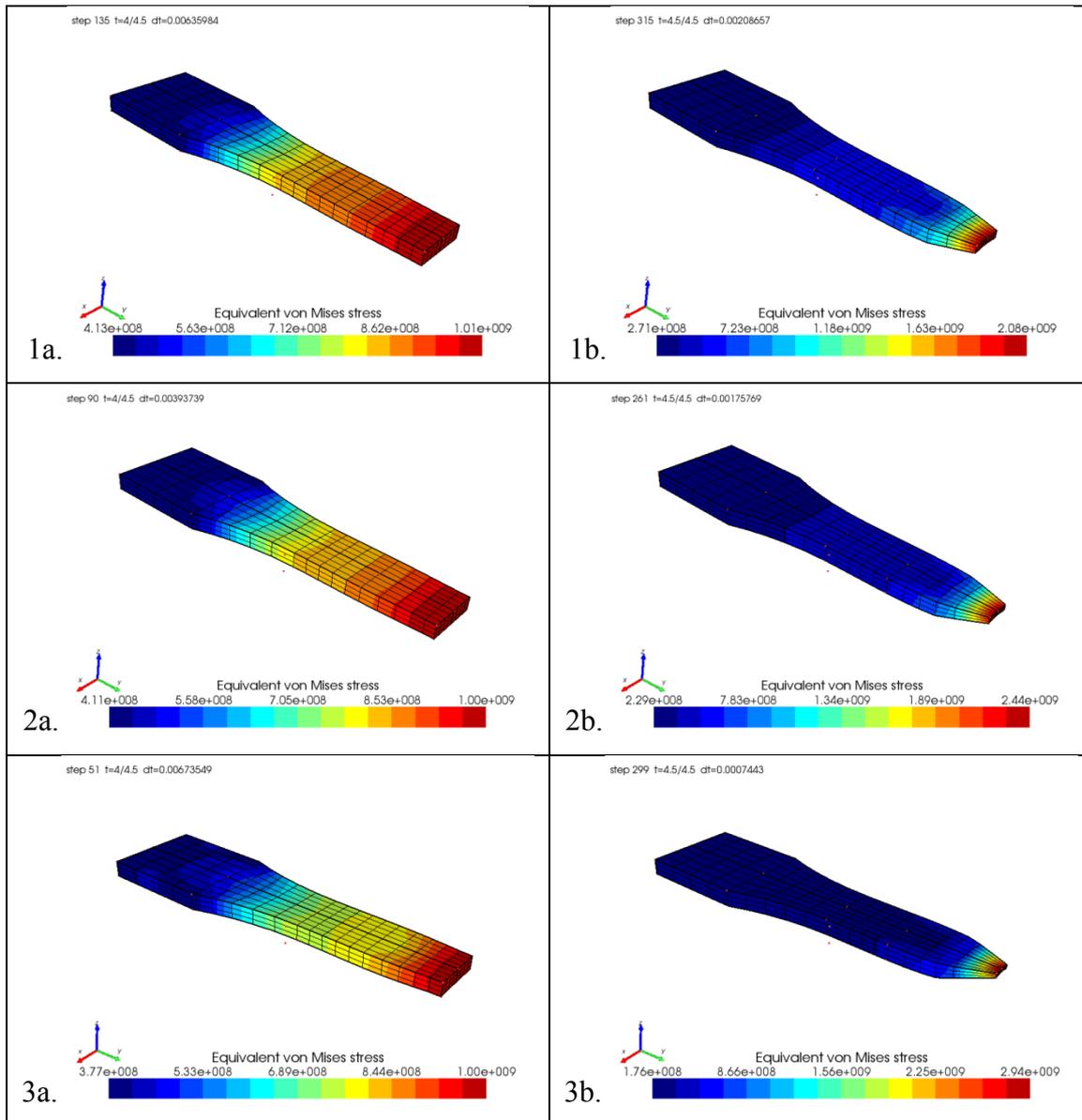


Figura 4.27 - Comportamento de estrição entre 40 mm (a) e 45 mm (b) de alongamento total do espécime para temperaturas iniciais de ensaio de 93 K (1), 293 K (2) e 793 K (3). Representação dos valores de tensão equivalente de von Mises.

5. Discussão e conclusões

Foi apresentada neste trabalho uma formulação apropriada para análise de fenômenos termo-elasto-viscoplásticos em regime de deformações finitas. A base teórica está fundada na proposta variacional apresentada por Yang *et al* (2006) e Stainier e Ortiz (2008) e foi adaptada para análise de materiais isotrópicos segundo os procedimentos adotados em Fancello *et al* (2006), Vassoler (2007) e Fancello *et al* (2007). Em particular, grandezas espectrais foram usadas como variáveis internas na descrição das parcelas elástica e plástica da deformação. Admitindo a hipótese adiabática, como em Stainier e Ortiz (2008), indicaram-se as simplificações do modelo termomecânico geral que levam à incorporação da temperatura como uma variável interna do problema. Toda a formulação foi feita de modo termodinamicamente consistente, de forma que a entropia é atualizada a partir da combinação da primeira e da segunda leis da termodinâmica.

Dada a característica dissipativa do problema viscoplástico, deu-se destaque à abordagem incremental com a qual é resolvido. Aspectos da minimização do pseudo-potencial foram abordados, com a incorporação das restrições sobre as variáveis internas dentro de uma função Lagrangeana. Foi construído o sistema não-linear resultante da aplicação das condições necessárias de otimalidade, base para a determinação dos valores das variáveis internas ao final do passo de carga através da aplicação do método de Newton. Partindo da definição do pseudo-potencial que descreve o problema acoplado, demonstrou-se a construção do tensor material consistente, posteriormente utilizado na implementação computacional do modelo.

Após a descrição completa da formulação variacional do problema de viscoplasticidade acoplada, foram apresentados resultados numéricos da aplicação do modelo proposto. O modelo foi implementado em linguagem GNU-Octave e posteriormente incorporado a uma estrutura de elementos finitos de código aberto desenvolvido pelos pesquisadores do Departamento de Engenharia Aeroespacial e Mecânica (LTAS) no Laboratório de Mecânica Não-Linear (LTAS-MN²L) da Université de Liège, na Bélgica, chamada METAFOR. O modelo teve sua versatilidade em descrever diversos tipos de comportamento termomecânico demonstrada. Tomando parâmetros característicos de

materiais metálicos e poliméricos, a resolução totalmente acoplada do problema levou a uma descrição de curvas de tensão-deformação concomitantes a curvas de temperatura-deformação. Foram apresentados resultados de testes de tração uniaxial, tração cíclica e de cisalhamento, com destaque para a influência de taxa de deformação e de temperatura inicial de ensaio sobre a resposta material. Foram realizados ainda testes em três dimensões dentro do código METAFOR, nos quais se simulou um ensaio de tração de um corpo de prova padrão. A influência de taxa de deformação e da temperatura inicial sobre o comportamento de estrição foi evidenciada.

Ao fim do trabalho, parece importante a reflexão quanto às capacidades e limitações inerentes ao modelo proposto.

Por um lado, o potencial de aplicação para uma vasta gama de materiais mostra-se evidente. A descrição de ligas metálicas de características tão diversas quanto as da liga de alumínio T3-2024 (independente de taxa de deformação), da liga alfa-titânio e do tântalo policristalino (com comportamento viscoso determinado por processos internos termicamente ativados, altamente dependente de temperatura) mostrou-se muito promissora na comparação com resultados experimentais em Yang *et al* (2006) e Stainier e Ortiz (2008). O modelo aqui proposto é capaz de reproduzir os modelos implementados naqueles trabalhos, de modo que a comparação com resultados experimentais se mantém.

A aplicação para materiais poliméricos, apesar de não ter sido comparada com resultados experimentais pela ausência de identificações de parâmetros para o modelo aqui proposto, também apresenta-se rica em informação relevante. Diversas características do comportamento viscoplástico de polímeros puderam ser modeladas, como a competição entre tendências ao amolecimento logo após o início de escoamento (associado à orientação das cadeias poliméricas com o carregamento) e ao crescente encruamento na medida em que crescem os níveis de deformação, ambas influenciadas por taxas de deformação e temperaturas iniciais de ensaio, característica de polímeros como o polimetilmetacrilato (PMMA). Também o comportamento de encruamento contínuo após escoamento, característica de alguns polímeros como o policarbonato (PC) pôde ser reproduzida.

Apesar de pouco discutidas até o momento, também as limitações do modelo merecem ser destacadas. Estão relacionadas essencialmente às hipóteses simplificativas adotadas

durante a fase de construção do pseudo-potencial incremental, e durante a fase de escolha dos potenciais para cada uma das componentes da energia livre associada ao problema.

Por construção, o modelo implementado tem sua aplicação restrita aos casos adiabáticos, em que se pode desconsiderar a troca de calor dentro do material sujeito à deformação, e dele com o ambiente. A incorporação de efeitos de condução de calor, por exemplo, introduziria uma dependência da temperatura em um ponto material com o gradiente térmico em sua vizinhança. Perde-se, assim, o caráter essencialmente local da temperatura, o que levaria ao abandono de sua consideração entre as variáveis internas do problema.

Deve-se destacar, no entanto, que esta restrição (processo adiabático) resultou de uma escolha para facilitar o processo de implementação, não decorrendo de uma limitação teórica. A liberação desta restrição implica apenas na eliminação da temperatura como variável interna do problema constitutivo local, sendo transferida para o problema de equilíbrio global, mecânico e térmico.

O tipo de dependência térmica adotada para os parâmetros materiais também pode restringir a aplicação do modelo a certos tipos de material. Foram assumidas dependências essencialmente lineares com a variação de temperatura para a maioria dos parâmetros, desde tensões que caracterizam o escoamento e o encruamento, até parâmetros como os módulos de elasticidade e compressibilidade. Isto contrasta com o comportamento real de alguns materiais poliméricos, por exemplo, reconhecidamente não-lineares com mudanças de temperatura. Parâmetros materiais como a capacidade térmica específica e o coeficiente de expansão volumétrica, considerados aqui constantes com a temperatura, são reconhecidamente bastante variáveis para alguns tipos de materiais poliméricos. Contudo, a incorporação de novos modelos de dependência com temperatura parece ser bastante direta, e não mudaria a estrutura proposta para o modelo variacional. Finalmente, deve-se destacar que existem limitações termodinâmicas sobre leis de variação possíveis em relação a temperatura em diferentes potenciais termodinâmicos. Considerações sobre este assunto podem ser encontradas em Holzapfel (2000).

Outros tipos de alterações também parecem ser necessários acaso se deseje construir um modelo consistente para polímeros em grandes faixas de temperatura. Fenômenos como as temperaturas de transição vítrea alteram sensivelmente o comportamento mecânico do material. O trabalho de Richeton *et al* (2007), por exemplo, propõe leis de escoamento para as

variáveis internas diferentes para as regiões de comportamento borrachoso e vítreo dos polímeros. Na medida em que se adota uma única lei de escoamento independente da temperatura, restringe-se a aplicabilidade do modelo proposto para contextos em que materiais poliméricos não sejam submetidos a algumas de suas transições térmicas mais características.

Outra limitação intrínseca ao modelo variacional proposto neste trabalho é o tratamento exclusivo de comportamentos isotrópicos. Quando o comportamento mecânico de algum material for caracterizado como anisotrópico, caso de materiais compósitos, por exemplo, o modelo como aqui proposto não pode ser aplicado. O tratamento de anisotropia redundaria em uma reformulação dos potenciais escolhidos para a descrição das parcelas de energia livre.

Neste panorama geral, fica claro que a aplicação do modelo proposto para tipos específicos de materiais (em especial, polímeros) depende de estudos de identificação de parâmetros materiais e de caracterização de sua dependência com a temperatura. Devem ainda ser identificadas as faixas de taxa de deformação e temperatura, de forma que a hipótese adiabática fosse adequada e que não se esperassem transformações térmicas durante o processo de deformação. Ainda assim, os resultados das simulações mostraram capacidades promissoras de aplicação do modelo para diversos tipos de comportamento material, de modo que a proposta central do presente trabalho parece ter sido alcançada.

O desenvolvimento dessas potencialidades e a superação de algumas das limitações inerentes ao modelo pautam algumas sugestões para trabalhos futuros.

Visando possibilitar a comparação com resultados experimentais para materiais poliméricos, são necessários estudos de caracterização de propriedades mecânicas e de acoplamento para materiais específicos dentro do contexto do modelo proposto. A Seção 4.3, onde se apresenta uma avaliação preliminar da sensibilidade do modelo pode dar subsídios e servir como base para futuros estudos de identificação de parâmetros materiais.

A incorporação de processos dissipativos durante a faixa elástica do comportamento mecânico (viscoelasticidade), uma característica marcante de alguns materiais poliméricos, também contribuiria para uma descrição mais precisa de um amplo leque de materiais. Para tanto, é possível incorporar o trabalho de Fancellò (2006) ao modelo proposto, introduzindo características de acoplamento termomecânico.

A fim de potencializar a aplicação do modelo a faixas maiores de taxas de deformação, pode-se pensar na eliminação da hipótese adiabática e conseqüente reconstrução do pseudo-potencial proposto. O caminho clássico de solução separada do problema de condução térmica após a solução do problema termomecânico acoplado (“*staggered solution*”) parece ser viável, por conservar a adequada descrição dos mecanismos de geração de calor local por acoplamento com a deformação.

A exemplo do que foi feito por Stainier e Ortiz (2008), é possível desenvolver um acompanhamento da fração de conversão de trabalho plástico em calor prevista pelo modelo proposto ao longo do processo de deformação. Baseia-se em cálculos bastante diretos sobre quantidades já calculadas pelo modelo, a fim de definir a relação que caracteriza o clássico fator de Taylor e Quinney. Seria possível avaliar se a adoção de um fator constante é razoável para diversas faixas de temperatura e taxas de deformação, embasando uma avaliação de procedimentos clássicos adotados em vários trabalhos, como por exemplo o de Helm (2006), citado anteriormente.

6. Referências bibliográficas

- Arruda, E. M., Boyce, M. C., Jayachandran, R., 1995, “Effects of strain rate, temperature and thermomechanical coupling on the finite strain deformation of galssy polymers”, *Mechanics of Materials*, Vol. 19, pp. 193-212.
- Callister, W. D. Jr., 2007, “Materials science and engineering: an introduction”, 7.ed., 392pp., John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Coleman, B. D., Gurtin, M. E., 1967, “Thermodynamics with internal variables”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 42, No. 2, pp. 597-613.
- De Souza Neto, E. A., Peric, D., Owen, D. R. J., 2009, “Computational methods for plasticity: theory and practice”, 1.ed., 814pp., John Wiley & Sons, New York.
- “Encyclopedia of Polymer Science and Technology”, 2002, 2.ed., John Wiley & Sons, New York.
- Fancello, E. A., Ponthot, J.-P. and Stainier, L., 2006, “A variational formulation of constitutive models and updates in nonlinear finite viscoelasticity”, *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol. 65, pp. 1831-1864.
- Fancello, E. A., Vassoler, J. M. and Stainier, L., 2008, “A variational constitutive update algorithm for a set of isotropic hyperelastic-viscoplastic material models”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.197, pp. 4132-4148.
- Helm, D., 2006, “Stress computation in finite thermoviscoplasticity”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 22, pp. 1699-1727.
- Holzapfel, G., 2000, “Nonlinear Solid Mechanics”, Wiley, Chichester.

- Malvern, L. E., 1969, "Introduction to the mechanics of a continuous medium", Prentice-Hall, Englewood Cliffs.
- METAFOR – Software for thermo-mechanical analysis of structures in large strain regime. Dépt. AéroSpatiale, Mécanique et Matériaux (ASMA – LTAS – MC&T), Université de Liège, Belgique.
- Ortiz, M. and Stainier, L., 1999, "The variational formulation of viscoplastic constitutive updates", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 171, No. 3-4, pp. 419-444.
- Perzyna, P., 1966, "Fundamental problems in viscoplasticity", *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 9, pp. 243-377.
- Perzyna, P., 1971, "Thermodynamic theory of viscoplasticity", *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 11, pp. 313-354.
- Richeton, J., Ahzi, S., Vecchio, K. S., Jiang, F. C., Makradi, A., 2007, "Modeling and validation of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain rates", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 7938-7954.
- Simo, J. C., Hughes, R. J. R., 1999, "Computational inelasticity", Singer Verlag, Berlin.
- Stainier, L., 2006, "Approche variationnelle en thermomécanique des solides", Course notes, Université de Liège.
- Stainier, L. and Ortiz, M., 2008, "On a variational approach to the partition of plastic work in finite thermo-visco-plasticity", in press.
- Vassoler, J. M., 2007, "Modelos constitutivos variacionais de viscoelasticidade e viscoplasticidade para materiais termoplásticos submetidos a deformacoes finitas", Dissertacao de mestrado, UFSC.

Yang, Q., Stainier, L. and Ortiz, M., 2006, “A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 54, No. 2, pp. 401-424.

Apêndice 1 – Cálculo do termo $\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i}$

Detalha-se aqui o procedimento analítico que permite a determinação das direções q_i durante a etapa de verificação de plastificação no passo. Parte-se da seguinte expressão:

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i} = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + \tilde{\lambda} + 2\tilde{\beta}q_i - \tilde{\gamma} \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon_i^e} \Delta q \Big|_{\Delta q=0} = 0, \quad i = 1,2,3 \quad (\text{A.1.1})$$

$$\sum_{i=1}^3 q_i = 0 \quad (\text{A.1.2})$$

O último termo se anula, já que se está avaliando a condição de otimalidade de $\tilde{\mathcal{L}}$ com relação às direções q_i para o caso de passo elástico ($\Delta q = 0$). Somando as três equações e usando a restrição de soma das direções q_i , encontra-se uma expressão para o multiplicador de Lagrange $\tilde{\lambda}$:

$$-\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + 3\tilde{\lambda} + 2\tilde{\beta} \sum_{i=1}^3 q_i - \tilde{\gamma} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon_i^e} \Delta q = -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + 3\tilde{\lambda} = 0 \quad (\text{A.1.3})$$

$$\tilde{\lambda} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} = \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e} \right) \quad (\text{A.1.4})$$

Define-se a parte deviatórica da derivada do potencial elástico isocórico e reescreve-se a expressão para $\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i}$ de forma mais enxuta:

$$\widehat{\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e}} = \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e} - \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e} \right) \quad (\text{A.1.5})$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i} = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + \tilde{\lambda} + 2\tilde{\beta}q_i = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e} \right) + 2\tilde{\beta}q_i = -\widehat{\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e}} + 2\tilde{\beta}q_i = 0 \quad (\text{A.1.6})$$

Elevando a expressão ao quadrado, tem-se:

$$\frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}^2}{\partial\varepsilon_1} - 4\tilde{\beta}q_i \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon_1} + 4\tilde{\beta}^2 q_i^2 = 0 \quad (\text{A.1.7})$$

Soma-se então, novamente, as três equações para fazer uso da restrição sobre a soma das direções q_i . Introduzindo ainda o conceito de norma de $\frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon^e}$, encontra-se uma expressão para o multiplicador de Lagrange $\tilde{\beta}$:

$$\left\| \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon^e} \right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}^2}{\partial\varepsilon_1}} \quad (\text{A.1.8})$$

$$\tilde{\beta} = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_{i=1}^3 \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon_1}} = \sqrt{\frac{1}{6} \left\| \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon^e} \right\|} \quad (\text{A.1.9})$$

Volta-se novamente à expressão para $\frac{\partial\tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i}$, encontra-se finalmente a expressão para as direções q_i que otimizam a função Lagrangeana $\tilde{\mathcal{L}}$ quando não ocorre plastificação no passo de tempo.

$$\frac{\partial\tilde{\mathcal{L}}}{\partial q_i} = -\frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon_1} + 2\sqrt{\frac{1}{6} \left\| \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon^e} \right\|} q_i = 0 \quad (\text{A.1.10})$$

$$q_i = \sqrt{\frac{3}{2} \frac{\frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon_1}}{\left\| \frac{\widehat{\partial\Delta\varphi^e}}{\partial\varepsilon^e} \right\|}} \quad (\text{A.1.11})$$

Apêndice 2 – Derivadas das parcelas componentes do pseudo-potencial incremental

Potencial elástico volumétrico

$$\frac{\partial \Delta \phi^{\text{vol}}}{\partial J} = \frac{\ln(J)}{J} (K(T) - 3K_0 \alpha (T - T_0)) \quad (\text{A.2.1})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \phi^{\text{vol}}}{\partial J^2} = \frac{1 - \ln(J)}{J^2} (K(T) - 3K_0 \alpha (T - T_0)) \quad (\text{A.2.2})$$

$$\frac{\partial \Delta \phi^{\text{vol}}}{\partial T} = \frac{1}{2} (\ln(J))^2 \left(\frac{\partial K}{\partial T} - 3K_0 \right) \quad (\text{A.2.3})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \phi^{\text{vol}}}{\partial T^2} = \frac{1}{2} (\ln(J))^2 \frac{\partial^2 K}{\partial T^2} \quad (\text{A.2.4})$$

Potencial elástico isocórico

Modelo de Hencky:

$$\frac{\partial \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e} = 2\mu(T) \varepsilon_i^e \quad (\text{A.2.5})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e{}^2} = 2\mu(T) \quad (\text{A.2.6})$$

$$\frac{\partial \Delta \phi^e}{\partial T} = \frac{\partial \mu(T)}{\partial T} \sum_{j=1}^3 \varepsilon_j^e \quad (\text{A.2.7})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial T^2} = \frac{\partial^2 \mu(T)}{\partial T^2} \sum_{j=1}^3 \varepsilon_j^e \quad (\text{A.2.8})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon_i^e} = 2 \varepsilon_i^e \frac{\partial \mu(T)}{\partial T} \quad (\text{A.2.9})$$

Modelo de Ogden:

$$\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e} = \sum_{i=1}^N \mu_i^e(T) (\exp(\varepsilon_j^e))^{\alpha_i} \quad (\text{A.2.10})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_j^e{}^2} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mu_i^e(T) (\exp(\varepsilon_j^e))^{\alpha_i} \quad (\text{A.2.11})$$

$$\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial T} = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{[(\exp(\varepsilon_j^e))^{\alpha_i} - 1]}{\alpha_i} \frac{\partial \mu_i^e(T)}{\partial T} \quad (\text{A.2.12})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T^2} = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N \frac{[(\exp(\varepsilon_j^e))^{\alpha_i} - 1]}{\alpha_i} \frac{\partial^2 \mu_i^e(T)}{\partial T^2} \quad (\text{A.2.13})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T \partial \varepsilon_j^e} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mu_i^e(T)}{\partial T} (\exp(\varepsilon_j^e))^{\alpha_i} \quad (\text{A.2.14})$$

Potencial plástico

$$\frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} = \Sigma_0(T) + H(T) \Delta q + \mu^p(T) [1 - \exp(-\alpha^p \Delta q)] + \sum_{j=1}^N \mu_j^p(T) (\Delta q)^{\alpha_j} \quad (\text{A.2.15})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} = H(T) + \mu^p(T) \alpha^p \exp(-\alpha^p \Delta q) + \sum_{j=1}^N \mu_j^p(T) \alpha_j (\Delta q)^{\alpha_j - 1} \quad (\text{A.2.16})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial T} &= \frac{\partial \Sigma_0(T)}{\partial T} \Delta q + \frac{1}{2} \frac{\partial H(T)}{\partial T} \Delta q^2 + \frac{\partial \mu^p(T)}{\partial T} \left[\Delta q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p \Delta q) \right] \\ &+ \sum_{j=1}^N \frac{\partial \mu_j^p(T)}{\partial T} \frac{(\Delta q)^{\alpha_j + 1}}{\alpha_j + 1} \end{aligned} \quad (\text{A.2.17})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Delta\phi^p}{\partial T^2} &= \frac{\partial^2 \Sigma_0(T)}{\partial T^2} \Delta q + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H(T)}{\partial T^2} \Delta q^2 + \frac{\partial^2 \mu^p(T)}{\partial T^2} \left[\Delta q + \frac{1}{\alpha^p} \exp(-\alpha^p \Delta q) \right] \\ &+ \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 \mu_j^p(T)}{\partial T^2} \frac{(\Delta q)^{\alpha_j + 1}}{\alpha_j + 1} \end{aligned} \quad (\text{A.2.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Delta\phi^p}{\partial \Delta q \partial T} &= \frac{\partial \Sigma_0(T)}{\partial T} + \frac{\partial H(T)}{\partial T} \Delta q + \frac{\partial \mu^p(T)}{\partial T} [1 - \exp(-\alpha^p \Delta q)] \\ &+ \sum_{j=1}^N \frac{\partial \mu_j^p(T)}{\partial T} (\Delta q)^{\alpha_j} \end{aligned} \quad (\text{A.2.19})$$

Potencial de acumulação térmica

$$\phi^h = \rho_0 C_0 \left[(T - T_0) - T \log \frac{T}{T_0} \right] \quad (\text{A.2.20})$$

$$\Delta\phi^h = \rho_0 C_0 \left[(T_{n+1} - T_n) - T_{n+1} \log \frac{T_{n+1}}{T_0} + T_n \log \frac{T_n}{T_0} \right] \quad (\text{A.2.21})$$

$$\frac{\partial \Delta\phi^h}{\partial T} = \frac{\partial \Delta\phi^h}{\partial T_{n+1}} = -\rho_0 C_0 \log \frac{T_{n+1}}{T_0} \quad (\text{A.2.22})$$

$$\frac{\partial^2 \Delta\phi^h}{\partial T^2} = \frac{\partial^2 \Delta\phi^h}{\partial T_{n+1}^2} = -\frac{\rho_0 C_0}{T_{n+1}} \quad (\text{A.2.23})$$

Pseudo-potencial dissipativo

$$\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = \sigma_y(q, T) + \sigma_v(T) (\dot{\epsilon}_0)^{-1/m} \left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)^{1/m} \quad (\text{A.2.24})$$

$$\frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = \sigma_v(T) (\dot{\epsilon}_0)^{-1/m} \left(\frac{T_{n+1} \Delta q}{T_n \Delta t} \right)^{1/m-1} \left(\frac{1}{m} \right) \quad (\text{A.2.25})$$

Apêndice 3 – Derivada de ε^e_i com relação a ε^{pr}_j

Partimos das condições de otimalidade para o pseudo-potencial incremental:

$$r_i = -\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \Delta q + \lambda + 2\beta q_i = 0 \quad (\text{A.3.1})$$

$$r_4 = -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \Delta q + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{T_{n+1}}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (\text{A.3.2})$$

$$r_5 = \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^h}{\partial T_{n+1}} + \frac{\partial \Delta \varphi^{vol}}{\partial T_{n+1}} \right) + \rho_0 \eta_n + \frac{\Delta q}{T_n} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \Delta q} = 0 \quad (\text{A.3.3})$$

$$r_6 = \sum_{i=1}^3 q_i = 0 \quad (\text{A.3.4})$$

$$r_7 = \sum_{i=1}^3 q_i^2 - \frac{3}{2} = 0 \quad (\text{A.3.5})$$

Admite-se, por simplicidade, que $\Delta \varphi^e = \sum_{i=1}^3 \omega_i^e(\varepsilon_i^e)$. Lembrando da definição do estado preditor, temos:

$$\varepsilon^e_i = \varepsilon^{e,pr}_i - \Delta q q_i \Rightarrow \frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{pr}_j} = \delta_{ij} - \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr}_j} q_i - \Delta q \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr}_j} \quad (\text{A.3.6})$$

Tomando as derivadas de cada uma delas com relação a ε^{pr}_j , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r_i}{\partial \varepsilon^{pr}_j} = & - \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i \partial \varepsilon^e_i} \frac{\partial \varepsilon^e_i}{\partial \varepsilon^{pr}_j} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr}_j} \right) \Delta q - \left(\frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon^e_i} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr}_j} \right) + \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{pr}_j} \\ & + 2\beta \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr}_j} + 2q_i \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{pr}_j} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3.7})$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \left(\delta_{ij} - \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} q_i - \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \Delta q \right) \Delta q - \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\
&\quad + \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + 2 \left(\beta \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + q_i \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.3.8}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \Delta q^2 + 2\beta \right) \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} q_i \Delta q - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \right) \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\
&\quad + \left(-\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} \Delta q \right) \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + 2q_i \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{pr_j}} - \delta_{ij} \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \Delta q = 0
\end{aligned} \tag{A.3.9}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r_4}{\partial \varepsilon^{pr_j}} &= -\sum \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial \varepsilon_i^e}{\partial \varepsilon^{pr_j}} q_i + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} q_i + \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) \\
&\quad + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial \Delta q} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.3.10}$$

$$\begin{aligned}
&= -\sum \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \left(\delta_{ij} - \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} q_i - \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \Delta q \right) q_i + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} q_i + \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) \\
&\quad + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial \Delta q} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.3.11}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \Delta q q_i - \sum \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e} \right) \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\
&\quad + \left(\sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial \Delta q} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \right) \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\
&\quad + \left(-\sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} q_i + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} \right) \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\
&\quad - \sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \delta_{ij} q_i = 0
\end{aligned} \tag{A.3.12}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial r_5}{\partial \varepsilon^{pr_j}} = & \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^{vol}}{\partial T^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial T} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial T^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^h}{\partial T^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \right) + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\ & + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \Delta q^2} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} = 0 \end{aligned} \quad (A.3.13)$$

$$\begin{aligned} = & \left(-\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial T} \Delta q \right) \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\ & + \left(-\sum \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial T} q_i + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q \partial T} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \Delta q^2} \right) \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\ & + \left(\frac{\partial^2 \Delta \varphi^{vol}}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \varphi^h}{\partial T^2} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \Delta q^2} \right) \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \\ = & 0 \end{aligned} \quad (A.3.14)$$

$$\frac{\partial r_6}{\partial \varepsilon^{pr_j}} = \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \quad (A.3.15)$$

$$\frac{\partial r_7}{\partial \varepsilon^{pr_j}} = 2q_i \frac{\partial q_i}{\partial \varepsilon^{pr_j}} \quad (A.3.16)$$

Analogamente ao que foi feito durante a minimização do pseudo-potencial incremental, aparecem então os termos da matriz tangente:

$$K_{ii} = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_i} \Delta q^2 + 2\beta, \quad i = 1,2,3 \quad (A.3.17)$$

$$K_{i4} = K_{4i} = \frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_i} \Delta q q_i - \frac{\partial \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i} = H_i, \quad i = 1,2,3 \quad (A.3.18)$$

$$K_{i5} = K_{5i} = -\frac{\partial^2 \Delta \varphi^e}{\partial \varepsilon_i \partial T} \Delta q = N_i, \quad i = 1,2,3 \quad (A.3.19)$$

$$K_{i6} = K_{6i} = 1, \quad i = 1,2,3 \quad (A.3.20)$$

$$K_{i7} = K_{7i} = 2q_i, \quad i = 1,2,3 \quad (A.3.21)$$

$$K_{44} = \sum \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} q_i^2 + \frac{\partial^2 \Delta \phi^p}{\partial \Delta q \partial \Delta q} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = H_4 \quad (\text{A.3.22})$$

$$K_{45} = K_{54} = - \sum \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_i^e \partial T} q_i + \frac{\partial^2 \Delta \phi^p}{\partial \Delta q \partial T} + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{T_{n+1}}{T_n} \right) \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right) \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = N_4 \quad (\text{A.3.23})$$

$$K_{55} = \left(\frac{\partial^2 \Delta \phi^{\text{vol}}}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \phi^p}{\partial T^2} + \frac{\partial^2 \Delta \phi^h}{\partial T^2} \right) + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\Delta q}{T_n} \right)^2 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \Delta q^2} = N_5 \quad (\text{A.3.24})$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & N_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & N_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & N_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & N_4 & 0 & 0 \\ N_1 & N_2 & N_3 & N_4 & N_5 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3.25})$$

Com a matriz \mathbf{K} , resolve-se a matriz \mathbf{x} do sistema abaixo, que por sua vez, fornece os termos que faltavam em A.3.6. para encontrar as derivadas $\frac{\partial \varepsilon_i^e}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_j}}$, bem como as derivadas $\frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_j}}$ que também entram no cálculo do tensor material:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial q_2}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial q_3}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} & \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_1}} \\ \frac{\partial q_1}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial q_2}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial q_3}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} & \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_2}} \\ \frac{\partial q_1}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial q_2}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial q_3}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial T}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial \lambda}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} & \frac{\partial \beta}{\partial \varepsilon^{\text{pr}_3}} \end{bmatrix}^T \quad (\text{A.3.26})$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \delta_{11} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_1^e \partial \varepsilon_1^e} \Delta q & \delta_{21} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_2^e \partial \varepsilon_2^e} \Delta q & \delta_{31} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_3^e \partial \varepsilon_3^e} \Delta q & \sum \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_1^e \partial \varepsilon_1^e} q_1 & 0 & 0 & 0 \\ \delta_{12} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_1^e \partial \varepsilon_2^e} \Delta q & \delta_{22} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_2^e \partial \varepsilon_2^e} \Delta q & \delta_{32} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_2^e \partial \varepsilon_3^e} \Delta q & \sum \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_2^e \partial \varepsilon_2^e} q_2 & 0 & 0 & 0 \\ \delta_{13} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_1^e \partial \varepsilon_3^e} \Delta q & \delta_{23} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_2^e \partial \varepsilon_3^e} \Delta q & \delta_{33} \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_3^e \partial \varepsilon_3^e} \Delta q & \sum \frac{\partial^2 \Delta \phi^e}{\partial \varepsilon_3^e \partial \varepsilon_3^e} q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (\text{A.3.27})$$

Apêndice 4 – Cotas do corpo de prova de tração

