

Rafael Yamaguti Lench

**ESTUDO DE MODELOS CONSTITUTIVOS PARA
SIMULAÇÃO DE MATERIAIS POLIMÉRICOS AMORFOS
SUBMETIDOS A DEFORMAÇÕES FINITAS**

Dissertação submetido ao programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Alberto Fancelo

Florianópolis
2015

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

Lenoch, Rafael Yamaguti

Estudo de modelos constitutivos para simulação de materiais poliméricos amorfos submetidos a deformações finitas / Rafael Yamaguti Lenocho ; orientador, Eduardo Alberto Fancelo - Florianópolis, SC, 2015.

111 p.

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

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Modelos constitutivos. 3. Simulação numérica. 4. Materiais poliméricos amorfos. I. Fancelo, Eduardo Alberto. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Rafael Yamaguti Lench

**ESTUDO DE MODELOS CONSTITUTIVOS PARA
SIMULAÇÃO DE MATERIAIS POLIMÉRICOS AMORFOS
SUBMETIDOS A DEFORMAÇÕES FINITAS**

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica, e aprovado em sua forma final pelo programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 18 de dezembro de 2015

Prof. Dr. Albertazzi
Coordenador do Curso

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Eduardo Alberto Fancello
Orientador
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Clovis Sperb Barcellos, Ph. D.
Universidade Federal de Santa Catarina

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

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

Dedico este trabalho à minha família e amigos, que nunca deixaram de me apoiar e sempre me incentivaram a seguir em frente.

Agradecimentos

Agradeço a minha família, que em todas as etapas da minha vida, sempre esteve ao meu lado. Não importando quão difícil a situação fosse sempre me deram todo o apoio necessário, me incentivando a sempre seguir em frente e não se deixar abater pelas dificuldades enfrentadas.

Aos meus amigos mais presentes, que da mesma maneira que minha família me ajudou de alguma forma, seja com palavras de incentivo ou com ideias para me ajudar a resolver algum problema.

À todos os docentes que fizeram parte da minha formação acadêmica, fortalecendo o meu conhecimento em sala de aula ou dentro dos laboratórios. Em especial ao professor Eduardo Alberto Fancello, que possibilitou que esse trabalho fosse possível de ser realizado, ao providenciar os meios necessários e atuar como orientador do mesmo.

Aos colegas do laboratório GRANTE, principalmente aos colegas que trabalharam comigo no dia a dia e se fizeram mais presentes. Destacando-se em especial os engenheiros Paulo Bastos de Castro, Thiago André Carniel, Jan-Michel Colombo Farias, Augusto Emmel Selke, Armin Sonnenhoh, entre outros, os quais me ajudaram com o desenvolvimento do trabalho, seja esclarecendo dúvidas ou em reuniões de estudo sobre o tema.

*“Today I will do what others
won’t, so tomorrow I can
accomplish what others can’t”.*

Jerry Rice

*“Pain is temporary. Quitting lasts
forever.”*

Lance Armstrong

Resumo

Na indústria é cada vez maior o espaço ocupado por materiais poliméricos, algumas características peculiares que esses materiais apresentam os fazem atrativos, como boas propriedades mecânicas e maior facilidade na fabricação. Estas aplicações tem requisitado uma maior capacidade de modelar e prever o comportamento dos polímeros, por isso, é necessário que se desenvolvam teorias mais aprofundadas sobre o tema. Neste trabalho expõe-se de maneira detalhada o desenvolvimento de duas teorias do contínuo para a deformação elasto-viscoplástica de materiais sólidos amorfos, tais como os polímeros. Para que se compreenda de maneira clara as teorias mostra-se desde a concepção da ideia principal por trás das mesmas, passando por todo seu desenvolvimento matemático, até se chegar na aplicação dos modelos constitutivos para materiais específicos. Introduzindo-se uma variável interna que representa o volume livre local associada com certos estados metaestáveis é possível capturar o comportamento altamente não linear presente nas curvas de tensão versus deformação desses materiais. Nessas teorias leva-se em conta a dependência da energia livre de Helmholtz na parcela plástica do gradiente da deformação F^P em uma maneira compatível termodinamicamente. Essa dependência acaba por levar à um *backstress* na regra de fluxo, permitindo capturar o fenômeno de escoamento reverso do tipo Bauschinger presente nesses polímeros amorfos quando descarregados após se atingir deformações inelásticas.

Palavras-chave: Modelo constitutivo, sólidos amorfos, polímeros, material viscoplástico.

Abstract

The space occupied by polymeric material in industry is growing over time, some peculiar features that these materials shows make them quite attractive, like good mechanical properties and easier manufacturing. Such applications made a request for a better knowledge about modeling and prediction of polymers behavior, hence, it's necessary the development of accurate theories about the theme. This work shows in details ways the development of two continuum theories for elastic-viscoplastic deformation of amorphous solid materials, such as polymeric. For a better understanding of these theories it's shown since the conception of the main idea behind those, going through their whole mathematical development, until the application of these models for specific materials. Introducing an internal state variable that represents the local free volume associated with certain metastable states, we are able to capture the highly non-linear stress strain behavior shown in the curves of these materials. These theories explicitly accounts for the dependence of the Helmholtz free energy on the plastic deformation gradient \mathbf{F}^p in a thermodynamically consistent manner. This dependence leads directly to a backstress in the flow rule, allowing to capture the Bauschinger type reverse yielding phenomena observed in amorphous polymeric solids upon unloading after large plastic deformations.

Keywords: Constitutive model, amorphous solids, polymers, viscoplastic materials.

Lista de Figuras

Figura 1 - Processo de polimerização do polietileno. <i>Moura, 2012</i>	5
Figura 2 - Morfologia das cadeias poliméricas: a) amorfo, b) cristalino, c) esferulita. <i>Moura, 2012</i>	6
Figura 3 - Curvas de tensão-deformação para velocidades e temperaturas constantes.....	7
Figura 4 - Curvas de tensão-deformação seguidas do descarregamento do material.....	9
Figura 5 - Modelo reológico de braços em paralelo.....	10
Figura 6 - Configurações e movimento de um corpo contínuo. Adaptado de <i>Holzappel, 2000</i>	14
Figura 7 - Representação de Haward e Thackray (1968) para modelo constitutivo. Retirado de Anand et al. 2006.....	18
Figura 8 - Variação do volume livre η ao longo da deformação.....	34
Figura 9 - Variação da resistência ao escoamento s ao longo da deformação.....	35
Figura 10 - Tensão versus deformação para diferentes formulações de μ	39
Figura 11 - Tensão versus deformação para diferentes formulações de μ , com descarregamento da carga.....	39
Figura 12 - Curva tensão por deformação para policarbonato em um ensaio de compressão simples. Adaptado de Anando <i>et al.</i>	40
Figura 13 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro <i>rubbery modulus</i> μR	41
Figura 14 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro <i>network locking stretch</i> λL	42
Figura 15 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro $\nu 0$	43
Figura 16 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro m	43
Figura 17 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro α	44
Figura 18 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro $h 0$	44
Figura 19 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro scv	45
Figura 20 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro b	45

Figura 21 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro ηcv .	46
Figura 22 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro $g0$.	46
Figura 23 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro $s0$.	47
Figura 24 - Representação unidimensional reológica do modelo constitutivo proposto. Nota-se que nenhuma das molas apresentadas, ou os amortecedores são lineares.	50
Figura 25 - Evolução da resistência ao escoamento s ao longo da deformação. São apresentadas para os 4 micromecanismos, $\alpha = 1, 2, 3, 4$.	62
Figura 26 - Evolução do volume livre η ao longo da deformação.	63
Figura 27 – Curva tensão versus deformação para PMMA.	63
Figura 28 - Curva de tensão real versus deformação real para PMMA em um ensaio de compressão monotônico. Adaptado de Anand e Ames (2006).	64
Figura 29- Curva tensão versus deformação para PMMA obtida através do código com descarregamento até nível zero de tensão.	65
Figura 30 - Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro rubbery modulus μR .	66
Figura 31 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro network locking stretch λL .	66
Figura 32 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro $v0$.	67
Figura 33 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro $g0$.	67
Figura 34 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro $h0$.	68
Figura 35 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro b .	68
Figura 36 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro ηcv .	69
Figura 37 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro ap .	69

Lista de Siglas

PLDLA – *poly lactic acid.*

PEEK – *polyether ether ketone.*

UHMWPE – *ultra high molecular weight polyethylene,*

PMMA – *polymethylmethacrylate.*

Lista de Símbolos

- \mathbf{F} – Gradiente da deformação.
 \mathcal{X} – Função mapeamento.
 \mathbf{R} – Tensor rotação do corpo.
 \mathbf{R}^e – Parcela elástica do tensor rotação do corpo.
 \mathbf{R}^p – Parcela plástica do tensor rotação do corpo.
 \mathbf{U} – Tensor deformação à direita.
 \mathbf{U}^e – Parcela elástica do tensor deformação à direita.
 \mathbf{U}^p – Parcela plástica do tensor deformação à direita.
 \mathbf{V} – Tensor deformação à esquerda.
 \mathbf{V}^e – Parcela elástica do tensor deformação à esquerda.
 \mathbf{V}^p – Parcela plástica do tensor deformação à esquerda.
 \mathbf{C} – Tensor de Cauchy-Green à direita.
 \mathbf{C}^e – Parcela elástica do tensor de Cauchy-Green à direita.
 \mathbf{C}^p – Parcela plástica do tensor de Cauchy-Green à direita.
 \mathbf{B} – Tensor de Cauchy-Green à esquerda.
 \mathbf{B}^e – Parcela elástica do tensor de Cauchy-Green à esquerda.
 \mathbf{B}^p – Parcela plástica do tensor de Cauchy-Green à esquerda.
 \mathbf{I} – Tensor identidade.
 \mathbf{E} – Tensor de deformação de Green-St. Venant.
 \mathbf{e} – Tensor de deformação de Euler-Almansi.
 \mathcal{V} – Vetor de velocidade material.
 \mathcal{v} – Vetor de velocidade espacial.
 t – Variável do tempo.
 \mathbf{D} – Tensor da taxa de deformação.
 \mathbf{D}^e – Parcela elástica do tensor da taxa de deformação.
 \mathbf{D}^p – Parcela plástica do tensor da taxa de deformação.
 \mathbf{W} – Tensor da taxa de rotação (vorticidade).
 \mathbf{W}^e – Parcela elástica do tensor da taxa de rotação.
 \mathbf{W}^p – Parcela plástica do tensor da taxa de rotação.
 \mathbf{L} – Gradiente da velocidade.
 \mathbf{F}^e – Parte elástica do gradiente da deformação.
 \mathbf{F}^p – Parte plástica do gradiente da deformação.
 J – Jacobiano do gradiente da deformação.
 \mathcal{V} – Velocidade virtual generalizada.
 \mathcal{W}_{ext} – Trabalho da força externa ao corpo.
 \mathcal{W}_{int} – Trabalho da força interna ao corpo.
 \mathbf{Q} – Tensor ortogonal próprio.
 \mathbf{t} – Vetor tração.

\mathbf{T} – Tensor de tensão.
 \mathbf{T}^e – Parcela elástica do tensor de tensão.
 \mathbf{T}^p – Parcela plástica do tensor de tensão.
 ψ – Energia livre.
 ψ^e – Parcela elástica da energia livre.
 ψ^p – Parcela plástica da energia livre.
 \mathbf{S}_{back} – Tensor *backstress*.
 λ^p – Alongamento plástico efetivo.
 s – Resistência intermolecular ao escoamento plástico.
 s_0 – Valor inicial da resistência intermolecular ao escoamento plástico.
 s_{cv} – Resistência intermolecular ao escoamento plástico de saturação
 η – Volume livre.
 η_{cv} – Volume livre de saturação.
 G – Módulo elástico de cisalhamento.
 K – Módulo elástico volumétrico.
 π – Pressão média normal.
 \mathcal{L} – Função de Langevin
 μ – Módulo do *backstress*.
 μ_R – *Rubbery modulus*.
 λ_L – *Network locking stretch*.
 $\bar{\tau}$ – Tensão de cisalhamento equivalente.
 ν^p – Taxa de deformação cisalhante plástica equivalente.
 ν_0 – taxa de deformação cisalhante plástica equivalente de referência.
 α – Parâmetro de sensibilidade à pressão.
 m – Parâmetro de sensibilidade à taxa de deformação.
 \mathbf{F}^* – Parte distorcional do gradiente de deformação.
 \mathbf{C}^* – Tensor de Cauchy-Green à direita correspondente à \mathbf{F}^* .
 \mathbf{B}^* – Tensor de Cauchy-Green à esquerda correspondente à \mathbf{F}^* .
 ϵ^e – Deformação elástica logarítmica.
 \mathcal{A} – Variáveis internas tensoriais simétricas.
 s – Variáveis internas escalares.

Sumário

1. INTRODUÇÃO	1
2. OBJETIVOS	3
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO DA TEORIA	5
3.1 DESCRIÇÃO QUALITATIVA DE POLÍMEROS	5
3.2 COMPORTAMENTO MECÂNICO DOS POLÍMEROS	7
3.3 MODELOS CONSTITUTIVOS	9
3.4 CINEMÁTICA BÁSICA DE DEFORMAÇÕES FINITAS	13
4. MODELOS ELÁSTICOS VISCOPLÁSTICOS	17
4.1 MODELO DE ANAND E GURTIN 2003.....	17
4.1.1 INTRODUÇÃO	17
4.1.2 CINEMÁTICA DO MODELO	19
4.1.3 PRINCÍPIO DAS POTÊNCIAS VIRTUAIS	21
4.1.4 RESTRIÇÕES TERMODINÂMICAS	24
4.1.5 TEORIA CONSTITUTIVA	24
4.1.6 PARTICULARIZAÇÃO PARA MATERIAIS AMORFOS	27
4.1.7 RESUMO DO MODELO	30
4.1.10 ESCOLHA DE FUNÇÕES PARA APLICAÇÃO EM UM SÓLIDO POLIMÉRICO AMORFO (POLICARBONATO).....	31
4.1.11 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO MODELO AOS SEUS PARÂMETROS DE CONTROLE.....	41
4.2 MODELO DE ANAND E AMES 2006.....	49
4.2.1 INTRODUÇÃO	49
4.2.2 GENERALIZAÇÃO DO MODELO CONSTITUTIVO TRIDIMENSIONAL.....	50
4.2.3 APLICAÇÃO DO MODELO PARA O POLÍMERO PMMA	57
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	71
BIBLIOGRAFIA.....	73

APÊNDICE A.....	77
APÊNDICE B.....	81
APÊNDICE C.....	87

1. INTRODUÇÃO

É cada vez maior o espaço ocupado na indústria por materiais poliméricos na fabricação e projetos dos mais diversos produtos. Esse crescimento se deve a algumas características que esses materiais apresentam, como, certa facilidade na fabricação e moldagem de produtos com geometrias mais complexas, boa resistência mecânica, e em algumas aplicações por apresentarem boas propriedades de isolamento térmico e elétrico.

Grande foco tem sido dado ao desenvolvimento e concepção de materiais e componentes de alto desempenho mecânico. Materiais como os polímeros termoplásticos possuem a capacidade de sofrer grandes deformações e elevada absorção e dissipação de energia antes de sua ruptura (elevada ductilidade e tenacidade). Exemplos de aplicação são: componentes eletrodomésticos, eletrônicos, automotivos, tubulações, janelas de segurança, dispositivos que devem dissipar a energia frente a impactos, blindagens.

Uma área que tem se destacado e se expandindo é o uso de materiais poliméricos biocompatíveis para fabricação de implantes. Um possível tratamento indicado para o caso de uma fratura óssea é a fixação dos fragmentos por implantes de parafusos. Esses implantes metálicos são recomendados até a regeneração da fratura e depois devem ser removidos. Porém, durante a remoção dos implantes pode ocorrer lesões ao tecido ósseo, o que acarretará em outros futuros problemas. Visando diminuir os possíveis efeitos adversos do uso de implantes metálicos, tem-se desenvolvido implantes bioabsorvíveis que proporcionam certas vantagens, como menor rejeição do corpo humano ao objeto introduzido e ausência da necessidade de remoção dos implantes.

Estes tipos de aplicações tem gerado uma forte demanda no aumento da capacidade de modelagem e desenvolvimento de modelos adequados a descrever o comportamento de materiais quando submetidos a cargas elevadas que acoplam diversos mecanismos dissipativos, sendo estes normalmente tratados de maneira separada, como: viscoelasticidade, viscoplasticidade, acoplamentos térmico, sensibilidade do modelo a certos parâmetros.

Modelos que incorporem os fenômenos citados dependem do ajuste de determinados parâmetros, de modo que defina a resposta para um material real específico, sendo que estes parâmetros devem ser

obtidos a partir de dados experimentais. A identificação destes parâmetros é normalmente realizada associando o modelo constitutivo proposto a dados experimentais junto com uso de técnicas de análise inversa (minimização de erro numérico/experimental).

O presente trabalho de dissertação insere-se no contexto acima mencionado, visando expor algumas teorias na área de modelagem e simulação do comportamento mecânico de materiais não lineares viscoelásticos e viscoplásticos com o objetivo de representar materiais poliméricos termoplásticos. É mostrado o desenvolvimento de dois modelos constitutivos voltados à capturar o comportamento altamente não linear presente nas curvas de resposta tensão versus deformação de materiais sólidos poliméricos amorfos analisando suas características e a sua dependência a um conjunto de parâmetros de controle

2. OBJETIVOS

O objetivo do trabalho consiste em apresentar uma análise comparativa do comportamento de dois modelos relevantes na literatura para simulação do comportamento de materiais termoplásticos em estado vítreo (temperatura de trabalho inferior à temperatura de transição vítrea do material, sendo esta a temperatura abaixo da qual um polímero apresenta um comportamento mais frágil e acima da qual o mesmo apresenta um comportamento mais de um líquido viscoso) submetidos a um regime de deformação finita.

A motivação para este estudo reside na crescente aplicação destes polímeros na área médica, em particular seu uso em implantes. Observa-se um aumento do seu uso para substituições de dispositivos que anteriormente eram fabricados com materiais metálicos. Dentre os materiais poliméricos mais utilizados citam-se: PLA (possui a característica de ser um material bioabsorvível), PEEK (poli ariléter cetona), UHMWPE (utilizado em acetábulo de próteses).

O escopo do presente trabalho dará ênfase a modelos isotérmicos que buscam capturar comportamentos típicos da fase vítrea dos termoplásticos. Sendo assim, o objetivo principal do trabalho é expor uma abordagem teórica que conclui em dois modelos constitutivos voltados a representação do comportamento mecânico de materiais sólidos poliméricos amorfos. Visa-se expor desde a ideia principal por trás da teoria, o seu desenvolvimento matemático, as suas hipóteses, quais são os parâmetros materiais e porque eles foram escolhidos, aplicação desses modelos na obtenção de curvas de resposta não lineares tensão versus deformação desses materiais poliméricos concluindo com uma análise de sensibilidade aos parâmetros de controle, de maneira a entender sua capacidade de representar curvas experimentais.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO DA TEORIA

3.1 DESCRIÇÃO QUALITATIVA DE POLÍMEROS

Um polímero é uma molécula de cadeia longa a qual é formada pela composição de inúmeras unidades repetidas, estas unidades são denominadas de monômeros. O processo de união e a criação de uma ligação entre essas unidades necessita do fornecimento de calor, pressão e/ou catalisadores, sendo este processo chamado de polimerização. Sendo assim, os monômeros são a menor unidade repetitiva dentro da cadeia do polímero. A composição química e a topologia das cadeias poliméricas conferem determinadas propriedades específicas a cada tipo de polímero.

A Figura 1 ilustra esse processo de polimerização para o caso do monômero etileno. Durante o processo a ligação covalente dupla entre os carbonos é quebrada em ligações covalentes simples, gerando assim a unidade básica que será repetida inúmeras vezes dentro da cadeia longa e criando a molécula do polietileno.

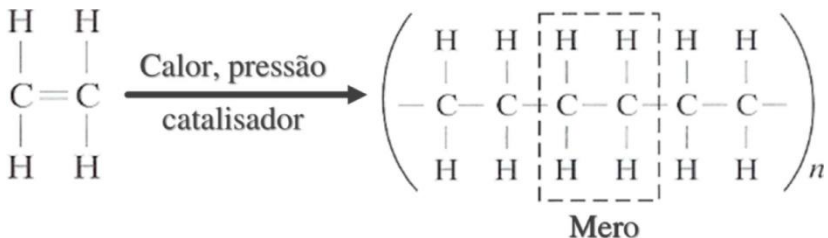


Figura 1 - Processo de polimerização do polietileno. Moura, 2012.

Uma forma muito comum de classificar os polímeros é dividi-los em três grandes grupos: elastômeros, termorrígidos e termoplásticos. Sendo que, os termoplásticos ainda podem ser classificados em materiais cristalinos e amorfos.

As ligações nas moléculas de um termoplástico são fracas, de modo que quando estes materiais são expostos ao calor sofrem um amolecimento e retornam a sua condição inicial ao serem resfriados a temperatura original. Sendo assim, são capazes de amolecer e endurecer quando submetidos a variações térmicas repetitivas (dentro de certos limites).

Dentro do grupo dos termoplásticos eles são divididos de acordo com a morfologia de seus arranjos poliméricos, podendo ser

definidos em estruturas amorfas, cristalinas e combinações dessas duas (estrutura semicristalina, esferulita). A Figura 2 ilustra as diferenças presentes dentro de morfologia.

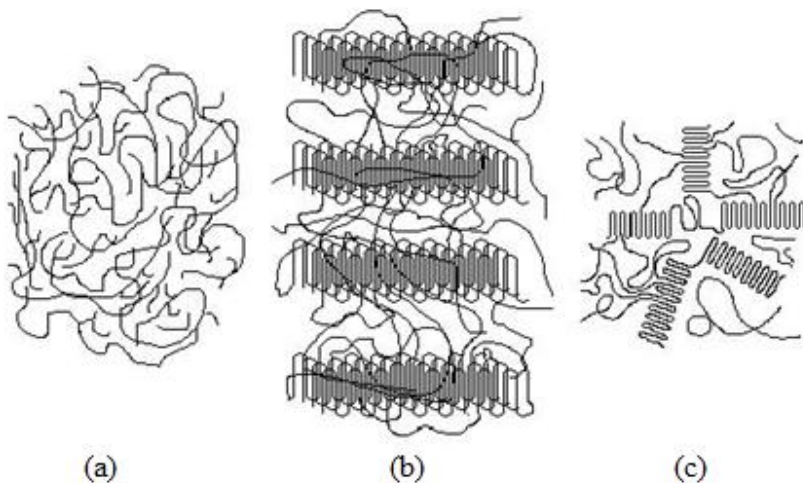


Figura 2 - Morfologia das cadeias poliméricas: a) amorfo, b) cristalino, c) esferulita. Moura, 2012.

Pequenas moléculas e íons contribuem para formar um arranjo regular das moléculas em formas de placas de 10 a 20 nm de espessura com uma estrutura cristalina (conforme Figura 2 b). Cadeias poliméricas que não conseguem ser arranjadas de maneira regular para formar placas cristalinas são denominadas de estruturas amorfas.

A disposição dentro das estruturas amorfas dificulta o deslizamento de um enredo molecular sobre o outro, porém permite que partes da cadeia possam rotacionar dentro da massa. Portanto, estruturas amorfas apresentam temperaturas de fusão mais baixas e menor rigidez do que disposições cristalinas.

Em baixas temperaturas o movimento molecular nas regiões amorfas é restrito a vibrações e as cadeias ficam “congeladas”, ou seja, impedidas de rotacionar ou se mover no espaço. Esta condição é conhecida como estado vítreo da região amorfa. Sendo assim, este estado leva a um comportamento rígido e frágil como um sólido cristalino, mas mantendo a desordem molecular de um fluido.

Termoplásticos ao serem aquecidos até atingir determinada temperatura, na qual partes das cadeias amorfas (de 20 a 50 átomos de

comprimento) são capazes de se mover, atinge-se a temperatura de transição vítrea. A partir da qual o material começa a apresentar um comportamento típico dos elastômeros. Os polímeros amorfos no estado elastomérico (*rubbery*) são moles e flexíveis.

3.2 COMPORTAMENTO MECÂNICO DOS POLÍMEROS

O comportamento típico de um corpo de prova termoplástico submetido a um ensaio de tração à velocidade de deformação e temperatura constante pode ser visualizado na Figura 3.

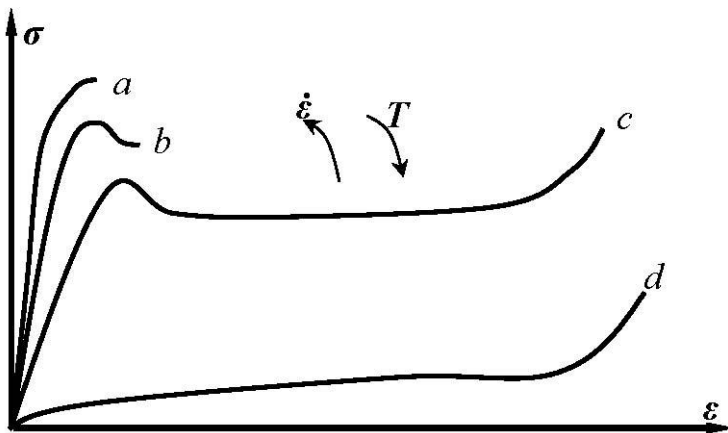


Figura 3 - Curvas de tensão-deformação para velocidades e temperaturas constantes.

Altas taxas de deformação e/ou baixas temperaturas acabam por diminuir a liberdade de movimento das cadeias moleculares do material, tornando o mesmo mais rígido e mais propenso a apresentar uma fratura de caráter frágil, como visto pela curva *a* da Figura 3. Para temperaturas suficientemente baixas, o mecanismo de deformação ocorre exclusivamente devido ao estiramento reversível das cadeias poliméricas, sofrendo pouca influência de comportamentos viscosos e irreversíveis. Já em temperaturas mais elevadas, a taxa de deformação possui uma forte influência nas tensões.

As curvas *b* e *c* da Figura 3 apresentam claramente um pico na curva de tensão deformação, o valor da tensão nesse pico pode ser definido como a tensão limite de escoamento. Para níveis de deformação abaixo do valor do pico, as cadeias poliméricas não apresentam um

deslizamento relativo entre elas, havendo a possibilidade de retorno à configuração inicial do material quando descarregado. Para valores de deformação mais elevados, as cadeias poliméricas começam a deslizar entre si, gerando deformações permanentes no material.

Nesta região de deformação os corpos de prova costumam apresentar uma forte localização das deformações, acabando por gerar uma estrição que se desloca ao longo do corpo de prova. As moléculas se orientam na direção do estiramento, direção esta do deslocamento, atingido um ponto máximo de orientação, ocorre um endurecimento ao estiramento e posterior ruptura, apresentando deformações da ordem de 10 a 20%. Em temperaturas mais elevadas, a região de deformação permanente se estabiliza a um nível de tensões quase constante para uma ampla faixa de deformações.

Em geral tanto o módulo de elasticidade quanto a tensão limite de escoamento diminuem com o aumento da temperatura ou com a diminuição da velocidade de deformação. Em temperaturas suficientemente altas e taxas de deformação suficientemente baixas, o material apresenta o comportamento monotônico como mostrado na curva *d*.

A geração de uma curva tensão-deformação para materiais termoplásticos a partir de um ensaio mecânico possui dificuldades particulares. Devido à formação da região de estrição (cuja amplitude cresce rapidamente e, diferentemente do comportamento típico apresentado pelos metais, esta frequentemente se desloca) o controle da taxa de deformação durante o ensaio do ponto material que se deseja capturar, bem como a geometria da seção transversal do corpo de prova, se tornam tarefas difíceis de serem realizadas com a precisão necessária. Estas dificuldades têm produzido controvérsias sobre a real intensidade ou mesmo existência do amolecimento do material após este ultrapassar a tensão limite de escoamento.

O comportamento do material quando no descarregamento após ultrapassar a região de escoamento ocorre seguindo a curva mostrada na Figura 4. Percebe-se uma diminuição no módulo de elasticidade aparente, indicando a ocorrência de dano no material.

No intuito de superar estas dificuldades observa-se na literatura uma ampla linha de modelos constitutivos de características fenomenológicas elaboradas para a reprodução de curvas experimentais. No presente trabalho se propõe realizar uma revisão de um conjunto representativo destes modelos com o intuito de compreender e avaliar suas características e escolhas de arquitetura.

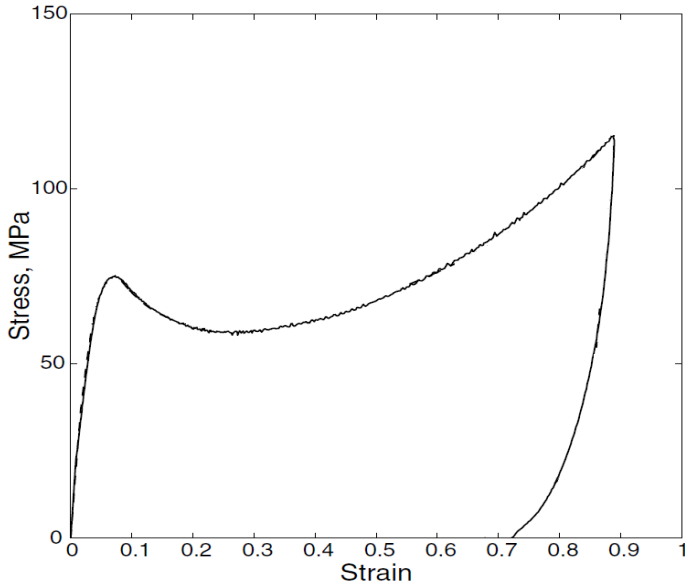


Figura 4 - Curva de tensão-deformação seguida do descarregamento do material. Adaptado de Anand e Gurtin, (2003).

3.3 MODELOS CONSTITUTIVOS

Ao longo dos últimos 30 anos um esforço considerável tem sido dedicado em desenvolver modelos constitutivos que representem o comportamento elástico-viscoplástico de materiais poliméricos, tanto abaixo quanto acima de suas temperaturas de transição vítrea. Modelos mais recentes tem abordado o problema de acoplamento termomecânico e conseqüentemente permitido a representação do comportamento de transição entre estas condições.

Dentre as diferentes abordagens, foi escolhido um conjunto inicial de trabalhos, todos de autores destacados na literatura sobre o assunto. Citando estes em ordem cronológica tem-se, Boyce *et al.* 1988, Arruda *et al.* 1993, Arruda *et al.* 1995, Bergstrom *et al.* 1998, Bergstrom *et al.* 1999, Boyce *et al.* 2000, Bergstrom *et al.* 2002, Mulliken *et al.* 2006, Richeton *et al.* 2007, Anand *et al.* 2009, Ames *et al.* 2009, Srivastava *et al.* 2010.

Nesta linha de trabalhos destacam-se as seguintes características:

Observa-se a utilização de modelos reológicos baseados em dois ou três braços em paralelo onde um deles contempla um

comportamento hiperelástico (reversível) e outro onde se considera uma cinemática de decomposição multiplicativa do gradiente da deformação F em parcela elástica F^e e outra dissipativa, viscoelástica ou viscoplástica F^{vp} . Esse tipo de comportamento pode ser visto na Figura 5.

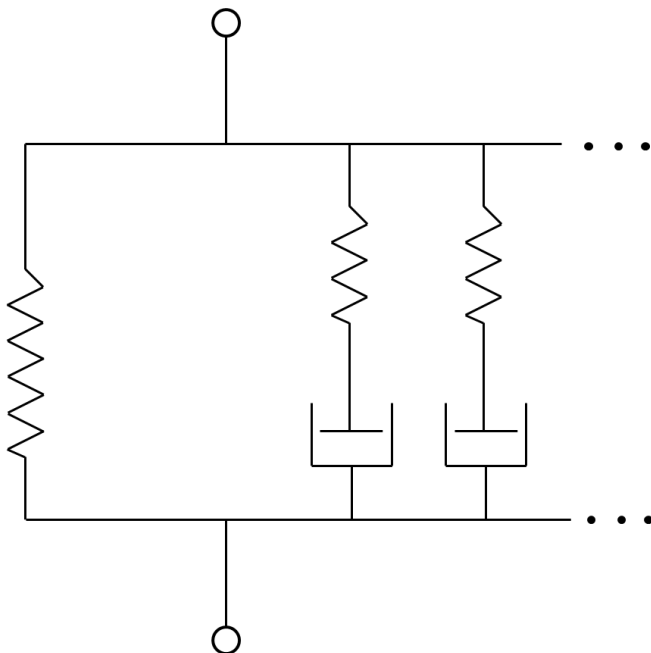


Figura 5 - Modelo reológico de braços em paralelo.

A utilização de variáveis internas permite definir direção e amplitude do escoamento viscoelástico e/ou viscoplástico em função do tipo de mecanismo dissipativo descrito.

Observa-se também a inexistência, em certos modelos, da clássica separação de uma região de comportamento totalmente elástica de outra plástica ou viscoplástica, mediante a utilização de um critério de limite de escoamento, típico de modelos para materiais metálicos. Neste contexto vários destes modelos podem ser classificados dentro do grupo de modelos viscoelásticos não lineares.

Boyce *et al.* 1988 avalia a dependência de leis constitutivas, que consideram o comportamento de grandes deformações inelásticas em polímeros, sobre a influência da taxa de deformação, temperatura e pressão no escoamento do material, bem como o amolecimento ou

encruamento na deformação verdadeira pós-escoamento. Assim, esse trabalho desenvolve um modelo constitutivo tridimensional baseado nas estruturas macromoleculares desses materiais e no mecanismo de escoamento plástico que engloba essas dependências.

Arruda *et al.* 1993 analisa como a resposta à grandes deformações em polímeros amorfos é afetada pela orientação das cadeias moleculares dentro do material polimérico durante deformação plástica, sendo que, a orientação das redes moleculares é um processo altamente anisotrópico. Assim, a resposta mecânica observada é uma função dependente do estado de anisotropia desses materiais. Um sistema tridimensional de molas de borracha que é capaz de capturar a dependência do estado de deformação do encruamento é usado para desenvolver um modelo de variáveis tensoriais internas da evolução da resposta anisotrópica do polímero.

Arruda *et al.* 1995 estuda a importância em se entender os efeitos termomecânicos acoplados que aparecem em polímeros que ocorrem durante condições de carregamento de impacto a processos de deformação. Esses efeitos são analisados variando-se as taxas de deformação e temperaturas impostas ao material. Resultados experimentais foram simulados utilizando um modelo constitutivo tridimensional da resposta inelástica de polímeros vítreos em grandes deformações em conjunto com uma análise termomecânica acoplada em elementos finitos. O modelo considera que parte do trabalho devido à deformação inelástica age como uma fonte de calor durante as simulações.

Bergstrom *et al.* 1998 e Bergstrom *et al.* 1999 utilizam dados de investigação experimental detalhada para desenvolver um modelo constitutivo que consiga representar o comportamento mecânico de materiais elastoméricos, conhecidos ser dependentes da taxa de deformação e exibir laços de histerese sobre carregamentos cíclicos. A fundação do modelo é que o comportamento mecânico pode ser decomposto em duas partes: uma rede de equilíbrio correspondente ao estado que é visto em testes de longa duração de relaxação de tensão e uma segunda rede que captura o desvio não linear dependente da taxa do estado de equilíbrio.

Boyce *et al.* 2000 apresenta um modelo constitutivo para o comportamento tensão-deformação do PET (*poly (ethylene terephthalate)*) para deformações finitas em temperaturas acima da temperatura de transição vítrea. Nesse regime de temperatura o comportamento do PET é fortemente dependente da taxa de deformação e temperatura do material. O modelo leva em conta esses efeitos no

comportamento tensão-deformação modelando a competição existente entre o processo de orientação molecular e o processo de relação molecular.

Bergstrom *et al.* 2002 compara a capacidade de diferentes teorias (por exemplo, teoria de plasticidade J_2) em reproduzir comportamentos mecânicos apresentados pelo UHMWPE. O UHMWPE ao ser submetido a um estado de deformação monotonicamente crescente, seu comportamento mecânico é caracterizado por uma resposta elástica linear seguida de um escoamento distribuído e encruamento em grandes deformações. Durante a fase de descarga de um processo cíclico de deformação, a resposta é caracterizada por uma recuperação não linear devido à liberação de energia armazenada internamente. Adicionalmente, um modelo híbrido é proposto, o qual incorpora algumas características das teorias anteriores.

Mulliken *et al.* 2006 realiza uma investigação experimental e analítica combinadas para estender o comportamento mecânico de dois polímeros amorfos, policarbonato e poli(metil metacrilato), em diferentes taxa de deformação, variando de 10^{-4} a 10^4 s^{-1} . Um modelo constitutivo baseado fisicamente para grandes deformações de termoplásticos foi estendido para englobar condições de alta taxa de deformações.

Richeton *et al.* 2007 desenvolve um modelo constitutivo robusto tridimensional fisicamente consistente para descrever a reposta finita mecânica de polímeros amorfos sobre uma larga faixa de temperaturas e taxa de deformações, incluindo a região de borracha (*rubbery*) e para taxa de carregamento de impacto. O modelo termomecânico é baseado em uma aproximação elástica-viscoplástica reológica, onde os efeitos de temperatura, taxa de deformação, e pressão hidrostática são levados em consideração.

Anande *et al.* 2009 apresenta a formulação de uma abordagem elástica-viscoplástica termomecanicamente acoplada para modelar a dependência da taxa de deformação e temperatura em grandes deformações sobre materiais poliméricos amorfos. Ames *et al.* 2009 é a continuação deste último paper onde se conduzem experimentos de grandes deformações em compressão em três diferente materiais poliméricos amorfos: PMMA (*poly(methylmethacrylate)*), policarbonato e Zeonex-690R (*cyclo-olefinpolymer*), em uma faixa de temperaturas variando desde a temperatura ambiente até temperaturas pouco menores do que a temperatura de transição vítrea de cada material, e em uma faixa de deformações compressivas verdadeiras excedendo 100%.

3.4 CINEMÁTICA BÁSICA DE DEFORMAÇÕES FINITAS

Um meio contínuo, ou um corpo contínuo, pode ser visto em uma escala macroscópica como um corpo que possui uma distribuição contínua de partículas em um espaço delimitado por uma determinada região. Em um espaço euclidiano a posição de uma partícula é definida por três coordenadas, assim, $P = P(x_1, x_2, x_3)$.

Pode-se apresentar o movimento de um meio contínuo através de duas descrições: a descrição material (Lagrangeana), na qual as variáveis independentes são descritas pelas posições das partículas \mathbf{X} escolhidas em uma configuração de referência (tempo $t = 0$), e a descrição espacial (Euleriana), sendo as variáveis independentes descritas pelas posições das partículas \mathbf{x} escolhidas na configuração atual no tempo t .

Considere um corpo na sua configuração de referência ocupando uma região Ω_0 do espaço e uma partícula \mathbf{X} dada pelas coordenadas $\mathbf{X} = \mathbf{X}(X_1, X_2, X_3)$, considere também o mesmo corpo na sua configuração atual ocupando uma região Ω e uma partícula \mathbf{x} dada pelas coordenadas $\mathbf{x} = \mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$.

O movimento de cada partícula do corpo contínuo pode ser descrito através de uma função contínua \mathcal{X} que leva cada ponto da configuração de referência para a configuração atual no tempo t . Assim, tem-se que,

$$\mathbf{x} = \mathcal{X}(\mathbf{X}, t) \quad (1)$$

Portanto, cada partícula na descrição espacial pode ser descrita por uma partícula na descrição material e pelo tempo t , essa relação é biunívoca, evitando-se assim que haja ruptura de um ponto em dois ou a colapso de dois pontos. Dessa maneira, pode-se obter a relação inversa, obter os pontos na configuração material através dos pontos na configuração espacial, por,

$$\mathbf{X} = \mathcal{X}^{-1}(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

A Figura 6 ilustra o corpo na sua descrição material (lado esquerdo) e espacial (lado direito), bem como a função de mapeamento \mathcal{X} .

O gradiente da função de mapeamento gera o tensor \mathbf{F} , o qual é referido como o gradiente de deformação, sendo dado por,

$$\mathbf{F} = \nabla \mathcal{X} \quad ; \quad F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} \quad (3)$$

E sendo o J definido como o Jacobiano, representado a deformação volumétrica do corpo e dado por,

$$J = \det \mathbf{F} > 0 \quad (4)$$

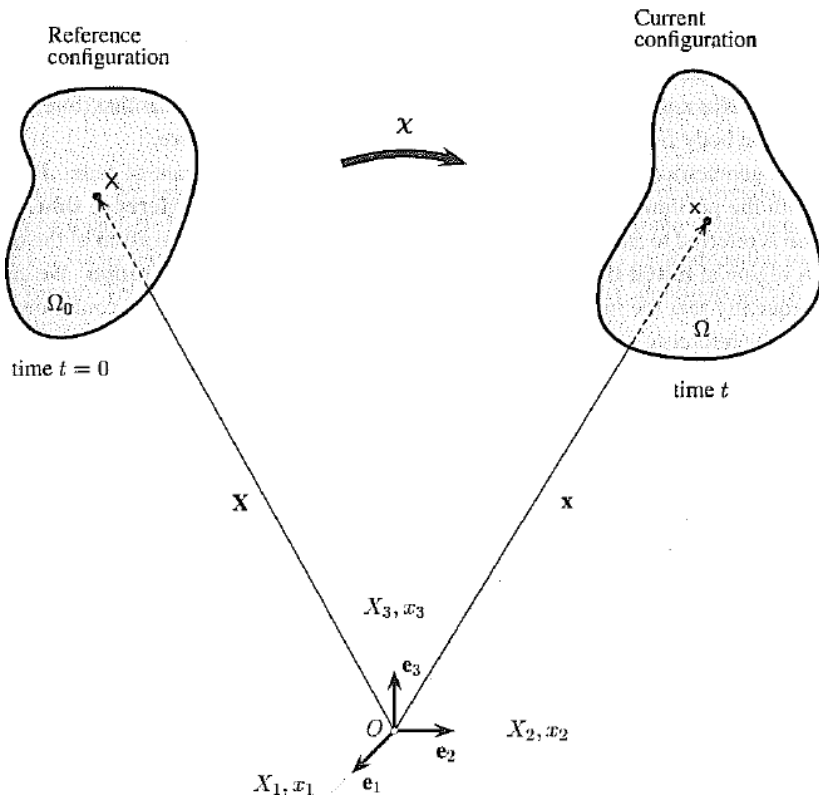


Figura 6 - Configurações e movimento de um corpo contínuo. Adaptado de Holzapfel, 2000.

Considere um vetor material dX dado pela diferença das posições de duas partículas do corpo na configuração de referência, e um vetor espacial dx dado pela diferença das posições de duas partículas do corpo na configuração atual, pode-se mostrar que,

$$dx = FdX \quad (5)$$

Sendo que a inversa dessa relação também é válida,

$$dX = F^{-1}dx \quad (6)$$

Assim, percebe-se o tensor F mapeia vetores na descrição material para espacial, e sua inversa F^{-1} mapeia vetores na descrição espacial para material.

Considere a decomposição polar do gradiente de deformação F ,

$$F = RU = VR \quad (7)$$

onde, R é um tensor que representa a rotação do corpo mapeando vetores materiais em espaciais, e U e V são tensores simétricos positivos definidos denominados de tensores de deformação a direita e esquerda, respectivamente. Os tensores U e V representam a deformação pura sofrida pelo corpo, sendo que o tensor U opera sobre vetores materiais e o tensor V opera sobre vetores espaciais.

Definem-se agora os tensores de Cauchy-Green à direita C e o Cauchy-Green esquerda B , dados por,

$$C = U^2 = F^T F \quad (8)$$

$$B = V^2 = F F^T \quad (9)$$

Um tensor muito útil em aplicações é o tensor de deformação de Green-St. Venant, dado por,

$$E = \frac{1}{2}(F^T F - I) = \frac{1}{2}(C - I) \quad (10)$$

Note que o tensor E desaparece, é nulo, quando o corpo não sofre deformação, sendo apenas submetidos a movimentos de corpo rígido, como rotações e translações. Esta propriedade é essencial para um tensor conseguir representar de fato uma medida de deformação do corpo. O tensor E é um tensor material, pode-se definir também um tensor de deformação espacial como,

$$e = \frac{1}{2}(I - F^{-T} F^{-1}) = \frac{1}{2}(I - b) \quad (11)$$

Onde, \mathbf{e} é um tensor espacial conhecido como tensor de deformação de Euler-Almansi.

Pode-se também, quando necessário, obter as taxas de deformação dos tensores apresentados, sendo a taxa do gradiente de deformação \mathbf{F} dado por,

$$\dot{\mathbf{F}}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \left(\frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right) \quad (12)$$

$$\dot{\mathbf{F}}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} = \text{Grad} \mathbf{v}(\mathbf{X}, t) \quad (13)$$

onde, o vetor $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$ é o vetor de velocidade material de uma partícula pertencente ao corpo, pode-se obter também o vetor de velocidade espacial $\boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}, t)$, sendo estes dados por,

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (14)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{v}(\mathcal{X}^{-1}(\mathbf{x}, t), t) = \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}, t) \quad (15)$$

O gradiente do vetor velocidade espacial pode ser dividido em sua parte simétrica e antissimétrica por,

$$\text{grad} \boldsymbol{\nu} = \frac{\partial \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (16)$$

onde, o tensor \mathbf{D} é a parte simétrica e é denominado de tensor da taxa de deformação, e o tensor \mathbf{W} é a parte antissimétrica denominado de tensor da taxa de rotação ou tensor da vorticidade.

4. MODELOS ELÁSTICOS VISCOPLÁSTICOS

4.1 MODELO DE ANAND E GURTIN 2003

4.1.1 INTRODUÇÃO

Polímeros e metais são frequentemente classificados em cristalinos e amorfos (e combinações) dependendo do arranjo geométrico em que moléculas (no caso de polímeros) e átomos (no caso de metais) estão distribuídos na correspondente microestrutura. Quando estes apresentam uma distribuição desordenada, são comumente referenciados como amorfos ou vítreos (*glassy*) em contraste com as distribuições ordenadas ou estruturadas, referenciadas como cristalinas.

Há particularidades importantes nos mecanismos microestruturais dos polímeros e metais amorfos que se refletem no seu comportamento macroscópico quando submetidos a deformações inelásticas, ou plásticas.

O trabalho de Anand e Gurtin 2003 desenvolve uma teoria do contínuo para deformações elásticas-viscoplásticas de sólidos amorfos. Sua teoria tem como um dos seus fundamentos decomposição cinemática de Kröner-Lee, $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$, do gradiente de deformação \mathbf{F} nas suas partes elástica e plástica, \mathbf{F}^e e \mathbf{F}^p , respectivamente.

Este modelo se caracteriza por utilizar duas variáveis internas para definir a evolução do fluxo plástico. A principal delas, s , representa a resistência molecular ao fluxo plástico, vinculando-se fortemente ao conceito de viscosidade. Esta resistência evolui ao longo do processo afetada por uma segunda variável interna, η que representa uma medida do volume livre intermolecular existente nos materiais amorfos. Novamente, esta segunda variável interna evolui ao longo do processo de deformação. Na literatura da área, atribui-se à variação deste volume livre o comportamento altamente não linear da curva tensão-deformação, na região que precede o pico de escoamento, e eventual posterior amolecimento durante a deformação do material.

Em termos de comportamento fenomenológico, este modelo se caracteriza por representar adequadamente a região inicial com comportamento viscoelástico, uma segunda região com amolecimento após o pico de tensão e forte escoamento (em carregamentos monotônicos), e evidente efeito Bauschinger tipicamente observado em polímeros amorfos quando descarregados após grandes deformações plásticas.

A teoria apresentada pelos autores é extremamente cuidadosa em satisfazer princípios de objetividade, satisfação da segunda lei da termodinâmica e restrições impostas pelas propriedades de materiais amorfos.

É importante destacar, entretanto que os aspectos principais do comportamento deste modelo podem ser esquematizados mediante o modelo reológico unidimensional proposto por Haward e Thackray (1968), visto na Figura 7, onde se percebe as principais contribuições observadas no comportamento em grandes deformações de polímeros vítreos. Neste, utiliza-se uma mola linear para representar as interações intermoleculares elásticas, um amortecedor viscoso não linear para modelar o escoamento macroscópico dependente do tempo, e uma mola não linear que pode ser estendida finitamente, conhecida como mola borracha elástica de Langevin, para descrever o subsequente encruamento devido ao alinhamento da rede de macromoléculas construído do emaranhado das moléculas do polímero. O alinhamento das cadeias da rede dá origem à uma tensão entrópica ou a um chamado *backstress* no material.

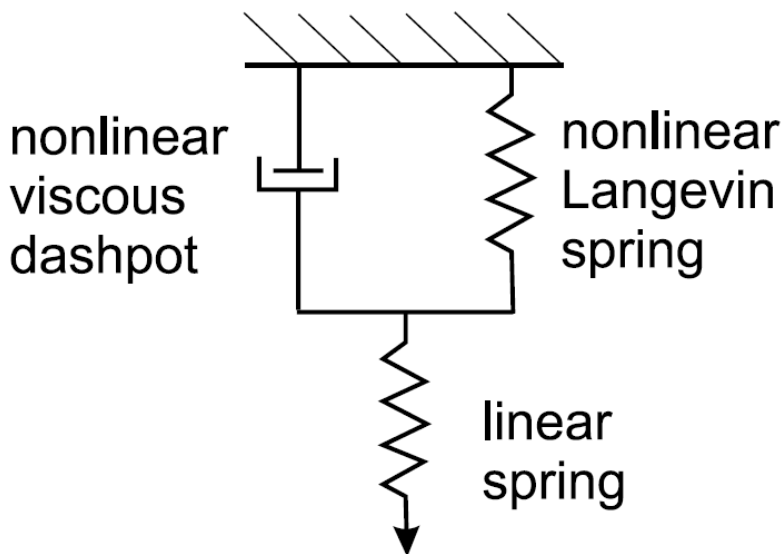


Figura 7 - Representação de Haward e Thackray (1968) para modelo constitutivo. Retirado de Anand et al. 2006.

Esse modelo tem sido trabalhado no presente para sua forma tridimensional por diversos colaboradores, entre eles Parks *et al.* (1985), Boyce *et al.* (1988), Arruda *et al.* (1993), Wu e van der Giessen (1993), Anand e Gurtin (2003).

4.1.2 CINEMÁTICA DO MODELO

Considera-se um corpo homogêneo Ω o qual delimita uma região do espaço em uma configuração de referência fixa, e sendo \mathbf{X} um ponto material arbitrário de Ω . Sendo assim, o movimento de Ω pode ser mapeado através de uma função suave dada por $\mathbf{x} = \mathcal{X}(\mathbf{X}, t)$. A partir desta define-se o gradiente da deformação, velocidade e gradiente da velocidade, dados por,

$$\mathbf{F} = \nabla \mathcal{X} \quad (17)$$

$$\mathbf{v} = \dot{\mathcal{X}} \quad (18)$$

$$\mathbf{L} = \text{grad} \mathbf{v} = \mathbf{F} \dot{\mathbf{F}}^{-1} \quad (19)$$

Admite-se que o gradiente da deformação é decomposto usando a expressão de Kröner-Lee,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (20)$$

Onde, \mathbf{F}^p representa a deformação local de segmentos $d\mathbf{X}$ na configuração de referência para segmentos $d\mathbf{l} = \mathbf{F}^p d\mathbf{X}$ na configuração relaxada devido a mecanismos plásticos. O tensor \mathbf{F}^e representa o mapeamento de segmentos $d\mathbf{l}$ na configuração relaxada para segmentos $d\mathbf{x} = \mathbf{F}^e d\mathbf{l}$ na configuração deformada devido a mecanismos elásticos.

Usando esta decomposição e após manipulações simples, pode-se escrever o gradiente da velocidade como,

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{F}^e \mathbf{L}^p \mathbf{F}^{e-1} \quad (21)$$

Com,

$$\mathbf{L}^e = \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} \quad (22)$$

$$\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \quad (23)$$

Definem-se também os tensores taxa de deformação e taxa de rotação, elástico e plástico, como as partes simétricas e antissimétricas dos respectivos tensores gradiente de velocidade,

$$\mathbf{D}^e = \text{sim}\mathbf{L}^e \quad (24)$$

$$\mathbf{W}^e = \text{skw}\mathbf{L}^e \quad (25)$$

$$\mathbf{D}^p = \text{sim}\mathbf{L}^p \quad (26)$$

$$\mathbf{W}^p = \text{skw}\mathbf{L}^p \quad (27)$$

$$\mathbf{L}^e = \mathbf{D}^e + \mathbf{W}^e \quad (28)$$

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p \quad (29)$$

Duas hipóteses cinemáticas são feitas a cerca do escoamento plástico. A primeira, é que o escoamento é incompressível, e portanto,

$$\det\mathbf{F}^p = 1 \quad (30)$$

$$\text{tr}\mathbf{L}^p = 0 \quad (31)$$

A segunda hipótese postula que o escoamento é irrotacional, tal que,

$$\mathbf{W}^p = \mathbf{0} \quad (32)$$

Sendo assim, chega-se que,

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{W}^p \quad (33)$$

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p \quad (34)$$

Com \mathbf{D}^p sendo desviador.

Utiliza-se também a decomposição polar para as parcelas elástica e plástica do gradiente de deformação:

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e = \mathbf{V}^e \mathbf{R}^e \quad (35)$$

$$\mathbf{F}^p = \mathbf{R}^p \mathbf{U}^p = \mathbf{V}^p \mathbf{R}^p \quad (36)$$

Como \mathbf{F}^p é isocórico o Jacobiano fica,

$$J = \det \mathbf{F} = \det \mathbf{F}^e \quad (37)$$

A satisfação de objetividade em relação a mudanças de observador é adotada como condição essencial a ser satisfeita. Mudanças de observador são transformações do espaço observado que se traduzem numa mudança da função mapeamento da forma

$$\mathcal{X}(\mathbf{X}, t) \rightarrow \mathcal{X}^*(\mathbf{X}, t) = \mathbf{Q}(t)\mathcal{X}(\mathbf{X}, t) + \mathbf{q}(t) \quad (38)$$

Sendo $\mathbf{Q}(t)$ uma rotação (tensor ortogonal próprio) e $\mathbf{q}(t)$ um vetor para cada instante t . Assim,

$$\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{F}^* = \mathbf{Q}\mathbf{F} \quad (39)$$

As configurações de referência e relaxada são independentes da escolha de tais variações do observador e assim, os campos \mathbf{F}^p e \mathbf{D}^p são invariantes sob transformações definidas pela equação 38. Como consequência desta observação, se obtêm a seguinte lei de transformação:

$$\mathbf{F}^e \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{F}^e \quad (40)$$

Tal que,

$$\mathbf{L}^e \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{L}^e\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T \quad (41)$$

$$\mathbf{D}^e \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{D}^e\mathbf{Q}^T \quad (42)$$

$$\mathbf{W}^e \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{W}^e\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T \quad (43)$$

4.1.3 PRINCÍPIO DAS POTÊNCIAS VIRTUAIS

Denota-se Ω_0 para à configuração ou domínio de referencia ocupado pelo corpo indeformado e $\Omega(t) = \mathcal{X}(\Omega_0, t)$ para a configuração ou domínio do corpo deformado. O termo subdomínio é usado para

referenciar uma sub-região arbitraria P_0 de Ω_0 que deforma com o corpo, tal que, $P(t) = \mathcal{X}(P_0, t)$. Seja \mathbf{n} um vetor unitário normal à superfície ∂P apontando para o exterior de $P(t)$.

Admite-se que no instante t em um tempo fixo escolhido arbitrariamente, arbitrário, os campos \mathcal{X} , \mathbf{F}^P e, portanto, \mathbf{F}^e são conhecidos. Considera-se também que os campos $\boldsymbol{\nu}$, \mathbf{L}^e e \mathbf{D}^P são taxas a serem especificadas de forma independente, mas consistentes com a equação 21. Denotam-se os campos virtuais como $\tilde{\boldsymbol{\nu}}$, $\tilde{\mathbf{L}}^e$ e $\tilde{\mathbf{D}}^P$ para diferenciar dos campos associados com a evolução real do corpo e o conjunto velocidade virtual generalizada como,

$$\mathcal{V} = (\tilde{\boldsymbol{\nu}}, \tilde{\mathbf{L}}^e, \tilde{\mathbf{D}}^P) \quad (44)$$

E conseqüentemente o gradiente de velocidade virtual,

$$\tilde{\mathbf{L}} = \tilde{\mathbf{L}}^e + \mathbf{F}^e \tilde{\mathbf{L}}^P \mathbf{F}^{e-1} \quad (45)$$

Seja a potência virtual externa definida como o produto das forças externas pela correspondente velocidade virtual (inclui forças inerciais) e dada por,

$$\mathcal{W}_{ext} = \int_{\partial P} \mathbf{t}(\mathbf{n}) \cdot \tilde{\boldsymbol{\nu}} da + \int_P \mathbf{f} \cdot \tilde{\boldsymbol{\nu}} dv \quad (46)$$

Com $\mathbf{t}(\mathbf{n})$ à força de superfície e \mathbf{f} força de corpo atuando sobre o contorno e interior do subdomínio P (arbitrário), respectivamente, para todo tempo, $\forall t$.

Um dos aspectos característicos da presente formulação é admitir a-priori que a Potencia Virtual Interna é composta pela adição de duas parcelas. A primeira, dada pelo produto do tensor *tensão* \mathbf{T} , definido como par conjugado com $\tilde{\mathbf{L}}^e$. A segunda é dada pelo produto, entre o tensor denotado *micro-tensão* interna \mathbf{T}^P que forma par conjugado com $\tilde{\mathbf{D}}^P$. Assim, escreve-se a potencia interna como (definição),

$$\mathcal{W}_{int} = \int_P (\mathbf{T} \cdot \tilde{\mathbf{L}}^e + J^{-1} \mathbf{T}^P \cdot \tilde{\mathbf{D}}^P) dv \quad (47)$$

O termo J^{-1} se faz necessário porque o trabalho dado por $\mathbf{T}^P \cdot \tilde{\mathbf{D}}^P$ é medido por unidade de volume na configuração relaxada, mas

a integração é feita na configuração deformada. Admite-se que \mathbf{T}^P é simétrico e deviatórico, já que $\widetilde{\mathbf{D}}^P$ é simétrico e deviatórico.

O Princípio das Potencias Virtuais consiste na satisfação de dois postulados:

- (1) Equilíbrio de potencia interna e externa $\mathcal{W}_{ext} = \mathcal{W}_{int}$ em todo subdomínio e para todas as velocidades virtuais generalizadas.
- (2) Objetividade: Dada qualquer subdomínio P e qualquer velocidade virtual, \mathcal{W}_{int} é invariante para qualquer mudança de observador.

Fazendo uma breve manipulação algébrica, mostra-se que as consequências da satisfação de (1) e (2) são que:

a) Todo ponto deve satisfazer as equações de balanço local

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}\mathbf{n} \quad (48)$$

$$\text{div}\mathbf{T} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (49)$$

E consequentemente \mathbf{T} revela ser o tensor de Cauchy com propriedade de simetria

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (50)$$

b) Definindo o Tensor de Mandel \mathbf{S} e seu desviador \mathbf{S}_0 como,

$$\mathbf{S} = \mathbf{J}\mathbf{F}\mathbf{e}^T\mathbf{T}\mathbf{F}\mathbf{e}^{-T} \quad (51)$$

$$\mathbf{S}_0 = \text{sym}_0(\mathbf{S}) \quad (52)$$

Onde $\text{sym}_0(\circ)$ é o operador que fornece a parte simétrica e deviatórica do argumento, chega-se a igualdade

$$\mathbf{S}_0 = \mathbf{T}^P \quad (53)$$

Que representa um balanço entre a *micro-tensão* \mathbf{T}^P (tensor definido na configuração intermediária) e a tensão (macroscópica) de Cauchy \mathbf{T} reescrita na configuração intermediária na forma do Tensor de Mandel.

4.1.4 RESTRIÇÕES TERMODINÂMICAS

Considera-se neste modelo uma teoria puramente mecânica baseada na segunda lei da termodinâmica, a qual requer que o aumento temporal na energia livre ψ de qualquer parte P seja menor ou igual ao trabalho despendido em P :

$$\frac{d}{dt} \int_P \psi J^{-1} dv \leq \mathcal{W}_{ext} = \mathcal{W}_{int} \quad (54)$$

Dada a arbitrariedade de P , o resultado deste princípio é a inequação da dissipação local,

$$\dot{\psi} - \mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{D}^e - \mathbf{T}^P \cdot \mathbf{D}^p \leq 0 \quad (55)$$

Essa equação incorpora restrições a ser imposta no modelo constitutivo

4.1.5 TEORIA CONSTITUTIVA

A fundamentação teórica dada em Anand (2003) para uma base de modelos constitutivos parte de uma condição genérica onde se admite o uso de um número arbitrário n de variáveis internas $\xi = (\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^n)$ e as seguintes equações de estado e evolução com dependências genéricas da forma

$$\psi = \hat{\psi}(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^p) \quad (56)$$

$$\mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^p) \quad (57)$$

$$\mathbf{T}^P = \hat{\mathbf{T}}^P(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^p, \mathbf{D}^p, \xi) \quad (58)$$

$$\dot{\xi}^i = h^i(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^p, \mathbf{D}^p, \xi) \quad (59)$$

A satisfação das restrições impostas pela Objetividade Material (invariância em relação a mudança de observador) e da Segunda Lei da Termodinâmica assim como particularizações de grau de isotropia material permite reduzir e ajustar as dependências destas leis em relação aos seus argumentos. Mostra-se a seguir as consequências da imposição destas restrições.

Objetividade:

Usando argumentos clássicos de invariância destas equações em relação a uma mudança no observador vê-se que \mathbf{F}^p e \mathbf{D}^p são invariantes, enquanto $\mathbf{F}^e \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{F}^e$. Assim, a objetividade reduz o conjunto de equações anteriores, e as dependências tomam a forma específica,

$$\psi = \hat{\psi}(\mathbf{U}^e, \mathbf{F}^p) \quad (60)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{R}^e \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{U}^e, \mathbf{F}^p) \mathbf{R}^{eT} \quad (61)$$

$$\mathbf{T}^p = \hat{\mathbf{T}}^p(\mathbf{U}^e, \mathbf{F}^p, \mathbf{D}^p, \xi) \quad (62)$$

$$\dot{\xi}^i = h^i(\mathbf{U}^e, \mathbf{F}^p, \mathbf{D}^p, \xi) \quad (63)$$

Isotropia material:

O grupo de modelos é limitado para materiais amorfos, para os quais o grupo de simetria de material corresponde a todas as rotações da configuração de referência e relaxada, em forma independente. Ao impor esta restrição, a rotação plástica \mathbf{R}^p é eliminada e a dependência das equações acima se reduz a,

$$\psi = \bar{\psi}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p) \quad (64)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{F}^e \bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p) \mathbf{F}^{eT} \quad (65)$$

$$\mathbf{T}^p = \bar{\mathbf{T}}^p(\Theta) \quad (66)$$

$$\dot{\xi}^i = h^i(\Theta) \quad (67)$$

Onde representa a seguinte lista de argumentos, $\Theta = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p, \mathbf{D}^p, \xi)$ e as funções $\bar{\psi}$, $\bar{\mathbf{T}}$, $\bar{\mathbf{T}}^p$ e h^i devem ser cada uma isotrópica em relação aos seus argumentos.

Consistência termodinâmica:

A taxa de variação da energia livre, considerando seus argumentos é,

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{C}^e} \cdot \mathbf{C}^e + \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{B}^p} \cdot \mathbf{B}^p \quad (68)$$

Usando a simetria da derivada $\partial \bar{\psi} / \partial \mathbf{C}^e$ e considerando que o tensor \mathbf{D}^p é simétrico e desviador, mostra-se que,

$$\dot{\psi} = \left(2\mathbf{F}^e \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{C}^e} \mathbf{F}^{eT} \right) \cdot \mathbf{D}^e + 2\text{sym}_0 \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{B}^p} \mathbf{B}^p \right) \cdot \mathbf{D}^p \quad (69)$$

Substituindo este resultado na inequação de dissipação local chega-se à,

$$\left\{ \mathbf{F}^e \left(2 \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{C}^e} - \mathbf{J} \bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p) \right) \mathbf{F}^{eT} \right\} \cdot \mathbf{D}^e + \left\{ 2\text{sym}_0 \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{B}^p} \mathbf{B}^p \right) - \bar{\mathbf{T}}^p(\boldsymbol{\Theta}) \right\} \cdot \mathbf{D}^p \leq 0 \quad (70)$$

Essa inequação deve ser satisfeita para todos os valores de $\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p, \mathbf{D}^e, \boldsymbol{\xi}$ e \mathbf{D}^p admissíveis. Como \mathbf{D}^e aparece como um termo linear, seu coeficiente deve desaparecer, gerando o resultado,

$$\mathbf{T} = 2\mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}^e \left(\frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p)}{\partial \mathbf{C}^e} \right) \mathbf{F}^{eT} \quad (71)$$

Definindo o tensor denominado de *backstress*,

$$\mathbf{S}_{back} = 2\text{sym}_0 \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \mathbf{B}^p} \mathbf{B}^p \right) \quad (72)$$

Chega-se à desigualdade

$$\mathbf{Y}^p(\boldsymbol{\Theta}) \cdot \mathbf{D}^p \geq 0 \quad (73)$$

Onde, formula-se a seguinte equação,

$$\mathbf{Y}^p(\boldsymbol{\Theta}) = \bar{\mathbf{T}}^p(\boldsymbol{\Theta}) - \mathbf{S}_{back} = \mathbf{S}_0 - \mathbf{S}_{back} \quad (74)$$

Sendo que esta é a tensão originada pelo escoamento plástico, e que produz dissipação não negativa com \mathbf{D}^p , dessa maneira, por conveniência, transforma-se a tensão de Cauchy para a configuração

intermediária, obtendo um tensor conhecido como Segundo Tensor de Piola Kirchhoff na Configuração Intermediária:

$$\mathbf{T}^e = J\mathbf{F}^{e-1}\mathbf{T}\mathbf{F}^{e-T} = 2\frac{\partial\bar{\psi}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p)}{\partial\mathbf{C}^e} \quad (75)$$

De forma que, usando as equações 51, 52 e 53 tem-se,

$$\mathbf{T}^p = \mathbf{S}_0 = \text{sym}_0(\mathbf{C}^e\mathbf{T}^e) = 2\text{sim}_0\left(\mathbf{C}^e\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial\mathbf{C}^e}\right) \quad (76)$$

É importante notar a sutil diferencia que existe entre as transformações do tensor de Cauchy para a configuração intermediária, dadas por \mathbf{T}^e e \mathbf{S} .

4.1.6 PARTICULARIZAÇÃO PARA MATERIAIS AMORFOS

Com o objetivo de limitar o modelo para caso de materiais amorfos, o modelo utiliza uma energia livre da forma,

$$\bar{\psi}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p) = \psi^e(\mathbf{C}^e) + \psi^p(\mathbf{B}^p) \quad (77)$$

com,

$$\psi^p(\mathbf{B}^p) = \Psi(\lambda^p) \geq 0, \quad \Psi(1) = 0 \quad (78)$$

$$\lambda^p = \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{\text{tr}\mathbf{B}^p} = \frac{1}{\sqrt{3}}|\mathbf{V}^p| \quad (79)$$

O escalar λ^p define uma medida do estado de deformação plástica instantânea. Assim, usando as equações 75 e 77 se obtém,

$$\mathbf{T}^e = 2\frac{\partial\psi^e}{\partial\mathbf{C}^e} \quad (80)$$

$$\mathbf{S}_{back} = \mu\mathbf{B}_0^p, \quad \mu = \frac{1}{3\lambda^p}\frac{\partial\Psi}{\partial\lambda^p} \quad (81)$$

O escalar μ atua como um fator de proporcionalidade entre o tensor de deformação plástica e a tensão \mathbf{S}_{back} . Para finalizar, é preciso definir uma forma constitutiva para a tensão \mathbf{Y}^p provocada pelo fluxo plástico. Este modelo propõe a seguinte dependência:

$$\mathbf{Y}^p(\Theta) = \ell(\Lambda)|\mathbf{D}^p|^{m-1}\mathbf{D}^p, \quad 0 < m \leq 1 \quad (82)$$

Nesta equação busca-se separar a função $\ell(\Lambda) > 0$ dependente da lista de variáveis de estado $\Lambda = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p, \xi)$ da velocidade de deformação plástica mensurada pelo tensor \mathbf{D}^p . Substituindo esta equação constitutiva em 74, se tem a regra de fluxo,

$$\mathbf{S}_0 - \mu\mathbf{B}_0^p = \ell(\Lambda)|\mathbf{D}^p|^{m-1}\mathbf{D}^p \quad (83)$$

Para um expoente $m > 0$, esta regra de fluxo pode ser invertida, de maneira a se obter uma expressão explícita para o tensor \mathbf{D}^p na forma,

$$\mathbf{D}^p = k(\Lambda)|\mathbf{S}_0 - \mu\mathbf{B}_0^p|^{(1-m)/m}(\mathbf{S}_0 - \mu\mathbf{B}_0^p), \quad k(\Lambda) = \ell(\Lambda)^{-1/m} \quad (84)$$

Observações experimentais indicam que polímeros com uma resposta elástica pequena são bem representados com uma forma de energia livre quadrática em termos do tensor de deformação de Green-Lagrange, isto é,

$$\psi^e(\mathbf{C}^e) = G|\mathbf{E}_0^e|^2 + \frac{1}{2}K|\text{tr}\mathbf{E}^e|^2 \quad (85)$$

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^e - \mathbf{I}) \quad (86)$$

Onde, G e K são o módulo elástico de cisalhamento e volumétrico, respectivamente. Sendo assim, as partes esférica e desviadora de \mathbf{T}^e ficam,

$$\mathbf{T}_0^e = 2G\mathbf{E}_0^e, \quad \text{tr}\mathbf{T}^e = 3K\text{tr}\mathbf{E}^e \quad (87)$$

Por outro lado, se as deformações elásticas são suficientemente pequenas no sentido que,

$$\mathbf{U}^e \approx \mathbf{C}^e \approx \mathbf{I}, \quad \mathbf{F}^e \approx \mathbf{R}^e \quad (88)$$

Então, é válido igualar o tensor de Mandel \mathbf{S}_0 e o tensor \mathbf{T}_0^e e escrever,

$$\mathbf{S} \approx \mathbf{T}^e \approx \mathbf{R}^e \mathbf{T} \mathbf{R}^e \quad (89)$$

$$\mathbf{S}_0 \approx \mathbf{T}_0^e = 2G\mathbf{E}_0^e \quad (90)$$

$$\pi \approx -\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{T}^e \quad (91)$$

Sendo π a pressão hidrostática.

Como uma hipótese simplificativa da teoria, admite-se que a lista de variáveis de estado $\Lambda = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}^p, \xi)$ se reduz a $\Lambda = (\pi, \lambda^p, \eta, s)$ sendo s e η duas variáveis internas. A primeira representa a resistência intermolecular ao escoamento plástico. A segunda, η , é um parâmetro associado ao volume livre local, ou seja, o volume livre intermolecular existente em materiais amorfos. Este volume livre afeta a resistência ao fluxo e, portanto, a variável interna s . O modelo considera que a evolução dessas variáveis internas ocorre segundo funções diferenciais do tipo,

$$\dot{s} = h(\pi, \lambda^p, \eta, s, |\mathbf{D}^p|), \quad s(\mathbf{X}, 0) = s_0 \quad (92)$$

$$\dot{\eta} = g(\pi, \lambda^p, \eta, s, |\mathbf{D}^p|), \quad \eta(\mathbf{X}, 0) = 0 \quad (93)$$

A regra de fluxo plástico é, portanto, reescrita na forma,

$$\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p = \ell(\pi, \lambda^p, \eta, s) |\mathbf{D}^p|^{m-1} \mathbf{D}^p \quad (94)$$

Com a inversa dada por,

$$\mathbf{D}^p = k(\pi, \lambda^p, \eta, s) |\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p|^{(1-m)/m} (\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p) \quad (95)$$

Nota-se que o tensor \mathbf{D}^p é proporcional ao tensor $\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p$.

O parâmetro de material s_0 representa a resistência inicial ao escoamento. A função h pode tomar valores positivos (encruamento) ou negativos (amolecimento). O volume livre η tomado a partir de um valor inicial $\eta = 0$, para um estado virgem do material.

Para completar o modelo constitutivo para um caso particular de algum material amorfo é preciso identificar os seguintes parâmetros e funções: $\{G, K, \Psi, k, h, g, s_0\}$.

4.1.7 RESUMO DO MODELO

O modelo proposto pelos autores considera as seguintes variáveis:

Tensor de Cauchy: $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$

Gradiente da deformação: $\mathbf{F}, \det \mathbf{F} > 0$

Parte plástica do gradiente de deformação: $\mathbf{F}^p, \det \mathbf{F}^p = 0$

Resistência isotópica ao escoamento plástico: $s > 0$

Volume livre: η

Parte elástica do gradiente de deformação: $\bar{\mathbf{F}}^e = \mathbf{F}\mathbf{F}^p{}^{-1}, \det \bar{\mathbf{F}}^e > 0$

Tensor de Cauchy-Green à direita elástico: $\mathbf{C}^e = \bar{\mathbf{F}}^e{}^T \bar{\mathbf{F}}^e$

Deformação de Green-Lagrange: $\mathbf{E}^e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^e - \mathbf{I})$

Par conjugado à deformação elástica: $\mathbf{T}^e = \mathbf{R}^e{}^T \mathbf{T} \mathbf{R}^e$

Pressão: $\pi = -\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{T}^e$

Tensão desviadora: $\mathbf{T}_0^e = \mathbf{T}^e + \pi \mathbf{I}$

Tensor de Cauchy-Green à esquerda plástico: $\mathbf{B}^p = \mathbf{F}^p \mathbf{F}^p{}^T$

Parte desviadora de \mathbf{B}^p : $\mathbf{B}_0^p = \mathbf{B}^p - \frac{1}{3}(\text{tr} \mathbf{B}^p) \mathbf{I}$

Alongamento plástico efetivo: $\lambda^p = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\text{tr} \mathbf{B}_0^p}$

A partir destas, é possível calcular as seguintes grandezas:

1. Energia livre:

$$\psi = \psi^e + \psi^p \quad (96)$$

$$\psi^e = G |\mathbf{E}_0^e|^2 + \frac{1}{2} K |\text{tr} \mathbf{E}^e|^2 \quad (97)$$

$$\psi^p(\mathbf{B}^p) = \Psi(\lambda^p) \geq 0, \quad \Psi(1) = 0 \quad (98)$$

2. Tensor de tensão:

$$\mathbf{T}^e = 2G \mathbf{E}_0^e + (K \text{tr} \mathbf{T}^e) \mathbf{I} \quad (99)$$

3. Regra de fluxo:

A equação de evolução para \mathbf{F}^p ,

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p, \quad \mathbf{F}^p(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{I} \quad (100)$$

Com \mathbf{D}^p definido pela regra de fluxo,

$$\mathbf{D}^p = k(\pi, \lambda^p, \eta, s) |\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p|^{(1-m)/m} (\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p) \quad (101)$$

Onde,

$$\mu = \frac{1}{3\lambda^p} \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda^p} \quad (102)$$

4. Equações de evolução para as variáveis internas s e η :

$$\dot{s} = h(\pi, \lambda^p, \eta, s, |\mathbf{D}^p|), \quad s(\mathbf{X}, 0) = s_0 \quad (103)$$

$$\dot{\eta} = g(\pi, \lambda^p, \eta, s, |\mathbf{D}^p|), \quad \eta(\mathbf{X}, 0) = 0 \quad (104)$$

4.1.10 ESCOLHA DE FUNÇÕES PARA APLICAÇÃO EM UM SÓLIDO POLIMÉRICO AMORFO (POLICARBONATO)

Os autores especializam o modelo proposto para descrever o comportamento do policarbonato quando submetido a deformações em temperatura ambiente e pressão atmosférica. São propostas duas formas específicas para o potencial de Helmholtz plástico.

Para valores pequenos a moderados de λ^p , é adequado utilizar a expressão do modelo neo-Hookean,

$$\psi^p = \mu \frac{3}{2} \{(\lambda^p)^2 - 1\} \quad (105)$$

Com μ sendo o módulo de *backstress*.

Entretanto, para valores elevados de λ^p , considera-se o modelo de Langevin-inverso que assegura a representação do enrijecimento devido ao estiramento das cadeias poliméricas.

$$\psi^p = \mu_R \lambda_L^2 \left[\left(\frac{\lambda^p}{\lambda_L} \right) x + \ln \left(\frac{x}{\sinh x} \right) - \left(\frac{1}{\lambda_L} \right) y - \ln \left(\frac{y}{\sinh y} \right) \right] \quad (106)$$

$$x = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda^p}{\lambda_L} \right) \quad y = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_L} \right) \quad (107)$$

Onde \mathcal{L}^{-1} é a inversa da função de Langevin, definida como $\mathcal{L}(\circ) = \coth(\circ) - (\circ)^{-1}$. Essa segunda forma para ψ^p envolve dois parâmetros materiais: μ_R , e λ_L . Nesse caso, o módulo do *backstress* é dado por,

$$\mu = \mu_R \left(\frac{\lambda_L}{3\lambda^p} \right) \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda^p}{\lambda_L} \right) \quad (108)$$

Onde se observa que $\mu \rightarrow \infty$ se $\lambda^p \rightarrow \lambda_L$, como $\mathcal{L}^{-1}(z) \rightarrow \infty$ se $z \rightarrow 1$.

Para facilitar a notação, se introduz uma tensão de cisalhamento equivalente e uma taxa de deformação cisalhante plástica equivalente, dadas por, respectivamente,

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\sqrt{2}} |\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p| \quad (109)$$

$$\nu^p = \sqrt{2} |\mathbf{D}_0^p| \quad (110)$$

Para definir a função ℓ são usados dois novos parâmetros de material: a taxa de deformação cisalhante plástica de referência ν_0 e um parâmetro de sensibilidade à pressão α . Denotando a constante

$$C = \sqrt{2} (\sqrt{2}/\nu_0)^m \quad (111)$$

Propõe-se a seguinte forma para ℓ

$$\ell(\pi, \lambda^p, \eta, s) = C(s + \alpha\pi) > 0 \quad (112)$$

Então, após movimentação algébrica,

$$\mathbf{D}^p = \nu^p \left(\frac{\mathbf{T}_0^e - \mu \mathbf{B}_0^p}{2\bar{\tau}} \right) \quad (113)$$

$$\nu^p = \nu_0 \left(\frac{\bar{\tau}}{s + \alpha\pi} \right)^{1/m} \quad (114)$$

Finalmente define-se a forma das equações de evolução das variáveis internas s e η :

$$\dot{s} = h_0 \left(1 - \frac{s}{\bar{s}(\eta)}\right) v^p \quad (115)$$

$$\dot{\eta} = g_0 \left(\frac{s}{s_{cv}} - 1\right) v^p \quad (116)$$

$$\bar{s}(\eta) = s_{cv}[1 + b(\eta_{cv} - \eta)] \quad (117)$$

Onde $\{h_0, g_0, s_{cv}, b, \eta_{cv}\}$ são parâmetros materiais. A solução do sistema acoplado satisfaz os seguintes limites,

$$s \rightarrow s_{cv} \quad (118)$$

$$\eta \rightarrow \eta_{cv} \quad (119)$$

Conforme,

$$t \rightarrow \infty \quad (120)$$

As condições iniciais são $s = s_0$ e $\eta = 0$, com,

$$s_0 \leq s \leq s_{cv}(1 + b\eta_{cv}) \quad (121)$$

Consegue-se observar que η cresce monotonicamente até seu valor de equilíbrio η_{cv} , enquanto s cresce monotonicamente até um pico e depois decresce monotonicamente para seu valor de equilíbrio s_{cv} , onde se captura assim o pico de escoamento observado na resistência ao escoamento.

Os comportamentos descritos para o volume livre η e a resistência ao escoamento s podem ser vistos nas Figuras 8 e 9, respectivamente.

Para o modelo constitutivo conseguir representar o comportamento previsto é necessário fazer o ajuste dos parâmetros materiais. Os parâmetros a serem determinados são:

1. Os módulos elásticos de cisalhamento e volumétrico (G, K) , respectivamente, na parte elástica da energia livre.
2. O parâmetro μ na formulação do neo-Hookean, ou os parâmetros (μ_R, λ_L) na formulação da função inversa de Langevin, na parte plástica da energia livre.

3. Os parâmetros $\{v_0, m, \alpha, h_0, g_0, s_{cv}, b, \eta_{cv}, s_0\}$ na regra de fluxo e nas equações de evolução para (s, η) .

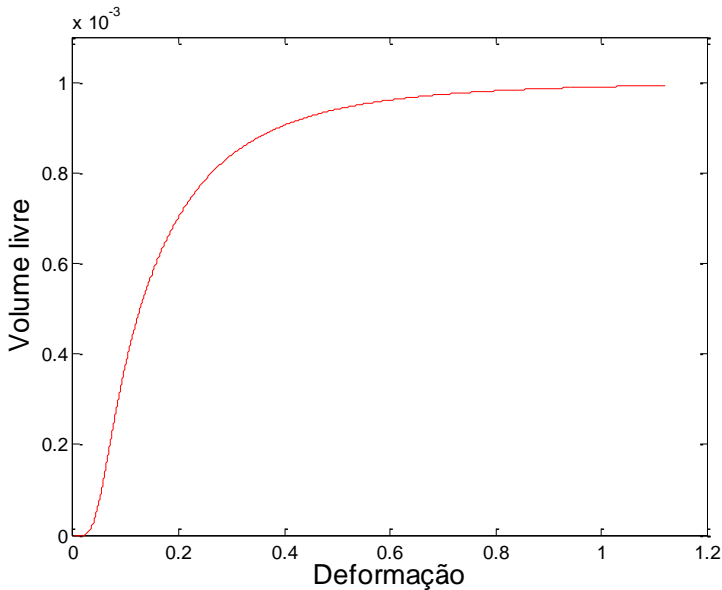


Figura 8 - Variação do volume livre η ao longo da deformação.

Os autores sugerem que os valores de (G, K) podem ser determinados medindo-se o módulo de Young e a razão de Poisson do material em um experimento de compressão e utilizando relações de conversão de elasticidade isotrópica para obter os módulos elásticos de cisalhamento e volumétrico. Os parâmetros $\{v_0, m\}$ são estimados em um experimento de compressão com variações na taxa de compressão, e o parâmetro de sensibilidade a pressão α é estimado a partir de experimentos de compressão sob pressões hidrostáticas superpostas. Já os parâmetros $\{h_0, g_0, s_{cv}, b, \eta_{cv}, s_0\}$ e (μ_R, λ_L) podem ser obtidos ao se ajustar uma curva apropriada de tensão-deformação em compressão para grandes deformações. Uma vez estimado os valores de (μ_R, λ_L) o valor de μ na formulação de neo-Hookean para ψ^p pode ser facilmente obtido fazendo-se $\lambda^p = 1$.

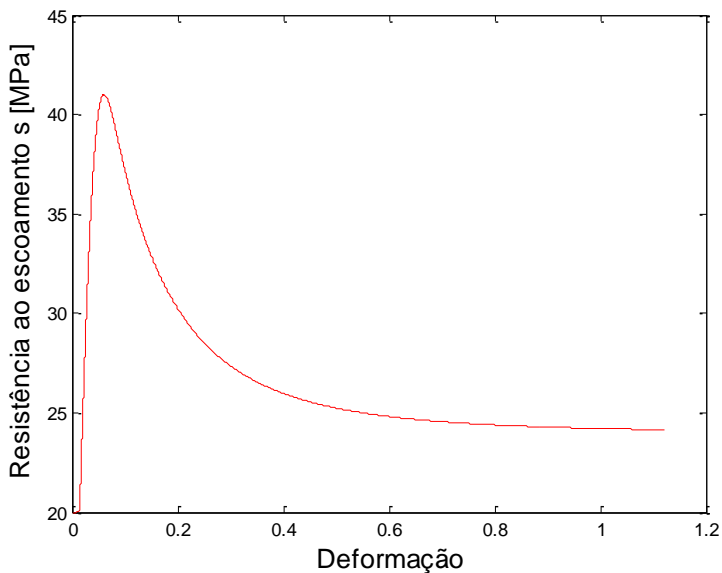


Figura 9 - Variação da resistência ao escoamento s ao longo da deformação.

Os valores dos parâmetros utilizados neste trabalho foram os mesmos testados em Anand *et al.*, 2003, sendo eles,

$$\begin{aligned}
 G &= 0,857 \text{ GPa} \\
 K &= 2,24 \text{ GPa} \\
 \mu_R &= 11,0 \text{ MPa} \\
 \lambda_L &= 1,45 \\
 \nu_0 &= 0,0017 \text{ s}^{-1} \\
 m &= 0,011 \\
 \alpha &= 0,08 \\
 h_0 &= 2,75 \text{ GPa} \\
 g_0 &= 6,0 \times 10^{-3} \\
 s_{cv} &= 24,0 \text{ MPa} \\
 b &= 825 \\
 \eta_{cv} &= 0,001 \\
 s_0 &= 20,0 \text{ MPa} \\
 \mu &= 16,95 \text{ MPa}
 \end{aligned}$$

Para efeitos de análise de comportamento do modelo e de sensibilidade da resposta ao valor dos seus parâmetros de material, foi implementado uma versão incremental do modelo baseada em Integração Explícita de Euler. Esta integração define o seguinte algoritmo constitutivo incremental:

Dado o estado no instante t_n caracterizado pelas variáveis de estado $\{\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^p, s_n, \eta_n, \pi_n\}$, calcula-se,

Pela decomposição de Kroner-Lee,

$$\mathbf{F}_n^e = \mathbf{F}_n^{p-1} \mathbf{F}_n \quad (122)$$

$$\mathbf{C}_n^e = \mathbf{F}_n^{eT} \mathbf{F}_n^e \quad (123)$$

$$\mathbf{U}_n^e = \sqrt{\mathbf{C}_n^e} \quad (124)$$

Pela decomposição polar,

$$\mathbf{R}_n^e = \mathbf{F}_n^e \mathbf{U}_n^{e-1} \quad (125)$$

O tensor de deformação de Green-St. Venant elástico e sua parte desviadora,

$$\mathbf{E}_n^e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_n^e - \mathbf{I}) \quad (126)$$

$$\mathbf{E}_{n0}^e = \mathbf{E}_n^e - \frac{1}{3}(\text{tr} \mathbf{E}_n^e) \mathbf{I} \quad (127)$$

A parcela elástica do tensor de tensão de Cauchy e sua parte desviadora,

$$\mathbf{T}_n^e = 2G\mathbf{E}_{n0}^e + K(\text{tr} \mathbf{E}_n^e) \mathbf{I} \quad (128)$$

$$\mathbf{T}_{0n}^e = \mathbf{T}_n^e - \frac{1}{3}(\text{tr} \mathbf{T}_n^e) \mathbf{I} \quad (129)$$

A tensão de Cauchy,

$$\mathbf{T}_n = \mathbf{R}_n^e \mathbf{T}_{0n}^e \mathbf{R}_n^{eT} \quad (130)$$

O tensor plástico, sua parte desviadora, tensão de backstress

$$\mathbf{B}_n^p = \mathbf{F}_n^p \mathbf{F}_n^{pT} \quad (131)$$

$$\mathbf{B}_{0n}^e = \mathbf{B}_n^e - \frac{1}{3}(\text{tr} \mathbf{B}_n^e) \mathbf{I} \quad (132)$$

$$\mathbf{Z}_n = \mathbf{T}_n^e - \mu \mathbf{B}_n^p \quad (133)$$

$$\bar{\tau}_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \mathbf{T}_{0n}^e - \mu \mathbf{B}_{0n}^p \right| \quad (134)$$

$$v_n^p = v_0 \left(\frac{\bar{\tau}_n}{s_n + \alpha \pi_n} \right)^{1/m} \quad (135)$$

$$\mathbf{D}_n^p = \frac{v_n^p \bar{\tau}_n^{(1-m)/m}}{2(s_n + \alpha \pi_n)^{1/m}} \mathbf{Z}_n \quad (136)$$

$$\tilde{s}_n(\eta_n) = s_{cv} [1 + b(\eta_{cv} - \eta_n)] \quad (137)$$

Sendo os incrementos das variáveis,

$$\Delta \mathbf{D}^p = \Delta t \frac{v_n^p}{2\bar{\tau}_n} \mathbf{Z}_n \quad (138)$$

$$\Delta s = \Delta t h_0 \left(1 - \frac{s_n}{\tilde{s}_n(\eta_n)} \right) v_n^p \quad (139)$$

$$\Delta \eta = \Delta t g_0 \left(\frac{s_n}{s_{cv}} - 1 \right) v_n^p \quad (140)$$

Para a evolução do gradiente de deformação plástico \mathbf{F}^p utiliza-se o mapeamento exponencial,

$$\mathbf{F}_{n+1}^p = \exp(\Delta \mathbf{D}^p \mathbf{F}_n^p) \quad (141)$$

$$s_{n+1} = s_n + \Delta s \quad (142)$$

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \Delta \eta \quad (143)$$

E assim dá-se um passo na integração numérica explícita, avançando para $n + 1$, e reiterando o loop para cada novo passo.

A Figura 10 mostra uma curva tensão por deformação obtida utilizando o modelo constitutivo apresentado e o respectivo código em *Matlab*. A simulação procura representar um corpo sendo submetido a uma tração simples em um único eixo, para tanto é aplicado um gradiente de deformação com a seguinte forma,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 + c & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1 + c}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1 + c}} \end{bmatrix}$$

Onde c representa o alongamento sofrido pelo corpo a cada instante de tempo t . Percebe-se que o $\det \mathbf{F} = 1$ para todo t , ou seja, o corpo está sempre submetido a uma deformação isocórica. No gráfico nota-se uma região inicial aproximadamente linear, sendo que logo após esta a curva tensão deformação apresenta um comportamento altamente não linear. Atinge-se um pico na tensão, o qual é logo seguido de um amolecimento do material, antes do mesmo começar a encruar novamente à medida que se deforma plasticamente.

Na Figura 9 há duas curvas sobrepostas, sendo que uma representa o modelo constitutivo quando utilizado o formato de neo-Hookean para o valor de μ (linha pontilhada) e outra para o modelo constitutivo quando se utiliza o formato da função inversa de Langevin para o parâmetro μ (linha contínua).

Nota-se que para o formato de neo-Hookean, após o pico na tensão, a região de encruamento segue um comportamento quase linear crescente. Já para o formato da função inversa de Langevin a curva apresenta um comportamento de crescimento logaritmo para a região de encruamento.

Todas as curvas de tensão versus deformação mostradas nessa seção 4.1 se referem à componente de tensão $\mathbf{T}(1,1)$ do tensor de Cauchy e à componente de deformação $\mathbf{E}(1,1)$ do tensor de Green-St. Venant.

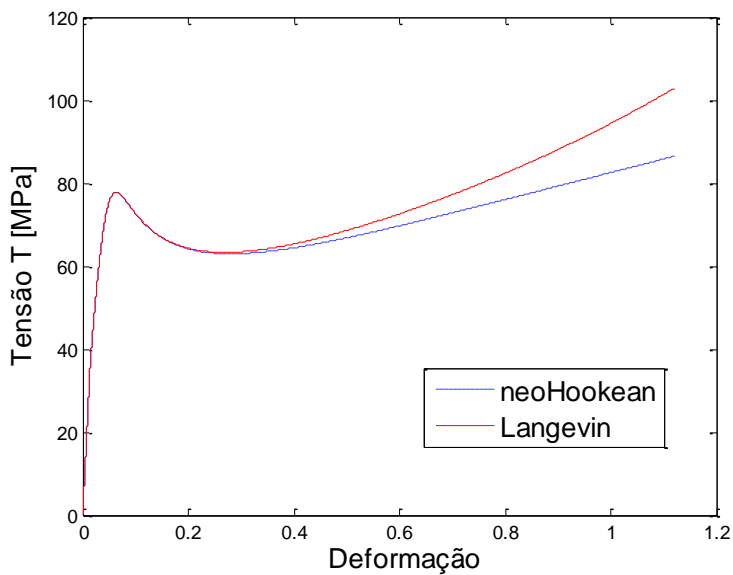


Figura 10 - Tensão versus deformação para diferentes formulações de μ .

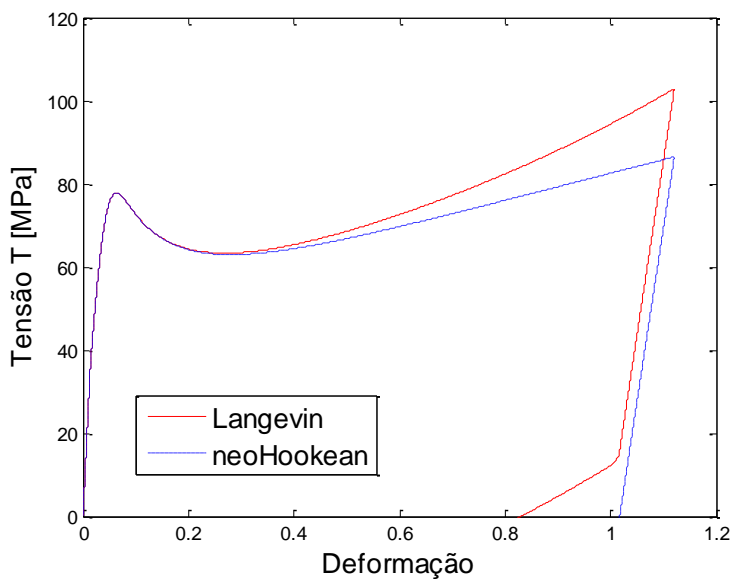


Figura 11 - Tensão versus deformação para diferentes formulações de μ , com descarregamento da carga.

A Figura 11 retrata as curvas de tensão por deformação obtidas utilizando o mesmo código implementado com o modelo constitutivo, utiliza-se também um gradiente de deformação F isocórico que visa tracionar o corpo em uma direção. Porém, nessa simulação houve um descarregamento da carga até se atingir um valor de tensão nulo. Novamente observa-se duas curvas sobrepostas, uma para o formato de neo-Hookean (linha pontilhada) e outra para a função inversa de Langevin (Linha contínua). A simulação exibe um escoamento reverso quando descarregado devido ao desenvolvimento do *backstress*.

A Figura 12 mostra uma curva experimental obtido realizando um ensaio de compressão simples em um corpo de prova de policarbonato. O experimento se deu até um nível de deformação de 0.9 e depois descarregado até tensão nula. Observa-se claramente o escoamento reverso dado por um *backstress*, o que confirma os resultados obtidos pela simulação.

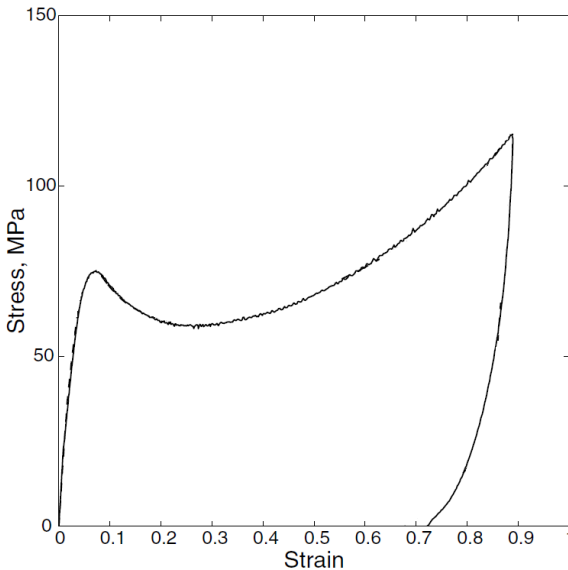


Figura 12 - Curva tensão por deformação para policarbonato em um ensaio de compressão simples. Adaptado de Anand *et al*, (2003).

4.1.11 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO MODELO AOS SEUS PARÂMETROS DE CONTROLE

De modo a se tentar entender melhor como o modelo se comporta se escolheu alguns parâmetros materiais do mesmo e faz-se uma pequena variação em cima dos valores originais desses parâmetros seleccionados. Dessa maneira, realiza-se uma análise de sensibilidade, onde se analisa também como estão inseridos esses parâmetros no modelo reológico. O intuito de realizar essa análise de sensibilidade é de se tentar visualizar como cada um desses parâmetros influi em certas características peculiares sobre a curva tensão versus deformação.

Na Figura 13 se observa como a variação do parâmetro μ_R afeta a resposta do encruamento nas curvas de tensão versus deformação. O valor original da variável no modelo é $\mu_R = 11 \text{ MPa}$, assim, faz-se uma variação acima e abaixo desse valor.. Sua dependência explícita se dá na parcela plástica da energia livre na forma com a função de Langevin, atuando assim na regra de fluxo.

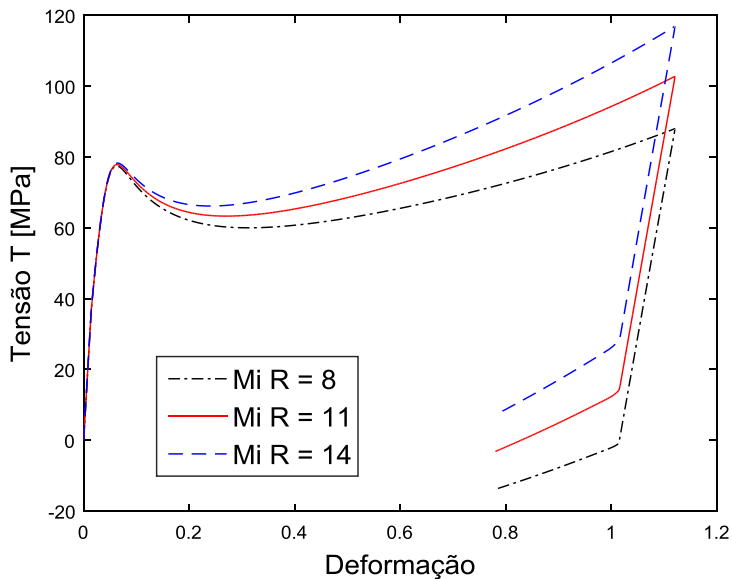


Figura 13 – Curva tensão versus deformação para o polycarbonato, com variação do parâmetro *rubbery modulus* μ_R .

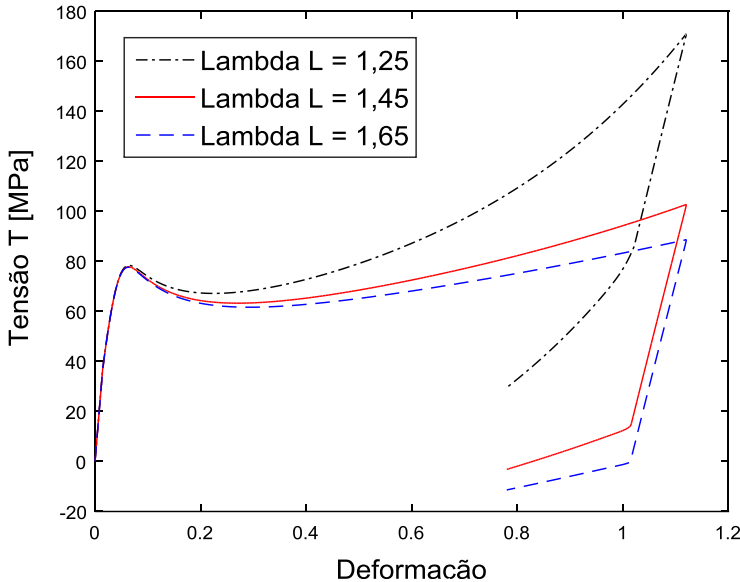


Figura 14 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro *network locking stretch* λ_L .

Já a Figura 14 mostra como a variação do parâmetro λ_L consegue alterar a resposta que o modelo apresenta nas curvas de tensão versus deformação. A função de Langevin possui um comportamento particular, apresenta valores baixos até se atingir um determinado valor no seu argumento quando começa a apresentar um crescimento quase assintótico na vertical. Portanto, insere-se essa função no modelo para atuar de maneira a garantir que o modelo não possa deformar indefinidamente. O valor original do alongamento de saturação $\lambda_L = 1,45$. Ao diminuir este valor, as tensões aumentam rapidamente ao se acercar ao novo valor de alongamento. Já ao aumentar este parâmetro, o impacto sobre a curva de encruamento é menor.

A Figura 15 mostra a resposta ao parâmetro ν_0 , que consegue transladar muito sutilmente a curva. Com valores mais elevados de ν_0 a curva tende a se deslocar para baixo. Já na Figura 15 observa-se que o expoente m que atua sobre a taxa de deformação plástica consegue fazer com que a curva sofra uma translação vertical na faixa de deformação indo desde o pico de escoamento até o início do descarregamento. À medida que o valor de m aumenta, aumenta a dependência com a taxa de deformação e as tensões sofrem um aumento.

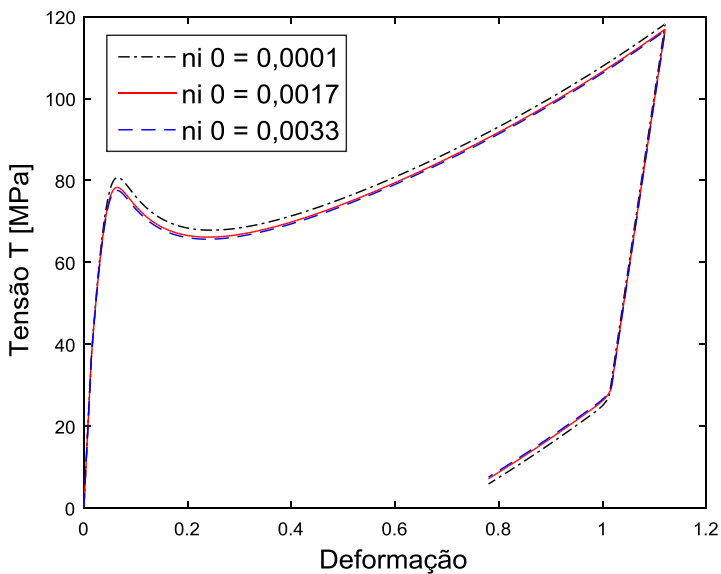


Figura 15 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro ν_0 .

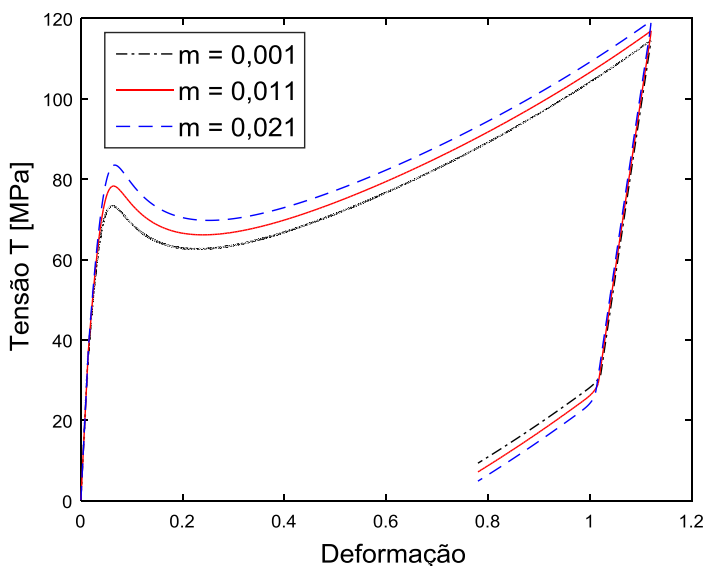


Figura 16 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro m .

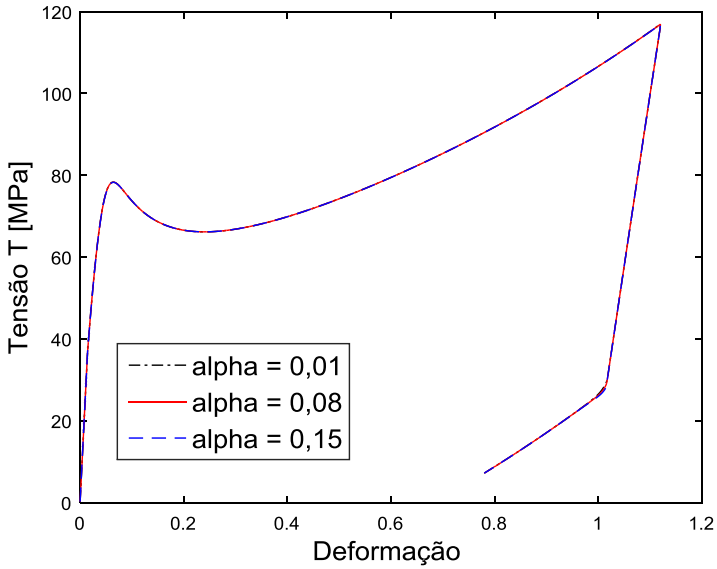


Figura 17 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro α .

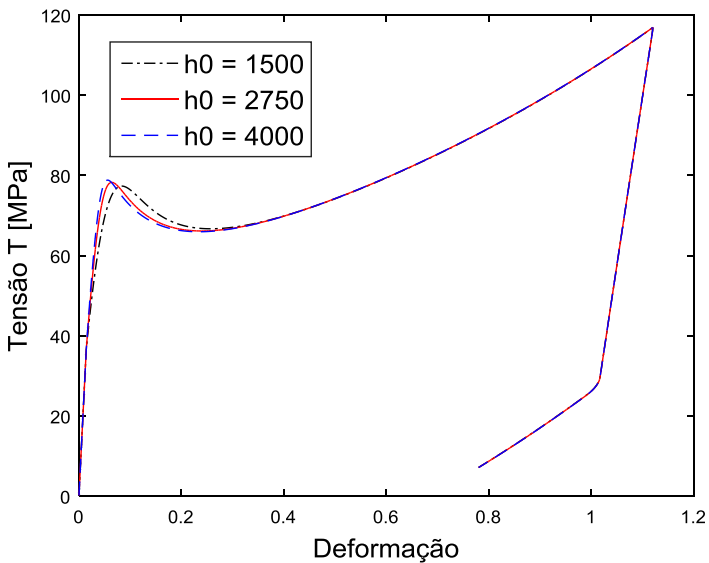


Figura 18 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro h_0 .

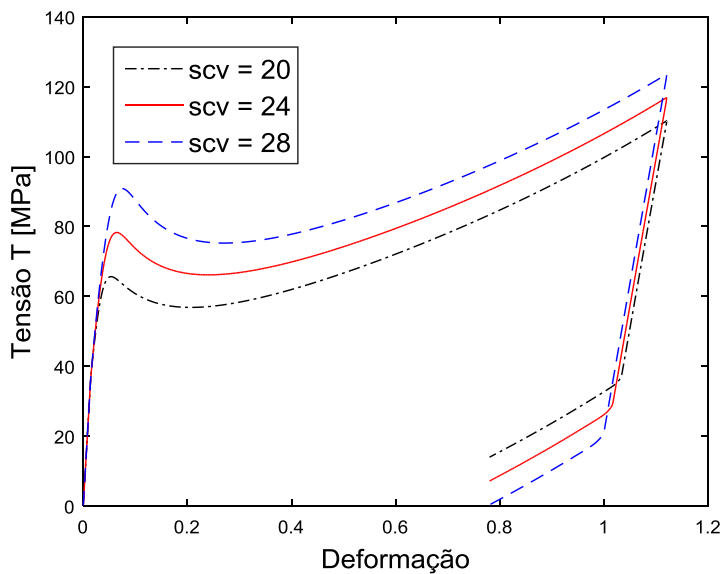


Figura 19 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro s_{cv} .

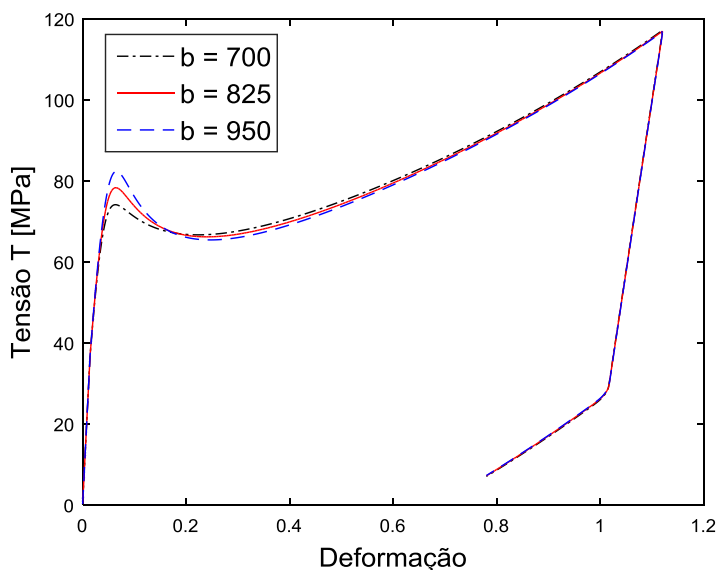


Figura 20 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro b .

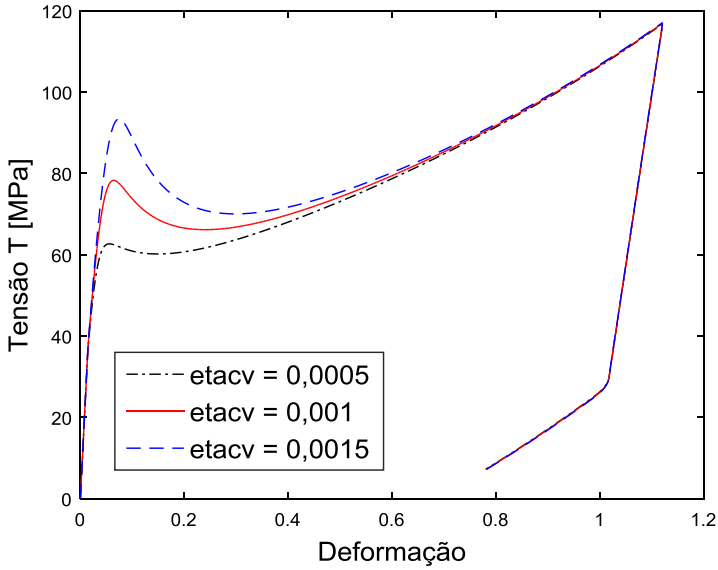


Figura 21 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro η_{cv} .

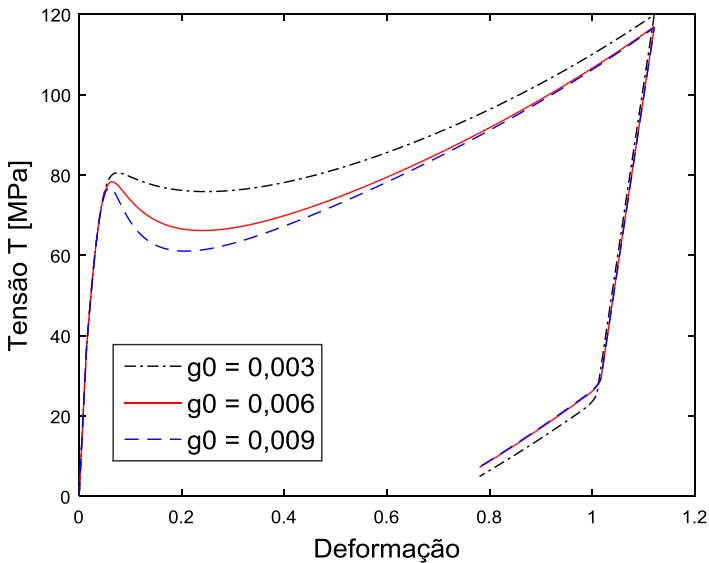


Figura 22 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro g_0 .

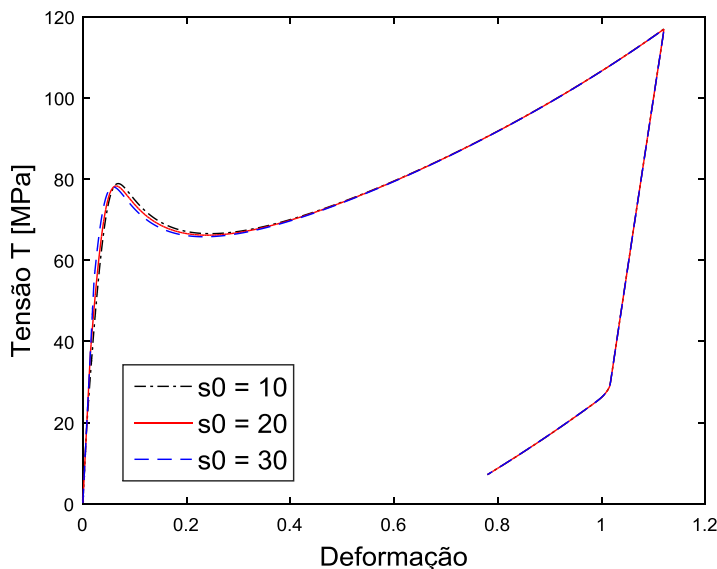


Figura 23 – Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro s_0 .

Na Figura 17 percebe-se que o parâmetro α , não exerce nenhuma influência significativa sobre a curva, ou seja, variando-se α a curva não sofre alterações visuais perceptíveis. Na Figura 18 percebe-se que o parâmetro h_0 consegue realizar um deslocamento lateral do pico de escoamento, porém, muito levemente, quanto menor o valor de h_0 mais para a direita o pico se encontra. A Figura 19 mostra que o parâmetro s_{cv} translada verticalmente a curva na região a partir do pico de escoamento, aumentando-se o valor de s_{cv} essa faixa é deslocada para cima. Para o m também se observa esse comportamento, porém, nesse caso a sensibilidade é mais acentuada.

A Figura 20 mostra a influência do parâmetro b , este possui uma característica interessante, ele não altera de maneira significativa a deformação onde ocorre o pico de deformação, porém, ele altera o valor da tensão do pico. Para valores maiores de b a tensão atinge valores mais elevados. Na Figura 21 observa-se que o parâmetro η_{cv} também altera a magnitude do valor de tensão do pico de escoamento, quando de aumenta η_{cv} o valor do pico tende a crescer, e essa influência é desse parâmetro é maior do que de b .

A influência do parâmetro g_0 pode ser vista na Figura 22, percebe-se um efeito peculiar desse parâmetro sobre a curva tensão

versus deformação, variando-se o valor de g_0 consegue acentuar ou atenuar a não linearidade presente após o pico de escoamento. À medida que os valores de g_0 aumentam a curva tende a apresentar um comportamento cada vez mais linear na região seguinte ao pico. Na Figura 23 nota-se que o parâmetro s_0 não possui nenhuma influência muito significativa sobre o comportamento da curva tensão versus deformação, ou seja, sua variação altera muito pouco as características da curva.

4.2 MODELO DE ANAND E AMES 2006

4.2.1 INTRODUÇÃO

Embora o modelo anteriormente estudado é capaz de reproduzir a resposta de polímeros amorfos quando submetidos a grandes deformações elásticas viscoplásticas de uma maneira razoavelmente aceitável, apresenta dificuldades em prever a resposta viscoelástica não linear desses materiais para níveis de tensão menores que a tensão que os autores denominam de “macroescoamento” a tensão máxima de resistência anterior a um amolecimento local, frequentemente descrita como tensão limite de escoamento.

O trabalho desenvolvido por Anand e Ames (2006) busca manter a capacidade de reprodução dos efeitos de grandes deformações inelásticas observadas após este pico, mas ao mesmo tempo poder reproduzir os efeitos observados com estes materiais nas regiões anteriores a ele, com comportamentos clássicos de viscoelasticidade.

O novo modelo (ou a versão melhorada do anterior) é baseado no modelo reológico generalizado de Kelvin-Voigt de viscoelasticidade linear clássica. Recordar-se que o elemento de Kelvin-Voigt de viscoelasticidade linear consiste de uma mola e um amortecedor arranjado em paralelo, e a cadeia generalizada de Kelvin-Voigt consiste de diversos desses arranjos colocados em série. Tais modelos conseguem representar de maneira razoável vários aspectos da viscoelasticidade linear de materiais poliméricos. Sendo assim, Anand e Ames buscaram estender o modelo clássico generalizado de Kelvin-Voigt para a ordem de deformações finitas não lineares, e também levar em conta o encruamento sofrido devido ao alinhamento da rede de macromoléculas quando submetida a grandes deformações, seguindo Haward e Thackray (1968). O modelo reológico que configura uma adaptação do modelo anterior está exposto na Figura 24.

É bem conhecido que a resposta de materiais poliméricos é altamente dependente da temperatura. Contudo, o trabalho desenvolvido por Anand e Ames restringe-se a atenção na formulação de um modelo para situações isotérmicas abaixo da temperatura de transição vítrea desses materiais.

4.2.2 GENERALIZAÇÃO DO MODELO CONSTITUTIVO TRIDIMENSIONAL

Os autores propõem um modelo com dois braços A e B dispostos em paralelo. No braço A há $(N + 1)$ elementos Kelvin-Voig representando os micromecanismos inelásticos que são arranjados em série juntos com um elemento de mola. No braço B há uma única mola não linear de Langevin.

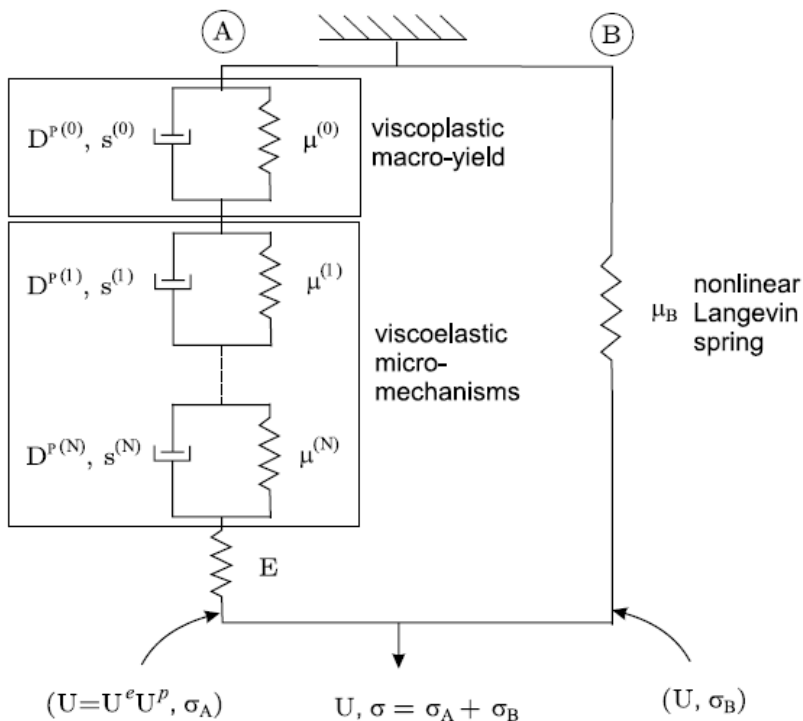


Figura 24 - Representação unidimensional reológica do modelo constitutivo proposto. Nota-se que nenhuma das molas apresentadas, ou os amortecedores são lineares.

Da lista de $\alpha = 0, \dots, N$ micromecanismos inelásticos, escolhe-se o micromecanismo indexado por $\alpha = 0$ para representar a resposta que domina o escoamento inelástico macroscópico próprio de tensões elevadas, enquanto os micromecanismos indexados por $\alpha = 1, \dots, N$ são escolhidos para representar os detalhes mais finos da resposta

viscoelástica não linear para tensões baixas ou moderadas. O braço A admite a decomposição de Kröner-Lee,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (144)$$

Onde o gradiente de deformação \mathbf{F} é separado em parcelas elástica e viscoplástica, \mathbf{F}^e e \mathbf{F}^p , respectivamente.

Da mesma forma que no primeiro modelo, o tensor de spin plástico seja identicamente nulo, $\mathbf{W}^p = \mathbf{0}$, tal que,

$$\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} = \mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p \quad (145)$$

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{D}^{pT} \quad (146)$$

$$\text{tr} \mathbf{D}^p = 0 \quad (147)$$

Entretanto, partindo-se de teorias anteriores para materiais poliméricos, admite-se que. \mathbf{D}^p é dado pela soma de $(N + 1)$ micromecanismos, tal que,

$$\mathbf{D}^p = \sum_{\alpha=0}^N \mathbf{D}^{p(\alpha)} = \sum_{\alpha=0}^N v^{(\alpha)} \mathbf{N}^{p(\alpha)} \quad (148)$$

$$\text{tr} \mathbf{N}^{p(\alpha)} = 0 \quad (149)$$

$$|\mathbf{N}^{p(\alpha)}| = 1 \quad (151)$$

$$v^{(\alpha)} \geq 0 \quad (152)$$

Onde os tensores simétricos e deviatóricos $\mathbf{N}^{p(\alpha)}$ com norma unitária denotam direções do escoamento plástico para cada micromecanismo, e $v^{(\alpha)}$ as associadas taxas escalares de escoamento. Desta forma, se introduzem conjuntos de variáveis internas para descrever o comportamento dissipativo do modelo. Define-se uma lista de $(N + 1)$ campos escalares,

$$\mathbf{s} = (s^{(0)}, s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N)}) \quad (153)$$

Que representam a resistência molecular ao escoamento plástico de cada micromecanismo inelástico, e outra lista de $(N + 1)$ campos tensoriais simétricos,

$$\mathcal{A} = (\mathbf{A}^{(0)}, \mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{A}^{(2)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)}) \quad (154)$$

Que representam uma medida da deformação de cada micromecanismo. Estes tensores mapeiam vetores na configuração relaxada para vetores na mesma configuração. Finalmente incorpora-se também uma variável interna adimensional escalar η que representa o volume livre local. Estas variáveis internas estão relacionadas com as outras variáveis de estado listadas a seguir:

Densidade de energia livre por unidade de volume na configuração relaxada: ψ

Tensão de Cauchy: \mathbf{T} , $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$

Gradiente da deformação: \mathbf{F} , $J = \det \mathbf{F} > 0$

Parcela plástica do gradiente da deformação: \mathbf{F}^p , $\det \mathbf{F}^p = 1$

Parcela elástica do gradiente da deformação: $\mathbf{F}^e = \mathbf{F} \mathbf{F}^p{}^{-1}$ $\det \mathbf{F}^e > 0$

Decomposição polar de \mathbf{F}^e : $\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e$

Decomposição espectral de \mathbf{U}^e : $\mathbf{U}^e = \sum_{\beta=1}^3 \lambda_{\beta}^e \mathbf{r}_{\beta} \otimes \mathbf{r}_{\beta}$

Deformação elástica logarítmica: $\mathbf{E}^e = \sum_{\beta=1}^3 (\ln \lambda_{\beta}^e) \mathbf{r}_{\beta} \otimes \mathbf{r}_{\beta}$

Parte distorcional de \mathbf{F} : $\mathbf{F}^* = J^{-1/3} \mathbf{F}$

Tensor de Cauchy-Green à direita correspondente à \mathbf{F}^* : $\mathbf{C}^* = \mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^*$

Tensor de Cauchy-Green à esquerda correspondente à \mathbf{F}^* : $\mathbf{B}^* = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^{*T}$

Variáveis internas tensoriais simétricas: $\mathcal{A} = (\mathbf{A}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)})$

$$\mathbf{A}^{(\alpha)} = \mathbf{A}^{(\alpha)T}$$

Variáveis internas escalares: $\mathbf{s} = (s^{(0)}, \dots, s^{(N)})$

$$s^{(\alpha)} > 0$$

Volume livre: η

A Energia livre é definida como

$$\psi = \psi^e(\mathbf{E}^e) + \Psi(\mathbf{C}^*) + \sum_{\alpha=0}^N \xi^{(\alpha)}(\mathbf{A}^{(\alpha)}, \eta) \quad (155)$$

Onde,

$$\psi^e = G |\mathbf{E}_0^e|^2 + \frac{1}{2} K |tr \mathbf{E}^e|^2 \quad (156)$$

Corresponde a energia acumulada na mola elástica do braço A, com módulos volumétrico e cisalhante $G > 0$ e $K > 0$ respectivamente. A contribuição $\Psi(\mathbf{C}^*)$ corresponde ao acúmulo energético na mola de Langevin, tendo como argumento um alongamento (distorcional) equivalente,

$$\bar{\lambda} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\text{tr} \mathbf{C}^*} \quad (157)$$

De maneira que a energia adota a forma,

$$\Psi = \mu_R \lambda_L^2 \left[\left(\frac{\bar{\lambda}}{\lambda_L} \right) x + \ln \left(\frac{x}{\sinh x} \right) - \left(\frac{1}{\lambda_L} \right) y - \ln \left(\frac{y}{\sinh y} \right) \right] \quad (158)$$

Sendo,

$$x = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\bar{\lambda}}{\lambda_L} \right) \quad (159)$$

$$y = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_L} \right) \quad (160)$$

E \mathcal{L}^{-1} é a inversa da função de Langevin, $\mathcal{L}(\circ) = \text{coth}(\circ) - (\circ)^{-1}$. O parâmetro material μ_R é chamado de *módulo elastomérico*, e λ_L é chamado de alongamento de travamento da rede (*network locking stretch*).

Finalmente, as energias acumuladas em cada um dos micromecanismos $\xi^{(\alpha)}(\mathbf{A}^{(\alpha)}, \eta)$ utiliza os alongamentos efetivos,

$$\lambda^\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\text{tr} \mathbf{A}^{(\alpha)}} \quad (161)$$

E adota-se a forma simples de tipo neo-Hookean,

$$\xi^{(\alpha)} = \mu^{(\alpha)} \frac{3}{2} \left\{ (\lambda^{(\alpha)})^2 - 1 \right\} \quad (162)$$

Com um módulo elástico denominado de módulo de *backstress* dependente da variável volume livre local,

$$\mu^{(\alpha)} = \hat{\mu}^{(\alpha)}(\eta), \quad \alpha = 0, \dots, N \quad (163)$$

A tensão, da mesma forma que no caso anterior, é dada pela contribuição de cada braço:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_A + \mathbf{T}_B \quad (164)$$

No braço A, a tensão é definida por uma lei linear do tensor de deformação elástica logarítmica \mathbf{E}^e ,

$$\mathbf{T}_A = J^{-1} \mathbf{R}^e (\mathbf{S}_A^e) \mathbf{R}^{eT} \quad (165)$$

Sendo,

$$\mathbf{S}_A^e = 2G\mathbf{E}_0^e + K(\text{tr}\mathbf{E}^e)\mathbf{I} \quad (166)$$

Enquanto no braço B, o modelo de Langevin impõe um limite para as deformações isocóricas totais:

$$\mathbf{T}_B = J^{-1} \mu_B \mathbf{B}_0^* \quad (167)$$

Com,

$$\mu_B = \mu_R \left(\frac{\lambda_L}{3\bar{\lambda}} \right) \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\bar{\lambda}}{\lambda_L} \right) \quad (168)$$

Deve-se observar que cada modelo de micromecanismo contribui na formação de uma tensão vinculada chamada de *backstress*,

$$\mathbf{S}_{back}^{(\alpha)} = \mu^{(\alpha)} \mathbf{A}^{(\alpha)}, \quad \alpha = 0, \dots, N \quad (169)$$

Que tem influência na taxa de fluxo inelástico \mathbf{D}^p e consequentemente na deformação inelástica \mathbf{F}^p mediante as equações cinemáticas

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p \quad (170)$$

$$\mathbf{F}^p(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{I} \quad (171)$$

O tensor de fluxo \mathbf{D}^p é formado pela contribuição dos alongamentos de cada micromecanismo mediante a lei de fluxo,

$$\mathbf{D}^p = \sum_{\alpha=0}^N \nu^{(\alpha)} \left(\frac{(\mathbf{S}_A^e)_0 - (\mathbf{S}_{back}^{(\alpha)})_0}{2\bar{\tau}^{(\alpha)}} \right) \quad (172)$$

$$\nu^{(\alpha)} = \nu_0 \left(\frac{\bar{\tau}^{(\alpha)}}{s^{(\alpha)} + \alpha_p \pi} \right)^{\frac{1}{m^{(\alpha)}}} \quad (173)$$

Onde,

$$\bar{\tau}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| (\mathbf{S}_A^e)_0 - (\mathbf{S}_{back}^{(\alpha)})_0 \right| \quad (174)$$

É uma medida de tensão de cisalhamento equivalente para cada micromecanismo, e,

$$\pi = -\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{S}_A^e \quad (175)$$

E uma medida da pressão média normal. A quantidade $\nu^{(\alpha)}$ pode ser considerada como uma taxa de deformação plástica cisalhante equivalente para o α -ésimo micromecanismo é tomada em uma forma de lei de potência, onde $\nu_0 > 0$ é uma taxa de deformação cisalhante de referência. O parâmetro $0 < m^{(\alpha)} \leq 1$ permite ajustar o nível de sensibilidade à taxa de deformação. Quando $m^\alpha \rightarrow 0$ se atinge o caso de comportamento plástico, isto é, independência da taxa de deformação. No caso contrário, se $m^\alpha = 1$ se recupera um modelo de viscosidade linear.

As medidas tensoriais de deformação inelástica $\mathbf{A}^{(\alpha)}$ seguem, segundo os autores, a seguinte equação diferencial como proposta de evolução:

$$\dot{\mathbf{A}}^{(\alpha)} = \mathbf{D}^{p(\alpha)} \mathbf{A}^{(\alpha)} + \mathbf{A}^{(\alpha)} \mathbf{D}^{p(\alpha)} \quad (176)$$

$$\mathbf{A}^{(\alpha)}(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{I} \quad (177)$$

Finalmente, a resistência ao fluxo do primeiro mecanismo (aquele que controla o fluxo plástico dito macroscópico) $s^{(0)}$ e η seguem o mesmo sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas, já proposto no modelo estudado de 2003 dos autores, que permite

modelar o processo de amolecimento que se observa para deformações finitas:

$$\dot{s}^{(0)} = h_0 \left(1 - \frac{s^{(0)}}{\bar{s}^{(0)}(\eta)} \right) v^{(0)} \quad (178)$$

$$\dot{\eta} = g_0 \left(\frac{s^{(0)}}{s_{cv}^{(0)}} - 1 \right) v^{(0)} \quad (179)$$

Com,

$$\bar{s}^{(0)}(\eta) = s_{cv}^{(0)} [1 + b(\eta_{cv} - \eta)] \quad (180)$$

Neste sistema, $\{h_0, g_0, s_{cv}^{(0)}, b, \eta_{cv}\}$ são parâmetros de material. Os valores iniciais de $s^{(0)}$ e η são denotados $s_i^{(0)}$, η_i .

As variáveis escalares internas associadas às resistências ao fluxo dos micromecanismos restantes $s^{(\alpha)}$ são admitidas constantes,

$$s^{(\alpha)} = s_i^{(\alpha)}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (181)$$

Onde $s_i^{(\alpha)}$ denotam seus valores iniciais.

Finalmente os módulos elásticos dos micromecanismos responsáveis pelos valores de *backstress* $\mu^{(\alpha)}$ evoluem com o volume livre η de maneira a representar que o módulo elástico destes mecanismos diminua a medida que o volume livre aumenta com a deformação. Assim, seguem uma lei do tipo

$$\dot{\mu}^{(\alpha)} = c^{(\alpha)} \left(1 - \frac{\mu^{(\alpha)}}{\mu_{sat}^{(\alpha)}} \right) \dot{\eta} \quad (182)$$

$$\mu^{(\alpha)}(\eta_i) = \mu_i^{(\alpha)} \quad (183)$$

Nesta última equação diferencial se utilizam os valores iniciais $\mu_i^{(\alpha)}$ quando η assume seu valor inicial η_i . As constantes de material $c^{(\alpha)} > 0$, e $\mu_{sat}^{(\alpha)} > 0$. Escolhe-se um valor para o módulo elástico de saturação menor que o inicial $\mu_{sat}^{(\alpha)} \leq \mu_i^{(\alpha)}$, tal que $\mu^{(\alpha)}$ decresça até seu valor final $\mu_{sat}^{(\alpha)}$ enquanto o volume livre η cresce.

Os parâmetros/funções constitutivos que precisam ser especificados são,

$$\{G, K, \mu_R, \lambda_L, \nu_0, m^{(\alpha)}, \alpha_p, h_0, g_0, s_{cv}^{(0)}, b, \eta_{cv}, s_i^{(0)}, \eta_i, s_i^{(\alpha)}, \mu_i^{(\alpha)}, c^{(\alpha)}, \mu_{sat}^{(\alpha)}\}$$

4.2.3 APLICAÇÃO DO MODELO PARA O POLÍMERO PMMA

Nesta seção descrevem-se detalhes da implementação do modelo constitutivo acima descrito. Para isto foram utilizados os parâmetros de material que os autores identificaram para reproduzir o comportamento mecânico do sólido polimérico amorfo PMMA (polimetilmetacrilato).

Anand e Ames 2006 não fazem menção ao tipo de integração utilizada para a obtenção da versão incremental do modelo proposto. Entretanto, como as aplicações envolvem o uso do código ABAQUS explícito, interpreta-se que a regra de integração seja também explícita. Assim, por simplicidade, foi utilizada esta regra de integração para a montagem de um algoritmo implementado em linguagem Octave e disponível no apêndice B deste trabalho.

O procedimento segue os seguintes passos: Dado o estado no instante t_n , dispõe-se dos valores das grandezas $\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^p, \mathbf{A}_n^\alpha, s_n^\alpha, \eta_n, \mu_n^\alpha$. Com estas, calcula-se:

O jacobiano do gradiente de deformação,

$$J = \det \mathbf{F}_n \quad (184)$$

Pela decomposição de Kröner-Lee

$$\mathbf{F}_n^e = \mathbf{F}_n \mathbf{F}_n^{p-1} \quad (185)$$

$$\mathbf{B}_n^e = \mathbf{F}_n^e \mathbf{F}_n^{eT} \quad (186)$$

$$\mathbf{C}_n^e = \mathbf{F}_n^{eT} \mathbf{F}_n^e \quad (187)$$

$$\mathbf{U}_n^e = \sqrt{\mathbf{C}_n^e} \quad (188)$$

Pela decomposição polar,

$$\mathbf{R}_n^e = \mathbf{F}_n^e \mathbf{U}_n^{e-1} \quad (189)$$

E com esta, o tensor de deformação logaritmo,

$$\mathbf{E}_n^e = \frac{1}{2} \ln \mathbf{U}_n^e \quad (190)$$

E a sua parte deviatórica fica,

$$\mathbf{E}_{0n}^e = \mathbf{E}_n^e - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{E}_n^e) \mathbf{I} \quad (191)$$

O gradiente isocórico e os tensores de Cauchy correspondentes,

$$\mathbf{F}_n^* = J^{-1/3} \mathbf{F}_n \quad (192)$$

$$\mathbf{C}_n^* = \mathbf{F}_n^{*T} \mathbf{F}_n^* \quad (193)$$

$$\mathbf{B}_n^* = \mathbf{F}_n^* \mathbf{F}_n^{*T} \quad (194)$$

Com estes calculam-se os alongamentos efetivos,

$$\bar{\lambda}_n = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\text{tr} \mathbf{C}_n^*} \quad (195)$$

$$\lambda_n^\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\text{tr} \mathbf{A}_n^\alpha} \quad (196)$$

A tensão no braço A é dada assim por,

$$\mathbf{S}_{A_n}^e = 2G \mathbf{E}_{0n}^e + K(\text{tr} \mathbf{E}_n^e) \mathbf{I} \quad (197)$$

$$\mathbf{T}_{A_n} = J^{-1} \mathbf{R}_n^e (\mathbf{S}_{A_n}^e) \mathbf{R}_n^{eT} \quad (198)$$

A tensão no braço B,

$$\mathbf{B}_{0n}^* = \mathbf{B}_n^* - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{B}_n^*) \mathbf{I} \quad (199)$$

$$\mu_{B_n} = \mu_R \left(\frac{\lambda_L}{3\bar{\lambda}_n} \right) \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\bar{\lambda}_n}{\lambda_L} \right) \quad (200)$$

$$\mathbf{T}_{B_n} = J^{-1} \mu_{B_n} \mathbf{B}_{0_n}^* \quad (201)$$

A tensão total no modelo é dada pela soma,

$$\mathbf{T}_n = \mathbf{T}_{A_n} + \mathbf{T}_{B_n} \quad (202)$$

As tensões internas *backstress* nos micromecanismos,

$$\mathbf{S}_{back_n}^\alpha = \mu_n^\alpha \mathbf{A}_n^\alpha \quad (203)$$

$$(\mathbf{S}_{A_n}^e)_0 = \mathbf{S}_{A_n}^e - \frac{1}{3} tr(\mathbf{S}_{A_n}^e) \mathbf{I} \quad (204)$$

$$(\mathbf{S}_{back_n}^\alpha)_0 = \mathbf{S}_{back_n}^\alpha - \frac{1}{3} tr(\mathbf{S}_{back_n}^\alpha) \mathbf{I} \quad (205)$$

$$\bar{\tau}_n^\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| (\mathbf{S}_{A_n}^e)_0 - (\mathbf{S}_{back_n}^\alpha)_0 \right| \quad (206)$$

$$\pi_n = -\frac{1}{3} tr(\mathbf{S}_{A_n}^e) \quad (207)$$

E com estes o fluxo plástico,

$$v_n^\alpha = v_0 \left(\frac{\bar{\tau}_n^\alpha}{s_n^\alpha + \alpha_p \pi_n} \right)^{\frac{1}{m(\alpha)}} \quad (208)$$

$$\mathbf{D}_n^{p\alpha} = v_n^\alpha \left(\frac{(\mathbf{S}_{A_n}^e)_0 - (\mathbf{S}_{back_n}^\alpha)_0}{2\bar{\tau}_n^\alpha} \right) \quad (209)$$

$$\mathbf{D}_n^p = \sum_{\alpha=0}^N \mathbf{D}_n^{p\alpha} \quad (210)$$

$$\Delta \mathbf{D}_n^p = \Delta t \mathbf{D}_n^p \quad (211)$$

$$\dot{A}_n^\alpha = \mathbf{D}_n^{p\alpha} \mathbf{A}_n^\alpha + \mathbf{A}_n^\alpha \mathbf{D}_n^{p\alpha} \quad (212)$$

$$\dot{s}_n^0 = s_{cv}^0 [1 + b(\eta_{cv} - \eta_n)] \quad (213)$$

$$\dot{s}_n^0 = h_0 \left(1 - \frac{s_n^0}{s_n^0} \right) v_n^0 \quad (214)$$

$$\dot{\eta}_n = g_0 \left(\frac{s_n^0}{s_{cv}^0} - 1 \right) v_n^0 \quad (215)$$

A atualização das variáveis internas segue diferentes alternativas. Para o caso da atualização do gradiente de deformação plástico \mathbf{F}^p utiliza-se um mapeamento exponencial como forma de preservar a isocoricidade durante a integração:

$$\mathbf{F}_{n+1}^p = \exp(\Delta \mathbf{D}^p \mathbf{F}_n^p) \quad (216)$$

Já para as outras variáveis, adota-se a regra de integração explícita de Euler,

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \Delta \eta \quad (217)$$

$$s_{n+1}^0 = s_n^0 + \Delta s \quad (218)$$

$$\mu_{n+1}^0 = \mu_n^0 \quad (219)$$

Para os mecanismos $\alpha > 0$ tem-se que,

$$\dot{\mu}_n^\alpha = c^\alpha \left(1 - \frac{\mu_n^\alpha}{\mu_{sat}^\alpha} \right) \dot{\eta}_n \quad (220)$$

$$s_{n+1}^\alpha = s_n^\alpha \quad (221)$$

Os valores dos parâmetros materiais utilizados nesse trabalho foram obtidos de Anand e Ames (2006), considerando um micromecanismo principal ($\alpha = 0$) e três subsidiários ($\alpha = 1, 2, 3$) sendo eles,

$$\begin{aligned} G &= 1580 \text{ MPa} \\ K &= 4120 \text{ MPa} \\ \mu_R &= 14 \text{ MPa} \\ \lambda_L &= 1,65 \\ \mu_i^0 &= 0 \text{ MPa} \\ \mu_i^{1,2,3} &= 3500 \text{ MPa} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_{cv}^0 &= 0 \text{ MPa} \\
\mu_{cv}^1 &= 1100 \text{ MPa} \\
\mu_{cv}^2 &= 400 \text{ MPa} \\
\mu_{cv}^3 &= 200 \text{ MPa} \\
s_i^0 &= 35 \text{ MPa} \\
s_i^1 &= 13 \text{ MPa} \\
s_i^2 &= 23 \text{ MPa} \\
s_i^3 &= 33 \text{ MPa} \\
s_{cv}^0 &= 34 \text{ MPa} \\
c^1 &= 4,5 \cdot 10^6 \text{ MPa} \\
c^2 &= 1,8 \cdot 10^6 \text{ MPa} \\
c^3 &= 1,3 \cdot 10^6 \text{ MPa} \\
\nu_0 &= 0,0005 \text{ s}^{-1} \\
h_0 &= 4500 \text{ MPa} \\
g_0 &= 0,009 \\
b &= 825 \\
\eta_i &= 0 \\
\eta_{cv} &= 0,001 \\
m^0 &= 0,0065 \\
m^{1,2,3} &= 0,19 \\
\alpha_p &= 0,204
\end{aligned}$$

A simulação representa o caso de um alongamento isocórico do tipo,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1+c & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1+c}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1+c}} \end{bmatrix}$$

Onde c representa o alongamento sofrido pelo ponto a cada instante de tempo t .

A Figura 25 mostra a evolução da variável interna de resistência ao escoamento s^α ao longo da deformação aplicada na simulação. Percebe-se na figura que existem quatro curvas: s^0 , s^1 , s^2 e s^3 , uma curva para cada índice α . Como esperado, apenas o primeiro mecanismo, que visa controlar o comportamento viscoplástico do modelo, muda ao longo do tempo sendo que os outros permanecem constantes (por definição).

Já a Figura 26 mostra a evolução da variável interna volume livre η ao longo da deformação.

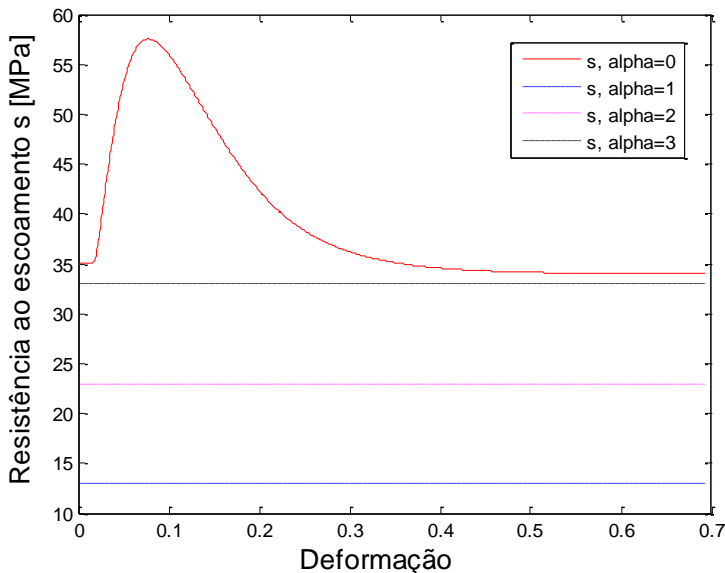


Figura 25 - Evolução da resistência ao escoamento s ao longo da deformação. São apresentadas para os 4 micromecanismos, $\alpha = 1, 2, 3, 4$.

A Figura 27 mostra uma curva de reposta da tensão axial de Cauchy versus deformação para a deformação imposta. Percebe-se que a reposta do polímero quando solicitado possui um comportamento altamente não linear, apresentando três regiões distintas. No começo da curva há uma região não linear prévia a um pico na tensão. É nesta região em que os micromecanismos ($\alpha > 0$) são chamados a atuar e controlar os aspectos típicos de viscoelasticidade. A partir do pico de tensão, ocorre um forte escoamento e começa a se observar o escoamento viscoplástico macroscópico. Neste modelo, o valor deste pico e as características do amolecimento que são controladas pela evolução acoplada da resistência ao escoamento s e volume livre η . Finalmente, para valores elevados de deformação, o alinhamento das cadeias poliméricas é representado pela mola de Langevin, provocando um rápido aumento nos níveis de tensão.

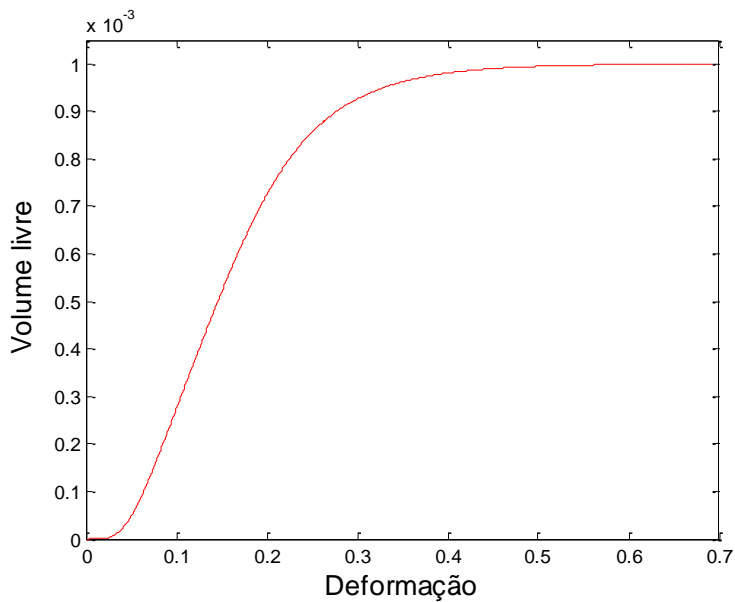


Figura 26 - Evolução do volume livre η ao longo da deformação.

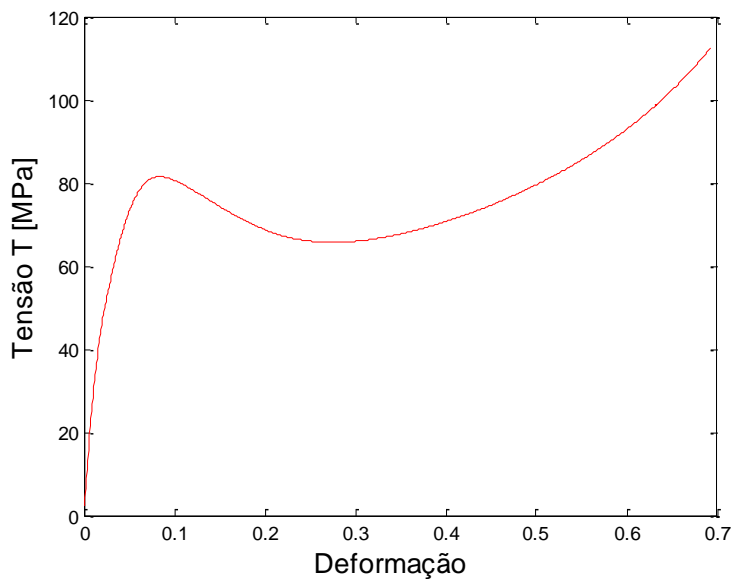


Figura 27 – Curva tensão versus deformação para PMMA.

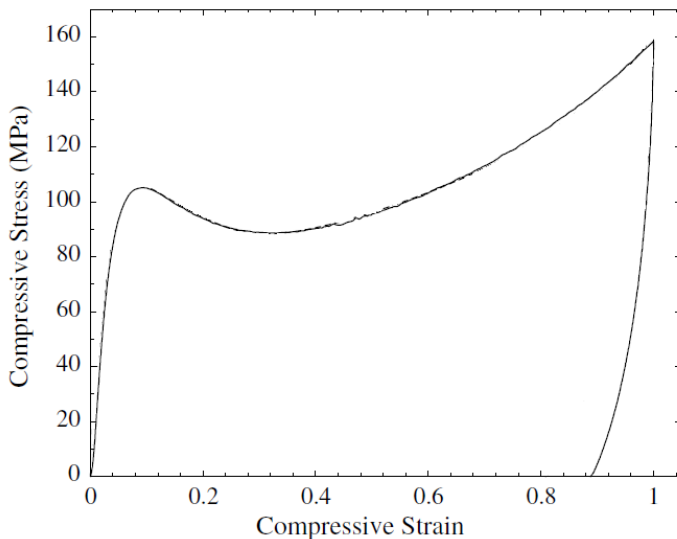


Figura 28 - Curva de tensão real versus deformação real para PMMA em um ensaio de compressão monotônico. Adaptado de Anand e Ames (2006).

Na Figura 28 observa-se uma curva de tensão real versus deformação real para o polímero PMMA (polimetilmetacrilato) em um ensaio de compressão monotônico simples até se atingir uma deformação total de 100%, seguida de um descarregamento total até nível zero de tensão. Os experimentos foram conduzidos sob condições isotérmicas em temperatura ambiente (abaixo da temperatura de transição vítrea do polímero) e em uma taxa de deformação baixa de $-0,0003\text{s}^{-1}$. As tensões e deformações compressivas são plotadas positivas. O descarregamento da curva após 100% de deformação mostra o fenômeno conhecido como conhecido como efeito Bauschinger.

A Figura 29 retrata uma curva tensão versus deformação obtida utilizando o algoritmo implementado neste trabalho segundo uma deformação imposta axial já mostrada. Na curva obtida através da simulação também se observa um escoamento reverso no descarregamento, como visto na curva obtida através dos experimentos, devido ao desenvolvimento do *backstress*. Como segundo Anand e Ames (2006), os experimentos foram conduzidos a uma taxa de deformação constante, foi adaptada a evolução do gradiente de deformação \mathbf{F} de maneira a que seja capaz de gerar uma deformação

total no corpo que apresente uma taxa de deformação constante. (ver apêndice C deste trabalho)

Todas as curvas de tensão versus deformação mostradas nessa seção 4.2 se referem à componente de tensão $T(1,1)$ do tensor de Cauchy (somando-se as parcelas nos braços A e B) e à componente de deformação $E(1,1)$ do tensor de deformação logarítmico de \mathbf{U} .

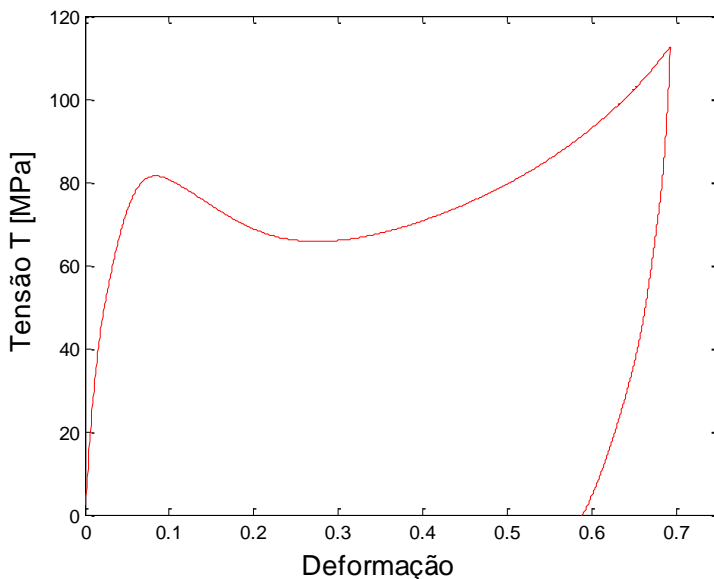


Figura 29- Curva tensão versus deformação para PMMA obtida através do código com descarregamento até nível zero de tensão.

Mais uma vez de modo a se tentar entender melhor como esse modelo se comporta, escolheram-se alguns parâmetros do mesmo para realizar um estudo de sensibilidade.

Na Figura 30 se observa a influência do parâmetro μ_R nas curvas de tensão versus deformação. Realizando variações ao redor do valor $\mu_R = 14 \text{ MPa}$, se observa como esperado aumentos de tensão para aumentos no valor do parâmetro apenas para valores elevados de deformação, dado que este parâmetro modifica a mola de Langevin.

Em forma similar, ao diminuir o alongamento de saturação, se observa aumento de tensão para os mesmos valores de deformação, como mostrado na Figura 31.

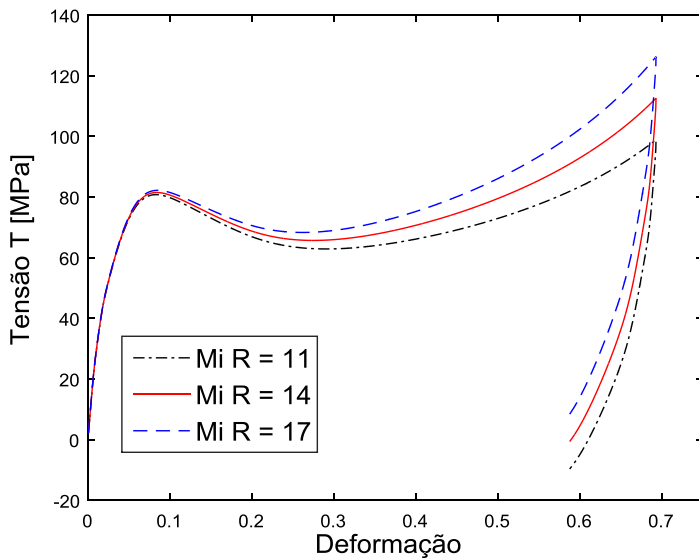


Figura 30 - Curva tensão versus deformação para o policarbonato, com variação do parâmetro rubbery modulus μ_R .

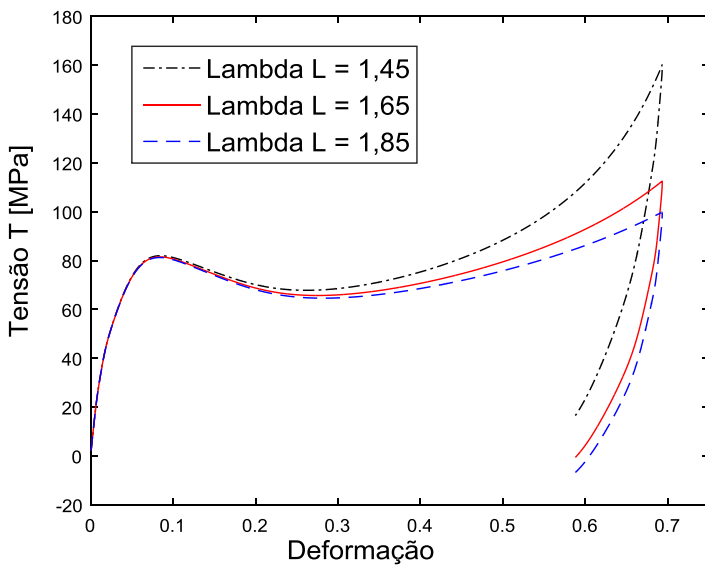


Figura 31 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro network locking stretch λ_L .

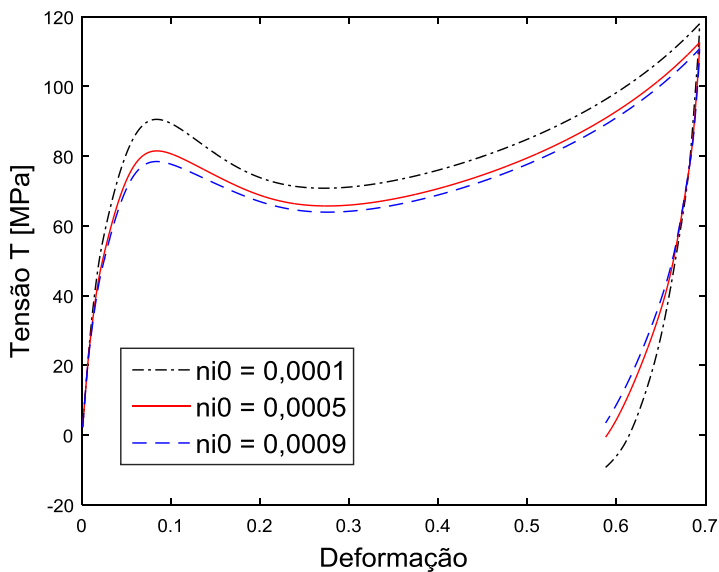


Figura 32 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro ν_0 .

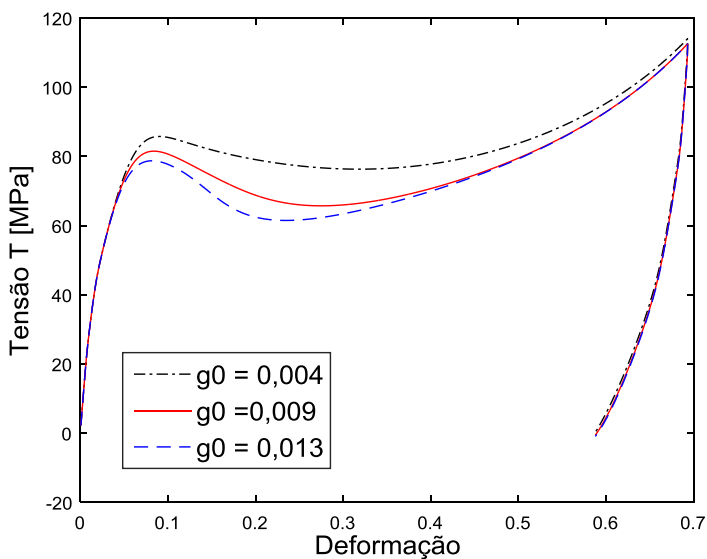


Figura 33 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro g_0 .

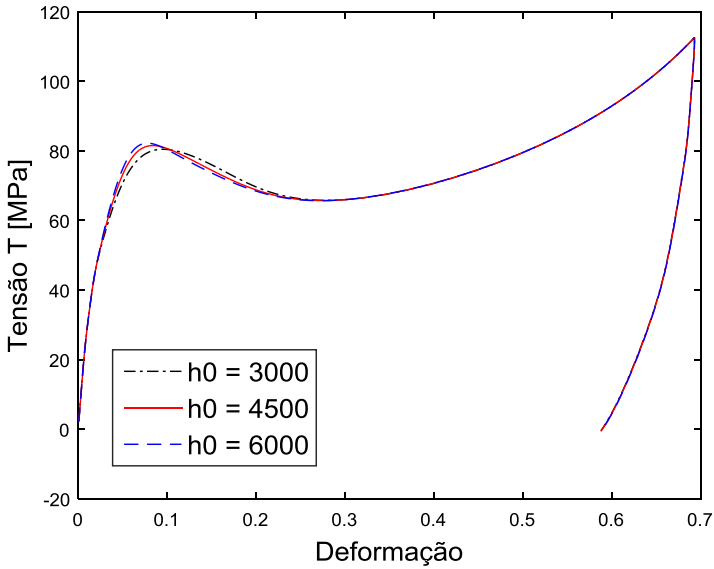


Figura 34 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro h_0 .

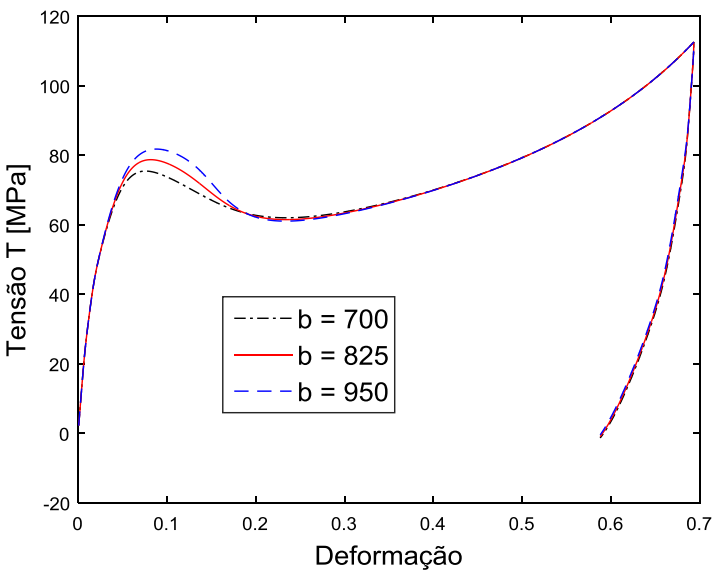


Figura 35 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro b .

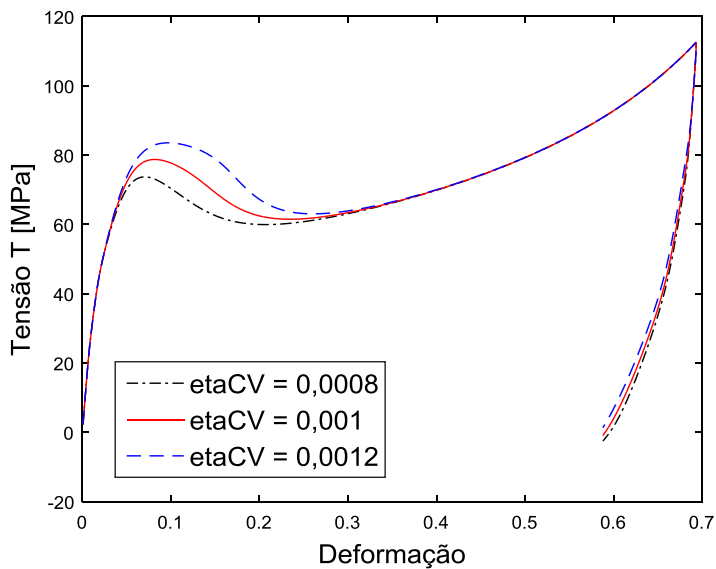


Figura 36 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro η_{CV} .

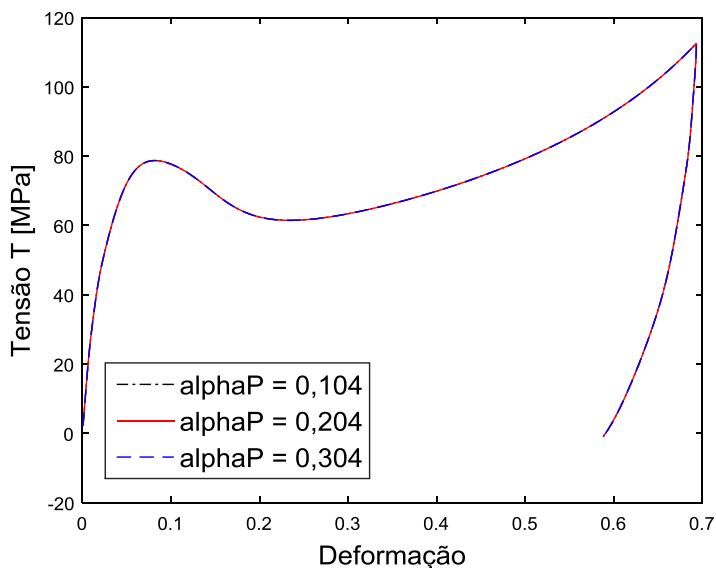


Figura 37 - Curva tensão versus deformação para o PMMA, com variação do parâmetro α_P .

Pelas Figuras 35 e 38 percebe-se que os parâmetros h_0 e α_p , respectivamente, exercem muito pouco ou quase nenhuma influência sobre o comportamento da curva de tensão versus deformação.

Já o parâmetro v_0 consegue fazer com que a curva sofra uma translação vertical, com um efeito inversamente proporcional, aumentando-se o valor de v_0 a curva tende a se deslocar para baixo, como pode ser visto na Figura 33. A Figura 34 mostra os efeitos do parâmetro g_0 , este possui a característica de acentuar ou diminuir a não linearidade apresentada pela curva na região após o pico de escoamento. Quando se aumenta o valor de g_0 a não linearidade tende a tornar mais evidente.

Nas Figuras 36 e 37 nota-se que os parâmetros b e η_{cv} , respectivamente, conseguem alterar o valor da tensão que ocorre no pico de escoamento, alterando também um pouco a forma característica desse pico. À medida que se aumenta o valor de b e/ou η_{cv} o valor da tensão no pico tende a aumentar também, percebe-se que a sensibilidade da curva à essa variação é mais acentuada ao parâmetro η_{cv} do que à b .

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi realizado um estudo, implementação e análise de sensibilidade aos parâmetros de material de dois modelos escolhidos na literatura pelas suas propriedades de representar o comportamento altamente não linear da curva tensão versus deformação que materiais sólidos poliméricos amorfos apresentam, quando submetidos a deformações finitas. Essas teorias são desenvolvidas e aplicadas em simulações nas quais se busca reproduzir o comportamento mecânico desses materiais viscoelásticos e viscoplásticos não lineares.

Para tal foi realizado um estudo inicial sobre o comportamento de materiais poliméricos e suas propriedades buscando um maior entendimento de como o arranjo dessas cadeias e suas forças interferem no comportamento macroscópico do material e influência em seu comportamento não linear.

A principal dificuldade exposta que as teorias alvos buscavam vencer é justamente o fato de o comportamento dos materiais estudados, sólidos poliméricos amorfos, ser altamente não linear, exibindo algumas características distintas, quando comparados com outros materiais mais usuais, como aço por exemplo. Dentre algumas teorias estudadas os modelos de Anand e Gurtin (2003) e o de Anand e Ames (2006) foram os selecionados pela sua habilidade de reproduzir as curvas de resposta tensão versus deformação de maneira satisfatória o comportamento dos materiais alvos quando comparados a ensaios experimentais.

Ambos os trabalhos possuem a mesma base conceitual e similar representação reológica: uma mola de saturação (Langevin) e um sistema mola-amortecedor com propriedades dependentes do nível de deformação para permitir a representação de dois fenômenos: comportamento viscoelástico para deformações pequenas ou moderadas e uma deformação viscoplástica macroscópica para deformações elevada. Ambos os fenômenos ocorrem em forma simultânea embora com amplitudes diferentes dependendo do nível de de deformação. Neste aspecto, ambos os modelos se diferenciam dos modelos elasto-plásticos ou elasto-viscoplásticos nos quais existe uma região de deformação puramente elástica e uma superfície de escoamento a ser atingida. Esta superfície inexistente no presente modelo, havendo deformações inelásticas em todo instante do processo.

Ambos os modelos estão baseados na utilização de duas variáveis internas importantes: resistência ao escoamento s e volume livre η , que, acopladas mediante um sistema de equações diferenciais ordinárias, são capazes de capturar o pico de tensão e posterior

amolecimento do material. A utilização do modelo de Langevin (baseado na deformação plástica na proposta de 2003 e na deformação total em 2006) completa o comportamento ao permitir reproduzir o travamento do material para deformações elevadas.

O modelo constitutivo de Anand e Ames (2006) se diferencia de outros modelos já existentes na literatura (Parks *et al.* 1985, Boyce *et al.* 1988, Arruda e Boyce 1993, Wu e van der Giessen 1993) e em particular do modelo de Anand e Gurtin 2003 por buscar contemplar o comportamento do material na sua fase inicial de deformações pequenas ou moderadas onde o comportamento viscoelástico domina.

A implementação dos modelos neste estudo permitiu compreender melhor a influência que os parâmetros de material utilizados possuem no desempenho do mesmo. As curvas de resposta tensão versus deformação obtidas com a simulação foram comparadas com as curvas obtidas experimentalmente (retiradas do trabalho de Anand e Ames (2006)), onde se observou uma boa correlação e também o aparecimento de escoamento reverso quando descarregado à nível zero de tensão devido ao desenvolvimento de um *backstress*.

Este trabalho, de cunho fortemente acadêmico, teve um caráter formativo para o autor e facilitará a execução de outros trabalhos em andamento na equipe de pesquisa onde se visa adaptar os modelos estudados em um marco teórico de modelos variacionais preservando, entretanto, as boas características dos modelos estudados.

Ainda visando trabalhos futuros deseja-se testar estes modelos na identificação de parâmetros de material em um conjunto de polímeros amorfos de relevância tecnológica como o UHMWPE (*ultra high molecular weight polyethylene*), PEEK (*polyether ether ketone*), e PLDLA (*poly lactic acid*) muito utilizados em aplicações médicas.

BIBLIOGRAFIA

Anand, L., Ames, N., “On modeling the micro-indentation response of an amorphous polymer”, *International Journal of Plasticity* 22 (2006) 1123-1170

Anand, L., Ames, N. M., Srivastava, V., and Chester, S. A. “A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers”. Part I: Formulation. *International Journal of Plasticity* 25, 8 (Aug. 2009), 1474-1494.

Anand, L., Ames, N. M., Srivastava, V., and Chester, S. A. “A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers”. Part II: Applications. *International Journal of Plasticity* 25, 8 (Aug. 2009), 1495-1539.

Anand, L., Gurtin, M. E., “A theory of amorphous solids undergoing large deformations, with application to polymeric glasses”. *International Journal of Solids and Structures* 40, 28 (Oct. 2002), 1465-1487.

Arruda, E. M., and Boyce, M. C., “Evolution of Plastic Anisotropy in Amorphous Polymers During Finite Straining”. *International Journal of Plasticity* 9, 6 (Jan. 1993), 697-720.

Arruda, E. M., Boyce, M. C., and Jayachandran, R., “Effects of strain rate, temperature and thermomechanical coupling on the finite strain deformation of glassy polymers”. *Mechanics of Materials* 19, 2-3 (Jan. 1995), 193-212.

Bardenhagen, S., Stout, M., Gray, G., “Three dimensional, finite deformation, viscoplastic constitutive models for polymeric materials.” *Mechanics of Materials*, 1997. 25, 235–253.

Bergstrom, J., “Large Strain Time-Dependent Elastomeric Materials”. Phd. thesis, MIT, 1999.

Bergstrom, J. S., and Boyce, M., “Constitutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers”. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46, 5 (May 1998), 931-954.

Bergstrom, J. S., Kurtz, S. M., Rimnac, C. M., and Edidin, A. A., “Constitutive modeling of ultrahigh molecular weight polyethylene under large-deformation and cyclic loading conditions”. *Biomaterials* 23, 11 (June 2002), 2329-43.

Boyce, M., Parks, D., Argon, A.S., “Large inelastic deformation of glassy polymers. Part 1: Rate dependent constitutive model.” *Mechanics of Materials* 7 (1988), 15–33.

Boyce, M., Socrate, S., and Llana, P., “Constitutive model for the finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition”. *Polymer* 41, 6 (Mar. 2000), 2183-2201.

Boyce, M. C., Parks, D. M., and Argon, A. S., “Large Inelastic Deformation of Glassy Polymers”. Part I: Rate Dependent Constitutive Model. *Mechanics of Materials* 7 (1988), 15-33.

Colak, O. U., “Modeling deformation behavior of polymers with viscoplasticity theory based on overstress.” *International Journal of Plasticity* (2005) 21, 145–160.

Drozdov, A.D., Gupta, R.K., “Constitutive equations of finite plasticity of semicrystalline polymers.” *International Journal of Solids and Structures* (2003) 40, 6217–6243.

Gurtin, M. E., Fried, E., Anand, L., “*The Mechanics and Thermodynamics of Continua*”. Cambridge University Press, 2010.

Hasan, O.A., “An experimental and analytical investigation of the thermomechanical properties of glassy polymers.” Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology (1994).

Hasan, O.A., Boyce, M.C., “A constitutive model for the nonlinear viscoelastic viscoplastic behavior of glassy polymers.” *Polymer Engineering and Science* (1995) 35, 331–344.

Holopainen, S., “Modeling of the mechanical behavior of amorphous glassy polymers under variable loadings and comparison with state of the art model predictions.” *Mechanics of Materials* (2013) 66, 35-58.

Holzappel, G. A., “*Nonlinear Solid Mechanics. A Continuum Approach for Engineering*”. John Wiley & Sons, LTD, 2000.

Khan, A. S., Lopez-Pamies, O., “Time and temperature dependent response and relaxation of a soft polymer.” *International Journal of Plasticity* (2002) 18, 1359–1372.

Khan, A. S., Zhang, H., “Finite deformation of a polymer: experiments and modeling.” *International Journal of Plasticity* (2001) 17, 1167–1188.

Krempf, E., Bordanardo, C., “A state variable model for high strength polymers”. *Polymer Engineering and Science* (1995) 35, 310–316.

Krempf, E., Khan, F., “Rate (time)-dependent deformation behavior: an overview of some properties of metals and solid polymers.” *International Journal of Plasticity* (2003) 19, 1069–1095.

Moura, R. T., 2012, “Modelagem e ensaios mecânicos de polímeros termoplásticos sob carregamentos quase estático e dinâmico”. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – USP, Universidade de São Paulo, São Paulo. 2012.

Mulliken, A. D., and Boyce, M. C., “Mechanics of the rate-dependent elastic-plastic deformation of glassy polymers from low to high strain rates”. *International Journal of Solids and Structures* 43, 5 (2006), 1331-1356.

Parks, D.M., Argon, A.S., Bagepalli, B., “Large elastic–plastic deformation of glassy polymers, Part 1: Constitutive modelling. Tech. rep.”, MIT, *Program in Polymer Science and Technology Report* (1985).

Richeton, J., Ahzi, S., Vecchio, K., Jiang, F., and Makradi, A. “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* 44, 24 (Dec. 2007), 7938-7954.

Souza Neto, E. de, Peric, D., Owens, D., “*Computational Methods for Plasticity – Theory and Applications*”, John Wiley & Sons, LTD, 2008.

Srivastava, V., Chester, S. a., Ames, N. M., and Anand, L. “A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which spans their glass transition”. *International Journal of Plasticity* 26, 8 (Aug. 2010), 1138-1182.

Wu, P.D., van der Giessen, E., “On improved network models for rubber elasticity and their applications to orientation hardening of glassy polymers.” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1993) 41, 427–456.

APÊNDICE A

Programa escrito em *Matlab* utilizando o modelo constitutivo para materiais sólidos poliméricos amorfos, calibrado para o material policarbonato, utilizando a teoria de Anand e Gurtin (2003).

```
% Programa para calculo de Tensoes em modelo de
Anand 2002
clear all;
clc;
% close all;

%dados Fp, Fe, F, s, eta
%Parâmetros materiais
G=857;
K=2240;
mu=16.95;
MUr=11;
lambdaL=1.45;
ni0=0.0017;
m=0.011;
alpha=0.08;
h0=2750;
scv=24;
b=825;
etacv=0.001;
g0=6e-3;
s0=20;

deltat=1e-4;

I=eye(3,3);

s1=s0;
eta1=0;
Fp1=eye(3,3);

c1 = 0.8;
ninc1 = 10000;
c2 = 0.6;
ninc2 = 5000;
ninc = ninc1+ninc2;
```

```

for j=1:ninc1

    s=s1;
    eta=etal;

    Fp=Fp1;

    if j<=ninc1
        cj1=(c1*j)/(ninc1);
        F = [ 1+cj1      0      0
              0  1/sqrt(1+cj1)  0
              0      0      1/sqrt(1+cj1)];
    end

    if j>ninc1
        cj=cj1+((c2-c1)*(j-ninc1))/(ninc2);
        F = [ 1+cj      0      0
              0  1/sqrt(1+cj)  0
              0      0      1/sqrt(1+cj)];
    end

    fp = inv(Fp);
    Fe=F*fp;

    C=F'*F;
    E=0.5*(C-I);

    Ce=Fe'*Fe;
    Ee=0.5*(Ce-I);
    [e, Lam2] = eig(Ce);
    E1 = e(:,1)*e(:,1)';
    E2 = e(:,2)*e(:,2)';
    E3 = e(:,3)*e(:,3)';
    Lam2 = diag(Lam2);
    Lam = sqrt(Lam2(:));
    Ue = Lam(1)*E1 + Lam(2)*E2 + Lam(3)*E3;
    ue = (1/Lam(1))*E1 + (1/Lam(2))*E2 +
(1/Lam(3))*E3;
    Re = Fe*ue;

```

```

Ee0=Ee-(trace(Ee)/3)*I;
Te=2*G*Ee0+K*trace(Ee)*I;
T=Re*Te*Re';
pi=- (1/3)*trace(T);

Bp=Fp*Fp';
Bp0=Bp-(1/3)*trace(Bp)*I;

%modelo langevin MU
lambdaP=(1/sqrt(3))*sqrt(trace(Bp));
pl=lambdaP/lambdaL;
if abs(pl)<0.84136
    L=1.31446*tan(1.58986*pl)+0.91209*pl;
elseif abs(pl)>=0.84136 & abs(pl)<1
    L=1/(sign(pl)-pl);
end
mu=MUr*(lambdaL/(3*lambdaP))*L;

Z=Te-mu*Bp0;
tal=(1/(sqrt(2)))*(norm(Z,'fro'));
nip=ni0*((tal/(s+alpha*pi))^(1/m));
Dp=(nip*(tal^(1-
m)/m))/(2*((s+alpha*pi)^(1/m)))*Z;

deltaDp=deltat*(nip/(2*tal))*Z;
stio=scv*(1+b*(etacv-eta));
deltas=deltat*h0*nip*(1-s/stio);
deltaeta=deltat*g0*nip*(s/scv-1);

M=exponencial(deltaDp);
Fp1=M*Fp;

s1=s+deltas;
eta1=eta+deltaeta;

sigma(j)=T(1,1)-T(2,2);
W(j)=T(1,2);
P(j)=T(2,2);
x(j)=E(1,1);

flowresistance(j)=s;
freevolume(j)=eta;

```

end

```
figure (1)
hold on
plot(x,sigma,'r')
xlabel('Deformação')
ylabel('Tensão T [MPa]')
grid off
```

```
figure (2)
plot(x,flowresistance,'r')
xlabel('Deformação')
ylabel('Resistência ao escoamento s [MPa]')
grid off
```

```
figure (3)
plot(x,freevolume,'r')
xlabel('Deformação')
ylabel('Volume livre')
grid off
```

APÊNDICE B

Programa escrito em *Matlab* utilizando o modelo constitutivo para materiais sólidos poliméricos amorfos, calibrado para o material PMMA, utilizando a teoria de Anand e Ames (2006).

```
% Programa para calculo de Tensoes em modelo de
Anand 2002
clear all;
close all;

%dados Fp, Fe, F, s, eta
%Parâmetros materiais
G=1580; %MPa
K=4120; %MPa
MuR=14; %MPa
lambdaL=1.65;
Mui(1)=0.0; %MPa
Mui(2)=3500; %MPa
Mui(3)=3500; %MPa
Mui(4)=3500; %MPa
MuCV(1)=0.0; %MPa
MuCV(2)=1100; %MPa
MuCV(3)=400; %MPa
MuCV(4)=200; %MPa
si(1)=35; %MPa
si(2)=13; %MPa
si(3)=23; %MPa
si(4)=33; %MPa
sCV(1)=34; %MPa
Co(1)=5e6; %MPa
Co(2)=4.2e6; %MPa
Co(3)=1.8e6; %MPa
Co(4)=1.3e6; %MPa
ni0=0.0005; %s^-1
h0=4500; %MPa
g0=0.009;
b=825;
phii=0;
phiCV=0.001;
m(1)=0.065;
m(2)=0.19;
m(3)=0.19;
```

```
m(4)=0.19;
alphaP=0.204;

deltat=1e-4;

I=eye(3,3);

A1n1=I;
A2n1=I;
A3n1=I;
A4n1=I;

phin1=phii;

Muin1(1)=Mui(1);
Muin1(2)=Mui(2);
Muin1(3)=Mui(3);
Muin1(4)=Mui(4);

Fpn1=eye(3,3);

sin1(1)=si(1);

c1 = 1;
v1 = 0.008;
ninc1 = 1000;
c2 = 0.8;
v2 = 0.008;
ninc2 = 500;
ninc = ninc1+ninc2;

[vcj, vdeltat] =
loadhistory(c1,v1,ninc1,c2,v2,ninc2);

for j=1:ninc1

    Fp=Fpn1;

    A1=A1n1;
    A2=A2n1;
    A3=A3n1;
```



```

A4=A4n1;

phi=phin1;

si(1)=sin1(1);

Mui(1)=Muin1(1);
Mui(2)=Muin1(2);
Mui(3)=Muin1(3);
Mui(4)=Muin1(4);

cj = vcj(j)-1;
deltat = vdeltat(j);

F = [ 1+cj      0      0
      0  1/sqrt(1+cj)  0
      0      0      1/sqrt(1+cj)];

fp = inv(Fp);
Fe=F*fp;
Je=det(Fe);
J=det(F);

Fasterisco=(J^(-1/3))*F;
Casterisco=Fasterisco'*Fasterisco;
Basterisco=Fasterisco*Fasterisco';

C=F'*F;
[e, Lam2] = eig(C);
E1 = e(:,1)*e(:,1)';
E2 = e(:,2)*e(:,2)';
E3 = e(:,3)*e(:,3)';
Lam2 = diag(Lam2);
Lam = sqrt(Lam2(:));
U = Lam(1)*E1 + Lam(2)*E2 + Lam(3)*E3;
u = (1/Lam(1))*E1 + (1/Lam(2))*E2 +
(1/Lam(3))*E3;
R = F*u;
E=logaritmo(U);

Ce=Fe'*Fe;

```

```

%Ee=0.5*(Ce-I);
[ee, Lame2] = eig(Ce);
Ee1 = ee(:,1)*ee(:,1)';
Ee2 = ee(:,2)*ee(:,2)';
Ee3 = ee(:,3)*ee(:,3)';
Lame2 = diag(Lame2);
Lame = sqrt(Lame2(:));
Ue = Lame(1)*Ee1 + Lame(2)*Ee2 + Lame(3)*Ee3;
ue = (1/Lame(1))*Ee1 + (1/Lame(2))*Ee2 +
(1/Lame(3))*Ee3;
Re = Fe*ue;
Ee=logaritmo(Ue);

lambdabarra=(1/sqrt(3))*sqrt(trace(Casterisco));
Eedev=Ee-(1/3)*trace(Ee)*I;
Sae=2*G*Eedev+K*trace(Ee)*I;
sigmaA=(J^(-1))*Re*Sae*Re';

pl=lambdabarra/lambdaL;
if abs(pl)<0.84136

Langevin=1.31446*tan(1.58986*pl)+0.91209*pl;
elseif abs(pl)>=0.84136 & abs(pl)<1
    Langevin=1/(sign(pl)-pl);
end

Basteriscodev=Basterisco-
(1/3)*trace(Basterisco)*I;
sigmaB=(J^(-
1))*MuR*(lambdaL/(3*lambdabarra))*Langevin*Basteris
codev;

sigma=sigmaA+sigmaB;

Sback1=Mui(1)*A1;
Sback2=Mui(2)*A2;
Sback3=Mui(3)*A3;
Sback4=Mui(4)*A4;

Sback1dev=Sback1-(1/3)*trace(Sback1)*I;

```

```

Sback2dev=Sback2-(1/3)*trace(Sback2)*I;
Sback3dev=Sback3-(1/3)*trace(Sback3)*I;
Sback4dev=Sback4-(1/3)*trace(Sback4)*I;

Saedev=Sae-(1/3)*trace(Sae)*I;
Zcompl1=Saedev-Sback1dev;

Zcompl1norm=sqrt(Zcompl1(1,1)^2+Zcompl1(1,2)^2+Zcompl1(1,3)^2+Zcompl1(2,1)^2+Zcompl1(2,2)^2+Zcompl1(2,3)^2+Zcompl1(3,1)^2+Zcompl1(3,2)^2+Zcompl1(3,3)^2);
Zcompl2=Saedev-Sback2dev;

Zcompl2norm=sqrt(Zcompl2(1,1)^2+Zcompl2(1,2)^2+Zcompl2(1,3)^2+Zcompl2(2,1)^2+Zcompl2(2,2)^2+Zcompl2(2,3)^2+Zcompl2(3,1)^2+Zcompl2(3,2)^2+Zcompl2(3,3)^2);
Zcompl3=Saedev-Sback3dev;

Zcompl3norm=sqrt(Zcompl3(1,1)^2+Zcompl3(1,2)^2+Zcompl3(1,3)^2+Zcompl3(2,1)^2+Zcompl3(2,2)^2+Zcompl3(2,3)^2+Zcompl3(3,1)^2+Zcompl3(3,2)^2+Zcompl3(3,3)^2);
Zcompl4=Saedev-Sback4dev;

Zcompl4norm=sqrt(Zcompl4(1,1)^2+Zcompl4(1,2)^2+Zcompl4(1,3)^2+Zcompl4(2,1)^2+Zcompl4(2,2)^2+Zcompl4(2,3)^2+Zcompl4(3,1)^2+Zcompl4(3,2)^2+Zcompl4(3,3)^2);

talbarra(1)=(1/sqrt(2))*Zcompl1norm;
talbarra(2)=(1/sqrt(2))*Zcompl2norm;
talbarra(3)=(1/sqrt(2))*Zcompl3norm;
talbarra(4)=(1/sqrt(2))*Zcompl4norm;

pie=(-1/3)*trace(Sae);

for i=1:4

ni(i)=ni0*((talbarra(i)/(si(i)+alphaP*pie))^(1/m(i)));

end

Dp1=ni(1)*(Zcompl1/(2*talbarra(1)));
Dp2=ni(2)*(Zcompl2/(2*talbarra(2)));
Dp3=ni(3)*(Zcompl3/(2*talbarra(3)));

```

```

Dp4=ni(4)*(Zcompl4/(2*talbarra(4)));

Dp=Dp1+Dp2+Dp3+Dp4;

deltaDp=deltat*Dp;
M=exponencial(deltaDp);
Fpn1=M*Fp

A1n1=A1+deltat*(Dp1*A1+A1*Dp1);
A2n1=A2+deltat*(Dp2*A2+A2*Dp2);
A3n1=A3+deltat*(Dp3*A3+A3*Dp3);
A4n1=A4+deltat*(Dp4*A4+A4*Dp4);

stio(1)=sCV(1)*(1+b*(phiCV-phi));

sin1(1)=si(1)+deltat*h0*(1-
si(1)/stio(1))*ni(1);

phin1=phi+deltat*g0*(si(1)/sCV(1)-1)*ni(1);

for i=2:4
    Muin1(i)=Mui(i)+deltat*Co(i)*(1-
Mui(i)/MuCV(i))*((phin1-phi)/deltat);
end

sigmaplot(j)=sigma(1,1);
x(j)=E(1,1);

end

figure(1)
hold on
plot(x,sigmaplot,'r')
xlabel('Deformação')
ylabel('Tensão T [MPa]')
grid off

```

APÊNDICE C

Subrotinas utilizadas por ambos os códigos, tanto da teoria de Anand e Gurtin (2003) como a teoria de Anand e Ames (2006).

Subrotina que calcula a derivada da função \dot{s} em relação à variável s .

```
function [dgds] = dsdotds (Seq, s)
```

```
delta=1e-6;
```

```
s0=s;
```

```
s1=s+delta;
```

```
g0=sdot (Seq, s0) ;
```

```
g1=sdot (Seq, s1) ;
```

```
dgds=(g1-g0)/delta;
```

```
end
```

Subrotina que calcula a derivada da função \dot{s} em relação à variável σ .

```
function [dgdSeq] = dsdotdSeq (Seq, s)
```

```
delta=1e-6;
```

```
Seq0=Seq;
```

```
Seq1=Seq+delta;
```

```
g0=sdot (Seq0, s) ;
```

```
g1=sdot (Seq1, s) ;
```

```
dgdSeq=(g1-g0)/delta;
```

```
end
```

Subrotina que calcula a exponencial de um tensor.

```
function [B] = exponencial (A)
```

```

[e, Lam2] = eig(A);
E1 = e(:,1)*e(:,1)';
E2 = e(:,2)*e(:,2)';
E3 = e(:,3)*e(:,3)';
Lam2 = diag(Lam2);
Lam = exp(Lam2(:));
B = Lam(1)*E1 + Lam(2)*E2 + Lam(3)*E3;

```

end

Subrotina que avalia a função f num ponto.

```
function [fn] = f(Seq,s)
```

```
global A epsilon m
```

```
fn=A*((sinh(epsilon*Seq/s))^(1/m));
```

end

Subrotina que calcula o logaritmo de um tensor.

```
function [B] = logaritmo(A)
```

```

[e, Lam2] = eig(A);
E1 = e(:,1)*e(:,1)';
E2 = e(:,2)*e(:,2)';
E3 = e(:,3)*e(:,3)';
Lam2 = diag(Lam2);
Lam = log(Lam2(:));
B = Lam(1)*E1 + Lam(2)*E2 + Lam(3)*E3;

```

end

Subrotina que avalia a função g num ponto

```
function [g] = sdot(Seq,s)
```

```
global A epsilon m h0 a stio n
```

```

Sasterisco=stio*((sinh(epsilon*Seq/s))^(n/m));
    if s<=Sasterisco
        h=h0*((1-(s/Sasterisco))^a);
    elseif s>Sasterisco
        h=-h0*((s/Sasterisco)-1)^a);
    end

g=h*(A*((sinh(epsilon*Seq/s))^(1/m)));

end

```

Subrotina que calcula a história do carregamento.

```

function [vcj, vdeltat] =
loadhistory(c1,veps1,nin1,c2,veps2,nin2)
%calcula historia de carga

ninc = nin1+nin2;
vcj = zeros(ninc,1);
vdeltat = zeros(ninc,1);

eps1 = log(1+c1);
deps1 = eps1/nin1;
deltat1 = abs(deps1/veps1);

for i = 1:nin1
    epsilon = i*deps1;
    vcj(i) = exp(epsilon);
    vdeltat(i) = deltat1;
end

eps2 = log(1+c2);
deps2 = (eps2-eps1)/nin2;
deltat2 = abs(deps2/veps2);

for i = 1:nin2
    epsilon = eps1+i*deps2;
    vcj(nin1+i) = exp(epsilon);
    vdeltat(nin1+i) = deltat2;
end

```