

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UMA ESTRUTURA VARIACIONAL PARA MATERIAIS INELÁSTICOS COM
ANISOTROPIA INDUZIDA POR DEFORMAÇÃO

por

Francisco Luiz Bresolin

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2020

UMA ESTRUTURA VARIACIONAL PARA MATERIAIS INELÁSTICOS COM
ANISOTROPIA INDUZIDA POR DEFORMAÇÃO

por

Francisco Luiz Bresolin

Mestre

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica,
PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como
parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos

Orientador: Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler

Aprovada por:

Prof. Dr. Eduardo Alberto FancelloPosMec / UFSC

Prof. Dr. Pablo Andrés Muñoz RojasCCT / UDESC

Prof. Dr. Rodrigo Rossi PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 10 de maio de 2020

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha esposa Crisliane pelo sempre presente carinho, compreensão e apoio durante todos esses anos em que estamos juntos. Espero retribuir tudo isso nos anos que virão.

Agradeço ao meu orientador Jakson pelo apoio e orientação durante os períodos de mestrado e doutorado. Obrigado pelo amadurecimento técnico e pessoal proporcionado.

Agradeço aos professores e colegas do PROMEC/UFRGS pelos ensinamentos e convivência nesse período formativo.

Agradeço aos membros das bancas de qualificação e defesa, suas contribuições elevaram a qualidade dessa proposta.

Por fim, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro para a elaboração desta tese.

RESUMO

Diferentes materiais, em especial materiais poliméricos sintéticos ou naturais, apresentam uma forte tendência ao acúmulo de comportamentos inelásticos com direções preferenciais. Como exemplos de materiais com respostas anisotrópicas, oriundas do acúmulo de inelasticidade, podem ser elencadas os elastômeros com carga e tecidos biológicos, onde se observam os comportamentos de viscoelasticidade e dano, e os materiais termoplásticos com a viscoplasticidade. Os mecanismos internos que regem a evolução da anisotropia diferem para cada material, mas de forma geral se observa que as estruturas internas destes materiais apresentam uma reorientação e/ou acúmulo de deformações permanentes orientados na direção dos carregamentos impostos. Na literatura diversos estudos experimentais apresentam evidências da anisotropia induzida pela deformação em diferentes materiais, contudo observa-se que não existe nenhum modelo consolidado para simulação numérica deste comportamento. Esta carência abre espaço para propostas com contribuição científica relevante em um tópico não muito explorado. Assim, o objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma família de modelos constitutivos para materiais que apresentem comportamentos inelásticos anisotrópicos induzidos pela deformação. Para tanto, foi desenvolvida uma estrutura para determinação dos modelos constitutivos empregando um *framework* variacional, onde foi incorporado o conceito de função de distribuição de cadeias (CODF) para obter este comportamento. Com esta estrutura foram propostos modelos para materiais com acoplamento viscoelástico e dano anisotrópicos, bem como para materiais com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação. Por fim, são apresentados exemplos numéricos para compreensão das características desta família de modelos, e para demonstrar a capacidade preditiva dos referidos fenômenos inelásticos anisotrópicos. Os resultados obtidos com os modelos desenvolvidos foram capazes de representar de forma qualitativa o comportamento de diferentes materiais poliméricos.

Palavras-chave: Anisotropia induzida pela deformação; Variacional; CODF; Dano; Plasticidade; Viscosidade.

ABSTRACT

Different materials such as synthetic and natural polymers present a tendency to accumulate oriented inelastic behaviors. As examples of materials that show anisotropic responses due to inelastic accumulation we can mention filled rubbers and soft biological tissues which show viscoelasticity and damage, and thermoplastic materials with viscoplasticity. Internal mechanisms governing the anisotropic evolution differ for each material, but in general the internal structures are observed to present a reorientation and/or accumulation of permanent deformations oriented in the direction of the imposed loads. Several experimental works in the literature present evidence of anisotropy induced by deformation in different materials, however there is no consolidated model for the numerical simulation of this behavior. Thus, the main objective of this work is to develop a family of constitutive models for materials that present anisotropic inelastic behavior induced by deformation. So, a structure was developed to determine the constitutive models using a variational framework, where the chain orientation distribution function (CODF) concept was incorporated to obtain this behavior. Models were proposed using this structure for materials with viscoelastic coupling and anisotropic damage, and materials with anisotropic viscoplasticity induced by deformation. Finally, numerical examples are presented to understand the characteristics of this family of models, and to demonstrate the predictive capability of the referred anisotropic inelastic phenomena. The results obtained with the developed models were able to qualitatively reproduce the behavior of different polymeric materials.

Keywords: Deformation-induced anisotropy; Variational; CODF; Damage; Plasticity; Viscosity.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Objetivos	3
2	MATERIAIS COM INELASTICIDADE ANISOTRÓPICA INDUZIDA PELA DEFORMAÇÃO	4
2.1	Características de materiais com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação	4
3	ESTRUTURA VARIACIONAL EMPREGANDO O CODF	24
3.1	Conceito de elemento equivalente	24
3.2	Conceito de função de distribuição da orientação da cadeia (CODF)	28
3.3	Problema constitutivo variacional de inelasticidade	32
3.4	Estrutura constitutiva variacional para materiais com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação	35
3.4.1	Representação gráfica da forma do CODF	38
3.5	Simetrias da solução numérica do modelo constitutivo inelástico isocórico	38
4	MODELOS COM INELASTICIDADE ANISOTRÓPICA INDUZIDA PELA DEFORMAÇÃO	42
4.1	Modelo com viscoelasticidade e dano mecânico anisotrópicos induzi- dos pela deformação	42
4.1.1	Potenciais para o modelo constitutivo para elastômeros com carga	46
4.1.2	Potenciais para o modelo constitutivo para tecido biológico moles	47
4.2	Modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação	48
4.2.1	Potenciais para um modelo constitutivo para materiais termoplásticos amorfos	51
5	EXEMPLOS NUMÉRICOS E RESULTADOS	56
5.1	Testes de integração do modelo com viscoelasticidade e dano ani- sotrópicos induzidos pela deformação	56

5.1.1	Integração temporal	57
5.1.2	Integração do CODF	59
5.1.3	Distribuição de tensão	61
5.2	Casos de estudo utilizando o modelo viscoelástico com dano com anisotropia induzida pela deformação	63
5.2.1	Anisotropia induzida pela deformação	63
5.2.2	Elastômeros com carga	67
5.2.3	Tecidos biológicos moles	69
5.3	Testes de integração do modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação	74
5.3.1	Tração uniaxial	74
5.3.2	Cisalhamento simples	80
5.4	Casos de estudo utilizando o modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação	86
5.4.1	Cíclico unidirecional	86
5.4.2	Cíclico bidirecional	89
5.4.3	Caso viscoplástico uniaxial	91
5.4.4	Deformações heterogêneas	92
6	CONCLUSÃO	97
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	98
APÊNDICE A	Resultados do modelo anisotrópico variacional viscoelástico isocórico com dano usando o CODF	107
APÊNDICE B	Resultados do modelo anisotrópico variacional viscoplástico isocórico usando o CODF	111
APÊNDICE C	Teoremas de representação	114

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Comportamento do módulo de relaxação de poliestireno em função da temperatura [Callister e Rethwisch, 2007]	6
Figura 2.2	Na Figura 2.2a [Callister e Rethwisch, 2007] uma micrografia eletrônica de um único cristal de polietileno, na Figura 2.2b [Sperling, 2006] uma micrografia óptica de cristais de poli(óxido de etileno)-bloco-poliestireno dibloco copolímero e na Figura 2.2c [Callister e Rethwisch, 2007] uma micrografia por transmissão (usando luz polarizada) mostrando a estrutura esferulítica do polietileno.	7
Figura 2.3	Respostas de polímeros amorfos mostrando a influência da taxa de deformação e da temperatura na tensão de início do processo viscoplástico	10
Figura 2.4	Respostas de polímeros, amorfo e semicristalino, mostrando a influência da pressão hidrostática no início do processo viscoplástico	11
Figura 2.5	Representação da deformação da estrutura cristalina de termoplásticos (legendas das figuras no texto), adaptado de Schultz, 1974.	13
Figura 2.6	Representação da resposta de tensão por deformação de ensaios uniaxiais, em grandes deformações, de termoplásticos.	14
Figura 2.7	Curvas tensão por deslocamento verdadeira e nominal de um termoplástico, ressaltando o comportamento de instabilidade da curva nominal representado pelo segmento de reta XY, adaptado de Ward e Sweeney, 2012.	15
Figura 2.8	Padrões de difração WAXS e SAXS em diferentes temperaturas. A direção de estiramento aplicada no ensaio experimental está orientada na direção vertical [Miranda et al., 2016].	17
Figura 2.9	Ilustração das mudança da morfologia devido ao estiramento. Na ilustração 2.9b as regiões azuis correspondem a mesofase [Murthy et al., 1995] e as regiões marrons são os cristais induzidos pela deformação [Miranda et al., 2016].	18

Figura 2.10	Curva de tensão média por deslocamento aplicado [Laiarindradasana et al., 2016]	19
Figura 2.11	Morfologia dos vazios para as diferentes amostras analisadas, onde os vazios estão em preto e a matriz em cinza [Laiarindradasana et al., 2016].	19
Figura 2.12	Resposta mecânica do polietileno: (a) curva tensão deformação, (b) evolução da deformação volumétrica pela deformação verdadeira [G'ssell et al., 2002]	20
Figura 2.13	Resposta do ensaio biaxial de cloropreno carregado com negro de fumo [Dargazany e Itskov, 2009]	22
Figura 3.1	Mapeamento da configuração de referência para a atual	24
Figura 3.2	Representações da cadeia polimérica inserida no material	25
Figura 3.3	Mapeamento da configuração de referência para a atual	26
Figura 3.4	Representação de uma microesfera contendo n cadeias poliméricas	29
Figura 3.5	Representação dos vetores de integração da Tabela 3.1	32
Figura 3.6	Representação por modelo reológico do constitutivo estudado	36
Figura 3.7	Exemplos de distribuição de variáveis de estado internas	39
Figura 4.1	Representação por modelo reológico do modelo com dano e viscosidade	43
Figura 4.2	Representação por modelo reológico do modelo viscoplástico	49
Figura 4.3	Exemplo da evolução de $\frac{\partial \varphi^p}{\partial \lambda^p}$ em relação à λ^p	53
Figura 4.4	Resposta s por ε^p	54
Figura 4.5	Exemplo da resposta para s com parâmetros escolhidos	54
Figura 5.1	Alongamento imposto no teste para diferentes α	57
Figura 5.2	Resposta de tensão para diferentes α , com diferentes números de incrementos N em cada caminho de carregamento e descarregamento.	58
Figura 5.3	Carregamentos impostos nos testes monotônico uniaxial e de cisalhamento simples	60
Figura 5.4	Resposta monotônica uniaxial e de cisalhamento simples para diferentes \bar{m}	60

Figura 5.5	Resposta de tensão uniaxial para diferentes números de pontos de integração \bar{m} e número de incrementos N para cada caminho de carregamento e descarregamento.	61
Figura 5.6	Distribuição de tensão radial para diferentes números de pontos de integração (\bar{m})	62
Figura 5.7	Evolução da forma do CODF usando a variável de dano η para o carregamento uniaxial compressivo-trativo.	64
Figura 5.8	Carregamentos imposto e resposta de tensão verdadeira uniaxial	65
Figura 5.9	Evolução da forma do CODF usando a variável $\log \lambda^v$ para os testes de fluência no plano $x - y$	66
Figura 5.10	Carregamento e resposta de deformação viscosa nos testes de fluência no plano $x - y$	66
Figura 5.11	Pressão aplicada	67
Figura 5.12	Distribuição de tensão, dano e deformação em $t = 50[s]$	68
Figura 5.13	Tensão J2 e o dano máximo no centro da membrana, no marcador A, e na fronteira, no marcador B (conforme apresentado na Figura 5.12)	69
Figura 5.14	Dimensões do modelo de artéria	70
Figura 5.15	Curva de pressão interna	70
Figura 5.16	Resposta mecânica do tubo no último instante de tempo ($t = 35s$)	72
Figura 5.17	Deslocamento radial e evolução das variáveis internas da família de fibras	73
Figura 5.18	Curvas tensão deformação para o caso uniaxial com diferentes quantidades de termos de integração	75
Figura 5.19	Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 1$	75
Figura 5.20	Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 3$	76
Figura 5.21	Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 7$	77
Figura 5.22	Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 43$	78
Figura 5.23	Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 85$	79
Figura 5.24	Curvas tensão deformação para o caso cisalhante com diferentes quantidades de termos de integração	81

Figura 5.25	Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 3$	82
Figura 5.26	Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 7$	83
Figura 5.27	Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 43$	84
Figura 5.28	Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 85$	85
Figura 5.29	Condições de contorno do caso cíclico unidirecional para os diferentes instantes apresentados na Figura 5.30.a	87
Figura 5.30	Resposta de tensão e distribuição do CODF usando a variável λ^p em diferentes instantes com carregamento unidirecional	88
Figura 5.31	Condições de contorno do caso cíclico bidirecional para os diferentes instantes apresentados na Figura 5.32.a	89
Figura 5.32	Resposta de tensão e distribuição do CODF usando a variável λ^p em diferentes instantes no caso com carregamento bidirecional	90
Figura 5.33	Curvas tensão deformação para diferentes taxas de deformação	92
Figura 5.34	Geometrias do caso com deformações heterogêneas	93
Figura 5.35	Respostas de tensão e da distribuição de alongamento plástico em pontos do problema com os entalhes alinhados	94
Figura 5.36	Respostas de tensão e da distribuição de alongamento plástico em pontos do problema com os entalhes desalinhados	95
Figura C.1	Representação da objetividade para dois sistemas de coordenadas distintos, onde e_1 e e_2 são as direções do sistema de coordenadas	116
Figura C.2	Representações de funções tensoriais isotrópica e anisotrópica	119
Figura C.3	Representação de uma função tensorial isotrópica com tensor estrutural	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Exemplos de vetores de integração e pesos para a integração numérica da esfera da quadratura de Lebedev	31
Tabela 5.1	Parâmetros constitutivos para os testes de integração	57
Tabela 5.2	Custo computacional (tc) em segundos para obter a solução para diferentes \bar{m}	63
Tabela 5.3	Parâmetros constitutivos do modelo de elastômero com carga para o teste de dano	64
Tabela 5.4	Parâmetros constitutivos do modelo para elastômero com carga para o teste viscoso	65
Tabela 5.5	Parâmetros de material para o teste de inflação de membrana . . .	67
Tabela 5.6	Parâmetros de material para o teste da artéria	71
Tabela 5.7	Parâmetros constitutivos das duas famílias de fibra	71
Tabela 5.8	Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos	86
Tabela 5.9	Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos com viscoplasticidade	91
Tabela 5.10	Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos	93
Tabela C.1	Bases funcionais e geradores, para diferentes conjuntos de medidas escalares (a), vetoriais (\mathbf{a}) e tensoriais simétricas (\mathbf{A}, \mathbf{B}) empregadas em funções tensoriais isotrópicas com uma saída tensorial de segunda ordem	118

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A, B	tensores de segunda ordem simétricos
C_0	função de distribuição de cadeias no instante inicial
C	função de distribuição de cadeias no instante atual
C	deformação de Cauchy-Green direita
\bar{C}	deformação de Cauchy-Green direita isocórica
d^v	variável interna viscosa
d^p	variável interna viscoplástica
e_i	conjunto de vetores unitários e ortogonais
e_i^+	conjunto de vetores unitários e ortogonais transformados linearmente por R
D	dissipação de energia
\bar{D}	parcela simétrica do gradiente de velocidade isocórico
F	gradiente de deformação (mapeamento linear do contínuo de elementos $d\mathbf{X}$ para $d\mathbf{x}$)
\bar{F}	gradiente de deformação isocórico
g	função tensorial
\mathcal{G}, \mathcal{D}	grupos de simetria
h_k	k -ésimo peso da integração numérica do CODF
I	matriz identidade
J	jacobiano ($\det \mathbf{F}$)
m	parâmetro constitutivo do tipo de comportamento da taxa de deformação plástica; quantidade de termos para integração da esfera do CODF
\bar{m}	quantidade de termos para integração de meia esfera do CODF
\mathbf{m}_0	orientação de uma cadeia na configuração de referência
$\mathbf{m}_{0,k}$	k -ésima direção de integração numérica do CODF
m	orientação de uma cadeia na configuração deformada
n	número de cadeias poliméricas em uma microesfera

q	conjunto de variáveis internas em uma direção de integração; variável interna viscosa incremental
Q	conjunto de variáveis internas
\mathcal{L}	função de Langevin
\bar{L}	gradiente de velocidade isocórico
r	medida de resíduo do método de Newton
\mathbf{r}	segmento de reta
\mathbf{R}	tensor de transformação linear
\mathbf{S}	segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff
\mathbf{S}_i	tensores de transformações de reflexão
t	variável de tempo
U	potencial volumétrico
\mathbf{X}	posição na configuração de referência
\mathbf{x}	posição na configuração deformada
Y	função do potencial modelo de dano
W	potencial de energia livre
H	parâmetro constitutivo de rigidez plástica
Y_0	parâmetro constitutivo que define o valor inicial de Y no modelo de dano
k^e	parâmetro constitutivo do modelo de Holzapfel
s	medida da resistência intramolecular
s_0	parâmetro constitutivo do valor inicial da medida s
s^*	parâmetro constitutivo do valor final da medida s
h_0	parâmetro constitutivo da rigidez da medida s

Símbolos Gregos

α	parâmetro de integração temporal
α_{min}	parâmetro que minimiza erro de integração temporal
Υ_0	região na configuração de referência
Υ	região na configuração deformada
Δ	mapeamento linear da subestrutura de elementos \mathbf{m}_0 para \mathbf{m}
λ	medida de alongamento total
λ^e	medida de alongamento elástico

λ^i	medida de alongamento inelástico
λ^v	medida de alongamento viscoso
λ^p	medida de alongamento plástico
η	variável interna de dano
ε^p	medida do acumulador plástico
Ω_0	domínio de uma microesfera na configuração de referência
Ω	domínio de uma microesfera na configuração deformada
φ	potencial de energia
φ^e	potencial de energia elástico
φ^i	potencial de energia inelástico
θ_0	ângulo de elevação do vetor \mathbf{m}_0
θ	ângulo de elevação do vetor \mathbf{m}
ϕ_0	ângulo azimutal do vetor \mathbf{m}_0
ϕ	ângulo azimutal do vetor \mathbf{m}
ψ	potencial de energia dissipativo
ψ^v	potencial de energia dissipativo viscoso
ψ^η	potencial de energia dissipativo de dano
ω	função que descreve a deformação de um corpo
$\bar{\omega}$	função do potencial de energia
$\bar{\omega}^e$	função do potencial de energia elástico
$\bar{\omega}^{ed}$	função do potencial de energia elástico com dano
$\bar{\omega}^i$	função do potencial de energia inelástico
$\bar{\omega}^v$	função do potencial de energia viscoinelástico
$\bar{\phi}^v$	função do potencial de energia viscoso
$\bar{\phi}^\eta$	função do potencial de energia de dano
Ξ	potencial efetivo
Ψ	potencial incremental total
$\bar{\Psi}$	parcela do potencial incremental Ψ que depende das variáveis internas
Ψ_k	potencial incremental associado à k -ésima direção de integração do CODF
$\bar{\Psi}_k$	parcela do potencial incremental Ψ_k que depende das variáveis internas
Ψ^{num}	potencial incremental total com integração aproximada do CODF
$\bar{\Psi}_f$	potencial incremental de fibra

μ	parâmetro constitutivo do potencial elástico
γ	parâmetro constitutivo de rigidez viscoinelástica
δ	parâmetro constitutivo que determina a evolução do dano
η_{mf}	parâmetro constitutivo que determina o valor máximo de dano
σ_0	parâmetro constitutivo de tensão de escoamento inicial
β	parâmetro constitutivo do potencial de dano
ζ	parâmetro constitutivo do potencial de dano
μ_R	parâmetro constitutivo de rigidez plástica
λ_{lock}	parâmetro constitutivo do potencial plástico que limita a medida λ^i
$\dot{\varepsilon}_0^i$	parâmetro constitutivo do potencia viscoplástico que normalização a medida $\dot{\varepsilon}^i$

1 INTRODUÇÃO

Diferentes tipos de materiais apresentam comportamentos mecânicos com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação, como por exemplo, respostas com viscoelasticidade, plasticidade ou dano anisotrópicos. Em especial, materiais poliméricos sintéticos ou naturais apresentam uma forte tendência ao acúmulo de comportamentos inelásticos com direções preferenciais. Alguns exemplos destes comportamentos podem ser encontradas em aplicações como absorvedores de impacto, mecanismos flexíveis e aplicações de polímeros em geral submetidos a grandes deformações [Mills e Gilchrist, 2008; Shuaeib et al., 2007; Qiu et al., 2016]. Contudo, as formulações constitutivas necessárias para representar estes materiais em regimes que apresentam estes tipos de comportamentos inelásticos são limitadas, e muitas vezes não são capazes de representar os comportamentos anisotrópicos observados na literatura.

Elastômeros com carga, por exemplo, são conhecidas por apresentar efeito Mullins que pode se traduzir na redução da rigidez do material quando submetido a carregamentos cíclicos. Além deste comportamento, dependendo da blenda usada para a fabricação, o efeito Mullins pode também estar associado ao fenômeno de viscoelasticidade [Roland, 2006; Le Cam et al., 2013; Wang e Chester, 2018; Morishita et al., 2019; Sriring et al., 2020]. Em Dargazany e Itskov, 2009 foi investigado o comportamento anisotrópico do efeito Mullins usando corpos de prova biaxiais de um elastômero carregada com negro de fumo, e os resultados obtidos mostraram que o efeito Mullins apresenta comportamento anisotrópico e que existe um acoplamento viscoelástico nestes comportamentos. Em Mai et al., 2017 mostrou-se também que o efeito Mullins é observado em diferentes tipos de carregamentos, sendo dependente do máximo alongamento em uma dada direção mas independente do alongamento aplicado em outras direções. Para esta classe de materiais, diversos modelos foram desenvolvidos com dano e viscoelasticidade isotrópicos como nos trabalhos de Govindjee e Simo, 1991; Souza e Owen, 1994; Miehe e Keck, 2000. Nestes trabalhos modelos hiperelásticos clássicos são associados a variáveis escalares de dano e viscosidade que resultam no comportamento isotrópico destes modelos. Mais recentemente foram desenvolvidos modelos que apresentam comportamento de dano anisotrópico, seguindo o desenvolvimento de modelos capazes de representar este comportamento [Dargazany e Itskov, 2009], utilizando o conceito de função de distribuição de orientação de

cadeias [Göktepe e Miehe, 2005; Diani et al., 2006; Dargazany e Itskov, 2009; Itskov e Knyazeva, 2016; Tehrani e Sarvestani, 2017; Diani e Le Tallec, 2019]. Porém sua capacidade preditiva ainda é limitada.

Tecidos biológicos moles apresentam comportamentos bastante similares àqueles observados em elastômeros com carga, podendo ser mais ou menos anisotrópicos dependendo do tecido e da distribuição de fibra. Comportamentos altamente não-lineares comumente observados em tecidos biológicos são viscoelasticidade, dano mecânico e anisotropia [Li, 2016; Holzapfel, 2017; Fathi et al., 2017]. Dano anisotrópico especificamente é levado em consideração nas propostas de modelagem constitutiva em Alastrué et al., 2007; Ehret e Itskov, 2009; Sáez et al., 2012; Fathi et al., 2017; Gültekin et al., 2018. Contudo, ao contrário das leis constitutivas empregadas para elastômeros com carga, para os tecidos biológicos moles são empregadas leis constitutivas exponenciais devido as características das fibras dispersas na estrutura [Chuong e Fung, 1986; Holzapfel et al., 2000a].

Por sua vez, materiais termoplásticos apresentam um forte comportamento viscoplástico, onde se observa um enrijecimento anisotrópico do material associado à reorientação das cadeias poliméricas quando em grandes deformações, enquanto os comportamentos viscoplásticos são associados a resistência de reorientação destas cadeias no material [Arruda e Boyce, 1993a; Boyce et al., 2000; Anand e Gurtin, 2003]. Para a determinação da resposta mecânica destes materiais muitas vezes assume-se que a resposta de enrijecimento do material incorpora uma resposta elastomérica para a parcela plástica do gradiente de deformação, dado que o enrijecimento e a reorientação das cadeias do polímero durante a deformação plástica apresentam as mesmas características observadas em elastômeros [Arruda e Boyce, 1993a]. Diferentes modelos de plasticidade anisotrópica foram desenvolvidos baseados nestas hipóteses [Boyce et al., 1988; Arruda et al., 1993; Hasan e Boyce, 1995; Arruda et al., 1995; Buckley e Jones, 1995; Tomita e Tanaka, 1995].

Uma abordagem promissora para tratar os comportamentos destes diferentes materiais poliméricos se dá pelo conceito orientações de cadeias. Este conceito está baseado em uma rede de cadeias de links rígidos, aleatoriamente orientados ligadas a pontos de junção [Treloar, 1975]. Originalmente este conceito foi desenvolvido para buscar representar as ligações cruzadas poliméricas existentes entre as macromoléculas destes materiais [Treloar, 1975; Wu e Van der Giessen, 1993]. Modelos bastante difundidos na literatura para elastômeros [Treloar, 1975; Arruda e Boyce, 1993b] e para termoplásticos [Arruda

e Boyce, 1993a; Anand e Gurtin, 2003] empregam este conceito com um número limitado de cadeias, como por exemplo de três e oito cadeias, para as orientações das cadeias poliméricas.

Os modelos de três e oito cadeias são uma aproximação do caso onde as cadeias estão aleatoriamente orientadas. Uma alternativa que representa de maneira mais aproximada uma cadeia completa, no sentido de todas as direções serem contempladas, é por meio do conceito da função de distribuição de orientação de cadeias (*chain orientation distribution function*) ou CODF [Wu e Van der Giessen, 1993]. Este conceito é empregado para representar a resposta de elastômeros [Wu e van der Giessen, 1992], termoplásticos amorfos [Harren, 1995; Miehe et al., 2009; Alastrué et al., 2009; Harrysson et al., 2010] e termoplásticos semicristalinos [Shepherd et al., 2006].

Por fim, observa-se que não existe nenhum modelo consolidado, e/ou que faça uso dos principais conceitos do CODF usados na simulação de materiais inelásticos com anisotropia induzida pela deformação. Esta carência abre espaço para propostas com contribuição científica relevantes em um tópico não muito explorado.

1.1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma família de modelos constitutivos para materiais que apresentem comportamentos inelásticos anisotrópicos induzidos pela deformação.

Para o desenvolvimento dos modelos constitutivos pretende-se empregar um *framework* variacional e incorporar o conceito de função de distribuição de cadeias (CODF) para obter o comportamento de inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação. Este *framework* está baseado nos trabalhos de Ortiz e Stainier, 1999; Fancello et al., 2006, 2008, que foi empregado com sucesso para reproduzir diferentes comportamentos como: viscosidade [Fancello et al., 2006]; plasticidade (viscoplasticidade) [Fancello et al., 2008]; dano [Vassoler et al., 2016; de Castro e Fancello, 2017]; e anisotropia [Vassoler et al., 2016].

2 MATERIAIS COM INELASTICIDADE ANISOTRÓPICA INDUZIDA PELA DEFORMAÇÃO

Para o desenvolvimento de modelos constitutivos é essencial o conhecimento do comportamento mecânico do material de interesse. Com o objetivo de compreender as respostas mecânicas de materiais com comportamento inelástico anisotrópico induzido pela deformação, e suas dependências, nesta seção as características de interesse destes materiais são apresentadas. Além disso, características de alguns modelos constitutivos desenvolvidos são discutidas, e diferentes observações pertinentes em relação a estes materiais são apresentadas.

2.1 Características de materiais com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação

Diferentes tipos de materiais apresentam comportamentos mecânicos com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação. Em especial os materiais poliméricos podem apresentar uma grande diversidade de propriedades físicas e químicas sendo empregados nas mais diversas aplicações. As propriedades mecânicas destes materiais, em especial, são dependentes de sua composição química, e da organização de sua estrutura a nível molecular e supermolecular [Ward e Sweeney, 2012].

Os polímeros, como elastômeros sintéticos e naturais e termoplásticos, podem apresentar diferentes estruturas cristalinas em sua estrutura que podem promover diferentes comportamentos mecânicos, os quais podem ser complexos para serem representados numericamente. A anisotropia induzida pela deformação é apenas um destes fenômenos. A cristalinidade em polímeros corresponde a um arranjo tridimensional das cadeias poliméricas de forma regular e ordenada na forma de lamelas, onde desordens ao longo da cadeia polimérica destroem a estrutura cristalina promovendo a formação da estrutura amorfa. O grau de organização cristalina dificilmente corresponde a totalidade do material assim, materiais poliméricos com presença de cristais, apresentam uma estrutura cristalina inserida em uma matriz amorfa e são denominados polímeros semicristalinos, apresentando uma estrutura bifásica formada por uma parcela amorfa e outra cristalina [Callister e Rethwisch, 2007; Ward e Sweeney, 2012].

Polímeros amorfos apresentam um baixo nível de empacotamento, ou seja, apresen-

tam grande volume livre (em inglês *free volume*). O volume livre é definido como o espaço vazio entre as cadeias poliméricas do polímero que está associada a organização molecular do polímero. Nas regiões cristalinas de polímeros semicristalinos, dada sua organização tridimensional e alto nível de empacotamento, ocorre uma relevante redução do volume livre presente em comparação com as regiões amorfas [Ward e Sweeney, 2012]. No entanto, ressalta-se que o volume livre não corresponde a uma medida do tipo de organização presente no material. Diferentes regiões amorfas de um mesmo polímero podem apresentar diferentes níveis de volume livre dependendo, por exemplo, do esforço mecânico, temperatura e deformações permanentes ao qual o material esteja submetido. O conceito de volume livre é empregado em diferentes teorias para explicar comportamentos mecânicos dos termoplásticos.

Diversos polímeros ao serem resfriados do estado de fluido viscoso podem apresentar uma estrutura considerada amorfa, os quais podem assumir comportamentos com as denominações vítrea e borrachosa. O comportamento exibido pelos materiais amorfos depende da temperatura relativa em relação a temperatura de transição vítrea [Ward e Sweeney, 2012]. Assim, conforme apresentado na Figura 2.1, um mesmo polímero amorfo pode apresentar comportamentos vítreos ou borrachosos, conforme a temperatura de transição vítrea (T_g) e a temperatura em que o material se encontra. Se observa que, comparativamente, os materiais em estado vítreo apresentam módulos de elasticidade maiores em relação aos materiais com comportamento borrachoso. Verifica-se também que os polímeros amorfos ao serem aquecidos apresentam, em geral, o mesmo volume livre até atingir a temperatura de transição vítrea, após esta temperatura o volume livre aumenta de forma linearmente dependente da temperatura [Ward e Sweeney, 2012].

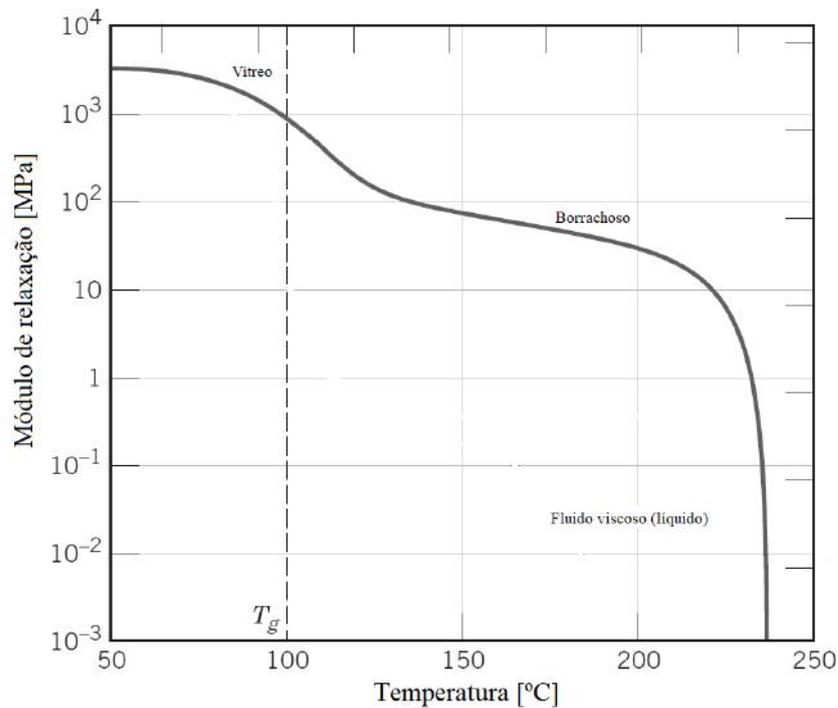


Figura 2.1 – Comportamento do módulo de relaxação de poliestireno em função da temperatura [Callister e Rethwisch, 2007]

Empregando técnicas de difração de raios X é possível observar que polímeros amorfos apresentam um padrão de difração com um máximo amplo e difuso (halo amorfo), indicando uma distância preferencial de separação entre as cadeias poliméricas. Caso este mesmo polímero amorfo seja estirado ocorre uma reorientação das cadeias poliméricas, e o padrão de difração se altera. Embora ocorra uma reorientação das cadeias poliméricas, isso não implica em um ordenamento tridimensional das cadeias poliméricas, o que caracterizaria uma região cristalina no polímero e ganharia a denominação de cristalito. No entanto, no caso do politereftalato de etileno (conhecido comumente como PET) ao ser estirado ocorre, além da reorientação das cadeias poliméricas, a formação de pequenas regiões com ordenamento tridimensional [Ward e Sweeney, 2012].

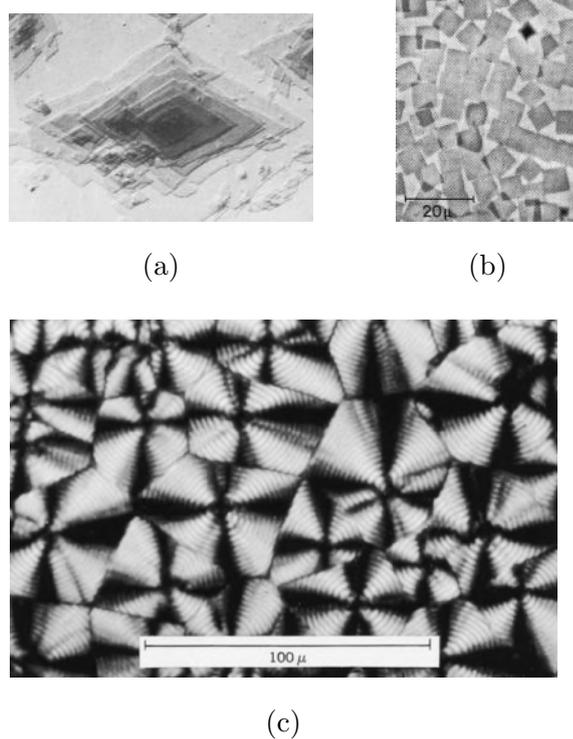


Figura 2.2 – Na Figura 2.2a [Callister e Rethwisch, 2007] uma micrografia eletrônica de um único cristal de polietileno, na Figura 2.2b [Sperling, 2006] uma micrografia óptica de cristais de poli(óxido de etileno)-bloco-poliestireno dibloco copolímero e na Figura 2.2c [Callister e Rethwisch, 2007] uma micrografia por transmissão (usando luz polarizada) mostrando a estrutura esferulítica do polietileno.

Diversos materiais poliméricos, incluindo o politereftalato de etileno, também apresentam cristalização caso sejam resfriados lentamente do estado de líquido viscoso, exemplos de cristalitos podem ser observados nas Figuras 2.2a e 2.2b. Nestes casos os materiais, embora cristalinos, não apresentam uma orientação preferencial. Tais materiais processados desta forma, embora não apresentem orientação preferencial, não são homogêneos em escala microscópica, apresentando estruturas esferulíticas podendo ser observados através de microscópios, conforme apresentado na Figura 2.2c [Ward e Sweeney, 2012]. A estrutura esferulítica, conforme o próprio nome indica, cresce de forma mais ou menos grosseira no formato de uma esfera, consistindo de agregados de cristalitos em forma de cadeias dobradas, onde cada cristalito cresce de dentro para fora a partir de um único ponto de nucleação [Callister e Rethwisch, 2007].

Para um material polimérico ser capaz de apresentar estruturas cristalinas a sua

cadeia polimérica deve apresentar estrutura regular, a temperatura do polímero deve estar abaixo da temperatura de formação do cristal, e tempo suficiente deve estar disponível para as moléculas se reordenarem enquanto o polímero estiver no estado sólido [Ward e Sweeney, 2012]. Materiais poliméricos que apresentam estruturas cristalinas em sua composição são geralmente parcialmente cristalinos (ou semicristalinos) devido ao tamanho e a usual complexidade das cadeias poliméricas que os compõem. Assim apresentam regiões cristalinas dispersas dentro de uma matriz amorfa [Callister e Rethwisch, 2007]. De modo a determinar estas regiões cristalinas, técnicas de difração de raios X em ângulo largo (WAXS) podem ser empregadas em polímeros que tenham sofrido grande estiramento. Nestes casos os padrões de difração obtidos correspondem a cristais totalmente orientados na direção do estiramento aplicado [Ward e Sweeney, 2012].

Além da difração devido à presença de cristalitos, os padrões de difração obtidos contemplam também a parcela amorfa, representada pela difração difusa. Comparando as parcelas cristalinas e amorfas de alguns polímeros semicristalinos escolhidos, por meio de medições utilizando difração por raios X, a parcela de material em estado cristalino se encontra em torno de 30% para o politereftalato de etileno orientado e 90% para o polietileno linear [Ward e Sweeney, 2012].

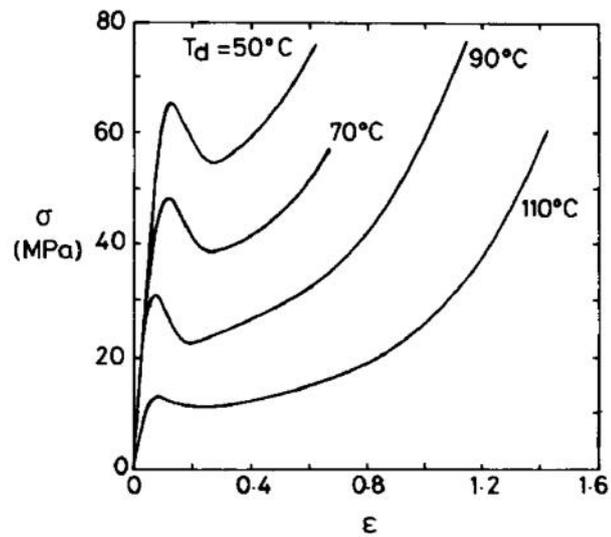
Embora existam controvérsias quanto à cristalização diretamente do resfriamento, existem diversas evidências que suportam a presença de estruturas lamelares organizadas denominadas esferulitas, inseridas em uma matriz de material polimérico amorfo para polímeros semicristalinos. O material polimérico semicristalino dito virgem (sem ter sofrido estiramento) apresenta estruturas esferulíticas distribuídas no material ao ser resfriado de forma lenta a partir de seu estado líquido viscoso. Caso este polímero semicristalino virgem seja estirado, a destruição das estruturas esferulíticas ocorre devido à deformação plástica (em inglês *drawing* neste contexto) que o material sofre. De modo a tratar deste comportamento, diferentes teorias constitutivas (físicas e fenomenológicas) foram desenvolvidas buscando representar estas observações [Ward e Sweeney, 2012; Watanabe, 1999].

O comportamento de acúmulo de deformações permanentes em polímeros foi inicialmente atribuído ao calor gerado pelo processo de deformação, e do conseqüente aumento da temperatura do material acima da temperatura de transição vítrea. Alternativamente, sugeriu-se que o acúmulo de deformação permanente fosse devido ao aumento do volume

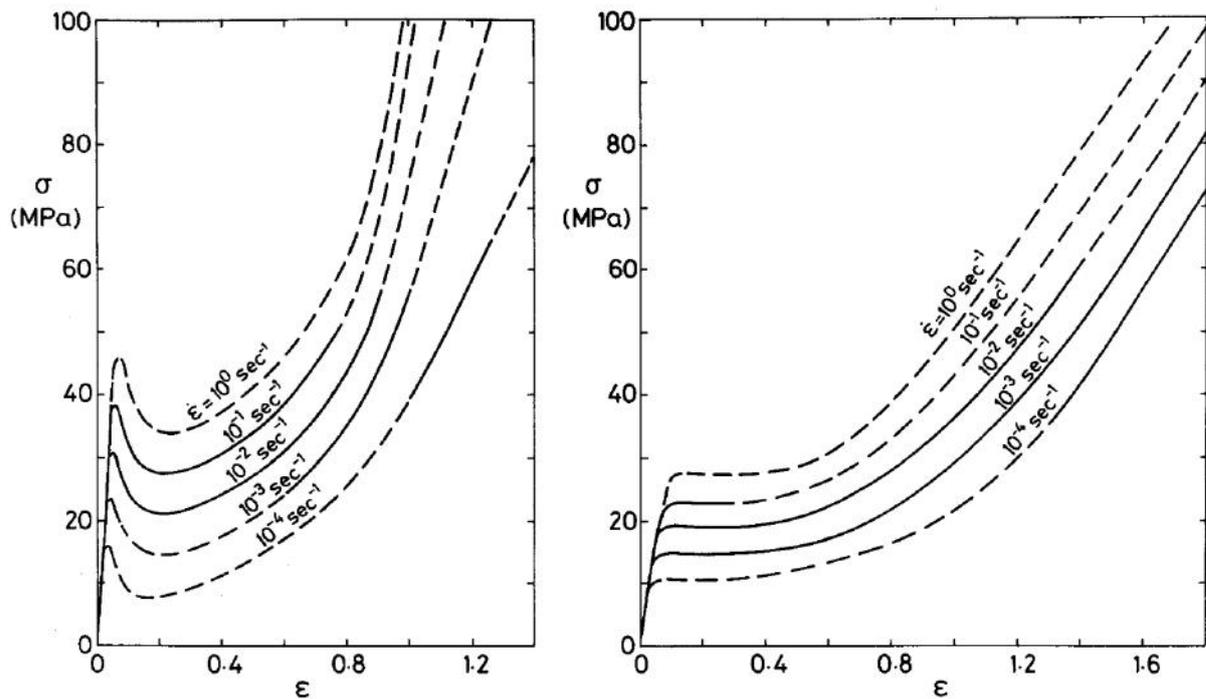
livre, o que geraria uma mobilidade molecular similar àquela produzida devido à geração de calor no material [Argon, 1973]. Embora o aquecimento do material e o aumento do volume livre contribuam para o acúmulo de deformações permanentes, atualmente está bem estabelecido que, a partir do trabalho de Argon, 1973, para polímeros amorfos o comportamento viscoplástico se inicia quando ocorre a rotação de pequenos segmentos moleculares de sua configuração aleatoriamente orientada para uma orientação flexionada na direção principal da deformação [Argon, 1973; Ghorbel, 2008; Miehe et al., 2009]. Em Argon, 1973 foi verificado também que a tensão de início do processo viscoplástico é dependente da pressão, temperatura e taxa de deformação e sua evolução é dependente de uma medida de alongamento plástico.

Evidências experimentais da dependência da temperatura e da taxa de deformação na tensão de início do processo viscoplástico em um dado polímero amorfo são dadas, respectivamente, em Hope et al., 1980a,b. Nestes trabalhos, ensaios de tração foram realizados em corpos de prova de polimetilmetacrilato (PMMA), submetidos a deformações finitas, onde foram observados os processos de estricção e estiramento. Nas Figuras 2.3a e 2.3b são apresentados diferentes gráficos tensão por deformação sendo possível visualizar a alteração na tensão de início do processo viscoplástico, respectivamente, para diferentes temperaturas e taxas de deformação. Para o caso da dependência da resposta mecânica em relação à pressão hidrostática em termoplásticos, no trabalho de Rabinowitz et al., 1970 ensaios de torção em corpos de provas de PMMA e PET foram realizados em diferentes pressões hidrostáticas, onde os corpos de prova foram testados em contato direto com óleo pressurizado. Por meio destes testes fica evidenciado, conforme apresentado nas Figuras 2.4a e 2.4b, a influência da pressão hidrostática na tensão de início do processo viscoplástico e possivelmente na rigidez do material.

Para polímeros semicristalinos com alto grau de cristalinidade, e acima da temperatura de transição vítrea, a deformação da estrutura amorfa é rapidamente exaurida e a deformação restante ocorre primariamente na estrutura cristalina [Schultz, 1974; Meyer e Pruitt, 2001]. Dessa forma, para pequenas deformações, tanto em polímeros amorfos quanto em semicristalinos, o comportamento que antecede aquele da região viscoplástica é governado pela fase amorfa. Assim, embora as propriedades mecânicas dos materiais amorfos e semicristalinos sejam diferentes, em pequenas deformações para ambos a resposta do material é dependente do emaranhamento e das deformações das cadeias

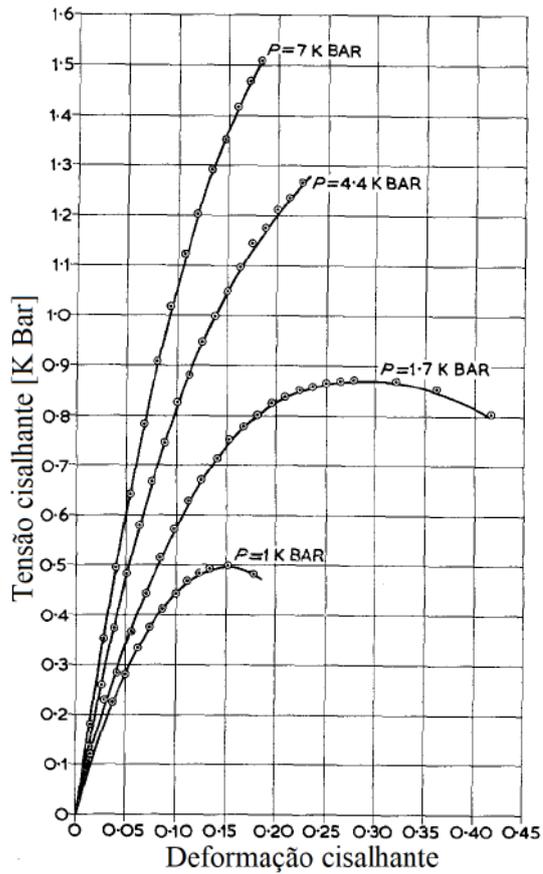


(a) Resposta do PMMA para diferentes temperaturas [Hope et al., 1980a]

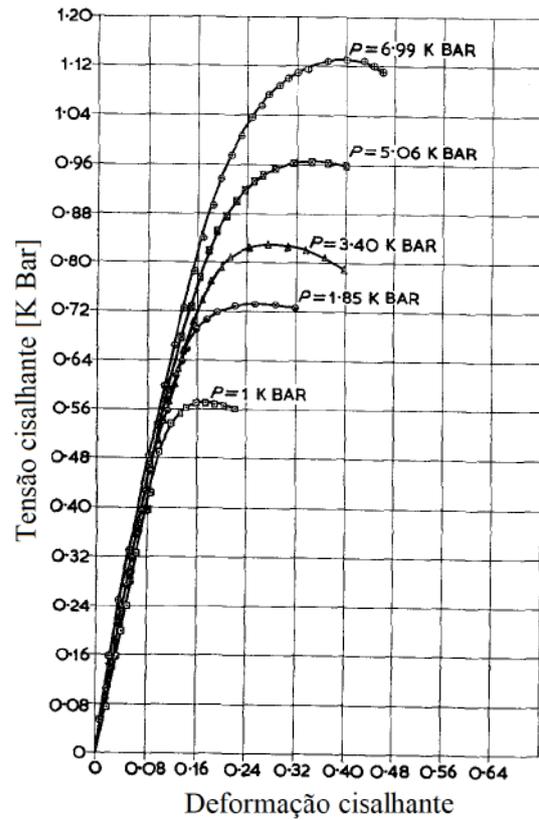


(b) Respostas de dois diferentes *grade* de PMMA para diferentes taxas de deformação [Hope et al., 1980b]

Figura 2.3 – Respostas de polímeros amorfos mostrando a influência da taxa de deformação e da temperatura na tensão de início do processo viscoplástico



(a) Resposta do PMMA amorfo para diferentes pressões hidrostáticas [Rabinowitz et al., 1970]



(b) Resposta do PET semicristalino para diferentes pressões hidrostáticas [Rabinowitz et al., 1970]

Figura 2.4 – Respostas de polímeros, amorfo e semicristalino, mostrando a influência da pressão hidrostática no início do processo viscoplástico

poliméricas presentes na fase amorfa [Ghorbel, 2008]. Após o início do comportamento viscoplástico em materiais semicristalinos, diferentes comportamentos no arranjo cristalino ocorrem, como o escorregamento cristalográfico e alterações nos cristais do polímero como a formação de estruturas martensíticas entre outras transformações cristalográficas [Frank et al., 1958; Wu et al., 1972]. A separação interlamelar apresentada em deformações de tração também pode resultar no embranquecimento (em inglês *whitening*) do material e na cavitação/formação de microvazios ou cavidades (em inglês *cavitation*) [Meyer e Pruitt, 2001].

Em Brown e Ward, 1968 ensaios de tração foram realizados empregando corpos de prova de um termoplástico semicristalino (polietileno) previamente estirado. Diferentes ângulos entre a direção de tração do ensaio, e o ângulo de estiramento prévio do material foram testados e os resultados como ângulo de estiramento resultante foram discutidos. Verificou-se em Brown e Ward, 1968 que mesmo em polímeros orientados, existem cadeias orientadas em todas as direções, mas com diferentes densidades para cada direção, e que o esforço necessário para aplicar uma compressão na cadeia estendida é maior que aquele necessário para aplicar uma tração nesta mesma cadeia. Finalmente, conforme colocado no trabalho, ambos estes princípios devem ser aplicáveis tanto em materiais amorfos quanto semicristalinos.

Na Figura 2.5 representações da evolução da estrutura cristalina de materiais termoplásticos são apresentadas para diferentes graus de deformação, englobando grandes deformações e deformações plásticas. Na Figura 2.5a as lamelas escorregam rigidamente umas sobre as outras, neste estágio a deformação fica acomodada praticamente em sua totalidade na fase amorfa, na Figura 2.5b as cadeias que fazem parte de mais de uma lamela (em inglês *tie chains*) estão altamente estendidas, e alguns escorregamentos entre as cadeias poliméricas das lamelas passam a ocorrer, na Figura 2.5c blocos cristalinos são arrancados das lamelas, mas continuam ligados às lamelas por algumas cadeias poliméricas remanescentes (*tie chains*) e finalmente na Figura 2.5d os blocos cristalinos se alinham na direção do esforço de tração do material [Schultz, 1974].

Uma característica peculiar apresentada por materiais termoplásticos em ensaios de tração, ao serem comparados com materiais metálicos, é que após a formação de pescoço, ou estrição, ocorre estiramento (em inglês *drawing*) sem a ruptura imediata do espécime. Nas regiões onde o material sofreu grandes deformações ocorre o acúmulo de

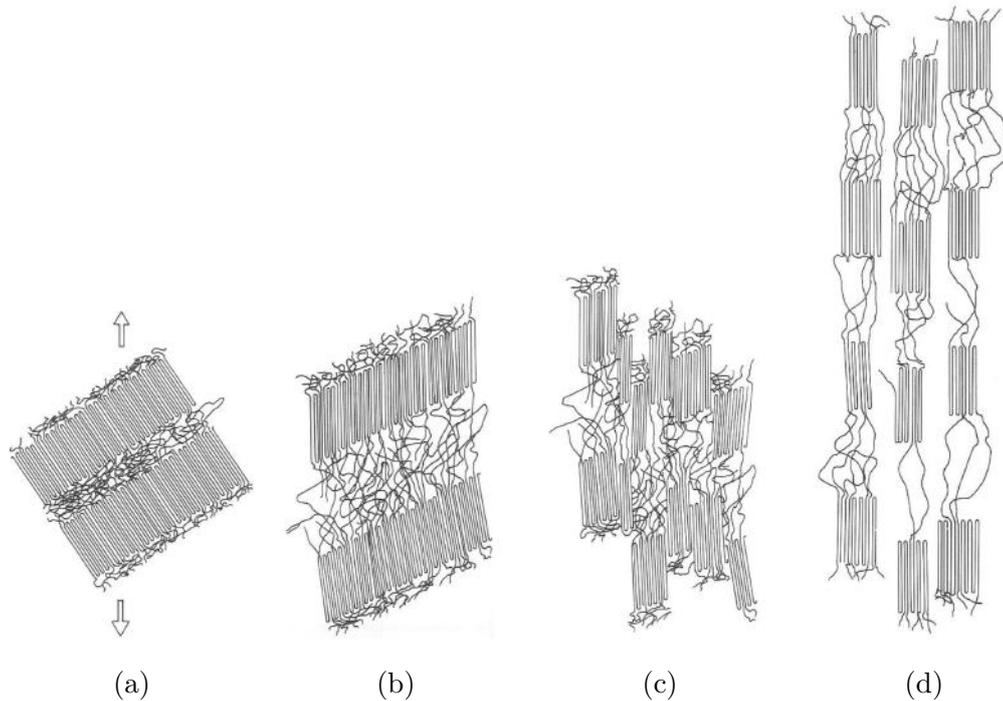


Figura 2.5 – Representação da deformação da estrutura cristalina de termoplásticos (legendas das figuras no texto), adaptado de Schultz, 1974.

deformações permanentes, e devido às características do material em questão ocorre o enrijecimento na direção principal de deformação, ocasionando o estiramento do material o que se traduz na estabilização na área da seção transversal da região de estrição, a qual se propaga ao longo do espécime. Este comportamento está associado ao realinhamento das cadeias poliméricas, que devido às deformações permanentes impostas ao material sofrem uma reorientação na direção do esforço aplicado, enrijecendo-o nessa direção. Este comportamento ocorre principalmente quando o espécime está submetido a baixas taxas de deformação, dado que para altas taxas de deformação a tensão de início do processo viscoplástico pode ser alta a ponto de romper o corpo.

Para termoplásticos a curva tensão deformação nominal pode ser completamente diferente da curva tensão deformação real, uma representação das curvas tensão deformação real e nominal de termoplásticos nestas condições pode ser visualizada na Figura 2.6. Esta diferença ocorre devido à cinemática localizada envolvida em grandes deformações, na qual pela formação do pescoço perde-se a relação entre a curva tensão deformação real e a resposta de força por deslocamento. Este comportamento pode ocorrer em materiais termoplásticos amorfos e semicristalinos [G'sell et al., 2002], submetidos

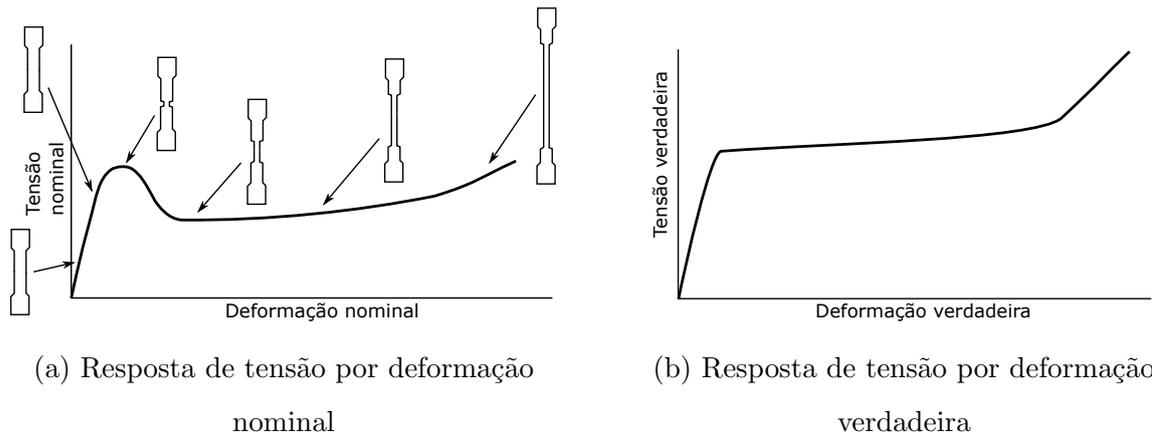


Figura 2.6 – Representação da resposta de tensão por deformação de ensaios uniaxiais, em grandes deformações, de termoplásticos.

a grandes deformações. Conforme colocado em Frank e Brockman, 2001, a estricção e o estiramento mascaram a resposta de tensão, sendo necessário maneiras alternativas para se obter a resposta constitutiva do material, além da curva de força por deslocamento. Diferentes medidas complementares podem ser obtidas para compensar a dificuldade em caracterizar o fenômeno de estricção e posterior estiramento, como no trabalho de G'sell e Jonas, 1979 onde uma medição direta da seção transversal da estricção foi empregada ou ainda medições óticas da região de estricção, empregando métodos de correlações de imagens, para determinar o campo de deslocamentos na região de interesse [Ye et al., 2015].

A estricção em termoplásticos pode ser entendida como um fenômeno de instabilidade, no qual ocorrem deformações sem um aumento da carga aplicada sobre o corpo, conforme representado nos gráficos da Figura 2.7, onde para um mesmo valor de tensão podem existir diferentes configurações de equilíbrio. Observando os comportamentos observados nas Figuras 2.6 e 2.7 pode-se concluir que, a plasticidade é uma propriedade intrínseca do material, enquanto a estricção é função do material, geometria e condições de contorno [Ward e Sweeney, 2012]. A dificuldade em caracterizar constitutivamente materiais termoplásticos, submetidos a grandes deformações, resulta da complexidade cinemática apresentada nos ensaios mecânicos somadas, simultaneamente durante o ensaio, às diferentes dependências que o material apresenta, em relação à temperatura, taxa de

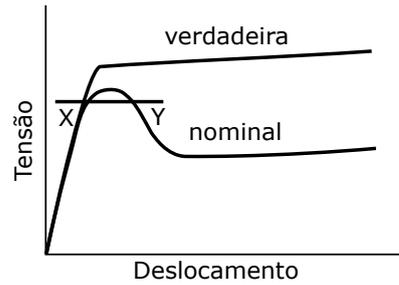


Figura 2.7 – Curvas tensão por deslocamento verdadeira e nominal de um termoplástico, ressaltando o comportamento de instabilidade da curva nominal representado pelo segmento de reta XY, adaptado de Ward e Sweeney, 2012.

deformação e pressão por exemplo, em conjunto com os diversos processos que ocorrem devido ao trabalho mecânico, como aquecimento, anisotropia induzida pela deformação, formação de vazios entre outros.

Diferentes comportamentos podem estar acoplados quando os termoplásticos estão submetidos a grandes deformações, sabe-se que o material ao acumular deformações plásticas produz calor, podendo aumentar de forma significativa a temperatura localmente e reduzindo assim sua rigidez. No entanto, para baixas taxas de deformação o calor produzido pode ser dissipado, enquanto para altas taxas de deformação ocorre o inverso e altas temperaturas podem ser atingidas reduzindo a rigidez do material. Por outro lado, diferentes comportamentos associados à temperatura em que o material se encontra, como comportamentos borrachoso ou vítreo, podem ser também associados com às diferentes taxas de deformação ao qual o material venha a ser submetido [Ward e Sweeney, 2012]. Um aumento na taxa de deformação corresponde a uma alteração no comportamento mecânico semelhante a uma redução na temperatura do material, sendo o inverso também verdadeiro. O aumento da rigidez do material, para uma alta taxa de deformação, pode ser atribuído ao aumento na dificuldade das cadeias poliméricas em se desentrelaçarem e, conseqüentemente, a redução da temperatura aumenta a rigidez devido à dificuldade de desentrelaçamento. O acoplamento destes comportamentos em ensaios mecânicos, principalmente em grandes deformações, dificulta significativamente o estudo dos mecanismos de deformação de termoplásticos.

Com relação ao comportamento anisotrópico induzido pela deformação e na conseqüente reorientação das cadeias poliméricas do material, alguns resultados que evidenciam esta característica são apresentados. No trabalho de Miranda et al., 2016 amostras do

polímero semicristalino poli(etileno-tetrafluoretileno), com T_g em torno de 100°C, foram estiradas de forma monotônica e uniaxial, e seus padrões de difração WAXS e SAXS (difração de raios X em baixo ângulo) foram capturados para diferentes temperaturas. Os padrões de difração obtidos nestes ensaios estão apresentados na Figura 2.8 para as três temperaturas avaliadas, onde os padrões na parte superior são para a técnica WAXS e na parte inferior com a técnica SAXS, e em cada padrão de difração apresentado consta a razão de estiramento aplicada (comprimento final/comprimento inicial) multiplicada por um λ . De modo a compreender os resultados apresentados na Figura 2.8, quando o feixe de raios X incide no material ocorre a difração do feixe, e então um padrão de difração é capturado. No caso com o polímero não estirado o padrão de difração é formado por anéis circulares, esta característica do padrão de difração indica que as cadeias poliméricas não possuem uma orientação preferencial, e a difração ocorre de forma semelhante em qualquer direção (de forma isotrópica). Contudo, no caso do material ser estirado o padrão de difração se altera, onde se observa que ocorre uma reorientação das cadeias poliméricas. Através dos dados obtidos no artigo os autores deduzem que as cadeias poliméricas se reorientaram na direção do estiramento aplicado.

Evidências apontadas neste artigo sugerem ainda que a destruição da estrutura esferulítica, ao ser submetida ao estiramento, depende da orientação da estrutura lamelar em relação à direção do estiramento, e que a temperatura em que o material se encontra no momento do ensaio em relação a T_g influencia na morfologia resultante. Através de dados colhidos pelas técnicas WAXS e SAXS, em conjunto com experimentos de DSC (calorímetro diferencial de varredura), pôde-se deduzir que no caso do estiramento ser realizado de maneira perpendicular à estrutura lamelar ocorre uma progressiva destruição dessa estrutura, em conjunto com a formação de microvazios (em inglês *microvoids*) no material, e reorientação das cadeias na direção do estiramento. Contudo, para o caso onde a estrutura lamelar esteja paralela ao estiramento, a morfologia obtida apresenta um aumento da região amorfa entre as lamelas da estrutura cristalina lamelar original ocorrendo nesta região a formação de microfibrilas e, em menores temperaturas (igual ou abaixo da T_g) de cristais fracos da mesofase [Murthy et al., 1995], e para maiores temperatura (acima da T_g) na formação de cristais induzidos pela deformação. Para ambos os casos, em menores temperaturas e maiores temperaturas do teste, tanto as microfibrilas quanto os cristais induzidos pelo estiramento são fortemente orientados na direção do es-

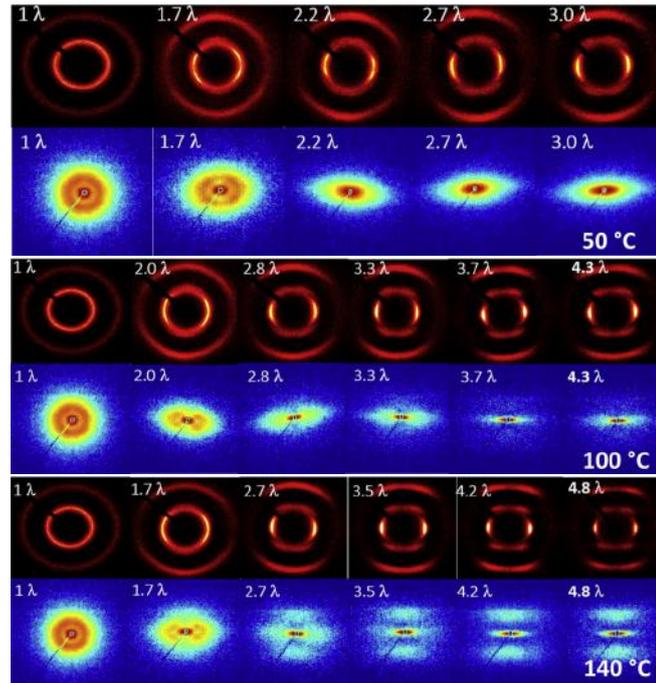


Figura 2.8 – Padrões de difração WAXS e SAXS em diferentes temperaturas. A direção de estiramento aplicada no ensaio experimental está orientada na direção vertical

[Miranda et al., 2016].

tiramento [Miranda et al., 2016], estas observações estão ilustradas na Figura 2.9. Neste trabalho são apresentadas evidências que indicam a forte tendência de reorientação das cadeias poliméricas na direção do estiramento, em conjunto com a formação de vazios no material nesse processo. Estes processos, à nível molecular, são fontes de anisotropias constitutivas ao analisar o material de maneira global.

Outra fonte de anisotropias constitutivas corresponde à formação, em conjunto com a evolução de maneira orientada, dos microvazios em ensaios uniaxiais. Para estudar esse comportamento são apresentados resultados do estudo realizado por Laiarinandrasana et al., 2016. Nesse trabalho amostras do polímero semicristalino poliamida 6 foram ensaiadas de maneira uniaxial e monotônica para três diferentes níveis de deformação. Após o ensaio, as amostras foram descarregadas e mantidas por dois meses em um estado livre de tensões para então serem inspecionadas, através de tomografia de radiação síncrotron (SRT), onde a morfologia das amostras pôde ser observada. As curvas de tensão média por deslocamento de cada um dos três ensaios estão apresentadas na Figura 2.10. Para a amostra A os vazios apresentaram formato de moedas, com a normal do plano da “moeda” na direção do esforço aplicado (figura 2.11a). Na amostra B se observa que os

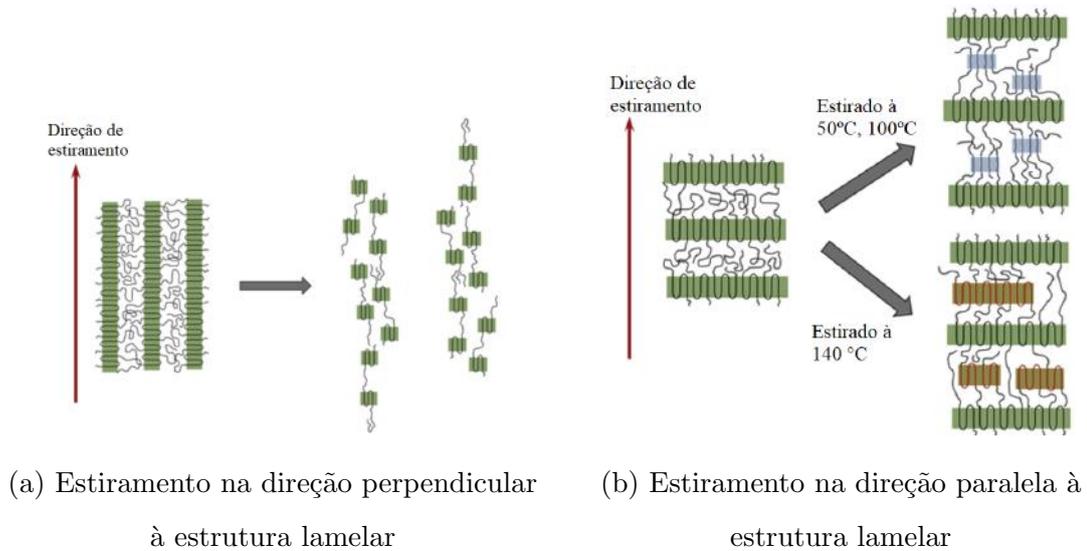


Figura 2.9 – Ilustração das mudanças da morfologia devido ao estiramento. Na ilustração 2.9b as regiões azuis correspondem a mesofase [Murthy et al., 1995] e as regiões marrons são os cristais induzidos pela deformação [Miranda et al., 2016].

vazios se estendem em altura tomando a forma de cilindros (figura 2.11b), e para o caso C ocorre um aumento em altura combinado com uma diminuição do diâmetro do vazio formando estruturas com formato de elipsoides (figura 2.11c). Os dados capturados pelo SRT, para diferentes níveis de deformação, demonstram a magnitude da alteração morfológica e reforçam as observações de alteração local de volume que o material sofre ao ser estirado [Fang et al., 2006]. Verifica-se ainda que os microvazios formados no material são orientados fortemente na direção do estiramento aplicado, indicando também serem fontes de anisotropia constitutiva.

A formação de microvazios e *crazing*, que são pequenas trincas no material que possuem microfibrilas entre as faces da trinca, estão associados ao fenômeno de dano e contribuem para a deformação plástica total aparente, apresentada para ambos termoplásticos amorfos e semicristalinos [G'sell et al., 2002]. A orientação das trincas na formação de *crazing*, em ensaios de tração uniaxial, se dá principalmente perpendicularmente à direção do esforço de tração [Brown e Ward, 1968]. No trabalho de Laiarinandrasana et al., 2016, ao comparar os resultados na região de estiramento para os diferentes ensaios realizados, verificou-se que significativas deformações volumétricas ocorrem quando o material acumula deformações permanentes. Embora existam para os polímeros diferentes fontes de

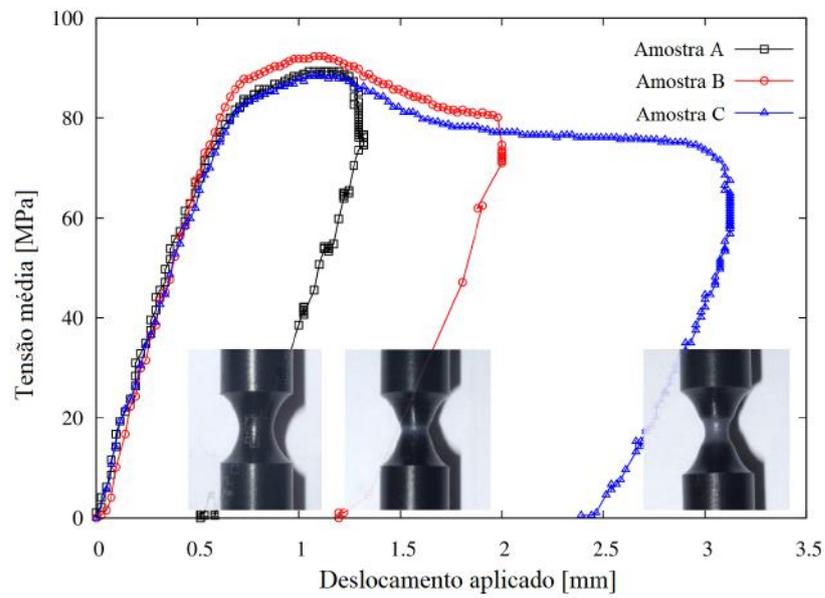


Figura 2.10 – Curva de tensão média por deslocamento aplicado [Laiarinandrasana et al., 2016]

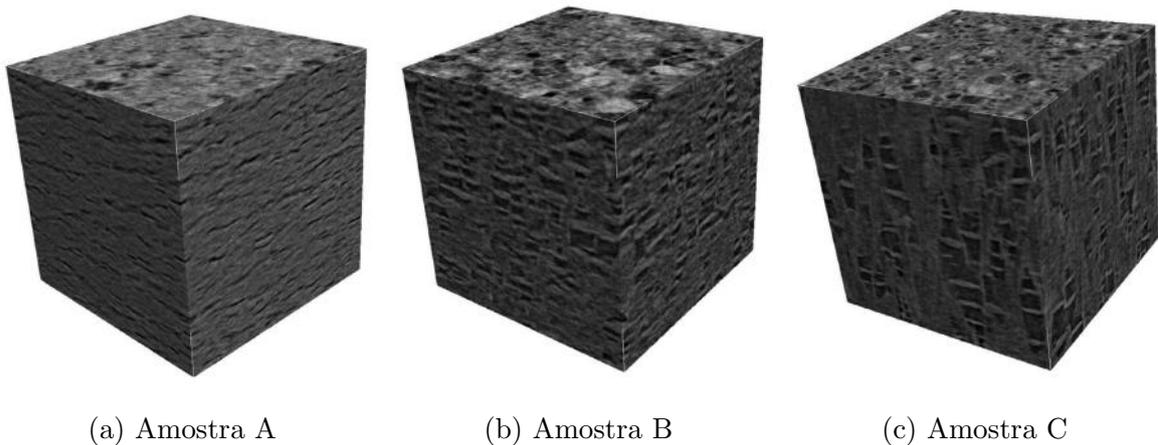


Figura 2.11 – Morfologia dos vazios para as diferentes amostras analisadas, onde os vazios estão em preto e a matriz em cinza [Laiarinandrasana et al., 2016].

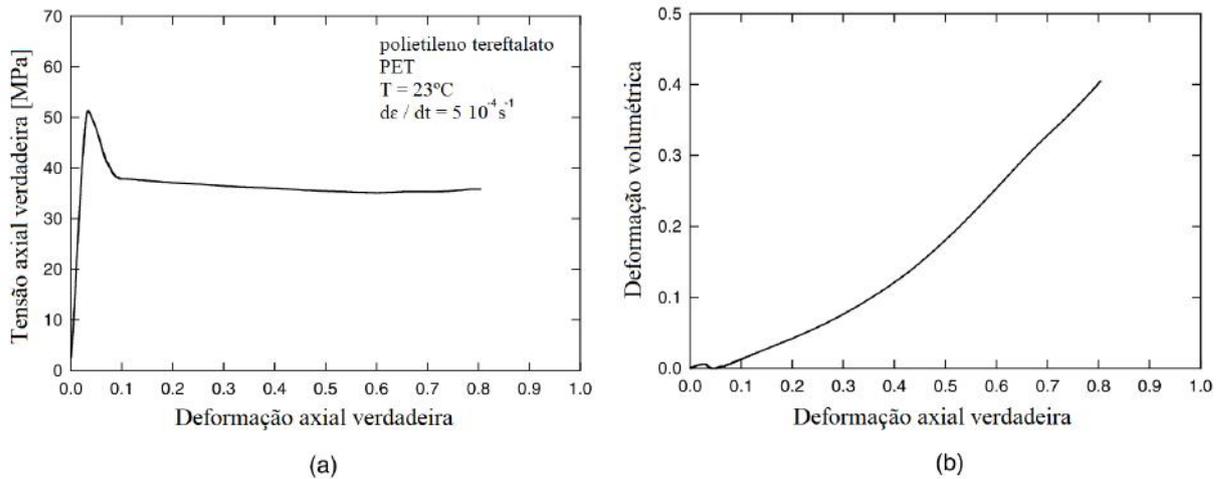


Figura 2.12 – Resposta mecânica do polietileno: (a) curva tensão deformação, (b) evolução da deformação volumétrica pela deformação verdadeira [G’sell et al., 2002]

deformações volumétricas, no trabalho citado as deformações volumétricas foram associadas à formação e evolução dos vazios formados no material, quando são acumuladas deformações plásticas. Esta associação é justificada pela significativa formação de vazios apresentadas na região de estrição, conforme apresentado na Figura 2.11.

Em G’sell et al., 2002 ensaios de tração de polietileno e poliestireno de alto impacto foram realizados, nos ensaios o deslocamento relativos de pontos na região de estrição foram determinados por meio de técnicas ópticas. Utilizando os deslocamentos relativos obtidos, as deformações longitudinal (na direção do esforço) e transversal (transversal ao esforço) na região de estrição foram determinadas. Deformações volumétricas foram avaliadas utilizando estas deformações empregando as hipóteses de material transversalmente isotrópico e deformações homogêneas, com a deformação normal à face do corpo de prova considerada como igual àquela na direção transversal. Com esta metodologia resultados para o polietileno são apresentados na Figura 2.12.

Conforme Figura 2.12.b em pequenas deformações, que correspondem a região elástica do material, são registradas pequenas deformações volumétricas com amplitudes inferiores a 0,01. Deformação volumétricas passam a ser acumuladas de maneira mais significativa após a transição viscoplástica do material, e em torno da deformação verdadeira de 0,5 ocorre uma abrupta alteração na tendência de aumento da deformação volumétrica, que cresce então linearmente até a ruptura do material. Na deformação de ruptura, a deformação axial se encontra em torno de 0,8 e a deformação volumétrica em torno de 0,4.

Vale ressaltar que estas observações diferem significativamente da hipótese comumente aceita de deformações volumétricas nulas (comportamento isocórico) em termoplásticos [G'sell et al., 2002]. Outros trabalhos, empregando técnicas de correlação de imagens, apresentam resultados que corroboram a observação de deformações volumétricas significativas associadas ao acúmulo de deformações plásticas [Grytten et al., 2009; Hachour et al., 2014]. No entanto, a inclusão da sensibilidade à deformação volumétrica permanente ainda é um ponto em discussão na literatura, sendo a hipótese de plasticidade desviadora a mais utilizada.

Entre outros fenômenos, materiais termoplásticos são bastante suscetíveis aos comportamentos de dano e fadiga. Diferentes autores apresentam trabalhos investigando o dano, ou perda de rigidez, de materiais termoplásticos como [Saï et al., 2011; Gunel e Basaran, 2011; Gu et al., 2013]. Alguns autores demonstram uma dependência do acúmulo de dano à taxa de deformação [Balieu et al., 2015], e também associam o comportamento de dano ao acúmulo de deformações volumétricas [G'sell et al., 2002] e fatores ambientais como o acúmulo de dano devido à radiação ultravioleta. Em relação à fadiga, materiais termoplásticos apresentam maior sensibilidade a cargas oscilantes do que materiais metálicos. Isso ocorre principalmente devido às cargas oscilantes produzirem calor, reduzindo dessa forma a rigidez do material devido ao aumento da temperatura [Ward e Sweeney, 2012].

Além dos termoplásticos, que possuem muitas investigações sobre plasticidade anisotrópica induzida por deformação, os elastômeros também têm ganhado a atenção de pesquisadores, porém com ênfase no dano mecânico. Elastômeros com carga são conhecidas por apresentar comportamentos mecânicos como o efeito Mullins. Este comportamento se traduz na redução na rigidez do material em carregamentos cíclicos, estando este fenômeno relacionado ao acúmulo de dano no material de forma independente da taxa de deformação [Mullins, 1948, 1969]. No entanto, dependendo da composição do elastômero o efeito de dano pode estar associado ao comportamento viscoelástico do material, onde após diversos ciclos de carga um estado permanente é atingido [Harwood et al., 1965]. No trabalho de Dargazany e Itskov, 2009 corpos de prova de elastômero (cloropreno) carregadas com negro de fumo foram testadas em carregamento cíclicos em ensaios biaxiais. Neste trabalho, conforme Figura 2.13, o corpo de prova foi preso e carregado ciclicamente na direção x , então foi solto nesta direção e carregado ciclicamente na direção y . Por meio

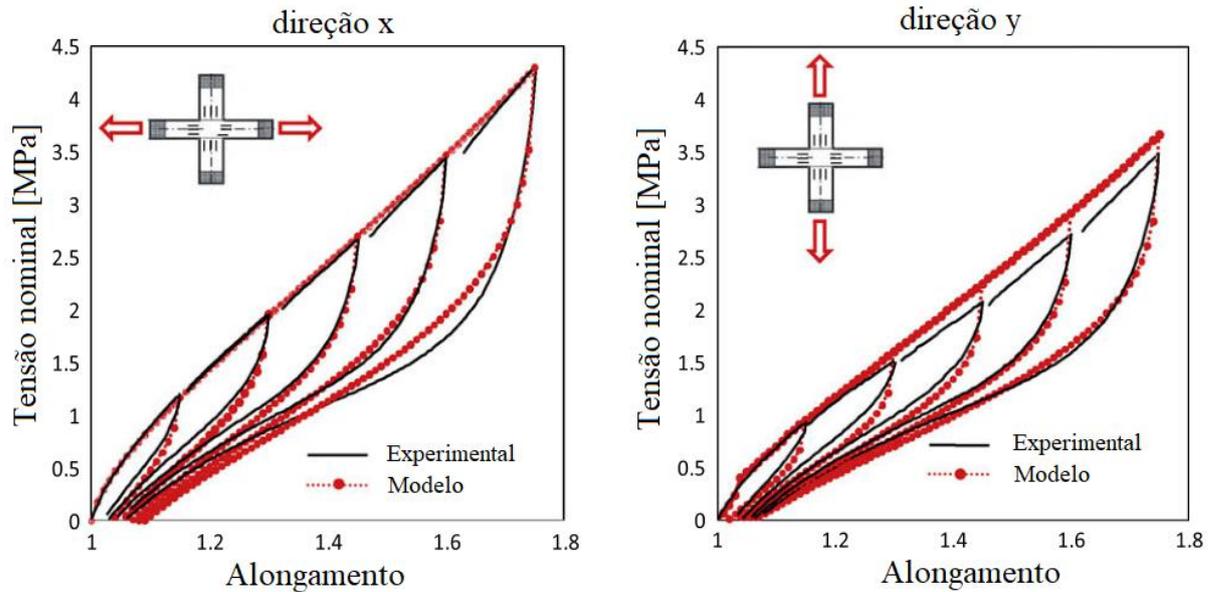


Figura 2.13 – Resposta do ensaio biaxial de cloropreno carregado com negro de fumo [Dargazany e Itskov, 2009]

deste ensaio foi observado o comportamento Mullins clássico ao carregar o corpo de prova na direção x, e um comportamento Mullins altamente anisotrópico ao carregar na direção y [Dargazany e Itskov, 2009].

Tecidos biológicos moles, por sua vez, apresentam diversas similaridades com elastômeros com carga, apresentando um comportamento viscoso fortemente anisotrópico dependendo da origem do tecido. Nestes materiais podem ser observados os comportamentos de elasticidade altamente não-linear, viscoelasticidade, dano mecânico e anisotropia [Li, 2016; Holzapfel, 2017; Fathi et al., 2017]. Dano anisotrópico é comumente observado em tecidos biológicos, e é levado em consideração no desenvolvimento de diversos modelos constitutivos [Alastrué et al., 2007; Ehret e Itskov, 2009; Sáez et al., 2012; Fathi et al., 2017; Gültekin et al., 2018]. No entanto se observa que as leis constitutivas diferem daquelas para elastômero com carga, onde para elastômeros com carga usualmente são utilizadas leis hiperelásticas isotrópicas [Ogden e Roxburgh, 1999; Tomita et al., 2008], enquanto para tecidos biológicos moles são utilizadas leis exponenciais para contabilizar a presença de fibras [Chuong e Fung, 1986; Holzapfel et al., 2000a].

As evidências apresentadas nesta seção mostram que a resposta de inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação é significativa em determinados regimes de carregamento, e portanto, necessita ser representada de forma adequada, para diferentes tipos

de materiais, respeitando suas especificidades. Dessa forma, é importante que sejam desenvolvidos modelos que sejam capazes de representar estes comportamentos, mesmo que de forma fenomenológica.

3 ESTRUTURA VARIACIONAL EMPREGANDO O CODF

Neste capítulo é apresentado o conceito de elemento equivalente [Treloar, 1975] e uma proposta de reescrita dos potenciais de energia utilizando este conceito, de forma a permitir seu uso em uma estrutura variacional para a descrição do comportamento de materiais que apresentam inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação.

3.1 Conceito de elemento equivalente

Seja uma região $\Upsilon_0 \subset \mathbb{R}^3$ ocupada por um corpo no instante inicial ($t = 0$), que corresponde a configuração de referência (ou lagrangeana). Nesta configuração de referência cada partícula material ocupa uma posição $\mathbf{X} \in \Upsilon_0$, e a posição destas partículas na configuração atual (ou eulereana) pode ser determinada a partir configuração de referência, em um instante de tempo t , por meio do seguinte mapeamento $\mathbf{x} = \omega(\mathbf{X}) \in \Upsilon$, onde Υ corresponde à região ocupada pelo corpo no instante atual. Para descrever a deformação em um ponto, o gradiente de deformação $\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}}\omega(\mathbf{X})$ é introduzido, com a restrição $\det(\mathbf{F}) > 0$. Usando o gradiente de deformação é possível mapear elementos infinitesimais de linha $d\mathbf{X}$, definidos no corpo, na configuração de referência, para a configuração atual usando a relação linear $d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}$, conforme representado na Figura 3.1 abaixo.

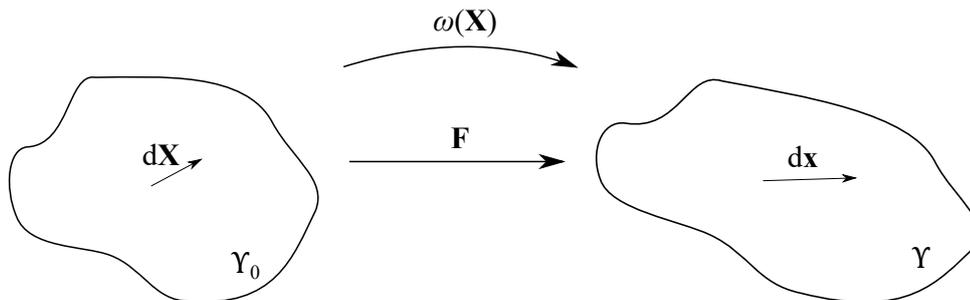


Figura 3.1 – Mapeamento da configuração de referência para a atual

Agora, seja uma única cadeia polimérica, pode-se definir um sistema de coordenadas local preso ao ponto inicial da cadeia, e um segmento de reta \mathbf{r} pode ser traçado entre seus pontos inicial e final. O corpo ao ser deformado, para diferentes instantes de tempo, tem suas cadeias poliméricas reorientadas e alongadas, conforme apresentado na Figura 3.2. Assim, para a configuração de referência, no instante $t = 0$, tem-se um segmento de reta $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(\theta_0, \phi_0)$, onde $\theta_0 = \theta(t = 0)$ e $\phi_0 = \phi(t = 0)$, e para a configuração atual

um segmento de reta é representado por $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\theta, \phi)$. O segmento de reta na configuração atual também pode ser definido como função da orientação no instante inicial e do tempo t no instante atual, conforme equações abaixo,

$$\theta = \theta(\theta_0, \phi_0; t) \quad (3.1)$$

$$\phi = \phi(\theta_0, \phi_0; t) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\theta, \phi) = \mathbf{r}(\theta_0, \phi_0; t). \quad (3.3)$$

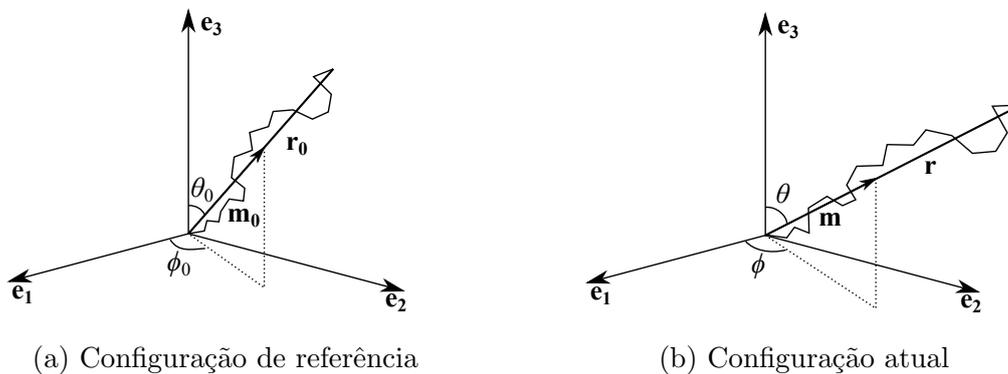


Figura 3.2 – Representações da cadeia polimérica inserida no material

Empregando as definições apresentadas podem ser desenvolvidas uma medida de alongamento $\lambda = |\mathbf{r}|/|\mathbf{r}_0|$, uma medida de orientação da cadeia no instante inicial $\mathbf{m}_0 = \mathbf{r}_0/|\mathbf{r}_0|$ e uma medida mista de orientação e de alongamento no instante atual $\mathbf{m} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}_0| = \lambda\mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Note que $\lambda = \lambda(\theta, \phi)$, ou seja λ é uma função do par (θ, ϕ) , assim para diferentes combinações dessas medidas diferentes valores de λ são determinados, \mathbf{m}_0 tem comprimento unitário e \mathbf{m} tem comprimento λ .

Diferentes materiais podem apresentar diferentes elementos microestruturais inseridos em sua estrutura, os quais podem vir a ter suas características alteradas devido aos diferentes esforços e/ou deformações que o corpo for submetido. Exemplos de elementos microestruturais são cristais, micro-vazios, fibras, trincas que entre outros, que podem estar associados a diferentes variáveis estado. Estes elementos microestruturais são associados a subestrutura do material, e esta subestrutura pode então ser mapeada da configuração referência para a configuração atual de forma análoga ao mapeamento do contínuo.

Com a subestrutura considerações microestruturais do material, que são represen-

tadas por meio de variáveis estado, têm sua evolução determinada por meio da solução do problema constitutivo, e por meia desta ocorre a evolução da subestrutura do material [Dafalias, 2001; Bucher et al., 2004]. Assume-se neste trabalho que os elementos microestruturais são a orientação preferencial e o comprimento das cadeias poliméricas, que podem ser determinados, nas configurações de referência e atual, pelos termos \mathbf{m}_0 e \mathbf{m} . Estes elementos também são chamados, para este trabalho, de elementos direcionáveis e estão ligados ao contínuo, caracterizando dessa forma a subestrutura do material [Dafalias, 2001; Harrysson et al., 2010].

Os elementos direcionáveis descritos apresentam uma clara dependência da deformação na evolução de suas características, justamente por permearem o contínuo. No entanto, o mapeamento da subestrutura entre as configurações de referência e atual não corresponde, necessariamente, àquela que mapeia o contínuo [Harrysson et al., 2007, 2010]. De forma análoga ao mapeamento do contínuo, que mapeia elementos infinitesimais de linha entre as configurações de referência e atual, um mapeamento linear da subestrutura pode ser desenvolvido que mapeie os elementos \mathbf{m}_0 para \mathbf{m} . Seguindo a literatura, enquanto o mapeamento do contínuo determina a deformação do corpo através do gradiente de deformação usando o mapeamento linear $d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}$, o mapeamento da subestrutura determina a evolução de medidas associadas à microestrutura do material. Neste caso, as medidas relacionadas à orientação e ao alongamento das cadeias poliméricas são dadas pela expressão $\mathbf{m} = \Delta\mathbf{m}_0$ [Harrysson et al., 2007; Harrysson e Ristinmaa, 2008; Harrysson et al., 2010], representada na Figura 3.3.

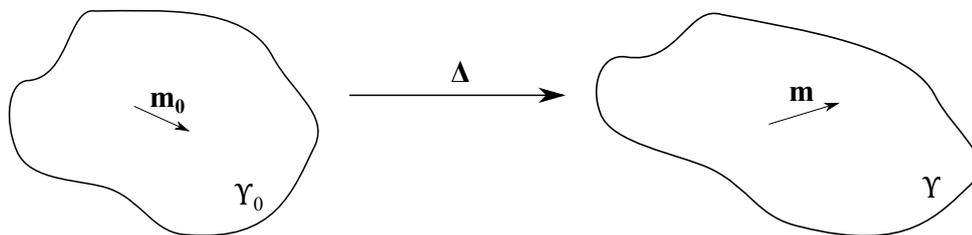


Figura 3.3 – Mapeamento da configuração de referência para a atual

O mapeamento da subestrutura entre as configurações de referência e atual pode ser realizado de maneira afim e não-afim [Wu e Van der Giessen, 1993; Harren, 1997; Dafalias, 2001; Miehe et al., 2004]. Na hipótese de mapeamento não-afim considera-se que a microestrutura deforma de maneira diferente do contínuo, e o gradiente de deformação

difere do mapeamento da subestrutura $\Delta \neq \mathbf{F}$, como apresentado em Miehe et al., 2004. Uma segunda hipótese, mais simples em sua implementação, denominada afim confere o mesmo mapeamento do contínuo para a subestrutura, obtendo dessa forma a relação $\Delta = \mathbf{F}$. Diferentes hipóteses microestruturais são empregadas para a determinação do emprego das abordagens afim e não-afim, sendo um tópico em discussão em relação aos materiais poliméricos, com diferentes abordagens na literatura [Wu e Van der Giessen, 1993; Harren, 1997; Dafalias, 2001; Miehe et al., 2004; Ward e Sweeney, 2012].

Dado que neste trabalho são tratados materiais poliméricos, foram utilizados em todos os modelos desenvolvidos a hipótese de comportamento isocórico. Por utilizar a hipótese isocórica o gradiente de deformação \mathbf{F} se equivale ao gradiente de deformação isocórico¹ $\bar{\mathbf{F}}$, assim neste trabalho o mapeamento da subestrutura é dado por $\Delta = \bar{\mathbf{F}}$. As medidas \mathbf{m} , e de alongamento λ , definidas em função do par (θ, ϕ) podem então ser determinadas através de um mapeamento linear dado por $\bar{\mathbf{F}}$ e da medida definida na configuração de referência \mathbf{m}_0 . As expressões resultantes do mapeamento proposto estão apresentadas nas expressões abaixo,

$$\mathbf{m}(\theta, \phi) = \bar{\mathbf{F}}\mathbf{m}_0(\theta_0, \phi_0) \quad \mathbf{m} = \mathbf{m}(\bar{\mathbf{F}}, \mathbf{m}_0) \quad (3.4)$$

$$\lambda(\theta, \phi) = \sqrt{\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}} = \sqrt{\bar{\mathbf{F}}\mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{F}}\mathbf{m}_0} = \sqrt{\mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}}\mathbf{m}_0} \quad (3.5)$$

$$= \sqrt{\mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{C}}\mathbf{m}_0} \quad \lambda = \lambda(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{m}_0). \quad (3.6)$$

Os comportamentos dissipativos observados em materiais poliméricos de viscosidade e deformações permanentes empregam uma variável de inelasticidade λ^i em sua representação. Assim, neste trabalho é empregada a hipótese de que o alongamento λ é decomposto em uma parcela elástica λ^e e outra inelástica λ^i . Esta decomposição, e as expressões resultantes para os termos de taxa são apresentadas nas equações abaixo [Neto et al., 2008],

$$\lambda = \lambda^e \lambda^i \quad (3.7)$$

$$\dot{\lambda} = \dot{\lambda}^e \lambda^i + \lambda^e \dot{\lambda}^i = \dot{\lambda}^e (\lambda^e)^{-1} \lambda^e \lambda^i + \lambda^e \dot{\lambda}^i (\lambda^i)^{-1} \lambda^i \quad (3.8)$$

$$\dot{\lambda} = \lambda (\dot{\lambda}^e (\lambda^e)^{-1} + \dot{\lambda}^i (\lambda^i)^{-1}) \quad \dot{\lambda} \lambda^{-1} = \dot{\lambda}^e (\lambda^e)^{-1} + \dot{\lambda}^i (\lambda^i)^{-1}. \quad (3.9)$$

A expressão de taxa da variável de alongamento λ também pode ser expressa em função de seu par de variáveis de estado de deformação na configuração de referência

¹Gradiente de deformação isocórico $\bar{\mathbf{F}}$ é dado por $\bar{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} = J^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}$

$(\mathbf{m}_0, \bar{\mathbf{C}})$, conforme expressão abaixo,

$$\dot{\lambda} = \frac{\partial \lambda}{\partial \lambda^2} \frac{\partial \lambda^2}{\partial t} = \frac{1}{2\lambda} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{C}} \mathbf{m}_0) \quad (3.10)$$

$$= \frac{1}{2\lambda} \left(\frac{\partial \mathbf{m}_0}{\partial t} \cdot \bar{\mathbf{C}} \mathbf{m}_0 + \mathbf{m}_0 \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial t} \mathbf{m}_0 + \mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{C}} \frac{\partial \mathbf{m}_0}{\partial t} \right) \quad (3.11)$$

$$= \frac{1}{2\lambda} (\mathbf{m}_0 \cdot \bar{\mathbf{F}}^T (\bar{\mathbf{L}}^T + \bar{\mathbf{L}}) \bar{\mathbf{F}} \mathbf{m}_0) \quad \bar{\mathbf{L}} = \dot{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{F}}^{-1} \quad (3.12)$$

$$= \frac{1}{2\lambda} \bar{\mathbf{F}} \mathbf{m}_0 \cdot 2\bar{\mathbf{D}} \bar{\mathbf{F}} \mathbf{m}_0 \quad 2\bar{\mathbf{D}} = (\bar{\mathbf{L}}^T + \bar{\mathbf{L}}) \quad (3.13)$$

$$= \frac{1}{\lambda} \mathbf{m} \cdot \bar{\mathbf{D}} \mathbf{m} \quad \dot{\lambda} \lambda^{-1} = \mathbf{m} \cdot \bar{\mathbf{D}} \mathbf{m}, \quad (3.14)$$

finalmente, empregando as expressões 3.9 e 3.14 a seguinte equação é obtida,

$$\mathbf{m} \cdot \bar{\mathbf{D}} \mathbf{m} = \dot{\lambda}^e (\lambda^e)^{-1} + \dot{\lambda}^i (\lambda^i)^{-1}. \quad (3.15)$$

Na abordagem deste trabalho, cada cadeia polimérica apresenta uma decomposição da deformação em parcelas elásticas e inelásticas independentes, que resultam em um comportamento mecânico diferenciado para cada direção do material ao acumular deformações inelásticas. As expressões $\dot{\lambda}^* \lambda^{*-1}$ apresentadas correspondem a uma decomposição em parcelas elástica e inelástica da parte simétrica do gradiente de velocidade isocórico $\bar{\mathbf{D}}$, orientado e escalonado por \mathbf{m} . Empregando esta parcela inelástica, um termo de taxa d^i pode ser definido pela expressão $d^i = \dot{\lambda}^i (\lambda^i)^{-1}$, e a solução desta EDO, utilizando como condição inicial $\lambda^i(t=0) = 1$, pode ser obtida por,

$$\lambda^i = \exp \int_0^t d^i(\bar{t}) d\bar{t}. \quad (3.16)$$

3.2 Conceito de função de distribuição da orientação da cadeia (CODF)

Seja uma microesfera que define um domínio dentro do material polimérico. Assume-se que este apresenta uma quantidade grande n de cadeias poliméricas, para qualquer instante de tempo, inseridas no domínio definido. Assim neste caso, ao invés de uma única cadeia como apresentado anteriormente, existe uma distribuição contínua de cadeias poliméricas ao longo das direções definidas pelo par de coordenadas esféricas (θ, ϕ) . Estabelece-se então uma função de distribuição da orientação da cadeia (CODF) dada por C , que corresponde à densidade relativa de cadeias, com vetor direção $\mathbf{m} = \mathbf{m}(\theta, \phi)$, que se encontra dentro de um intervalo (θ, ϕ) e $(\theta + d\theta, \phi + d\phi)$ [Wu e Van der Giessen, 1993]. Assim, para um dado elemento infinitesimal que contém dn cadeias, conforme re-

apresentação na Figura 3.4, a seguinte relação entre o CODF e um elemento infinitesimal estéreo angular $d\Omega$ é obtida,

$$dn = nC(\theta, \phi) \text{sen } \theta d\theta d\phi \quad (3.17)$$

$$= nC d\Omega, \quad (3.18)$$

integrando esta expressão para toda a microesfera,

$$\int dn = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} nC \text{sen } \theta d\theta d\phi \quad (3.19)$$

$$n = n \int_0^\pi \int_0^{2\pi} C \text{sen } \theta d\theta d\phi \quad (3.20)$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} C \text{sen } \theta d\theta d\phi = \int_\Omega C d\Omega = 1, \quad (3.21)$$

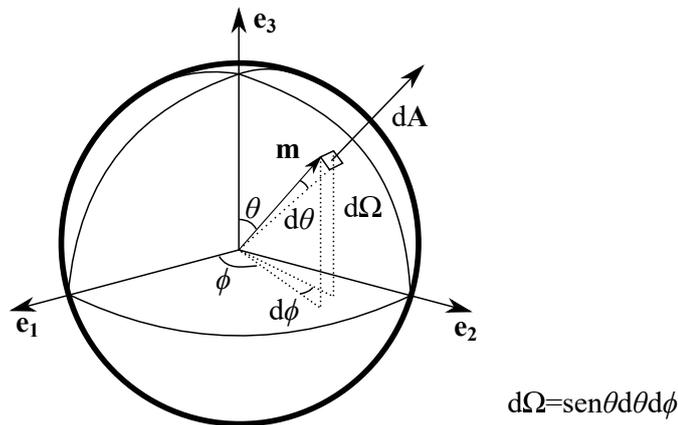


Figura 3.4 – Representação de uma microesfera contendo n cadeias poliméricas

onde dA , na Figura 3.4, representa um elemento infinitesimal de área associado ao elemento infinitesimal estéreo angular $d\Omega$. Assumindo que para o caso de um material virgem (no instante inicial $t = 0$) o CODF é o mesmo para qualquer par (θ_0, ϕ_0) , integrando a expressão acima têm-se que $C_0 = C(\theta_0, \phi_0) = \frac{1}{4\pi}$. Agora, a expressão 3.21 pode ser reescrita como,

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} C \text{sen } \theta d\theta d\phi = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\pi} \text{sen } \theta_0 d\theta_0 d\phi_0 = 1, \quad (3.22)$$

reescrevendo a expressão acima usando $d\Omega$ e $d\Omega_0$, a seguinte relação para C é obtida,

$$\int_{\Omega} C d\Omega = \int_{\Omega_0} \frac{1}{4\pi} d\Omega_0 = 1 \quad C = \frac{1}{4\pi} \frac{d\Omega_0}{d\Omega} \quad (3.23)$$

$$dn = n \frac{1}{4\pi} d\Omega_0. \quad (3.24)$$

Verifica-se pela expressão acima que a função de distribuição da orientação da cadeia C , na configuração deformada, corresponde a uma razão entre os elementos diferenciais $d\Omega$ e $d\Omega_0$, respectivamente, na configuração deformada e na configuração indeformada, a qual pode ser empregada para determinar uma nova expressão dn , conforme expressão 3.24. Considere agora uma quantidade ω^* , que pode ser definida como função do seguinte conjunto de variáveis de estado $\omega^* = \omega^*(\lambda)$, a qual representa um potencial associado ao alongamento das cadeias poliméricas para diferentes direções de um dado ponto do material, que ao ser integrado no domínio da microesfera resulta em um potencial φ^* ,

$$\varphi^* = \int \omega^*(\lambda) dn \quad (3.25)$$

$$= n \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \omega^*(\lambda) d\Omega_0, \quad (3.26)$$

aproximando numericamente obtêm-se a seguinte expressão,

$$\varphi^* = n \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \omega^*(\lambda) d\Omega_0 \quad (3.27)$$

$$\approx n \sum_{k=1}^m h_k \omega^*(\lambda_k) \quad (3.28)$$

$$\approx \sum_{k=1}^m h_k \bar{\omega}^*(\lambda_k) = \sum_{k=1}^m h_k \bar{\omega}^*(\mathbf{m}_k) = \sum_{k=1}^m h_k \bar{\omega}^*(\bar{\mathbf{C}}; \mathbf{m}_{0,k}), \quad (3.29)$$

onde os coeficientes h_k correspondem a fatores de peso da quadratura de Lebedev, ou de alguma outra quadratura, e $\mathbf{m}_{0,k}$ são vetores unitários definidos pela quadratura escolhida para a avaliação do processo de integração numérica. O potencial $\bar{\omega}^* = n\omega^*$ assume que o número de cadeias poliméricas na microesfera n representa um parâmetro constitutivo, e fica assim implicitamente multiplicado no potencial energético empregado para representar o material.

Note que a medida λ , conforme Equação 3.6, satisfaz a seguinte identidade $\lambda(\bar{\mathbf{C}}; \mathbf{m}_0) = \lambda(\bar{\mathbf{C}}, -\mathbf{m}_0)$. As medidas λ^e e λ^i apresentadas na seção 3.1 possuem esta mesma característica, dado que são decomposições da variável escalar λ . Assim, somente os vetores de integração que correspondem a um dos hemisférios da superfície de integração (integração

de meia esfera) precisam ser avaliados, ou seja, metades de avaliações o que resulta em $\bar{m} = m/2$ vetores de integração e o potencial φ^* pode ser escrito como,

$$\varphi^* = n \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \omega^*(\lambda) d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^*(\bar{\mathbf{C}}; \mathbf{m}_{0,k}). \quad (3.30)$$

Para empregar os potenciais apresentados na solução de problemas mecânicos, se faz necessário o emprego de integrações numéricas aproximadas destes potenciais. Diferentes quantidades de termos podem ser empregadas para realizar estas integrações numéricas, onde, conforme esperado, quanto maior a quantidade de termos melhor a aproximação da solução analítica. Exemplos de integrações dos potenciais são apresentadas na Tabela 3.1, e na Figura 3.5 são apresentadas graficamente as respectivas as direções de integração. Os exemplos apresentados na tabela correspondem a diferentes quadraturas de Lebedev, as quais são utilizadas para realizar a integração numérica aproximada de uma integral de superfície de uma função definida sobre uma esfera. Quadraturas com mais termos podem ser encontradas em Badel e Leblond, 2003.

Tabela 3.1 – Exemplos de vetores de integração e pesos para a integração numérica da esfera da quadratura de Lebedev

No m de termos	Pesos h_k		Vetores $\mathbf{m}_{0,k} = [a \ b \ c] = a\mathbf{e}_1 + b\mathbf{e}_2 + c\mathbf{e}_3$	
2	$h_1 = 1/2$	$h_2 = h_1$	$\mathbf{m}_{0,1} = [1 \ 0 \ 0]$	$\mathbf{m}_{0,2} = -\mathbf{m}_{0,1}$
6	$h_1 = 1/6$	$h_4 = h_1$	$\mathbf{m}_{0,1} = [1 \ 0 \ 0]$	$\mathbf{m}_{0,4} = -\mathbf{m}_{0,1}$
	$h_2 = 1/6$	$h_5 = h_2$	$\mathbf{m}_{0,2} = [0 \ 1 \ 0]$	$\mathbf{m}_{0,5} = -\mathbf{m}_{0,2}$
	$h_3 = 1/6$	$h_6 = h_3$	$\mathbf{m}_{0,3} = [0 \ 0 \ 1]$	$\mathbf{m}_{0,6} = -\mathbf{m}_{0,3}$
14	$h_1 = 1/12$	$h_8 = h_1$	$\mathbf{m}_{0,1} = [1 \ 0 \ 0]$	$\mathbf{m}_{0,8} = -\mathbf{m}_{0,1}$
	$h_2 = 1/12$	$h_9 = h_2$	$\mathbf{m}_{0,2} = [0 \ 1 \ 0]$	$\mathbf{m}_{0,9} = -\mathbf{m}_{0,2}$
	$h_3 = 1/12$	$h_{10} = h_3$	$\mathbf{m}_{0,3} = [0 \ 0 \ 1]$	$\mathbf{m}_{0,10} = -\mathbf{m}_{0,3}$
	$h_4 = 1/16$	$h_{11} = h_4$	$\mathbf{m}_{0,4} = [\sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3}]$	$\mathbf{m}_{0,11} = -\mathbf{m}_{0,4}$
	$h_5 = 1/16$	$h_{12} = h_5$	$\mathbf{m}_{0,5} = [\sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3} \ -\sqrt{1/3}]$	$\mathbf{m}_{0,12} = -\mathbf{m}_{0,5}$
	$h_6 = 1/16$	$h_{13} = h_6$	$\mathbf{m}_{0,6} = [-\sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3}]$	$\mathbf{m}_{0,13} = -\mathbf{m}_{0,6}$
	$h_7 = 1/16$	$h_{14} = h_7$	$\mathbf{m}_{0,7} = [-\sqrt{1/3} \ \sqrt{1/3} \ -\sqrt{1/3}]$	$\mathbf{m}_{0,14} = -\mathbf{m}_{0,7}$

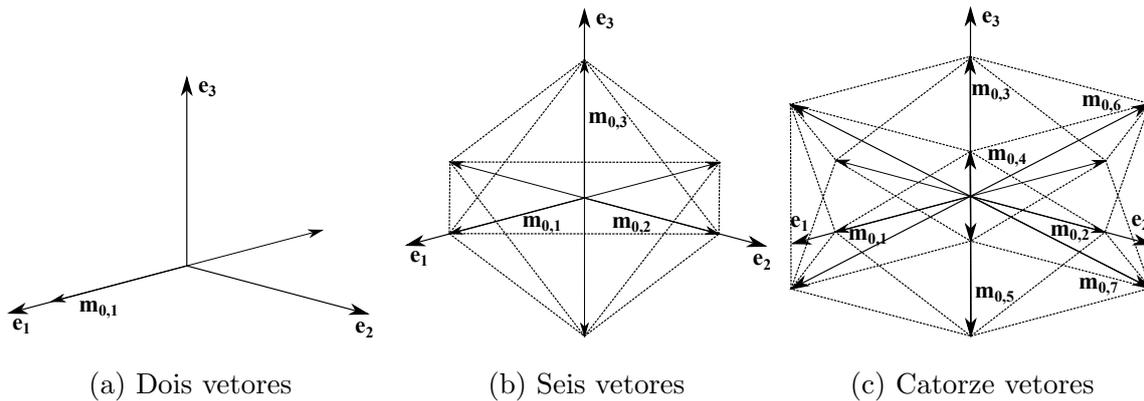


Figura 3.5 – Representação dos vetores de integração da Tabela 3.1

Note que para o caso com dois vetores de integração emprega-se somente um vetor para realizar a integração numérica aproximada. Este resultado se encontra em conformidade com a afirmação de que somente metade dos m pontos de integração são necessários na avaliação das integrações numéricas, ou seja, $\bar{m} = m/2$. Emprega-se esta abordagem pois, por exemplo, para o caso com dois vetores de integração as seguintes expressões são satisfeitas $\lambda = \sqrt{[1 \ 0 \ 0] \cdot \mathbf{C}[1 \ 0 \ 0]} = \sqrt{[-1 \ 0 \ 0] \cdot \mathbf{C}[-1 \ 0 \ 0]}$. Este comportamento é satisfeito para quaisquer vetores de integração paralelos que apontem em em direções distintas, pois estes apresentam o mesmo valor para a variável escalar λ e suas decomposições λ^e e λ^i . As quadraturas da Tabela 3.1 possuem uma quantidade de termos insuficiente para representar a integração da esfera para os modelos estudados, os exemplos de integração apresentados servem somente para representar de forma simplificada as características da integração numérica.

3.3 Problema constitutivo variacional de inelasticidade

O equacionamento apresentado nesta seção corresponde a uma formulação variacional bastante geral, baseada naquelas apresentadas nos trabalhos de Ortiz e Stainier, 1999; Fancello et al., 2006, 2008, podendo ser aplicada para definir modelos constitutivos com comportamentos e fenômenos distintos. Seguindo o *framework* apresentado nestes trabalhos, combinando a primeira e segunda leis da termodinâmica e descartando efeitos térmicos, a seguinte expressão é obtida,

$$D = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}/2 - \dot{W} \geq 0, \quad (3.31)$$

onde D representa a dissipação de energia, \mathbf{S} o segundo tensor de Piola-Kirchoff, \mathbf{C} o tensor de deformação de Cauchy-Green direita e W o potencial de energia livre de Helmholtz. Dado um conjunto de variáveis de estado $\xi = \{\mathbf{C}, \mathbf{Q}\}$. O potencial de energia livre W , que é função destas variáveis de estado, apresenta para sua taxa a seguinte expressão,

$$\dot{W} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} : \dot{\mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}}, \quad (3.32)$$

onde \mathbf{Q} corresponde ao conjunto de variáveis internas do problema constitutivo. Da desigualdade apresentada na Equação 3.31, a expressão de dissipação pode ser reescrita como,

$$D = \left(\frac{\mathbf{S}}{2} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \right) : \dot{\mathbf{C}} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0. \quad (3.33)$$

A expressão apresentada na Equação 3.33 deve ser satisfeita para qualquer processo termodinâmico. Dado que para processos não-dissipativos a seguinte expressão $\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{0}$ é satisfeita, então para processos termodinâmicos quaisquer a Equação 3.33 resulta nas seguintes expressões,

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \quad (3.34)$$

$$D = - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0, \quad (3.35)$$

as derivadas parciais apresentadas na Equação 3.35 podem ser definidas como forças termodinamicamente conjugadas, com seu respectivo conjunto de variáveis de estado $\dot{\mathbf{Q}}$,

$$D = \mathbf{B} : \dot{\mathbf{Q}} \geq 0. \quad (3.36)$$

Empregando a transformada de Legendre, um par de potenciais duais podem ser definidos, que é função do conjunto de forças termodinâmicas definidas (\mathbf{B}) e de seu respectivo conjunto de taxas das variáveis internas conjugadas ($\dot{\mathbf{Q}}$),

$$\psi^* = \psi^*(\mathbf{B}) \quad (3.37)$$

$$d\psi^* = \frac{\partial \psi^*}{\partial \mathbf{B}} : d\mathbf{B} \quad (3.38)$$

$$= \dot{\mathbf{Q}} : d\mathbf{B}, \quad (3.39)$$

um potencial dual ψ , relacionado a ψ^* , pode ser definido conforme expressão,

$$\psi = \mathbf{B} : \dot{\mathbf{Q}} - \psi^* \quad (3.40)$$

$$d\psi = d\mathbf{B} : \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{B} : d\dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{Q}} : d\mathbf{B} \quad (3.41)$$

$$= \mathbf{B} : d\dot{\mathbf{Q}}. \quad (3.42)$$

Assim, o conjunto de forças conjugadas \mathbf{B} pode ser reescrito em função dos dois potenciais duais definidos ψ^* e ψ , bem como a dissipação D . Empregando as expressões apresentadas, relações entre as forças conjugadas e os potenciais apresentados, podem ser definidas,

$$D = \psi(\dot{\mathbf{Q}}) + \psi^*(\mathbf{B}) \quad (3.43)$$

$$\mathbf{B} = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} = \frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{Q}}}, \quad (3.44)$$

reescrevendo as expressões apresentadas pode se obter,

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} + \frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{Q}}} = 0, \quad (3.45)$$

onde a Equação 3.45 representa a condição de otimalidade de primeira ordem do seguinte problema de minimização,

$$\min_{\dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} : \dot{\mathbf{Q}} + \psi(\dot{\mathbf{Q}}; \xi) \right\}. \quad (3.46)$$

Finalmente, conforme trabalho de Ortiz e Stainier, 1999, um problema de minimização pode ser escrito, o qual define um potencial efetivo Ξ do problema constitutivo, conforme expressão abaixo,

$$\Xi = \min_{\dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \dot{W} + \psi(\dot{\mathbf{Q}}; \xi) \right\}. \quad (3.47)$$

A condição de otimalidade de primeira ordem do potencial efetivo Ξ , definido na Equação 3.47, garante que a Equação 3.45 seja satisfeita, respeitando a correta evolução das variáveis internas do problema estudado. Além disso, a derivada do potencial efetivo em relação à taxa do tensor deformação de Cauchy-Green direita corresponde ao tensor tensão \mathbf{S} .

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Xi}{\partial \dot{\mathbf{C}}} = 2 \frac{\partial W}{\partial \dot{\mathbf{C}}} \quad (3.48)$$

Para satisfazer a expressão de desigualdade da dissipação da Equação 3.36, o pro-

duto do par termodinamicamente conjugado deve apresentar valor nulo ou maior que zero. Assim dependendo do comportamento mecânico que se busca representar diferentes restrições para a evolução das variáveis de estados internas devem ser impostas.

Com o objetivo de determinar uma solução numérica incremental para o problema constitutivo variacional apresentado, uma discretização temporal do problema é empregada. Assumindo que o termo de taxa $\dot{\mathbf{Q}}$ seja aproximadamente constante durante cada incremento de tempo Δt , tal que $\dot{\mathbf{Q}} \approx \Delta \mathbf{Q} / \Delta t$, um potencial Ψ , consistente com o potencial Ξ apresentado na Equação 3.47, pode ser definido,

$$\Psi = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Xi dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \min_{\dot{\mathbf{Q}}} \left\{ \dot{W} + \psi(\dot{\mathbf{Q}}; \xi) \right\} dt \quad (3.49)$$

$$= \min_{\dot{\mathbf{Q}}} \left\{ W|_{t_n}^{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \psi(\dot{\mathbf{Q}}; \xi) dt \right\}$$

$$\Psi = \min_{\Delta \mathbf{Q}} \left\{ W_{n+1} - W_n + \Delta t \psi \left(\frac{\Delta \mathbf{Q}}{\Delta t}; \xi \right) \right\}. \quad (3.50)$$

3.4 Estrutura constitutiva variacional para materiais com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação

Empregando o desenvolvimento apresentado nas seções 3.1, 3.2 e 3.3 um modelo constitutivo variacional anisotrópico é desenvolvido nesta seção. Para tanto, considerando as hipóteses apresentadas na seção 3.1, seja o conjunto de variáveis de estado $\{\bar{\mathbf{C}}, J, \mathbf{Q}\}$ que definem o estado termodinâmico do problema, onde \mathbf{Q} corresponde ao conjunto de variáveis internas, e o potencial de energia livre W para este modelo constitutivo dado por,

$$W = \varphi^e(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{Q}) + \varphi^i(\mathbf{Q}) + \varphi(\bar{\mathbf{C}}) + U(J). \quad (3.51)$$

O potencial φ^e corresponde ao potencial elástico associada a parcela elástica de deformação, φ^i corresponde ao potencial inelástico e φ um potencial dependente da deformação total isocórica. O potencial volumétrico U por sua vez, para todos os casos deste trabalho, apresenta uma penalidade que inibe deformações volumétricas. Uma representação, através de componentes reológicos, do modelo descrito nesta subseção está apresentada na Figura 3.6.

Para avaliar numericamente os potenciais apresentados nesta subseção, estes potenciais podem ser integrados empregando a expressão aproximada de integração apresentada

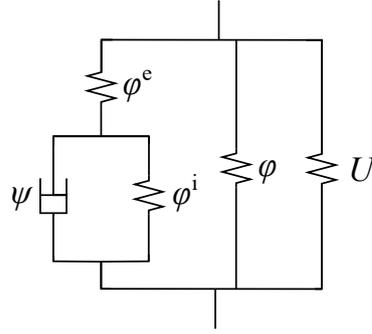


Figura 3.6 – Representação por modelo reológico do constitutivo estudado

na Equação 3.30,

$$\varphi^e = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^e d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^e(\lambda_k, \mathbf{Q}_k) \quad (3.52)$$

$$\varphi^i = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^i d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^i(\mathbf{Q}_k) \quad (3.53)$$

$$\psi = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^v d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^v(\dot{\mathbf{Q}}_k, \mathbf{Q}_k) \quad (3.54)$$

$$\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega} d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}(\lambda_k), \quad (3.55)$$

onde a função k -ésima $\bar{\omega}_k$ corresponde a avaliação das funções $\bar{\omega}$ utilizando as variáveis de estado na direção k . O potencial $\psi = \psi(\dot{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q})$, da Equação 3.54, corresponde ao potencial dissipativo do problema. Com o objetivo de desenvolver uma solução incremental, para o problema apresentado, foi utilizada a aproximação de valor constante para a taxa de deformação inelástica ao longo de cada incremento de tempo. Assim, as variáveis internas do problema podem ser escritas de forma incremental,

$$\mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + \Delta \mathbf{Q}. \quad (3.56)$$

Do potencial incremental Ψ , desenvolvido na Equação 3.50, a seguinte expressão é obtida para o presente modelo,

$$\Psi = \min_{\Delta \mathbf{Q}} \{ \Delta W + \Delta t \psi \} \quad (3.57)$$

$$= \min_{\Delta \mathbf{Q}} \{ \Delta \varphi^e + \Delta \varphi^i + \Delta t \psi \} + \Delta \varphi + \Delta U, \quad (3.58)$$

tal que,

$$\Delta\varphi^e = \varphi_{n+1}^e - \varphi_n^e \quad (3.59)$$

$$\Delta\varphi^i = \varphi_{n+1}^i - \varphi_n^i \quad (3.60)$$

$$\Delta\varphi = \varphi_{n+1} - \varphi_n \quad (3.61)$$

$$\Delta U = U_{n+1} - U_n. \quad (3.62)$$

Com a integração numérica dos potenciais φ^e , φ^i e ψ , apresentadas nas Equações 3.52 a 3.54, o problema de mínimo apresentado pode ser reescrito. As medidas dos potenciais apresentados estão desacopladas por definição, onde na avaliação das variáveis de um dado índice k do problema não são empregadas variáveis de estado com índices diferentes de k . Assim, o problema de minimização apresentado pode ser desacoplado em \bar{m} diferentes problemas escalares de minimização,

$$\bar{\Psi} = \min_{\Delta\mathbf{Q}} \{ \Delta\varphi^e + \Delta\varphi^i + \Delta t \psi \} \quad (3.63)$$

$$= 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} \min_{\Delta\mathbf{Q}_k} \{ h_k \Delta\bar{\omega}_k^e + h_k \Delta\bar{\omega}_k^i + h_k \Delta t \bar{\omega}_k^v \}$$

$$\bar{\Psi} = 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \underbrace{\min_{\Delta\mathbf{Q}_k} \{ \Delta\bar{\omega}_k^e + \Delta\bar{\omega}_k^i + \Delta t \bar{\omega}_k^v \}}_{\bar{\Psi}_k}. \quad (3.64)$$

Para a solução destes problemas de minimização pode ser empregado o método de Newton. Utilizando os valores das variáveis internas obtidos por meio desta minimização pode-se então determinar, ignorando termos definidos no instantes anterior $t = t_n$, uma aproximação numérica para o potencial Ψ , definido na Equação 3.58, conforme expressão abaixo,

$$\Psi^{num} = \sum_{k=1}^{\bar{m}} 2h_k \left(\underbrace{\min_{\Delta\mathbf{Q}_k} \{ \Delta\bar{\omega}_k^e + \Delta\bar{\omega}_k^i + \Delta t \bar{\omega}_k^v \}}_{\bar{\Psi}_k} + \Delta\bar{\omega}_k \right) + \Delta U. \quad (3.65)$$

Esta expressão, conforme apresentado na Equação 3.48, pode ser empregada para a determinação do segundo tensor tensão de Piola Kirchhoff \mathbf{S} por meio da seguinte expressão,

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Psi^{num}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \lambda_{n+1,k}}{\partial \lambda_{n+1,k}^2} \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} : \frac{\partial \lambda_{n+1,k}^2}{\partial \bar{\mathbf{C}}_{n+1}} + 2 \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \frac{\partial J_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \quad (3.66)$$

$$= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \text{Dev} \left(\sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} \right) + J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1}, \quad (3.67)$$

onde $\text{Dev}(\bullet) = (\bullet) - 1/3 \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{C} : (\bullet))$, a qual corresponde à operação para determinação do tensor desviador material.

3.4.1 Representação gráfica da forma do CODF

Na abordagem CODF para este trabalho, um conjunto de \bar{m} variáveis escalares r representam as variáveis internas do problema constitutivo, ao invés de uma variável interna tensorial que é usualmente empregada no *framework* variacional. Para avaliar a evolução destas variáveis internas, neste trabalho é utilizada uma representação gráfica da superfície, onde r corresponde a uma dada variável interna e as variáveis θ e ϕ são, respectivamente, os ângulos polar e azimutal de um sistema de coordenadas esférico [Menzel e Waffenschmidt, 2009].

Nesta abordagem cada uma destas variáveis internas escalares r está associada a uma orientação θ e ϕ , e esta orientação é definida pela mesma orientação \mathbf{m}_0 empregada para a integração do CODF. Com as orientações definidas pela quadratura do CODF, uma representação de uma superfície discreta pode ser obtida pela triangulação de Delaunay dos pontos de superfície com magnitude r_k e orientação $\mathbf{m}_{0,k}$ na configuração de referência.

Por exemplo, esta representação para uma variável com distribuição de magnitude uniforme $r = 1$, utilizando a quadratura de Lebedev de meia esfera com $\bar{m} = 85$, é obtida a distribuição apresentada na Figura 3.7.a. Esta distribuição corresponde ao tensor esférico tal que $\mathbf{A} = r\mathbf{I}$, onde a magnitude r de cada direção k pode ser obtida por meio da expressão $r_k = \mathbf{m}_{0,k} \cdot \mathbf{A}\mathbf{m}_{0,k}$. Analogamente, a representação do tensor $\mathbf{A} = r\mathbf{I} + r\tilde{\mathbf{m}} \otimes \tilde{\mathbf{m}}$, com $\tilde{\mathbf{m}} = [1, 0, 0]$, é equivalente a distribuição apresentada na Figura 3.7.b.

Esta representação pode ser utilizada para avaliar a evolução de \bar{m} variáveis escalares internas, tais como r_k , com comportamentos muito mais complexos apresentados nos exemplos numéricos deste trabalho, que serão apresentados em um capítulo posterior.

3.5 Simetrias da solução numérica do modelo constitutivo inelástico isocórico

No desenvolvimento do modelo constitutivo inelástico foi empregado o conceito de tensores estruturais. O emprego de tensores estruturais, conforme colocado anteriormente, confere as mesmas simetrias apresentadas pelo tensor estrutural ao modelo constitutivo. Por meio do estudo do grupo de simetria é possível demonstrar os tipos de simetria do

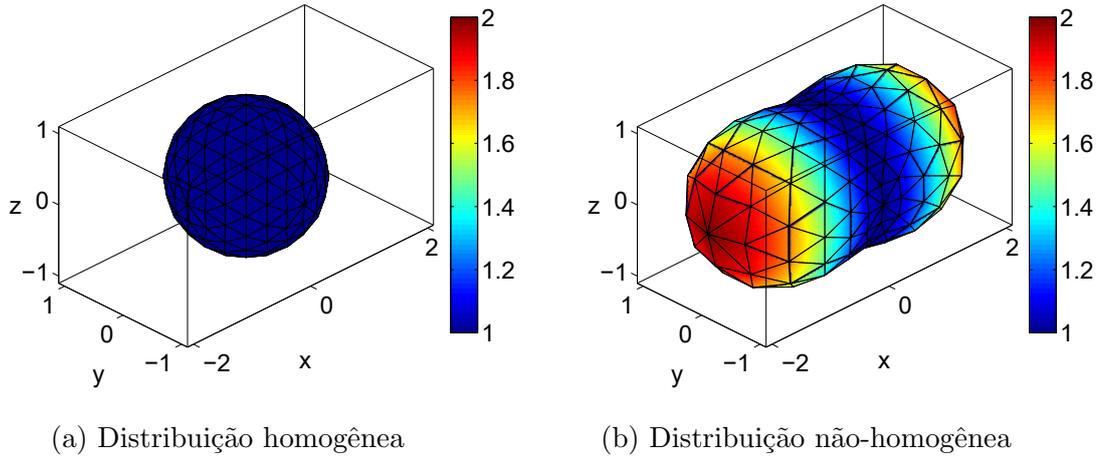


Figura 3.7 – Exemplos de distribuição de variáveis de estado internas

modelo constitutivo estudado em sua configuração inicial, e após o acúmulo de variáveis internas inelásticas [Spencer, 1971; Zheng e Spencer, 1993].

Com o objetivo de estudar o comportamento do grupo de simetria do presente modelo constitutivo, seja a expressão apresentada na Equação 3.67 para o segundo tensor de Piola Kirchhoff, a qual pode ser reescrita como uma função tensorial \mathbf{g} , tal que $\mathbf{S} = \mathbf{g}(\mathbf{C}, q_k, \mathbf{m}_{0,k}, h_k)$, onde q_k corresponde ao conjunto de variáveis internas escalares associada à cada k -ésima direção de integração e $\mathbf{m}_{0,k}$ e h_k são, respectivamente, as direções e pesos da integração da esfera. Como as variáveis internas q_k são escalares, estas variáveis não sofrem rotação ao serem transformadas da configuração de referência para a configuração deformada, ou vice-versa. Esta expressão pode ser desenvolvida conforme colocado abaixo,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S} &= \mathbf{g}(\mathbf{C}, q_k, \mathbf{m}_{0,k}, h_k) \\
 &= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \left(\mathbf{M}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{M}_{0,k}) \right) + J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1} \\
 &= \sum_{k=1}^{\bar{m}} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \mathbf{M}_{0,k} + \\
 &\quad + \left(J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} - J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{1}{3\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \lambda_{n+1,k}^2 \right) \mathbf{C}^{-1} \\
 &= \sum_{k=1}^{\bar{m}} \varphi_{1,k} \mathbf{M}_{0,k} + \varphi_2 \mathbf{C}^{-1}, \tag{3.68}
 \end{aligned}$$

onde $\mathbf{M}_{0,k} = \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}$, $\lambda_{n+1,k}^2 = \mathbf{C} : \mathbf{M}_{0,k}$ e as funções escalares $\varphi_{1,k}$ e φ_2 são dependentes das variáveis de estado do modelo. Por meio do resultado apresentado na Equação 3.68 pode ser facilmente provado que a função tensorial \mathbf{g} é isotrópica e objetiva, tal que $\mathbf{g}(\mathbf{RCR}^T, q_k, \mathbf{Rm}_{0,k}, h_k) = \mathbf{Rg}(\mathbf{C}, q_k, \mathbf{m}_{0,k}, h_k)\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in \text{SO}$. Com relação ao grupo de simetria do material \mathcal{D} , tal que $\mathbf{Rm}_{0,k} = \mathbf{m}_{0,k} \forall \mathbf{R} \in \mathcal{D}$, obtêm-se a seguinte expressão $\mathbf{g}(\mathbf{RCR}^T, q_k, \mathbf{m}_{0,k}, h_k) = \mathbf{Rg}(\mathbf{C}, q_k, \mathbf{m}_{0,k}, h_k)\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in \mathcal{D}$ onde cada termo de integração adicional empregado no procedimento de integração adiciona um novo tensor estrutural na função tensorial definida, modificando assim o grupo de simetria do modelo constitutivo.

Na integração numérica dos potenciais empregando somente um termo, com $\bar{m} = 1$, o grupo de simetria da função tensorial corresponde a $\mathcal{D} = \{\pm \mathbf{I}, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3, \mathbf{H}(\theta), (0 < \theta < 2\pi)\}$, onde \mathbf{S}_i são reflexões sobre os planos da tríade ortogonal à qual o vetor unitário $\mathbf{m}_{0,1}$ faz parte, e $\mathbf{H}(\theta)$ são as rotações sobre este mesmo vetor unitário. Esta integração corresponde a um caso extremo para este problema, pelo baixo número de termos empregados no procedimento de integração.

Ao empregar mais de uma direção no procedimento de integração, o grupo de simetria da função tensorial passa a ser formado pelas transformações que satisfazem a identidade apresentada para os todos tensores estruturais da função tensorial simultaneamente. Assim, no caso de um procedimento de integração que emprega uma tríade ortogonal de vetores unitários o grupo de simetria corresponde à $\mathcal{D} = \{\pm \mathbf{I}, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3\}$, onde \mathbf{S}_i são reflexões sobre os planos normais aos vetores unitários que compõem a tríade ortogonal. Então, ao selecionar um procedimento de integração numérica dos potenciais com vetores unitários apresentando direções não ortogonais entre si, que corresponde a qualquer caso com quatro ou mais termos de integração ($\bar{m} \geq 4$), o grupo de simetria do material se reduz a $\mathcal{D} = \{\mathbf{I}, -\mathbf{I}\}$.

O grupo de simetria \mathcal{D} de um modelo constitutivo isotrópico é dado pelo grupo ortogonal completo, ou seja, $\mathcal{D} = \{\mathbf{R} \mid \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T, \det \mathbf{R} = \pm 1\}$. As transformações \mathbf{R} deste grupo de simetria correspondem a quaisquer transformações de reflexão e de rotação. Por outro lado, para o modelo estudado neste trabalho ao utilizar 4 termos ou mais na integração da microesfera ($\bar{m} \geq 4$) um comportamento anisotrópico é obtido. Neste caso o grupo de simetria \mathcal{D} do modelo é dado por $\mathcal{D} = \{\mathbf{I}, -\mathbf{I}\}$. No entanto, note que para o modelo estudado neste trabalho ao utilizar integrações com menos de 4 termos diferentes tipos simetrias são obtidas, mas nenhuma delas corresponde a um modelo constitutivo

isotrópico.

Uma das características mais distintas de um modelo constitutivo isotrópico são seus infinitos planos de simetria, ou seja, o modelo possui planos de simetria em quaisquer direções. Verifica-se por sua vez que, para o modelo estudado, cada termo adicional na integração da microesfera confere também ao modelo um plano de simetria normal ao referido vetor unitário do termo de integração. Assim, no caso específico do material não ter acumulado nenhuma inelasticidade, uma característica do modelo estudado é que: ao aumentar o número de direções de integração da microesfera, e por conseguinte aumentar o número de planos de simetria, a resposta mecânica capturada pelo modelo constitutivo gradualmente se aproxima daquela observada em um modelo isotrópico enquanto todas as variáveis internas apresentarem seu valor inicial.

Por fim, pelas discussões apresentadas, é possível afirmar que o modelo constitutivo estudado apresenta em sua configuração inicial indeformada a presença da isotropia inicial, e com o processo de deformação, e consequente acúmulo de variáveis inelásticas, ocorre a evolução da resposta obtida pelo modelo para um com características anisotrópicas. Ou seja, o modelo constitutivo estudado apresenta anisotropia induzida pela deformação.

4 MODELOS COM INELASTICIDADE ANISOTRÓPICA INDUZIDA PELA DEFORMAÇÃO

Neste capítulo são desenvolvidos diferentes modelos constitutivos empregando a estrutura constitutiva variacional para materiais com inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação apresentada na seção 3.4. Os modelos desenvolvidos empregando esta estrutura são: um modelo com dano e viscoelasticidade anisotrópicos para elastômeros com carga e tecidos biológicos e; um modelo com plasticidade anisotrópica para materiais termoplásticos. Os modelos apresentados neste capítulo estão de acordo com a hipótese de direções equivalentes, pois não apresentam de forma predominante estruturas compactas e orientadas, como por exemplo estruturas cristalinas.

4.1 Modelo com viscoelasticidade e dano mecânico anisotrópicos induzidos pela deformação

O modelo apresentado nesta seção busca representar os comportamentos de materiais como elastômeros com carga, como por exemplo o efeito Mullins [Mullins, 1948, 1969], e os comportamentos usualmente observados em tecido biológicos moles reforçados por fibras [Holzapfel, 2017]. A estrutura matemática apresentada neste trabalho, dada a sua construção variacional, pode ser facilmente adaptada para representar diferentes tipos de materiais. Para este modelo a seguinte decomposição viscoelástica é usada para a medida de deformação λ ,

$$\lambda = \lambda^e \lambda^v, \quad (4.1)$$

onde λ^e é a medida de alongamento elástica e λ^v é a medida de alongamento viscosa. Além da medida inelástica de viscosidade λ^v , uma outra variável interna associada à evolução do dano η é utilizada, tal que $\eta = [0; 1]$. Para este problema o potencial de energia livre W e o potencial dissipativo ψ são dados, respectivamente, pelas expressões [Vassoler et al., 2016],

$$W = \varphi^e(\lambda^e, \eta) + \varphi(\lambda) + U(J) \quad (4.2)$$

$$\psi = \psi^v(d^v) + \psi^\eta(\dot{\eta}, \eta), \quad (4.3)$$

onde $d^v = \dot{\lambda}^v (\lambda^v)^{-1}$, e ψ^v corresponde ao potencial dissipativo viscoso e $\psi^\eta(\dot{\eta}, \eta)$ ao potencial dissipativo de dano, este último definindo o critério de evolução do dano no modelo.

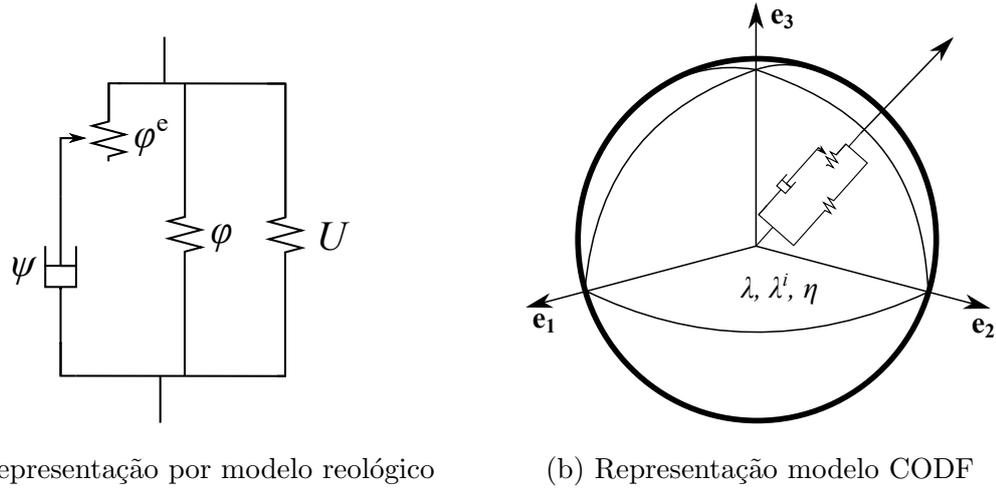


Figura 4.1 – Representação por modelo reológico do modelo com dano e viscosidade

Uma representação por modelo reológico deste modelo é apresentada na Figura 4.1. Os potenciais apresentados correspondem as seguintes expressões,

$$\varphi^e(\lambda^e, \eta) \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^{ed}(\lambda_k^e, \eta_k) = 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k (1 - \eta_k) \bar{\omega}^e(\lambda_k^e) \quad (4.4)$$

$$\varphi(\lambda) \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}(\lambda_k) \quad (4.5)$$

$$\psi^v(d^v) \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\phi}^v(d_k^v) \quad (4.6)$$

$$\psi^\eta(\dot{\eta}, \eta) \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\phi}^\eta(\dot{\eta}_k, \eta_k). \quad (4.7)$$

Note que diferentemente dos outros potenciais apresentados acima, a função elástica $\bar{\omega}^{ed}$, do potencial elástico φ^e , apresenta uma relação linear com o potencial de dano η_k . Para $\eta_k = 0$ a função apresenta comportamento não danificado nesta direção, e para $\eta_k = 1$ a função elástica apresenta resposta nula, estando assim totalmente danificado na direção k . Agora, para se obter uma solução incremental para este problema, as expressões incrementais das variáveis de estado do problema utilizam as seguintes expressões,

$$\lambda_{n+1}^v = \lambda_n^v \exp(\Delta t \dot{q}) = \lambda_n^v \exp(\Delta q) \quad (4.8)$$

$$\lambda_{n+1}^e = \lambda_{n+1} \lambda_n^{v-1} \exp(-\Delta q) = \lambda^{trial} \exp(-\Delta q) \quad (4.9)$$

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \Delta \eta, \quad (4.10)$$

onde $d^v \approx \dot{q} = \Delta q / \Delta t$. E utilizando estas definições o potencial incremental é dado pela

expressão,

$$\Psi = \min_{\Delta q, \Delta \eta} \{\Delta W + \Delta t \psi\} \quad (4.11)$$

$$= \min_{\Delta q, \Delta \eta} \{\Delta \varphi^e + \Delta t(\psi^v + \psi^\eta)\} + \Delta \varphi + \Delta U, \quad (4.12)$$

tal que,

$$\Delta \varphi^e = \varphi^e(\lambda_{n+1,k}^e, \eta_{n+1,k}) - \varphi^e(\lambda_{n,k}^e, \eta_{n,k}) \quad (4.13)$$

$$\Delta \varphi = \varphi(\lambda_{n+1,k}) - \varphi(\lambda_{n,k}) \quad (4.14)$$

$$\Delta U = U(J_{n+1,k}) - U(J_{n,k}). \quad (4.15)$$

Com a integração numérica dos potenciais φ^e , ψ^v e ψ^η apresentadas nas Equações 4.4, 4.6 e 4.7, o problema de minimização pode ser reescrito. As medidas dos potenciais apresentados estão desacopladas por definição, onde na avaliação das variáveis de um dado índice k do problema não são empregadas variáveis de estado com índices diferentes de k . Assim, o problema de minimização apresentado pode ser desacoplado em \bar{m} diferentes problemas escalares de minimização,

$$\bar{\Psi} = \min_{\Delta q, \Delta \eta} \{\varphi^e(\lambda_{n+1}^e, \eta_{n+1}) + \Delta t(\psi^v(\Delta q/\Delta t) + \psi^\eta(\Delta \eta/\eta, \eta_{n+\alpha}))\} \quad (4.16)$$

$$= 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} \min_{\Delta q_k, \Delta \eta_k} \{h_k \bar{\omega}^{ed}(\lambda_{n+1,k}^e, \eta_{n+1,k}) + \Delta t(h_k \bar{\phi}^v(\Delta q_k/\Delta t) + h_k \bar{\phi}^\eta(\Delta \eta_k/\Delta t, \eta_{n+\alpha,k}))\}$$

$$\bar{\Psi} = 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \underbrace{\min_{\Delta q_k, \Delta \eta_k} \{\bar{\omega}^{ed}(\lambda_{n+1,k}^e, \eta_{n+1,k}) + \Delta t(\bar{\phi}^v(\Delta q_k/\Delta t) + \bar{\phi}^\eta(\Delta \eta_k/\Delta t, \eta_{n+\alpha,k}))\}}_{\bar{\Psi}_k}, \quad (4.17)$$

onde α , da variável $\eta_{n+\alpha}$, corresponde a um parâmetro de integração de forma análoga ao proposto em Vassoler et al., 2016. O parâmetro α permite que a variável η possa ser avaliada em um instante entre o instante anterior e o instante atual da integração temporal. Para a solução dos \bar{m} problemas escalares de minimização definidos pelas expressões $\bar{\Psi}_k$ é empregado o método de Newton pelo qual a condição de otimalidade de primeira ordem corresponde à determinação dos zeros das seguintes expressões,

$$r_{\Delta q_k} = -\lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} (1 - \eta_{n+1,k}) + \frac{\partial \bar{\phi}^v}{\partial \dot{q}_k} = 0 \quad (4.18)$$

$$r_{\Delta \eta_k} = -\bar{\omega}^e + \frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} = 0. \quad (4.19)$$

A estratégia de minimização para este problema é a seguinte: primeiro minimizar o problema impondo $\Delta\eta_k = 0$ para determinar Δq_k ; se o resíduo $r_{\Delta\eta_k}$ for satisfeito com o resultado obtido ($r_{\Delta\eta_k} \geq 0$) então o problema foi resolvido. Este procedimento acelera a solução quando não há incremento de alongamento na direção k , uma vez que não haverá acúmulo de dano. Ao contrário, ambos os resíduos devem ser resolvidos simultaneamente. Com a solução deste problema é possível então determinar uma aproximação numérica para o potencial Ψ , definido na Equação 3.58, conforme expressão abaixo,

$$\Psi^{num} = \sum_{k=1}^{\bar{m}} 2h_k \left(\bar{\Psi}_k + \bar{\omega}(\lambda_{n+1,k}) \right) + U(J_{n+1}). \quad (4.20)$$

Para determinar o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff é usada a expressão apresentada na Equação 3.67, que para este modelo específico também é apresentada em detalhes no apêndice A. A derivada do potencial constitutivo desviador pelo alongamento e outras soluções do problema constitutivo também são apresentados no apêndice A. Por fim, o potencial dissipativo merece atenção especial, dado que este necessita uma penalização para inibir taxas negativas da variável de dano. A função para determinação do dano é dada pela expressão [Vassoler et al., 2016],

$$\bar{\phi}^n(\dot{\eta}, \eta) = \begin{cases} Y(\eta)\dot{\eta} & \text{para } \Delta\eta_k \geq 0 \\ +\infty & \text{senão,} \end{cases} \quad (4.21)$$

onde $Y(\eta)$ corresponde a força conjugada de dano, que define a evolução da variável interna de dano nesta proposta. Esta escolha para a função de dano $\bar{\phi}^n$, com o potencial linearmente dependente da taxa de dano $\dot{\eta}$, torna a resposta de tensão do modelo independente da taxa de acúmulo de dano. Como expresso em Vassoler et al., 2016, esta expressão é avaliada em um tempo intermediário $n + \alpha$, $\alpha \in [0, 1]$, tal que $Y(\eta_{n+\alpha})$ é avaliado em $\eta_{n+\alpha} = (1 - \alpha)\eta_n + \alpha\eta_{n+1}$. A mesma estratégia proposta em Vassoler et al., 2016 é usada para minimizar o erro da integração temporal pode ser usada para avaliar um α conveniente para cada incremento de minimização,

$$\alpha_{min} = \frac{Y(\eta_{n+1}) - Y(\eta_n)}{Y(\eta_{n+1}) - Y(\eta_n) + \frac{\partial Y(\eta_{n+1})}{\partial \eta_{n+1}} \Delta\eta}. \quad (4.22)$$

O potencial viscoso $\bar{\phi}^v = \bar{\phi}^v(d^v)$ não está presente no resíduo $r_{\Delta\eta_k}$ dado que este potencial é independente do dano. Já a medida λ^e é função da medida λ^v o que a torna dependente de efeitos viscosos, conforme observado na expressão de resíduo $r_{\Delta q_k}$. Por fim,

a evolução do dano para elastômeros com carga pode ser considerada aproximadamente independente de taxa, dada que esta é uma característica observada experimentalmente [Mullins, 1948, 1969].

4.1.1 Potenciais para o modelo constitutivo para elastômeros com carga

Para o primeiro estudo utilizando o *framework* variacional apresentado na seção 4.1, potenciais específicos para elastômeros com carga são propostos. As moléculas de elastômeros carregadas com negro de fumo apresentam usualmente ligações cruzadas, e estas ligações estão também ligadas a superfície das partículas de carga em diferentes posições ao longo da cadeia [Dargazany e Itskov, 2009]. Um fenômeno comumente observado nestes materiais é o efeito Mullins, que se traduz no acúmulo de dano no material na forma de uma progressiva destruição das ligações entre as cadeias poliméricas e a carga, reduzindo assim a rigidez do material. Este fenômeno é claramente observado em ensaios de tração cíclica, onde o efeito Mullins se caracteriza pela degradação das propriedades elásticas em níveis de deformação menores que a máxima deformação atingida no histórico de carregamento [Souza e Owen, 1994].

Assim, neste modelo são utilizadas funções elásticas adaptadas do potencial de Ogden, as quais são empregadas para representar diferentes materiais com comportamento elastomérico. Neste trabalho estas expressões foram modificadas para possuírem sua primeira derivada nula na configuração relaxada ($\bar{\omega}(\lambda = 1)$ e $\bar{\omega}^e(\lambda^e = 1)$),

$$\bar{\omega}(\lambda) = \frac{\mu^*}{\beta^*}((\lambda)^{\beta^*} - 1) - \mu^*(\lambda - 1) \quad (4.23)$$

$$\bar{\omega}^e(\lambda^e) = \frac{\mu}{\beta}((\lambda^e)^\beta - 1) - \mu(\lambda^e - 1), \quad (4.24)$$

onde μ^* , β^* , μ e β são parâmetros constitutivos do material. A necessidade de potenciais elásticos com primeira derivada nula na configuração relaxada (característica essa observada em potenciais de fibra) é imposta para garantir que o problema fique em equilíbrio ($\mathbf{S} = \mathbf{0}$) quando a deformação elástica em todas as direções for nula ($\lambda_k^e = 1 \forall k$). Para os potenciais dissipativos viscosos e dano são empregadas as seguintes expressões,

$$\bar{\phi}^v(d^v) = \gamma(d^v)^2 \quad (4.25)$$

$$Y(\eta) = Y_0 - \delta \log \left(1 - \frac{\eta}{\eta_\infty} \right), \quad (4.26)$$

onde γ é o parâmetro do potencial viscoso e Y_0 , δ e η_∞ são parâmetros do potencial de dano. O parâmetro Y_0 corresponde a uma força termodinâmica de característica energética que deve ser ultrapassada para o modelo passar a acumular dano, η_∞ um parâmetro que define o limite máximo que o valor de dano pode atingir e δ um parâmetro que determina, em conjunto com o parâmetro η_∞ , a evolução do limite energético necessário para a evolução da variável interna de dano.

4.1.2 Potenciais para o modelo constitutivo para tecido biológico moles

A mesma estrutura empregada pode ser especializada para tecidos biológicos moles, com ou sem reforços de fibras (inicialmente isotrópicos ou anisotrópicos). Diferentes tecidos biológicos moles como pele, tendões e artérias são conhecidos por envolverem fenômenos mecânicos complexos como grandes deformações e resposta não-linear. Modelos constitutivos para estes materiais usualmente incorporam hipóteses como direções preferenciais, viscosidade e dano [Garcia-Gonzalez et al., 2018].

Tecidos biológicos moles, em especial artérias saudáveis, apresentam uma estrutura composta altamente deformável com comportamento não-linear com um típico enrijecimento exponencial para altos valores de pressão vascular. Este efeito de enrijecimento é comum a diferentes tecidos biológicos e está relacionado ao recrutamento de um número diferente de fibrilas de colágeno conforme o tecido se alonga, se traduzindo assim no comportamento anisotrópico característico destas estruturas [Holzapfel et al., 2000a]. Para tanto a seguinte expressão exponencial é usada para definir o potencial elástico [Holzapfel et al., 2000b],

$$\bar{\omega}(\lambda) = \frac{k_1}{2k_2} \left(\exp \left(k_2 (\lambda^2 - 1)^2 \right) - 1 \right) \quad (4.27)$$

$$\bar{\omega}^e(\lambda^e) = \frac{k_1^e}{2k_2^e} \left(\exp \left(k_2^e (\lambda^{e2} - 1)^2 \right) - 1 \right), \quad (4.28)$$

onde k_1 , k_2 , k_1^e e k_2^e são parâmetros de material. Assim, para os potenciais viscoso e dano é utilizada, respectivamente, um potencial linear e uma função de dano simples Vassoler et al., 2016,

$$\bar{\phi}^v(d^v) = \gamma (d^v)^2 \quad (4.29)$$

$$Y(\eta) = Y_0 + \beta (-\log(1 - \eta))^\zeta, \quad (4.30)$$

onde γ é o parâmetro de rigidez viscosa e os parâmetros Y_0 , β e ζ são os parâmetros do potencial de dano.

No caso de representação de tecidos biológicos reforçado com fibras, como tendões ou artérias (inicialmente anisotrópicos), o modelo pode facilmente incorporar matematicamente uma (ou possivelmente mais) famílias de fibras em sua formulação. Para o caso de um tecido como uma artéria, se adicionam duas famílias de fibras em diferentes direções do material através das expressões $\bar{\Psi}_{f1}$ e $\bar{\Psi}_{f2}$, as quais utilizam a mesma formulação variacional e os mesmos potenciais empregados pela expressão $\bar{\Psi}_k$, da Equação 4.17, mas com parâmetros constitutivos distintos para representar uma rigidez superior apenas nas referidas direções. Assim o potencial Ψ^{num} , da Equação 4.20 pode ser reescrito como,

$$\Psi^{num} = \sum_{k=1}^{\bar{m}} 2h_k \left(\bar{\Psi}_k + \bar{\omega}(\lambda_{n+1,k}) \right) + U(J_{n+1}) + \bar{\Psi}_{f1} + \bar{\Psi}_{f2}. \quad (4.31)$$

Cada um dos termos $\bar{\Psi}_{f1}$ e $\bar{\Psi}_{f2}$ possuem orientações de fibra distintas. Os termos $\bar{\Psi}_{f\beta}$ (com $\beta = 1$ ou $\beta = 2$) são dados pelo seguinte problema de minimização,

$$\bar{\Psi}_{f\beta} = \min_{\Delta q_{f\beta}, \Delta \eta_{f\beta}} \left\{ \bar{\omega}_f^{ed}(\lambda_{n+1,f\beta}^e, \eta_{n+1,f\beta}) + \Delta t (\bar{\phi}_f^v(\Delta q_{f\beta}/\Delta t) + \bar{\phi}_f^\eta(\Delta \eta_{f\beta}/\Delta t, \eta_{n+\alpha,f\beta})) \right\}, \quad (4.32)$$

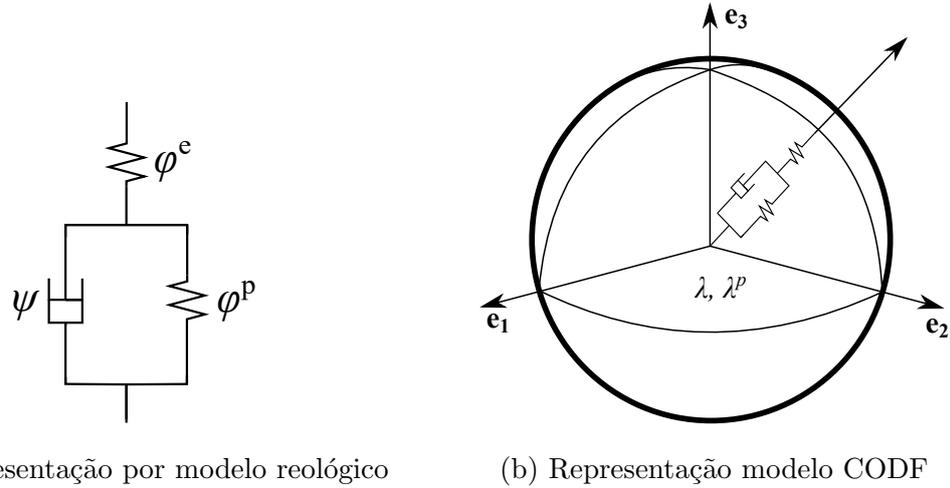
onde, conforme colocado anteriormente, as funções $\bar{\omega}_f^{ed}$, $\bar{\phi}_f^v$ e $\bar{\phi}_f^\eta$ (ou Y_f) são idênticas, respectivamente, às funções $\bar{\omega}^{ed}$, $\bar{\phi}^v$ e $\bar{\phi}^\eta$ (ou Y) com a exceção dos valores dos parâmetros constitutivos.

4.2 Modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação

A estrutura apresentada utilizando o framework variacional e o conceito de função de distribuição de orientação da cadeia (CODF) pode também ser utilizado para representar diferentes comportamentos inelásticos e por consequência outros materiais. Na sequência é apresentada a estrutura utilizada para representar o comportamento de materiais termoplásticos com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação. Para este modelo a seguinte decomposição viscoplástica é usada para a medida de deformação λ ,

$$\lambda = \lambda^e \lambda^p, \quad (4.33)$$

onde λ^e é a medida de alongamento elástica e λ^p é a medida de alongamento plástica em uma determinada direção. Seja o potencial de energia livre W e o potencial dissipativo



(a) Representação por modelo reológico

(b) Representação modelo CODF

Figura 4.2 – Representação por modelo reológico do modelo viscoplástico

para estes modelo constitutivo dados por,

$$W = \varphi^e(\lambda^e) + \varphi^p(\lambda^p) + \varphi(\lambda) + U(J) \quad (4.34)$$

$$\psi = \psi(d^p), \quad (4.35)$$

onde $d^p = \dot{\lambda}^p(\lambda^p)^{-1}$. Uma representação por modelo reológico deste modelo é apresentada na Figura 4.1. Para avaliar os potenciais apresentados nesta subseção numericamente, estes potenciais devem ser integrados empregando a expressão aproximada de integração apresentada na Equação 3.30,

$$\varphi^e(\lambda^e) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^e(\lambda^e) d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^e(\lambda_k^e) \quad (4.36)$$

$$\varphi^p(\lambda^p) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^p(\lambda^p) d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^p(\lambda_k^p) \quad (4.37)$$

$$\psi(\dot{\varepsilon}^p) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}^v(d^p) d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}^v(\Delta \varepsilon_k^p / \Delta t) \quad (4.38)$$

$$\varphi(\lambda) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \bar{\omega}(\lambda) d\Omega_0 \approx 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \bar{\omega}(\lambda_k). \quad (4.39)$$

Com o objetivo de desenvolver uma solução incremental, para o problema apresentado as seguintes expressões incrementais para as variáveis de estado do problema são

utilizadas,

$$\lambda_{n+1}^p = \lambda_n^p \exp(\Delta t \dot{\varepsilon}^p) = \lambda_n^p \exp(\Delta \varepsilon^p) \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{n+1}^e &= \lambda_{n+1} \lambda_{n+1}^{p-1} = \lambda_{n+1} \lambda_n^{p-1} \exp(\Delta \varepsilon^p)^{-1} \\ &= \lambda^{trial} \exp(-\Delta \varepsilon^p), \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde $d^p \approx \dot{\varepsilon}^p = \Delta \varepsilon^p / \Delta t$. Do potencial incremental Ψ , desenvolvido na Equação 3.50, a seguinte expressão é obtida para o presente modelo,

$$\Psi = \min_{\Delta \varepsilon^p} \{ \Delta W + \Delta t \psi(\Delta \varepsilon^p / \Delta t) \} \quad (4.42)$$

$$= \min_{\Delta \varepsilon^p} \{ \Delta \varphi^e + \Delta \varphi^p + \Delta t \psi \} + \Delta \varphi + \Delta U, \quad (4.43)$$

tal que,

$$\Delta \varphi^e = \varphi^e(\lambda_{n+1}^e) - \varphi^e(\lambda_n^e) \quad (4.44)$$

$$\Delta \varphi^p = \varphi^p(\lambda_{n+1}^p) - \varphi^p(\lambda_n^p) \quad (4.45)$$

$$\Delta \varphi = \varphi(\lambda_{n+1}) - \varphi(\lambda_n) \quad (4.46)$$

$$\Delta U = U(J_{n+1}) - U(J_n). \quad (4.47)$$

Com a integração numérica dos potenciais φ^e , φ^p e ψ apresentadas nas Equações 4.36 a 4.38, o problema de minimização pode ser reescrito. As medidas dos potenciais apresentados estão desacopladas por definição, onde na avaliação das variáveis de um dado índice k do problema não são empregadas variáveis de estado com índices diferentes de k . Assim, o problema de minimização apresentado pode ser desacoplado em \bar{m} diferentes problemas escalares de minimização,

$$\bar{\Psi} = \min_{\Delta \varepsilon^p} \{ \varphi^e(\lambda_{n+1}^e) + \varphi^p(\lambda_{n+1}^p) + \Delta t \psi(\Delta \varepsilon^p / \Delta t) \} \quad (4.48)$$

$$\begin{aligned} &= 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} \min_{\Delta \varepsilon_k^p} \{ h_k \bar{\omega}^e(\lambda_{n+1,k}^e) + h_k \Delta t \bar{\omega}^p(\lambda_{n+1,k}^p) + h_k \bar{\omega}^v(\Delta \varepsilon_k^p / \Delta t) \} \\ \bar{\Psi} &= 2 \sum_{k=1}^{\bar{m}} h_k \underbrace{\min_{\Delta \varepsilon_k^p} \{ \bar{\omega}^e(\lambda_{n+1,k}^e) + \Delta t \bar{\omega}^p(\lambda_{n+1,k}^p) + \bar{\omega}^v(\Delta \varepsilon_k^p / \Delta t) \}}_{\bar{\Psi}_k}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Para a solução destes problemas de minimização é empregado método de Newton pela qual a condição de otimalidade de primeira ordem corresponde à determinação do

zero da seguinte expressão,

$$r_k = \frac{\partial}{\partial \Delta \varepsilon_k^p} \left(\bar{\omega}^e(\lambda_{n+1,k}^e) + \bar{\omega}^p(\lambda_{n+1,k}^p) + \Delta t \bar{\omega}^v(\Delta \varepsilon_k^p / \Delta t) \right) = 0 \quad (4.50)$$

$$= -\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \lambda_{n+1,k}^e + \frac{\partial \bar{\omega}^p}{\partial \lambda_{n+1,k}^p} \lambda_{n+1,k}^p + \frac{\partial \bar{\omega}^v}{\partial \varepsilon_k^p} = 0. \quad (4.51)$$

Por meio dessa solução é possível determinar uma aproximação numérica para o potencial Ψ , definido na Equação 3.58, conforme expressão abaixo,

$$\Psi^{num} = \sum_{k=1}^{\bar{m}} 2h_k \left(\bar{\Psi}_k + \bar{\omega}(\lambda_{n+1,k}) \right) + U(J_{n+1}). \quad (4.52)$$

Para determinar o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff é usada a expressão apresentada na Equação 3.67, que para este modelo específico também é apresentada em detalhes no apêndice B. A derivada do potencial constitutivo desviador pelo alongamento e outras soluções do problema constitutivo também são apresentados no apêndice B. Por fim, para este modelo o potencial dissipativo também merece atenção especial de forma a garantir que o comportamento de plasticidade apresente acúmulo estritamente positivo da variável internal de plasticidade ($\dot{\varepsilon}^p \geq 0$). Para tanto é imposta a seguinte restrição para o potencial dissipativo ψ (ou $\bar{\omega}^v$) que garante este comportamento [Fancello et al., 2008],

$$\bar{\omega}^v(\varepsilon_k^p) = \begin{cases} \bar{\omega}^v(\varepsilon_k^p) & \text{para } \Delta \varepsilon_k \geq 0 \\ +\infty & \text{senão.} \end{cases} \quad (4.53)$$

4.2.1 Potenciais para um modelo constitutivo para materiais termoplásticos amorfos

O modelo desta subseção foi desenvolvido visando a representação de materiais termoplásticos amorfos, assim as escolhas de potenciais deste modelo foram feitas baseando-se nas abordagens apresentadas nos seguintes trabalhos [Haward e Thackray, 1968; Boyce et al., 1988; Arruda e Boyce, 1993a; Anand e Gurtin, 2003; Farias et al., 2019], referentes à modelagem de termoplásticos amorfos, o seguinte potencial elástico é escolhido,

$$\bar{\omega}^e = 2\lambda^e \mu (\log \lambda^e - 1) + 2\mu \quad (4.54)$$

$$\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda^e} = 2\mu \log \lambda^e, \quad (4.55)$$

onde μ é um parâmetro de rigidez elástico e a medida $\log \lambda^e$ corresponde a uma medida de deformação elástica logarítmica. O potencial plástico escolhido está baseado na mecânica estatística de elasticidade de elastômeros, e corresponde a uma simplificação da expressão apresentado em Treloar, 1975 para elastômeros em grandes deformações. Essa escolha está baseada na hipótese de que o comportamento inelástico de materiais termoplásticos assemelha-se ao mecanismo de deformação de elastômeros, conforme discutido em Haward e Thackray, 1968; Arruda e Boyce, 1993b. Assim, neste trabalho foi escolhido um potencial que emprega a inversa da função de Langevin na forma da seguinte expressão, conforme apresentado em Anand e Gurtin, 2003,

$$\bar{\omega}^p(\lambda^p) = \mu_R \lambda_{lock}^2 \left(\frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} x + \log \frac{x}{\sinh x} - \frac{1}{\lambda_{lock}} y - \log \frac{y}{\sinh y} \right) \quad (4.56)$$

$$x = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \right), \quad y = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_{lock}} \right), \quad (4.57)$$

onde \mathcal{L}^{-1} é a inversa da função de Langevin dada por $\mathcal{L}(\bullet) = \coth(\bullet) - 1/(\bullet)$ e os termos μ_R e λ_{lock} são parâmetros do material. A expressão do potencial $\bar{\omega}^p$ foi desenvolvida de forma que apresente a derivada do potencial inelástico, em relação à λ^p , dada por [Anand e Gurtin, 2003],

$$\frac{\partial \bar{\omega}^p}{\partial \lambda^p} = \mu_R \lambda_{lock}^2 \left(\frac{1}{\lambda_{lock}} x + \frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} + \frac{\sinh x}{x} \left(\frac{1}{\sinh x} \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} + x \frac{\partial}{\partial \lambda^p} \frac{1}{\sinh x} \right) \right) \quad (4.58)$$

$$= \mu_R \lambda_{lock}^2 \left(\frac{1}{\lambda_{lock}} x + \frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} - \left(\coth(x) - \frac{1}{x} \right) \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} \right) \quad (4.59)$$

$$= \mu_R \lambda_{lock}^2 \left(\frac{1}{\lambda_{lock}} x + \frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} - \frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \frac{\partial x}{\partial \lambda^p} \right) \quad (4.60)$$

$$= \mu_R \lambda_{lock} \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda^p}{\lambda_{lock}} \right). \quad (4.61)$$

O parâmetro μ_R corresponde a uma rigidez do potencial plástico do material, e este pode ser definido de forma a depender da temperatura absoluta θ em que o material se encontra, tal que $\mu_R = \mu_R(\theta)$. A utilização da função de Langevin para o potencial plástico reproduz o comportamento de enrijecimento em grandes comumente observado em materiais termoplásticos. Nesta proposta a anisotropia induzida pela deformação do material é função da evolução do alongamento plástico λ^p com diferentes valores em diferentes direções para um mesmo ponto do corpo. Esta abordagem se diferencia do trabalho de Boyce et al., 1988 onde emprega-se uma medida de *backstress* (enrijecimento cinemático) para representar anisotropia induzida pela deformação.

Ressalta-se que embora a geração e o fluxo de calor neste modelo foram desconsiderados, isso não impede que a temperatura inicial do material possa ser usada como um parâmetro do modelo. O parâmetro λ_{lock} está associado ao alongamento limite das cadeias poliméricas do material e determina um valor limite para a variável de *stretch* λ^p , para tanto o potencial desenvolvido apresenta um comportamento tal que $\frac{\partial \varphi^p}{\partial \lambda^p} \rightarrow \infty$ para $\lambda^p \rightarrow \lambda_{lock}$. Na Figura 4.3 um exemplo do comportamento da expressão apresentada para $\mu_R = 1$ e $\lambda_{lock} = 3$, note que $\frac{\partial \varphi^p}{\partial \lambda^p}$ apresenta um valor não nulo para um instante sem deformação inelástica acumulada (com $\lambda^p = 1$).

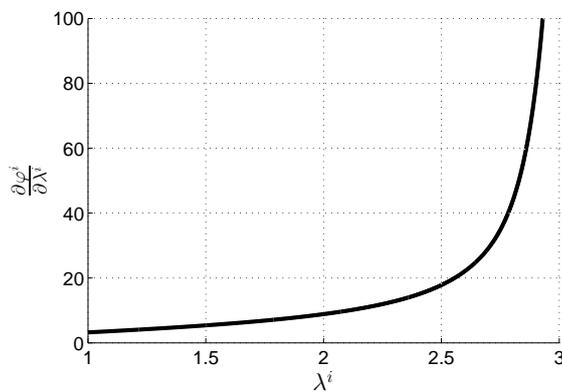


Figura 4.3 – Exemplo da evolução de $\frac{\partial \varphi^p}{\partial \lambda^p}$ em relação à λ^p

Conforme abordagem discutida em Argon, 1973, em materiais termoplásticos amorfos o fluxo plástico é considerado um mecanismo termicamente ativado, que se manifesta por meio da rotação de pequenos segmentos moleculares de suas orientação inicialmente aleatória para uma configuração orientada na direção da deformação principal [Miehe et al., 2009]. A resistência ao fluxo plástico pode ser dividida em duas: intramoleculares e intermoleculares. As resistências intramoleculares estão associadas aos mecanismos de realinhamento das cadeias poliméricas, como por exemplo flexão, tração e rotação das cadeias. Esta resistência depende da estrutura e composição do polímero empregado. A resistência intermolecular, definida pela variável s , por outro lado está associada a mecanismos como deslizamento e rotações entre as cadeias poliméricas. Este mecanismo apresenta dependência de fatores como pressão hidrostática e o volume livre presente no material. Para representar este comportamento a seguinte expressão para o potencial

dissipativo ψ é empregado [Anand e Gurtin, 2003],

$$\bar{\omega}^v(\dot{\varepsilon}^p) = \frac{s}{m+1} \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0^p} \right)^{m+1} \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial \bar{\omega}^v}{\partial \dot{\varepsilon}^p} = s \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0^p} \right)^m, \quad (4.63)$$

onde s corresponde a resistência intermolecular que evolui com acúmulo de deformação plástica, e $\dot{\varepsilon}_0^p$ e m são parâmetros constitutivos que correspondem, respectivamente, a uma referência do termo de taxa de deformação plástica e a um termo relacionado ao tipo comportamento do termo de taxa, que para $m = 0$ torna o modelo independente da taxa de deformação e para $m = 1$ o torna linearmente viscoplástico. Para a evolução do termo s , uma aproximação simplificada do sistema de Equações de [Anand e Gurtin, 2003] foi desenvolvido,

$$s_{n+1} = s^* + \exp\left(-\frac{h_0}{s^*} \varepsilon_{n+1}^p\right) (s_0 - s^*). \quad (4.64)$$

A resistência intermolecular s tem como limites $s(t = 0) = s_0$ e $s(t \rightarrow \infty) \rightarrow s^*$. Como exemplo de resposta obtida empregando a expressão apresentada na Equação 4.64, segue na Figura 4.5 um exemplo da curva s . Os parâmetros escolhidos foram $h_0 = 150$, $s_0 = 15$ e $s^* = 80$.

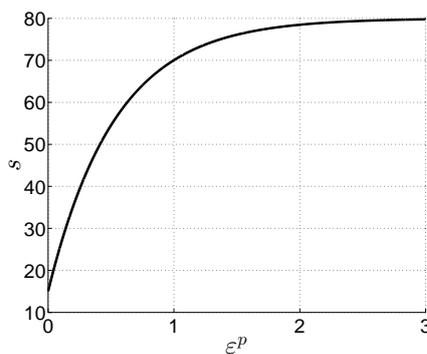


Figura 4.4 – Resposta s por ε^p

Figura 4.5 – Exemplo da resposta para s com parâmetros escolhidos

Ao empregar variáveis de estado que estão associadas a todas as direções do material simultaneamente como temperatura e deformação volumétrica, em um dado ponto, ocorre o acoplamento das equações destas diferentes direções ao empregar procedimentos

implícitos de solução do problema constitutivo. Assim, para a simplificação da solução do problema, foi escolhida uma abordagem que evitasse tal acoplamento facilitando significativamente a determinação de uma solução constitutiva implícita. Uma abordagem similar a esta com relação à escolha dos potenciais, e da formulação variacional, pode ser encontrada em Farias et al., 2019.

5 EXEMPLOS NUMÉRICOS E RESULTADOS

Neste capítulo os modelos constitutivos propostos são utilizados para solucionar diferentes problemas mecânicos, onde os resultados obtidos são analisados e discutidos. Para tanto, os modelos estudados são primeiramente avaliados em casos simples, onde o principal objetivo foi testar os aspectos relacionados à solução numérica, como a integração numérica e as características básicas associadas à inelasticidade anisotrópica da resposta do modelo. Na sequência do estudo de cada um dos modelos são avaliados casos mais complexos, envolvendo diferentes geometrias e casos de carregamento, para apresentar a capacidade do modelo, e as possibilidades que cada proposta apresenta em casos mais próximos àqueles de aplicação.

Para os casos com geometrias complexas o modelo proposto foi implementado no software ANSYS 14 utilizando a rotina USERMAT [Ansys Inc., 2016a], e dado que todos os modelos utilizados apresentam comportamento isocórico foi utilizada a formulação U-P para a solução dos problemas [Ansys Inc., 2016b]. Assim, os resultados de diferentes testes são apresentados de maneira progressiva em complexidade para elucidar as diferentes características dos modelos propostos neste trabalho.

Para a representação gráfica da anisotropia são apresentados, nas próximas seções, diferentes gráficos que representam a forma do CODF, seguindo os trabalhos de Dafalias, 2001; Harrysson et al., 2010. Neste trabalho busca-se estudar as variáveis inelásticas do modelos constitutivos, então optou-se por construir uma representação destas variáveis da forma do CODF.

5.1 Testes de integração do modelo com viscoelasticidade e dano anisotrópicos induzidos pela deformação

Testes numéricos são apresentados nesta seção para avaliar as principais características do modelo proposto, onde uma escolha apropriada para o esquema de integração do CODF, e o parâmetro de integração α [Vassoler et al., 2016] (parâmetro associado à variável η do potencial dissipativo ϕ^η), são necessários para representar adequadamente a resposta desejada. Para este primeiro estudo numérico, o modelo proposto para elastômeros com carga é empregado. Para tanto, os parâmetros de modelo apresentados na Tabela 5.1 são empregados para objetivo de demonstração da resposta numérica

somente, não estando relacionando a nenhum material específico.

Tabela 5.1 – Parâmetros constitutivos para os testes de integração

$\bar{\omega}^e$	ϕ^v	Y
$\mu = 20$ [MPa]	$\gamma = 0,1$ [GPa s]	$Y_0 = 0,5$ [MPa]
$\beta = 4$		$\delta = 5$ [MPa]
		$\eta_\infty = 1$

5.1.1 Integração temporal

Em Vassoler et al., 2016 é mostrado que uma escolha arbitrária do parâmetro α (associado neste trabalho ao valor da variável $\eta_{m+\alpha}$ da função de dano $\bar{\phi}^\eta(\Delta\eta/\Delta t, \eta_{m+\alpha})$) pode gerar erros na solução numérica dependendo da magnitude do passo de tempo e/ou deformação. Para estudar este aspecto da solução numérica, um teste de tensão uniaxial¹ impondo uma sequência de carregamentos e descarregamentos, conforme Figura 5.1, com uma taxa constante de deformação $\dot{\epsilon} = 0,05$ [1/s], onde cada caminho de carregamento e descarregamento é subdividido em N passos tempo, é utilizado. Neste estudo o número de incrementos testados é dado pela lista $N = \{2; 4; 8; 32; 128\}$ e, para a integração do CODF, foi utilizado $\bar{m} = 85$.

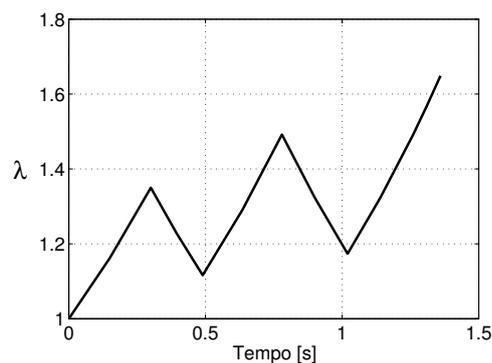


Figura 5.1 – Alongamento imposto no teste para diferentes α

A Figura 5.2 mostra as curvas de resultado do caso de tensão uniaxial usando $\alpha = \{0,25; 0,50; 0,75; 1,0\}$ e α_{min} , calculado usando a equação 4.22, para diferentes números de incrementos N .

¹Gradiente de deformação $\mathbf{F} = [\lambda \ 0 \ 0; 0 \ 1/\sqrt{\lambda} \ 0; 0 \ 0 \ 1/\sqrt{\lambda}]$.

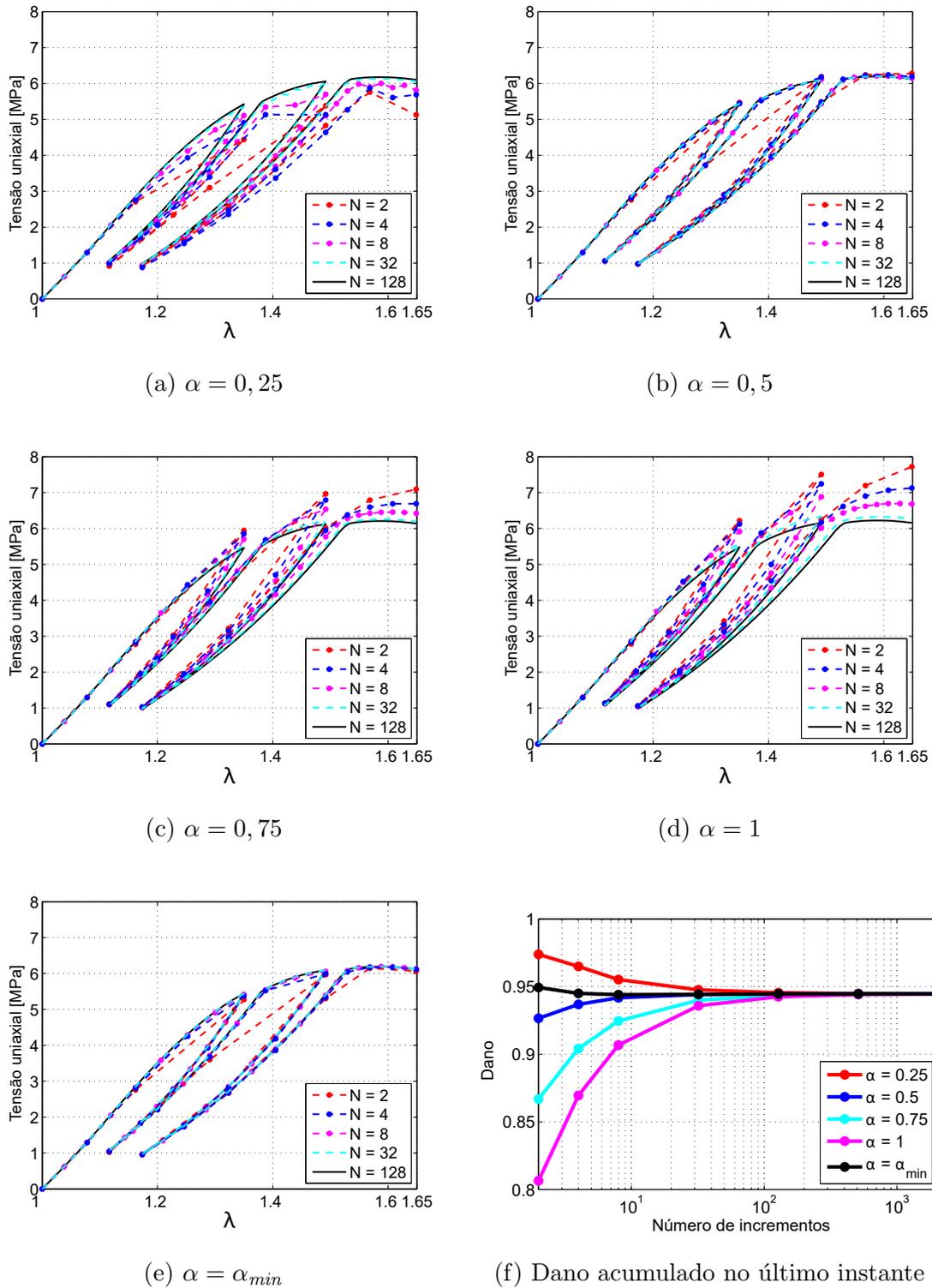


Figura 5.2 – Resposta de tensão para diferentes α , com diferentes números de incrementos N em cada caminho de carregamento e descarregamento.

Os resultados mostram que ao usar $\alpha = \alpha_{min}$ foram obtidos os menores erros para

o dano acumulado em qualquer número de incrementos testado. Embora sejam impostas grandes deformações em cada caminho de carregamento e descarregamento ($> 30\%$), mesmo um pequeno número de incrementos é suficiente para reduzir significativamente o erro.

5.1.2 Integração do CODF

Em relação ao procedimento de integração do CODF, diferentes conjuntos de vetores e pesos de integração podem ser empregados para avaliar os potenciais constitutivos. Com o objetivo da integração numérica dos potenciais constitutivos aproximar-se da integração analítica destas expressões, ao empregar quantidades maiores de termos no processo de integração o resultado obtido tende a aproximar-se daquele considerado ideal.

No entanto, existe um compromisso na escolha da quantidade de termos da integração numérica, pois ao aumentar o número de termos na integração dos potenciais aumenta-se em conjunto o esforço computacional exigido nesta avaliação. Assim, um estudo da quantidade de termos de integração na solução do problema constitutivo deve ser realizada na sequência deste trabalho, com o objetivo de avaliar a necessidade do emprego de diferentes quantidades de termos na integração para diferentes potenciais, diferentes geometrias e diferentes condições de contorno.

Como mostrado em Ehret et al., 2009 e Verron, 2015 o uso de funções não suaves para avaliação dos potenciais pode reduzir a precisão da integração, mesmo com um número elevado de pontos de integração. Para estudar a integração da meia esfera do CODF são utilizados testes monotônicos e cíclicos usando $\alpha = \alpha_{min}$ e os mesmos potenciais e parâmetros de material do exemplo anterior.

Testes monotônicos uniaxiais, e de cisalhamento simples², são realizados para diferentes números valores de integração do CODF $\bar{m} = \{19; 43; 85; 295\}$ utilizando os carregamentos apresentados na Figura 5.3. Os resultados, apresentados na Figura 5.4, mostram que para o modelo estudado usando $\bar{m} = 19$ a precisão é mantida somente para pequenas deformações, ou seja, $< 30\%$ para a resposta uniaxial e $< 75\%$ para a resposta de cisalhamento simples. A resposta uniaxial mostra que para grandes deformações ($\approx 100\%$) é necessário $\bar{m} = 85$.

²Gradiente de deformação $\mathbf{F} = [1 \ \varepsilon \ 0; 0 \ 1 \ 0; 0 \ 0 \ 1]$.

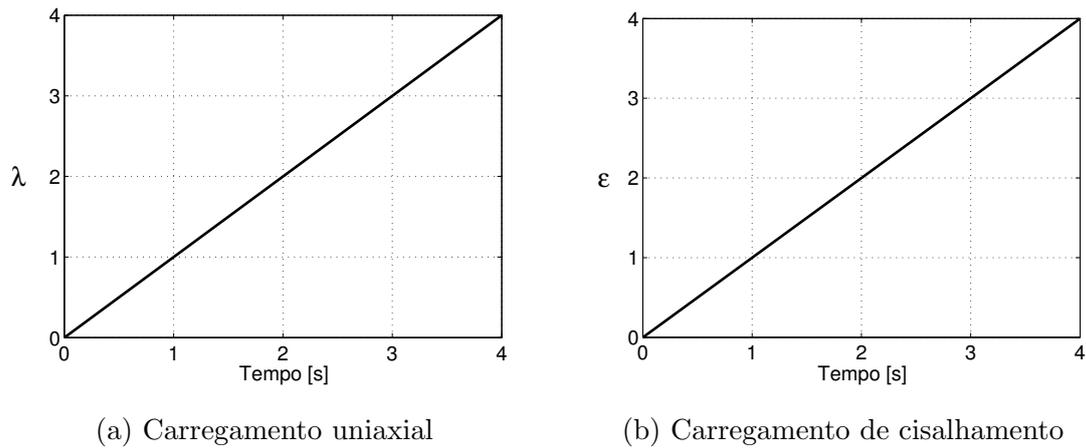


Figura 5.3 – Carregamentos impostos nos testes monotônico uniaxial e de cisalhamento simples

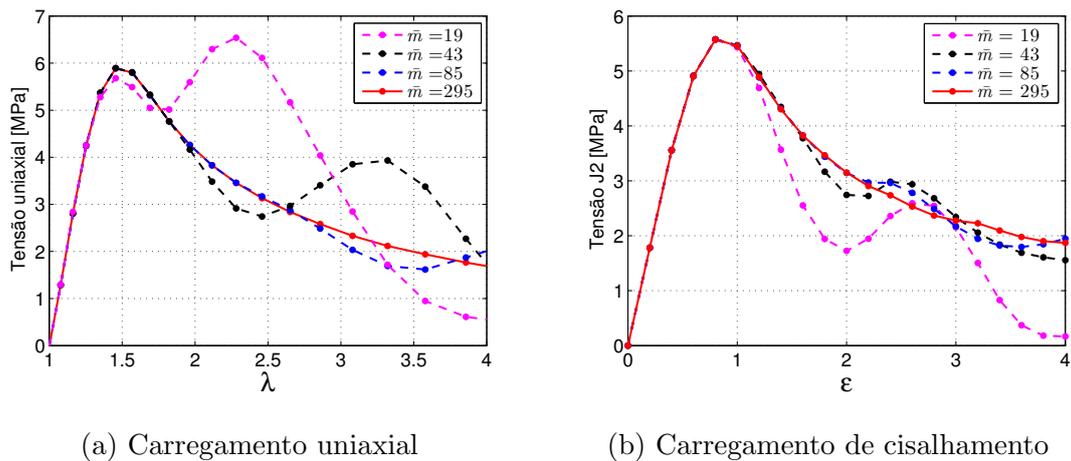


Figura 5.4 – Resposta monotônica uniaxial e de cisalhamento simples para diferentes \bar{m}

O mesmo teste de carregamento e descarregamento apresentado previamente, usando diferentes incrementos N de deformação nos caminhos de carregamento e descarregamento, é realizado para diferentes números de pontos de integração do CODF usando $\bar{m} = \{19; 43; 85; 295\}$. Os resultados, apresentados na Figura 5.5, mostram que para grandes deformações ($> 100\%$) somente com $\bar{m} = 85$ o modelo é capaz de representar a resposta de tensão com precisão.

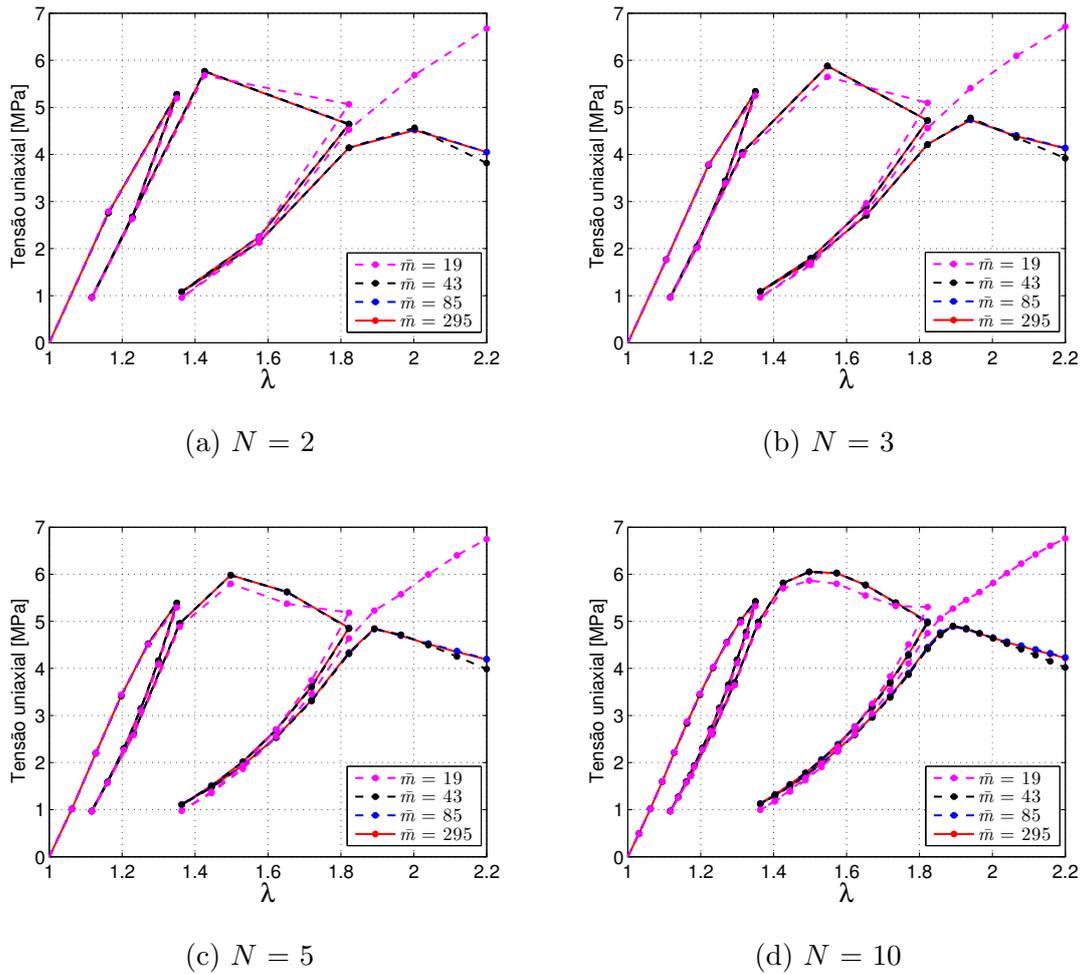


Figura 5.5 – Resposta de tensão uniaxial para diferentes números de pontos de integração \bar{m} e número de incrementos N para cada caminho de carregamento e descarregamento.

5.1.3 Distribuição de tensão

A distribuição de tensão pode também ser afetada pelo número de pontos de integração [Ehret et al., 2009]. Um disco anular com diâmetros interno e externo de, respectivamente, 6 mm e 10 mm é submetido a um deslocamento radial 1 mm no seu diâmetro externo dividido em 10 passos de tempo. O modelo utiliza 700 elementos lineares SOLID185. Os resultados de um quarto do disco, mostrados na Figura 5.6, demonstram que somente para altos números de direções de integração o comportamento axissimétrico esperado do modelo é obtido. Na Tabela 5.2 são apresentados os diferentes tempos computacionais necessários para solucionar o problema apresentado usando diferentes quan-

tidades de termos de integração \bar{m} . Por meio dos resultados apresentados foi observada uma relação linear entre a quantidade de termos de integração e o custo computacional da solução do modelo.

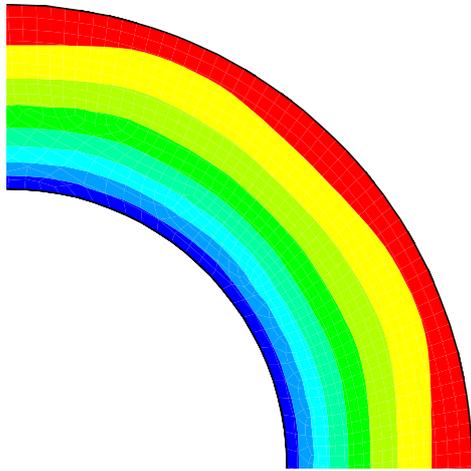
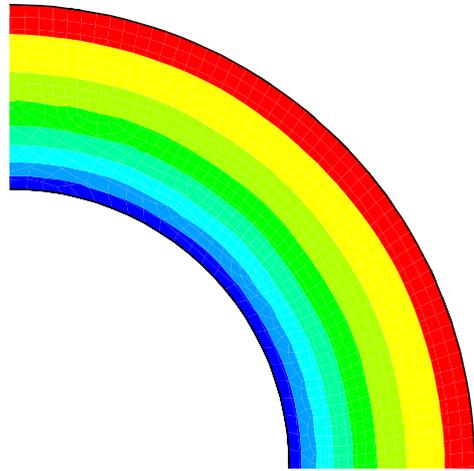
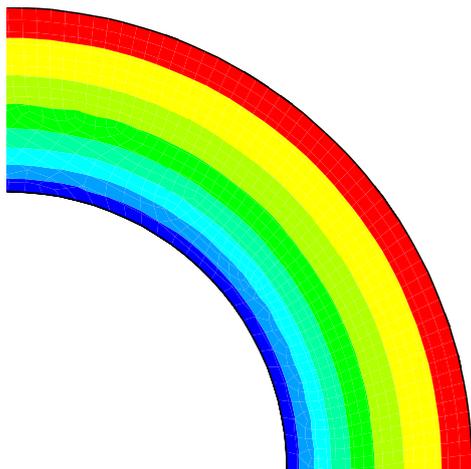
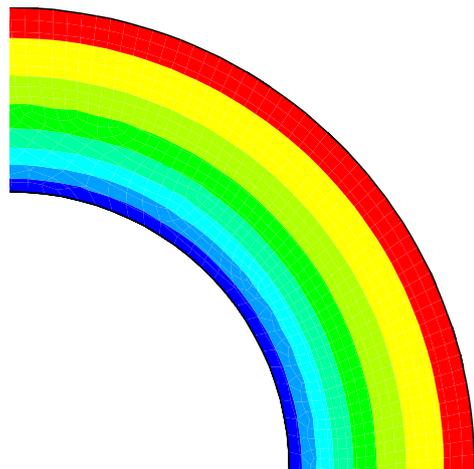
(a) $\bar{m} = 19$ (b) $\bar{m} = 43$ (c) $\bar{m} = 85$ (d) $\bar{m} = 295$

Figura 5.6 – Distribuição de tensão radial para diferentes números de pontos de integração (\bar{m})

Tabela 5.2 – Custo computacional (tc) em segundos
para obter a solução para diferentes \bar{m}

\bar{m}	$tc[s]$
19	76 [s]
43	123 [s]
85	219 [s]
295	679 [s]

5.2 Casos de estudo utilizando o modelo viscoelástico com dano com anisotropia induzida pela deformação

Esta seção apresenta testes numéricos que mostram a capacidade do modelo proposto para representar a resposta mecânica usualmente observada para elastômeros com carga e tecidos biológicos moles. Os testes almejam explorar as capacidades anisotrópicas relacionados aos comportamentos de dano, viscoelasticidade e seus acoplamentos.

5.2.1 Anisotropia induzida pela deformação

Neste *framework*, a anisotropia inelástica é induzida pela deformação de cada direção previamente definida pela direção do ponto de quadratura usada na integração da meia esfera. O conjunto de testes numéricos apresentados nestas seções servem para mostrar a evolução das variáveis internas inelásticas.

No primeiro teste, um paralelepípedo ($1 \times 0,5 \times 0,5 \text{ mm}$) é submetido à compressão, com um posterior alongamento até $\lambda = 1,7$ na mesma direção, conforme apresentado na Figura 5.8.a. O teste é realizado utilizando $\bar{m} = 85$, e os potenciais apresentados na subseção 4.1.1. Os parâmetros de material utilizados são apresentados na Tabela 5.3, estes parâmetros anulam o potencial viscoso tornando a resposta do modelo independente da taxa de deformação. A deformação geométrica e a evolução anisotrópica do dano mecânico para este teste são apresentadas na Figura 5.7.

Tabela 5.3 – Parâmetros constitutivos do modelo de elastômero com carga para o teste de dano

$\bar{\omega}^e$	Y
$\mu = 20$ [MPa]	$Y_0 = 25$ [MPa]
$\beta = 8$	$\delta = 40$ [MPa]
	$\eta_\infty = 1$

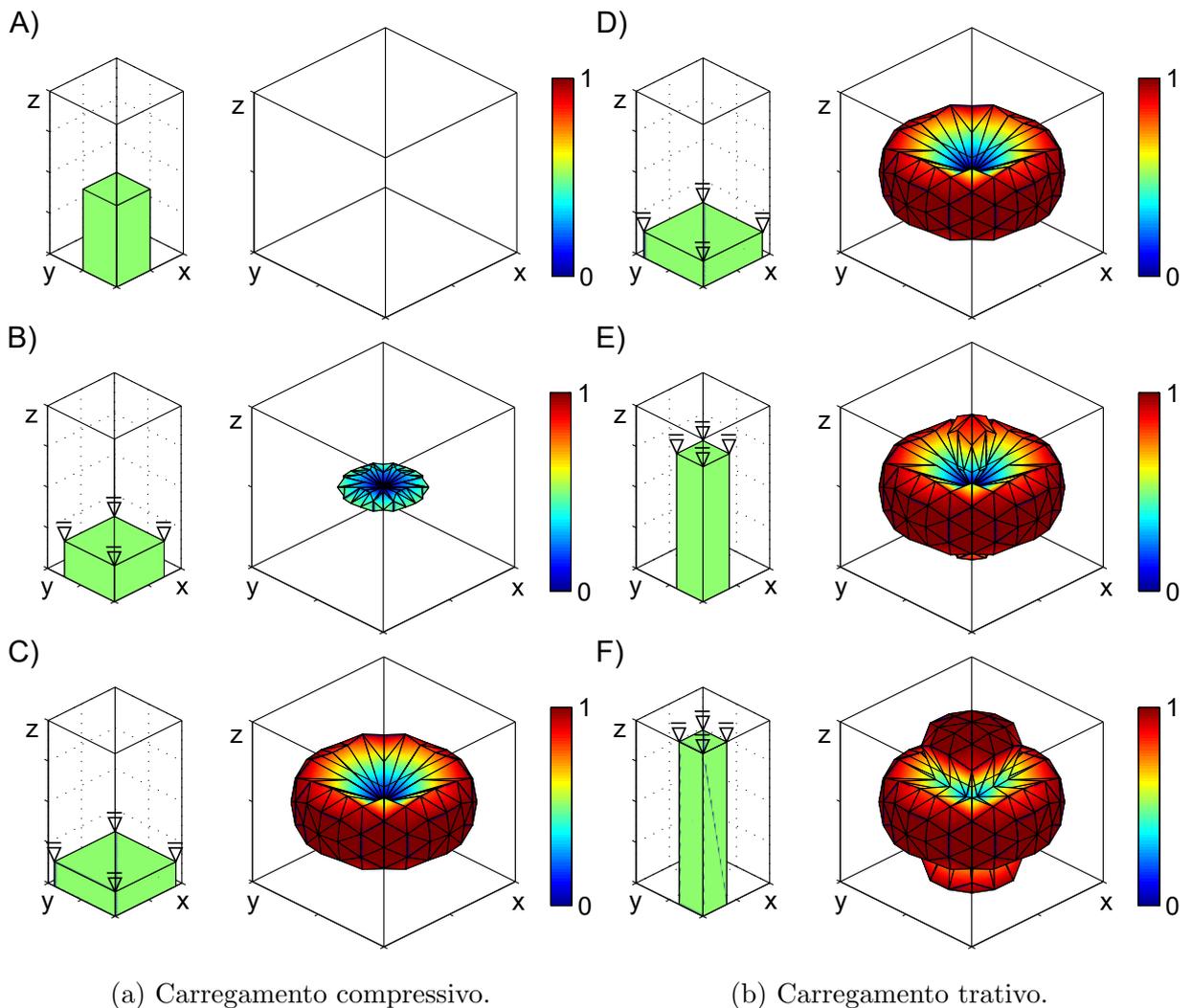


Figura 5.7 – Evolução da forma do CODF usando a variável de dano η para o carregamento uniaxial compressivo-trativo.

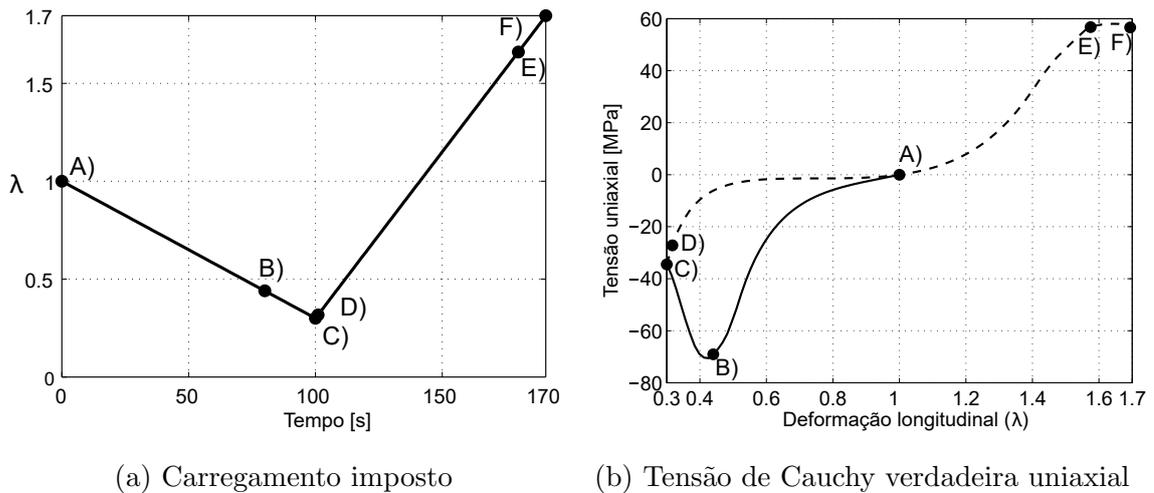


Figura 5.8 – Carregamentos imposto e resposta de tensão verdadeira uniaxial

A Figura 5.7 mostra que durante o carregamento compressivo foi acumulado dano somente nas direções submetidas ao alongamento trativo, ortogonais ao esforço de compressão. No entanto, durante o carregamento trativo, a direção alinhada ao carregamento trativo passa a acumular dano quando passa a apresentar deformações positivas (em tração). A evolução da resposta de tensão devido ao dano neste teste é suave, e pode ser observada na Figura 5.8.b.

No segundo teste, um cubo unitário é submetido a dois testes de fluência em sequência. Neste caso, uma força unitária é aplicada na direção x , retirada, e então aplicada na direção y . Os parâmetros de material usados são apresentados na Tabela 5.4 de forma que o único efeito inelástico incluído é o de viscoelasticidade (sendo assim sem dano). A deformação geométrica e a evolução da anisotropia viscosa são apresentados na Figura 5.9.

Tabela 5.4 – Parâmetros constitutivos do modelo para elastômero com carga para o teste viscoso

$\bar{\omega}$	$\bar{\omega}^e$	ϕ^v
$\mu^* = 1$ [MPa]	$\mu = 1$ [MPa]	$\gamma = 1$ [MPa s]
$\beta^* = 3$	$\beta = 3$	

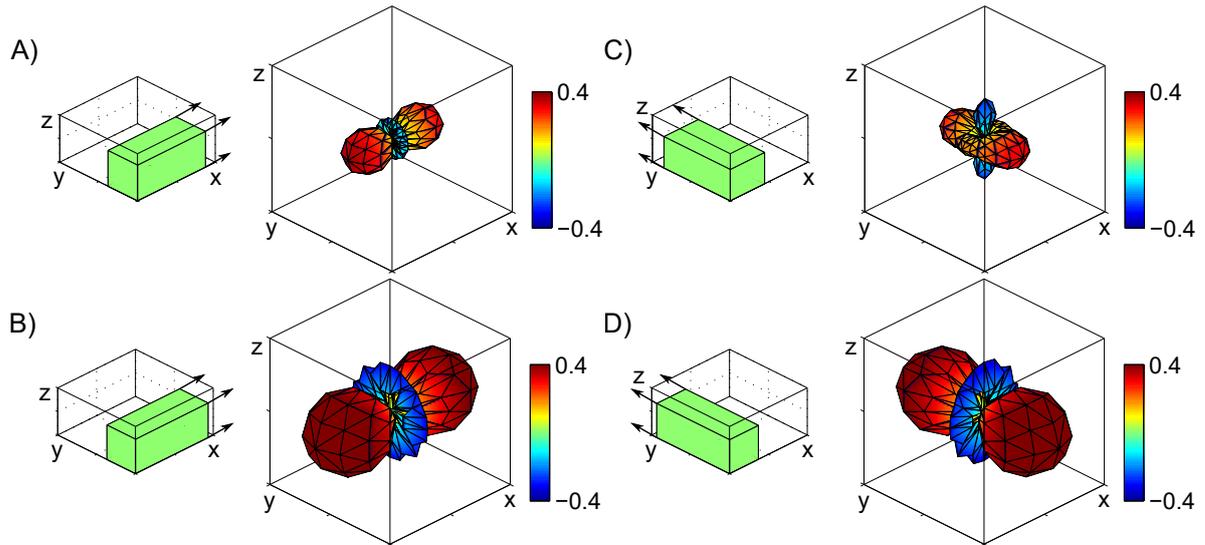
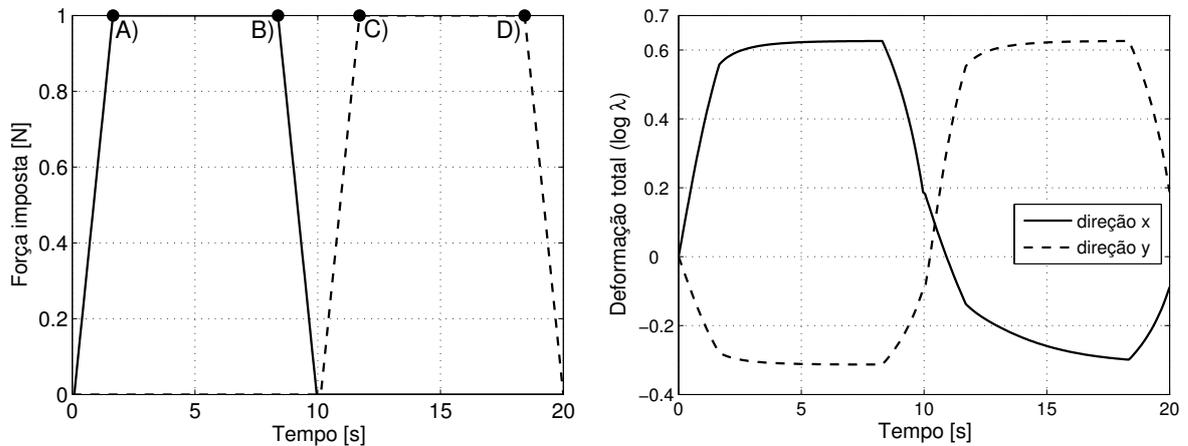


Figura 5.9 – Evolução da forma do CODF usando a variável $\log \lambda^v$ para os testes de fluência no plano $x - y$.



(a) Força imposta

(b) Deformação total

Figura 5.10 – Carregamento e resposta de deformação viscosa nos testes de fluência no plano $x - y$.

A Figura 5.9 mostra que o corpo ao ser submetido a uma força constante na direção x apresenta acúmulo de deformação viscosa trativa, conforme esperado de um comportamento viscoso usual. Após o ponto B, ao descarregar o corpo, pode ser observado na Figura 5.10.b um descarregamento elástico do corpo na direção x , e ao iniciar o carregamento do corpo na direção y pode ser observado nesta mesma curva o comportamento de

carregamento elástico e posterior comportamento viscoelástico.

O comportamento viscoelástico também é observado quando o carregamento é aplicado na direção y , dado que um alongamento viscoso residual se encontra ainda presente na direção x (conforme Figura 5.9.C). No entanto, ao progredir com o carregamento, a representação viscoelástica na direção y se torna similar àquela observada na direção x . A evolução viscoelástica usual de um teste de fluência é observada na Figura 5.10.

5.2.2 Elastômeros com carga

Nesta seção é realizado um teste numérico, implementado em software comercial de elementos finitos, da inflação de uma membrana de elastômero com dano mecânico e viscoelasticidade. Para tanto uma membrana com as bordas engastadas, quadrada e plana ($200 \times 200 \times 1 \text{ mm}$), é inflada usando a curva de pressão apresentada na Figura 5.11. O teste foi realizado utilizando $\bar{m} = 85$, empregando o modelo para elastômeros com cargas proposto na seção 4.1.1, e os parâmetros de material apresentado na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 – Parâmetros de material para o teste de inflação de membrana

$\bar{\omega}^e$	ϕ^v	Y
$\mu = 1 \text{ [MPa]}$	$\gamma = 500 \text{ [MPa s]}$	$Y_0 = 0,15 \text{ [MPa]}$
$\beta = 6$		$\delta = 2,1 \text{ [MPa]}$
		$\eta_\infty = 1$

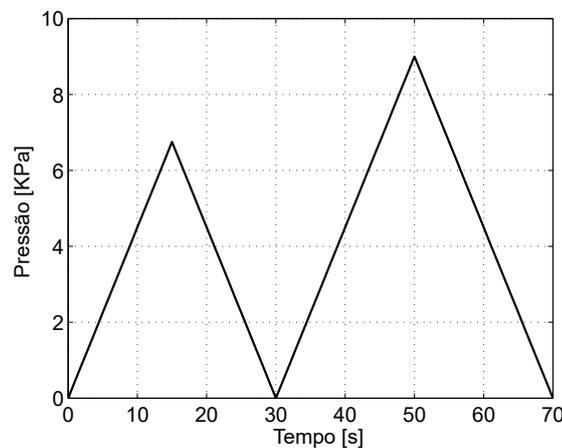
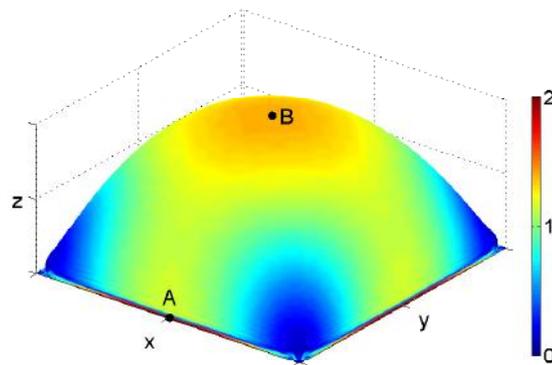
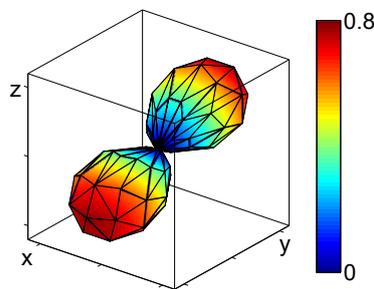


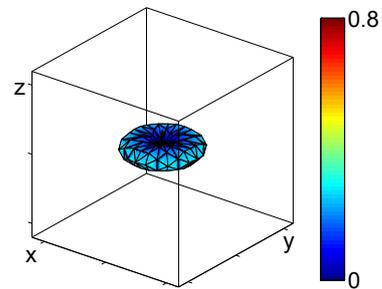
Figura 5.11 – Pressão aplicada



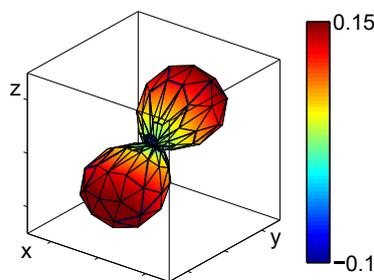
(a) Distribuição da tensão J2 [MPa]



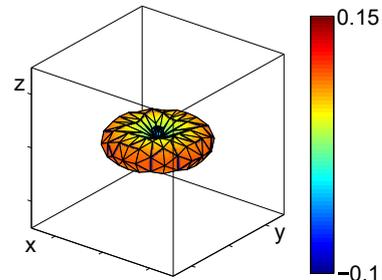
(b) Distribuição do dano no ponto A



(c) Distribuição do dano no ponto B



(d) Distribuição da deformação viscosa no ponto A



(e) Distribuição da deformação viscosa no ponto B

Figura 5.12 – Distribuição de tensão, dano e deformação em $t = 50[s]$.

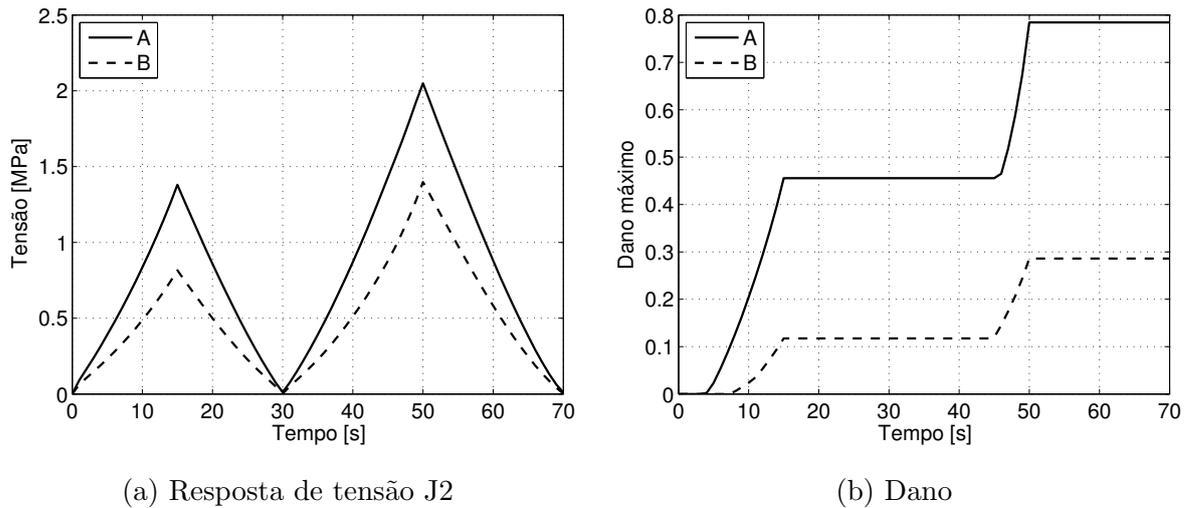


Figura 5.13 – Tensão J2 e o dano máximo no centro da membrana, no marcador A, e na fronteira, no marcador B (conforme apresentado na Figura 5.12)

Diferentes distribuições de dano na fronteira e no centro da membrana, em diferentes instantes de tempo, são apresentados na Figuras 5.12.a and 5.12.b. Conforme esperado, a distribuição de dano na fronteira e no centro mostram que o dano e a deformação viscosa acumuladas são orientadas principalmente nas direções submetidas aos maiores valores de deformação tratativa.

A resposta de tensão também apresenta valores conforme esperado, com altos valores de tensão no centro e na fronteira da membrana e picos de tensão obtidos nos mesmos instantes de pressão máxima. O teste apresentado mostra de forma qualitativa as capacidades do modelo de resolver problemas submetidos a grandes deformações, com configurações deformadas e ciclos de carregamento complexos, distribuição de dano e viscosidade não homogênea e grandes valores de dano acumulado.

5.2.3 Tecidos biológicos moles

Neste estudo de caso foi empregado o modelo desenvolvido para tecidos biológicos moles da seção 4.1.2, que foi implementado em software comercial de elementos finitos. Neste teste um segmento de um tubo é submetido a uma condição de contorno de deslocamento radial, como aquela observada em um procedimento de angioplastia. Carregamentos posteriores correspondem a uma curva de pressão imposta na parede interna seguindo

uma curva de pressão arterial típica, conforme Figura 5.15 [Goldwyn e Watt, 1967]. Os resultados esperados neste estudo são o aumento localizado de deformações (aneurisma) na região que sofreu o trauma inicial [Miley et al., 2008]. Ambas extremidades do tubo estão presas, e o trauma corresponde a um deslocamento radial monotônico de 4 mm na região definida como la da Figura 5.14.

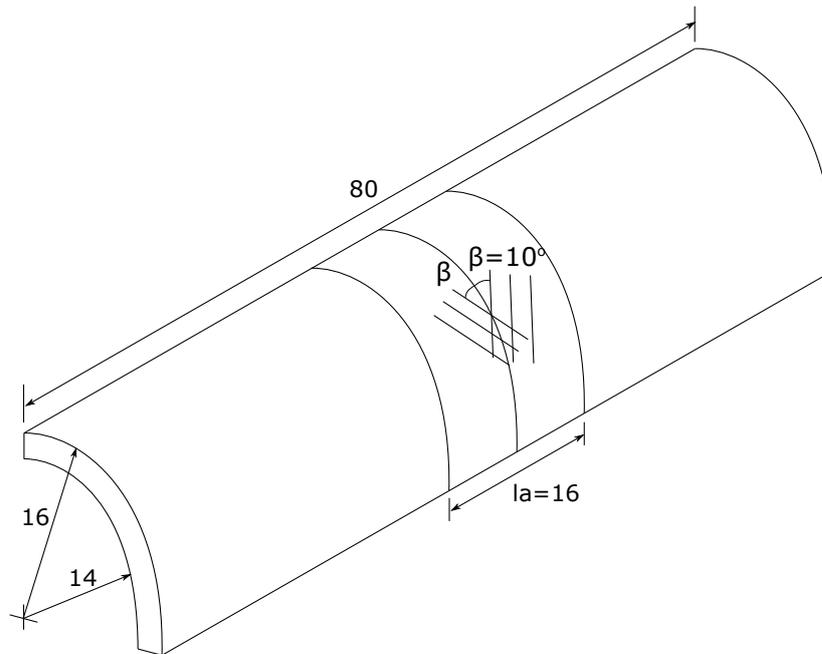


Figura 5.14 – Dimensões do modelo de artéria

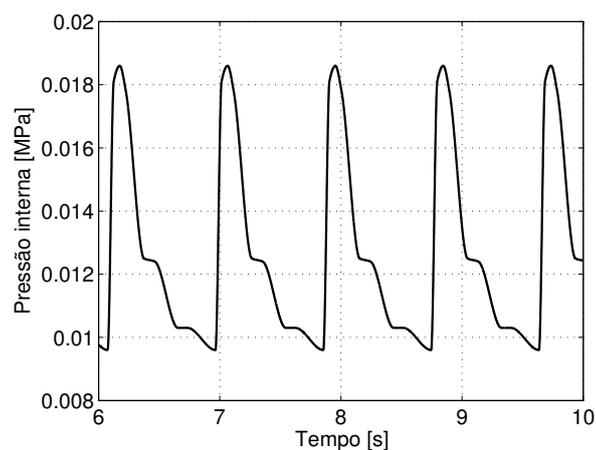


Figura 5.15 – Curva de pressão interna

A dimensão β mostrada na Figura 5.14 corresponde ao ângulo de duas famílias de fibras adicionadas para representar o típico comportamento anisotrópico de uma artéria.

Os parâmetros de material empregados para o CODF são apresentados na Tabela 5.7, usando $\bar{m} = 85$.

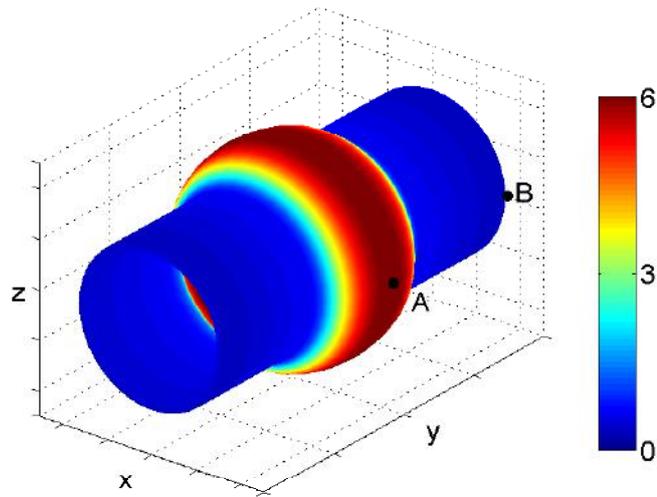
Tabela 5.6 – Parâmetros de material para o teste da artéria

$\bar{\omega}$	$\bar{\omega}^e$	$\bar{\phi}^v$	Y
$k_1 = 0,23$ [MPa]	$k_1^e = 3$ [MPa]	$\gamma = 10$ [MPa s]	$Y_0 = 0,05$ [MPa]
$k_2 = 0,05$	$k_2^e = 0,5$		$\beta = 8$ [MPa]
			$\zeta = 3$

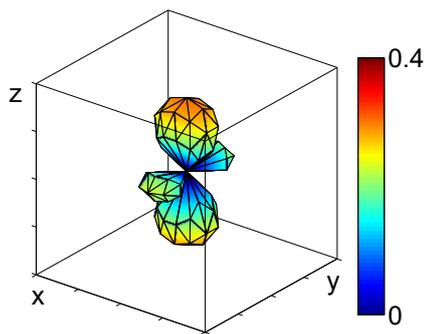
As duas famílias de fibras, mostradas na Figura 5.14, possuem o mesmo ângulo $\pm\beta$ em relação ao eixo principal. Os termos da parcela de fibra do modelo $\bar{\Psi}_{f1}$ e $\bar{\Psi}_{f2}$ empregam para seus potenciais as mesmas expressões usadas para o parcela do CODF conforme discutido na subseção 4.1.2, e os parâmetros constitutivos para estas duas famílias de fibras são apresentados na Tabela 5.7.

Tabela 5.7 – Parâmetros constitutivos das duas famílias de fibra

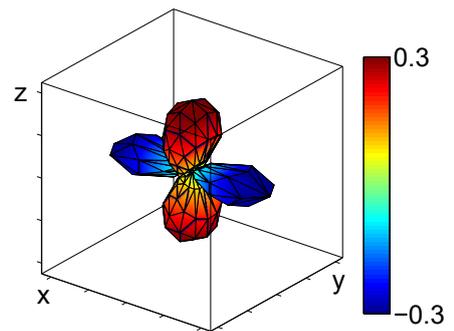
$\bar{\omega}_f^e$	$\bar{\phi}_f^v$	Y_f
$k_{f1}^e = 40$ [MPa]	$\gamma_f = 10$ [MPa s]	$Y_{f0} = 0,001$ [MPa]
$k_{f2}^e = 5$		$\beta_f = 0,18$ [MPa]
		$\zeta_f = 1,65$



(a) Deslocamento total [mm]

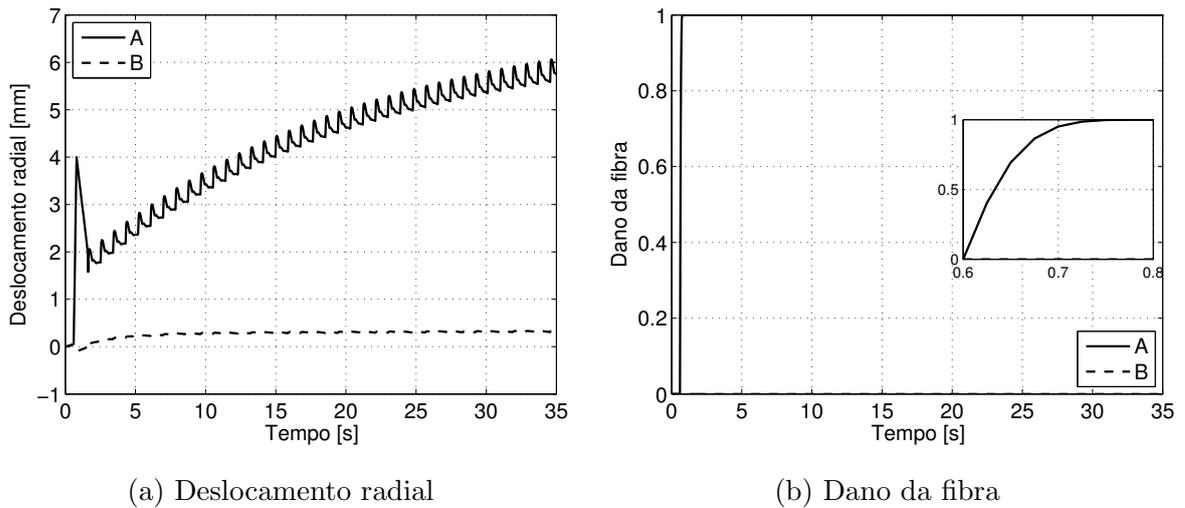


(b) Distribuição de dano no ponto A



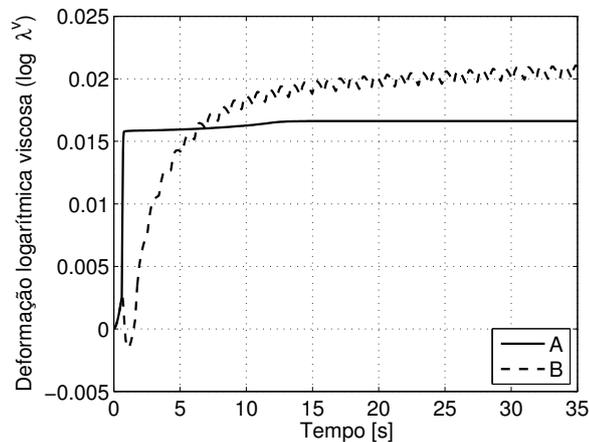
(c) Distribuição de deformação viscosa no ponto A

Figura 5.16 – Resposta mecânica do tubo no último instante de tempo ($t = 35s$)



(a) Deslocamento radial

(b) Dano da fibra



(c) Deformação viscosa da fibra

Figura 5.17 – Deslocamento radial e evolução das variáveis internas da família de fibras

No primeiro pico de deslocamento radial (em $t = 0,8s$ como mostrado na Figura 5.17.a) a região de trauma alcança o máximo valor de dano acumulado para o CODF (figura 5.16.b) e para as famílias de fibra (figura 5.17.c). Por outro lado, conforme mostrado na Figura 5.17.c, o acúmulo de deformação viscosa gerou um progressivo aumento do deslocamento radial na região de trauma, causando conseqüentemente uma redução da espessura do tubo nesta região. Ambos os efeitos de acúmulo de dano, que diminuiu a rigidez do material, e a perda de espessura do tubo, ocorridos na região de trauma devido ao comportamento viscoso, reduzem a resistência mecânica nesta região causando a formação do aneurisma.

5.3 Testes de integração do modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação

Nesta seção são apresentados alguns testes utilizando o modelo de viscoplasticidade com anisotropia induzida pela deformação, para observar o início e a evolução do comportamento inelástico do modelo para diferentes quantidades de termos de integração do CODF. Para tanto nesta seção são utilizadas expressões simples para os potenciais, de forma que facilitem a visualização do início do comportamento inelástico, na forma das seguintes expressões,

$$\bar{w}^e(\lambda^e) = 2\lambda^e\mu(\log(\lambda^e) - 1) + 2\mu \quad (5.1)$$

$$\bar{\omega}^p(\lambda^p) = \lambda^p(\sigma_0 - H(1 - \log(\lambda^p))). \quad (5.2)$$

Os estudos numéricos desenvolvidos são dois casos de carregamento monotônico, um de tração uniaxial e outro de cisalhamento simples. Nenhuma geometria específica é estudada, somente um ponto do corpo submetido a um determinado gradiente de deformação, onde o equilíbrio de esforços do carregamento uniaxial é satisfeito. As propriedades mecânicas dos potenciais apresentados para este estudo são dadas por $\mu = 500$, $\sigma_0 = 40$ e $H = 10$.

5.3.1 Tração uniaxial

Para este estudo, seja um ponto submetido a um carregamento trativo uniaxial tal que a deformação aplicada esteja prescrita pelo seguinte gradiente de deformação $\mathbf{F} = [a \ 0 \ 0; 0 \ 1/\sqrt{a} \ 0; 0 \ 0 \ 1/\sqrt{a}]$, onde a é definido como o alongamento aplicado neste ponto do corpo. A deformação é imposta em forma de rampa por meio de uma medida de deformação $\varepsilon_{uni} = \log(a)$, que evolui monotonicamente no intervalo $\varepsilon_{uni} = [0 \ 0,5]$.

Conforme Figura 5.18, ao aumentar o número de termos de integração torna-se difícil distinguir o ponto de início do processo de plastificação na curva tensão deformação, que fica suavizado. Esta característica de suavização é observada também ao longo da curva tensão deformação, pois não é possível identificar as diferentes orientações de integração que passam a acumular deformação plástica. Observa-se assim que, a resposta da curva tensão deformação de forma geral tende a ficar suavizada ao empregar uma quantidade maior de termos de integração.

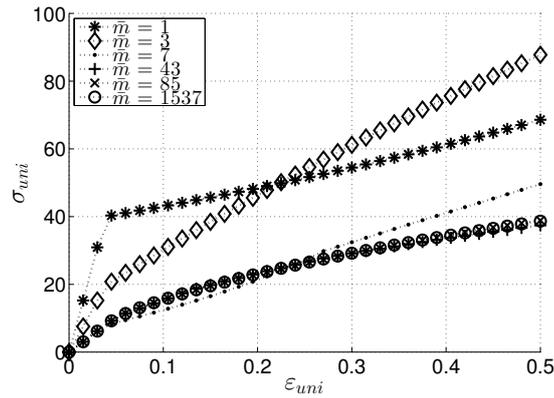


Figura 5.18 – Curvas tensão deformação para o caso uniaxial com diferentes quantidades de termos de integração

De forma a estudar esta transição de comportamento, conforme é aumentado o número de direções de integração, são apresentadas a resposta de tensão do modelo em conjunto com a evolução das variáveis de estado do problema constitutivo para as quantidades de termos de integração $\bar{m} = \{1, 3, 7, 43, 85\}$. Nas Figuras 5.19, 5.20, 5.21, 5.22 e 5.23 são apresentadas as resposta de tensão e deformação, além a forma do CODF das variáveis λ , λ^e e λ^p para diferentes instantes marcados na curva tensão deformação com uma marcação $*$.

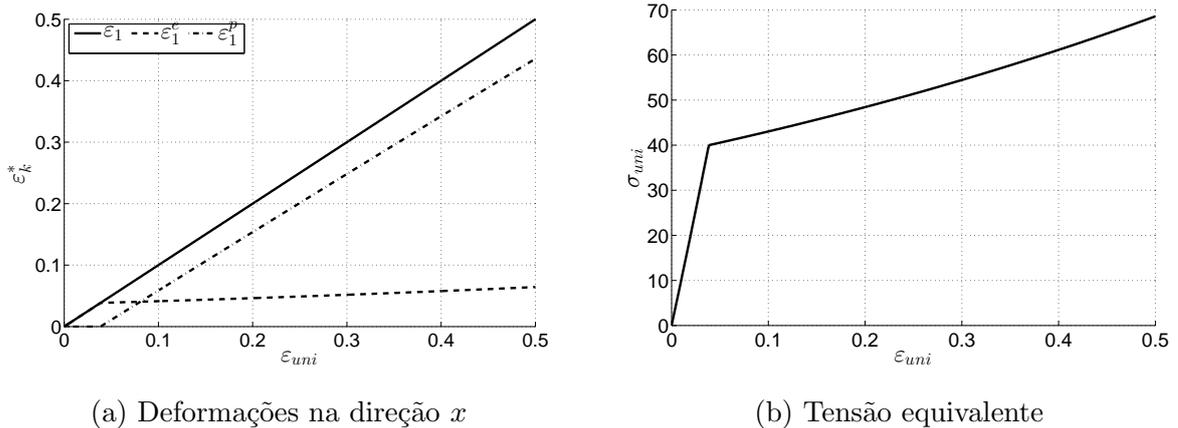
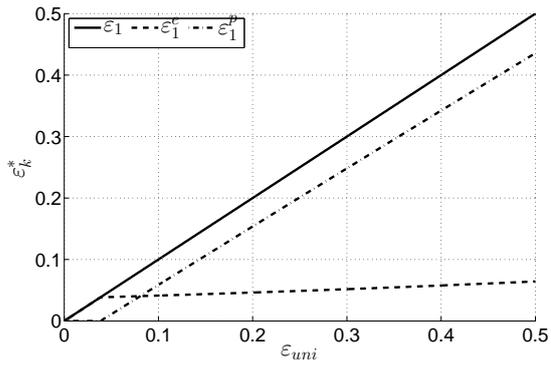
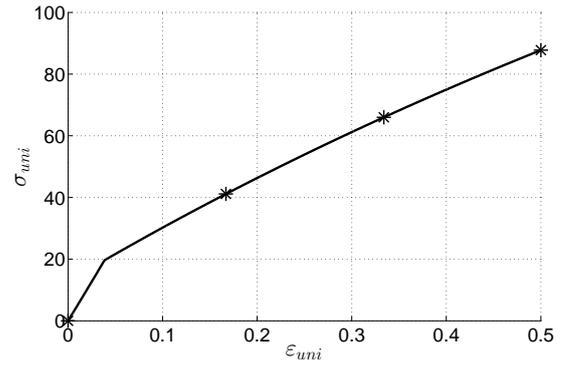
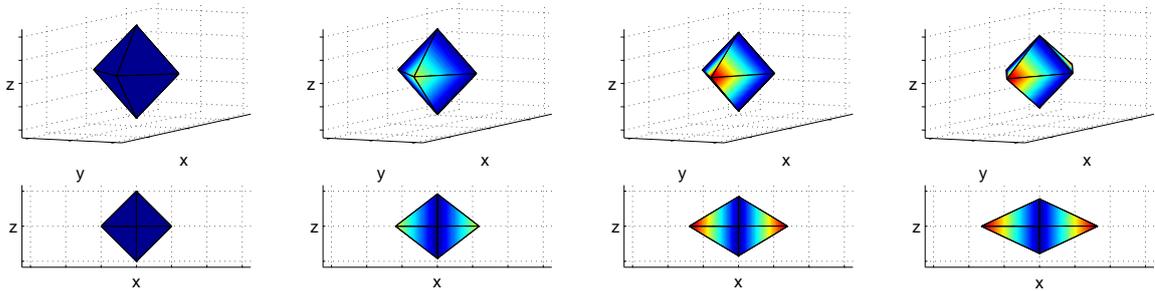
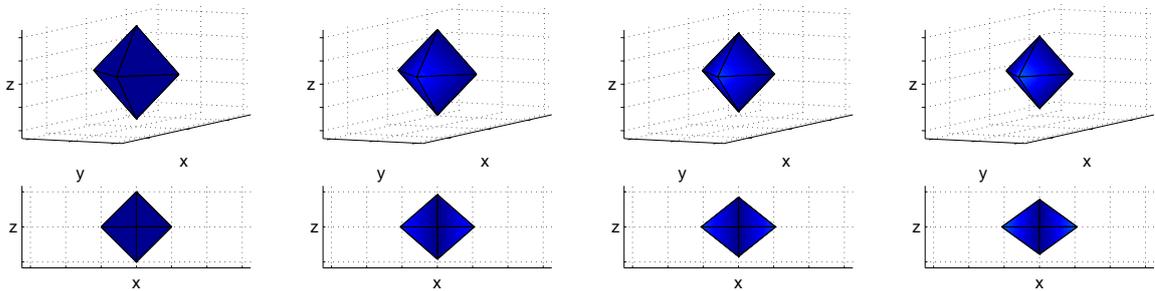
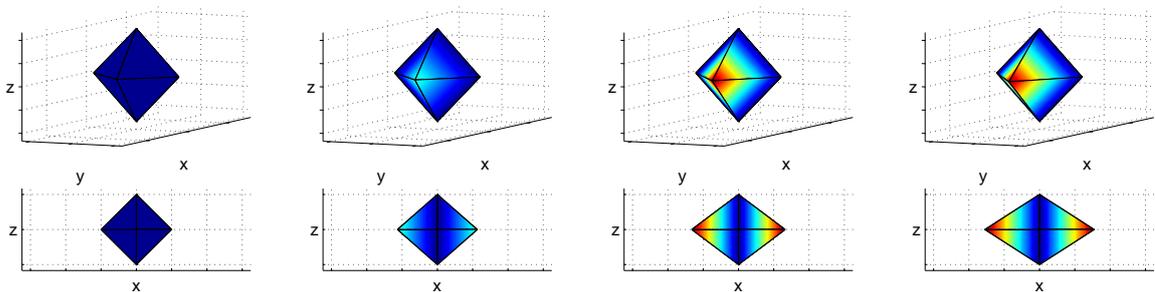
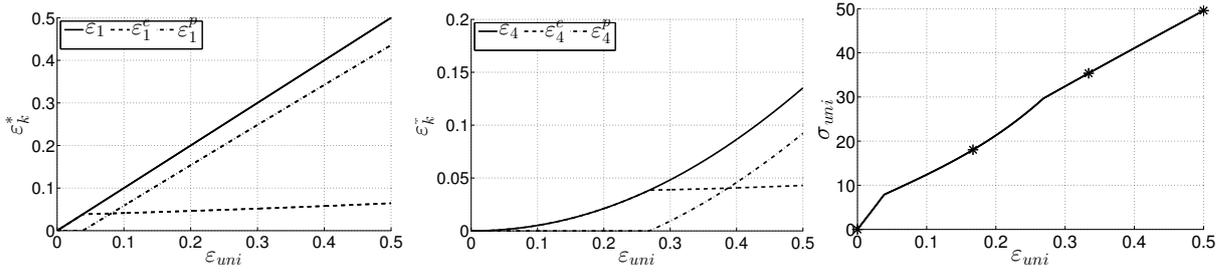


Figura 5.19 – Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 1$

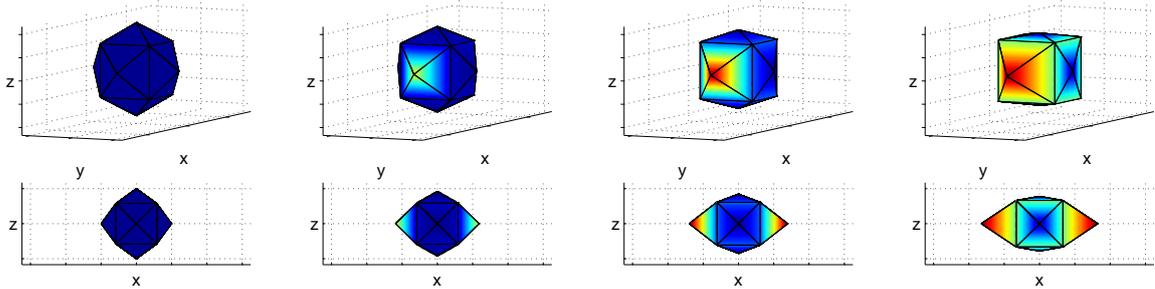
(a) Deformações na direção x 

(b) Tensão equivalente

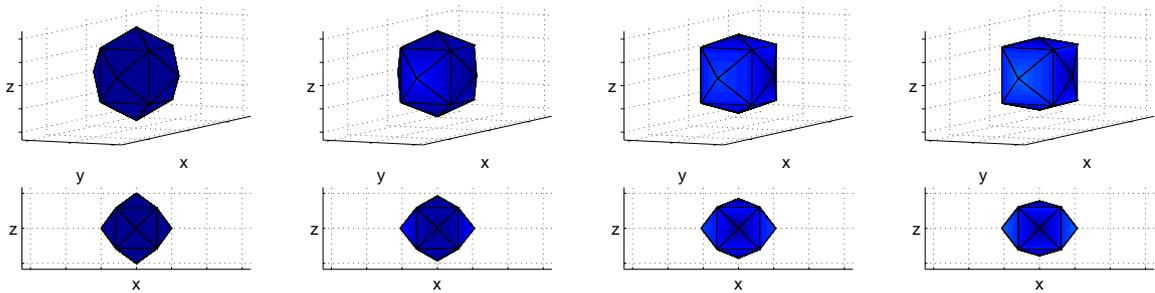
(c) Duas vistas da resposta do CODF da medida λ em diferentes instantes(d) Duas vistas da resposta do CODF da medida λ^e em diferentes instantes(e) Duas vistas da resposta do CODF da medida λ^p em diferentes instantesFigura 5.20 – Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 3$



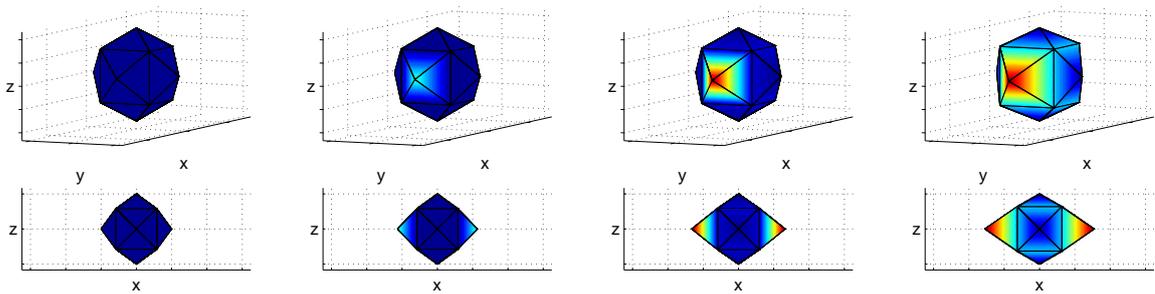
(a) Deformações na direção x (b) Deformações nas diagonais (c) Tensão equivalente



(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes

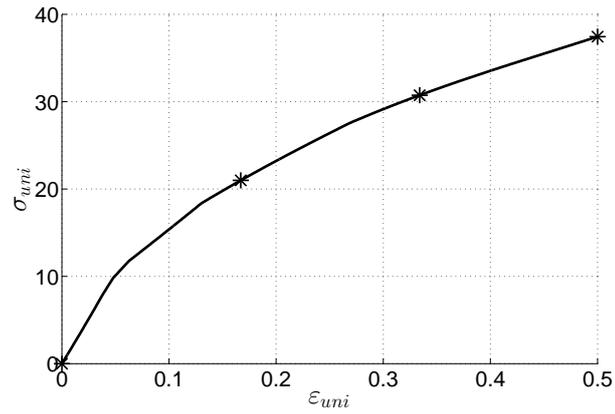


(e) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes

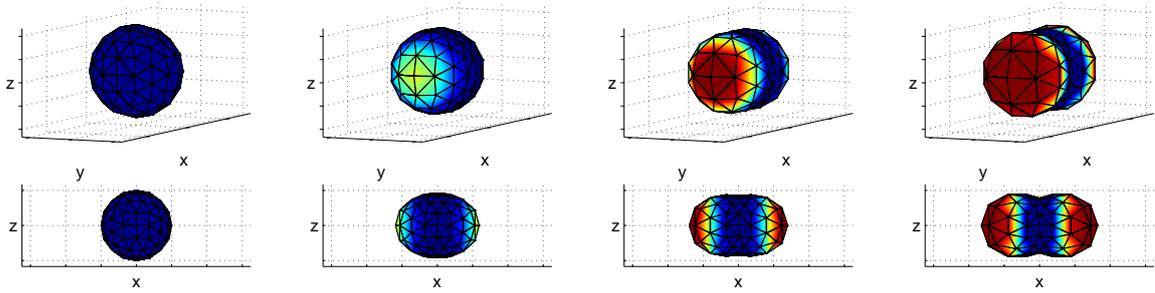
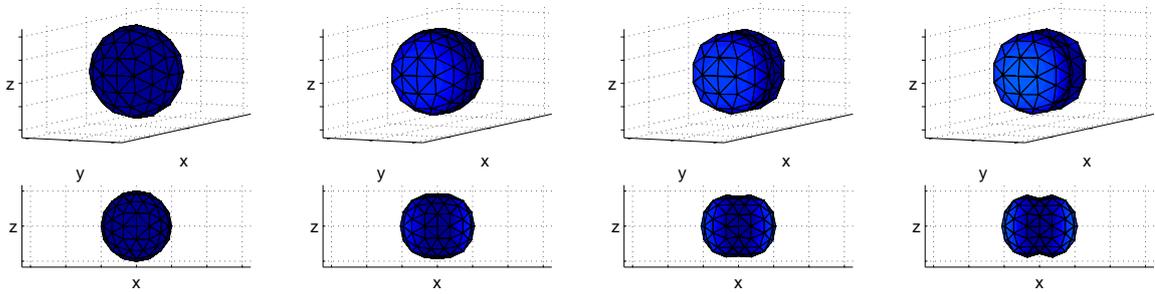
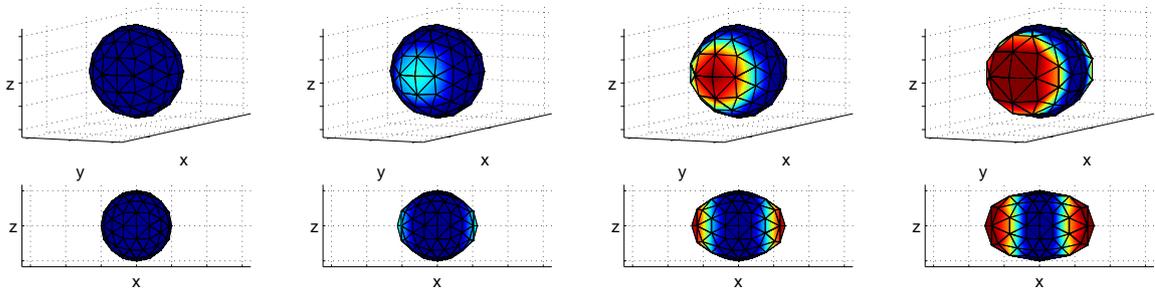


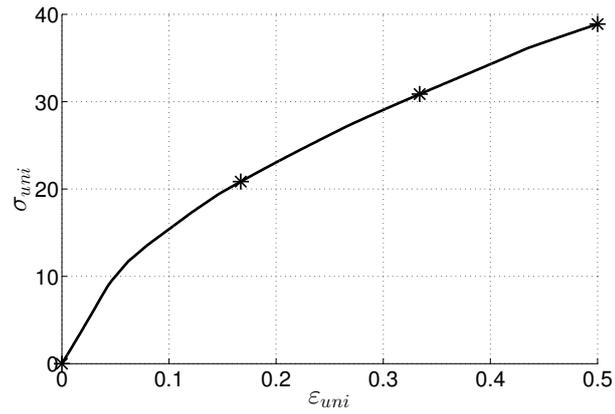
(f) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantes

Figura 5.21 – Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 7$

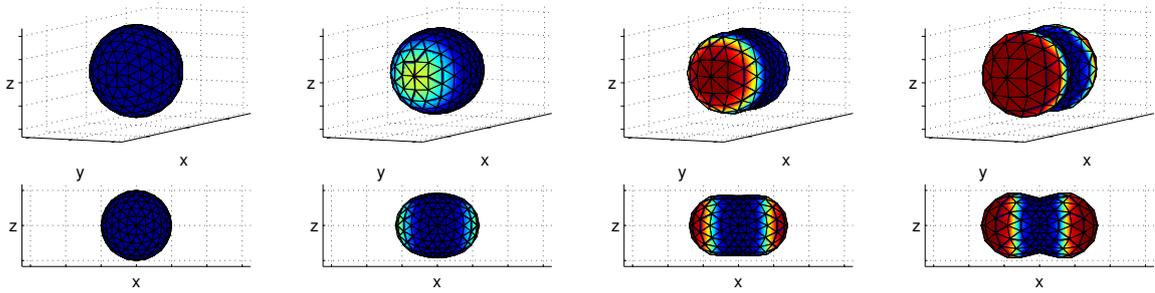
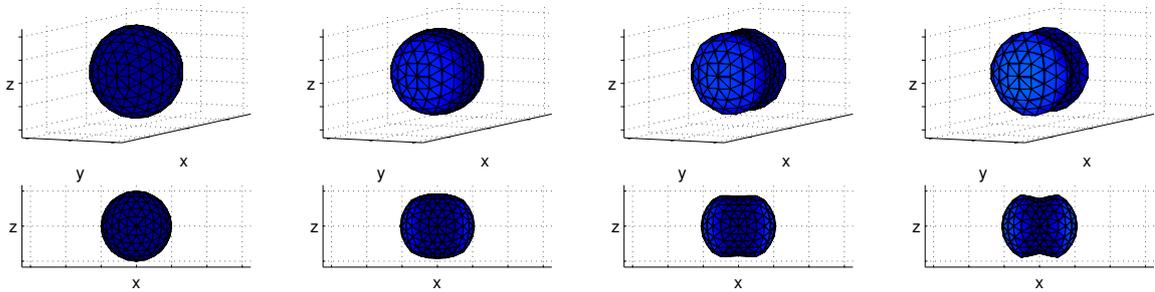
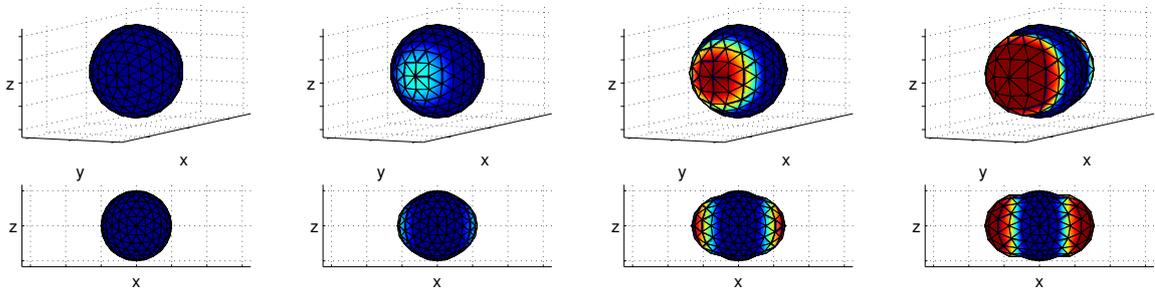


(a) Tensão equivalente

(b) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes(c) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantesFigura 5.22 – Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 43$



(a) Tensão equivalente

(b) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes(c) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantesFigura 5.23 – Resposta de um ponto do corpo para o caso uniaxial com $\bar{m} = 85$

Percebe-se pelos resultados apresentados que embora a evolução das variáveis de estado na direção x não se altere ao aumentar a quantidade de termos de integração, a resposta de tensão do modelo se altera sensivelmente. Isso decorre da soma das contribuições em direções distintas que, ao passarem a contribuir na resposta em diferentes instantes suavizam a curva do modelo. No entanto, as variáveis de estado evoluem de maneira similar em cada direção dependendo diretamente do valor de λ atual naquela direção. Observa-se também que, para o caso estudado, e com os potenciais escolhidos, ao empregar $\bar{m} = 85$ ou quantidades maiores de termos de integração mais as curvas tensão deformação apresentam diferenças pouco significativas para as diferentes quantidades de termos de integração.

5.3.2 Cisalhamento simples

Para o caso de cisalhamento simples um ponto de um corpo é submetido ao gradiente de deformação $\mathbf{F} = [1 \ 0 \ 0; 0 \ 1 \ 0; \ \gamma \ 0 \ 1]$, onde foi considerado que a variável γ corresponde a uma medida de deformação cisalhante. Esta medida de deformação foi imposta de forma monotônica cobrindo o intervalo determinado por $\gamma = [0 \ 0,5]$.

Na Figura 5.24 são apresentadas as curvas tensão deformação empregando incrementos de deformação γ de 0,001 e diferentes quantidades de termos de integração \bar{m} . Bem como no caso da subseção anterior de carregamento em tração, conforme pode ser observado na Figura 5.24, ao empregar uma quantidade maior de termos de integração torna-se difícil distinguir o ponto de início do processo de plastificação pois a curva tensão deformação vai tornando-se cada vez mais suavizada.

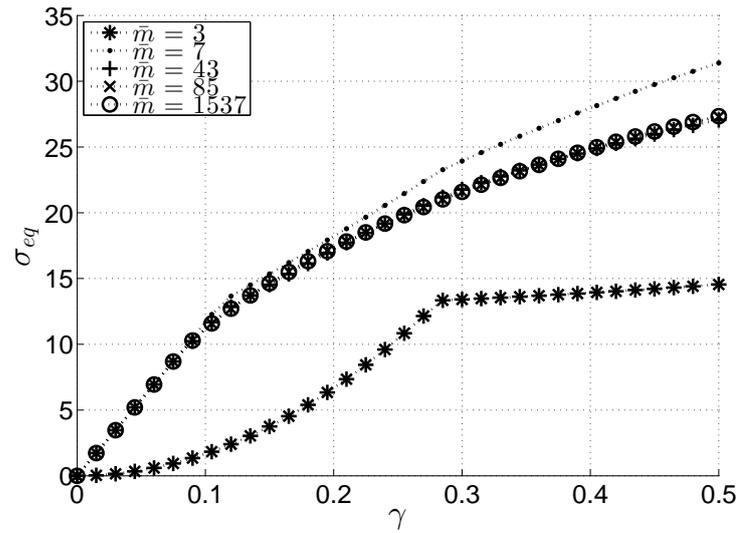
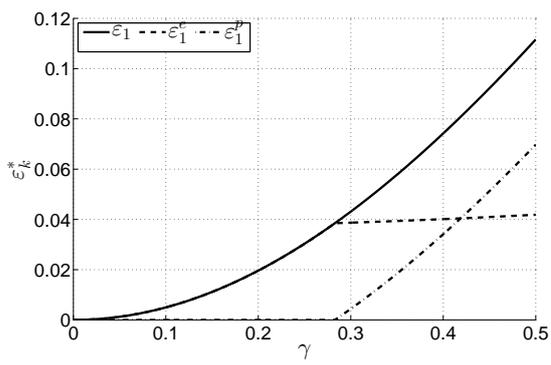
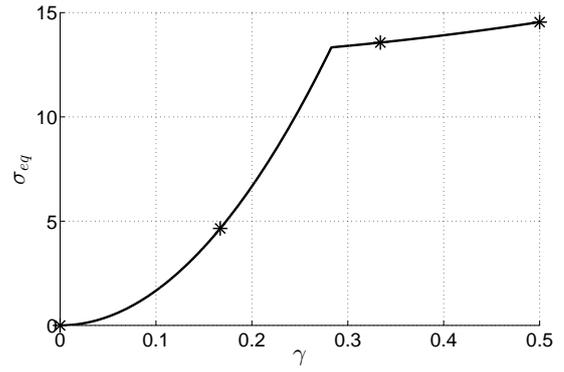


Figura 5.24 – Curvas tens o deformaç o para o caso cisalhante com diferentes quantidades de termos de integraç o

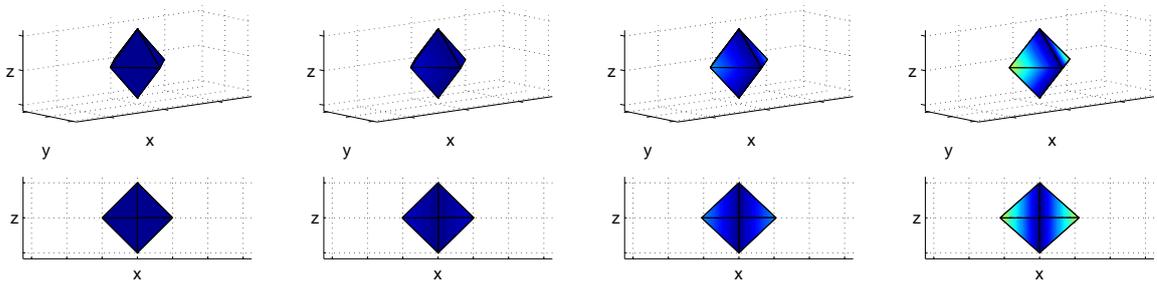
Os resultados da evoluç o das vari veis de estado deste problema para as quantidades de termos de integraç o $\bar{m} = \{3, 7, 43, 85\}$ s o apresentadas em diferentes figuras na sequ ncia. Nas Figuras 5.25, 5.26, 5.27 e 5.28 s o apresentadas as resposta de tens o e deformaç o, al m da forma do CODF das vari veis λ , λ^e e λ^p para diferentes instantes marcados na curva tens o deformaç o com uma marcaç o *.



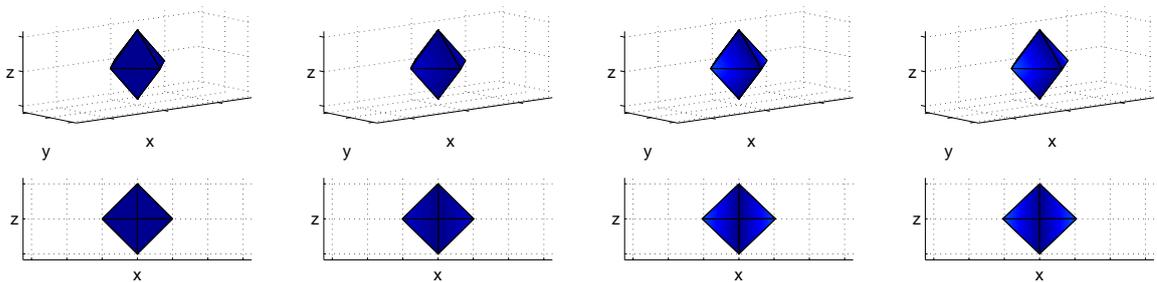
(a) Deformações na direção x



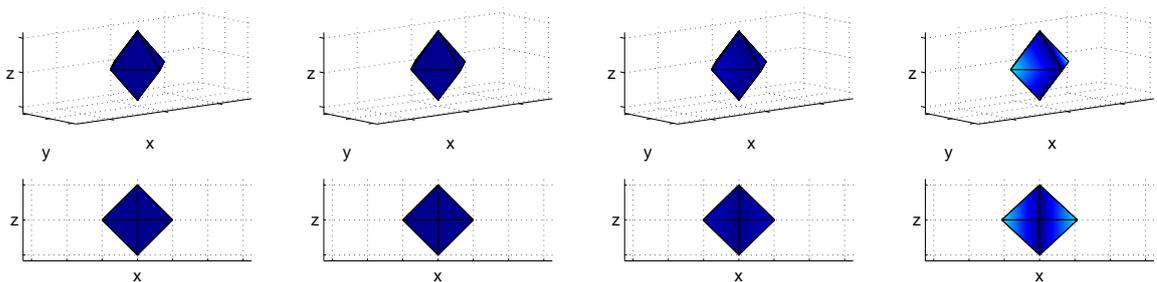
(b) Tensão equivalente



(c) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes de tempo

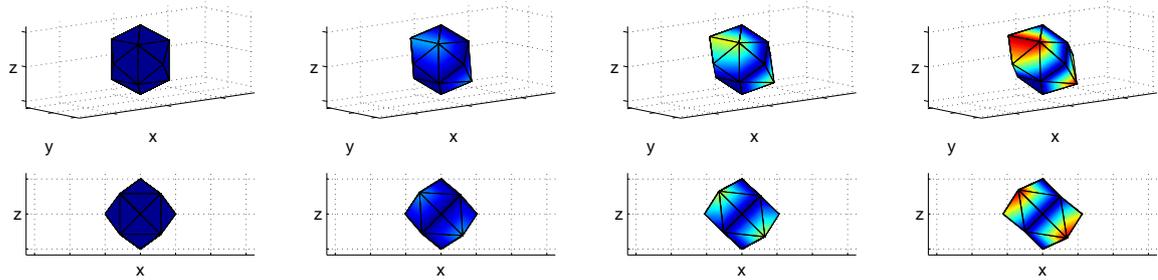
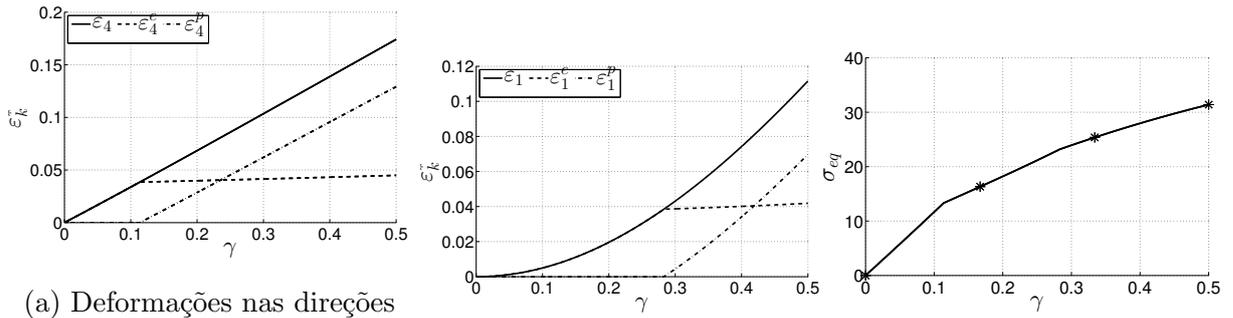


(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes de tempo



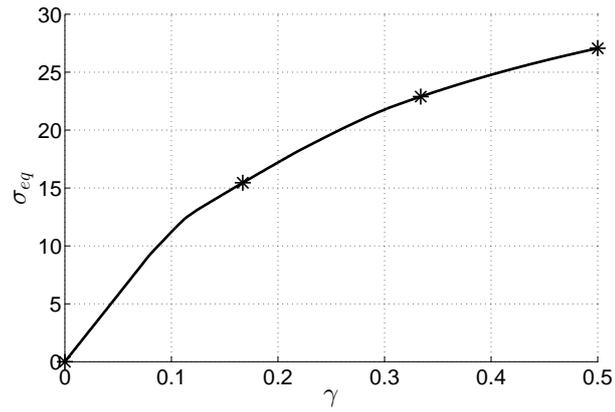
(e) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantes de tempo

Figura 5.25 – Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 3$

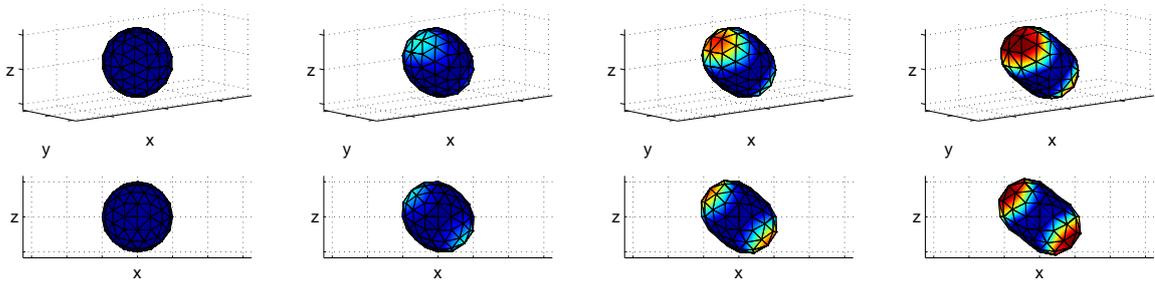
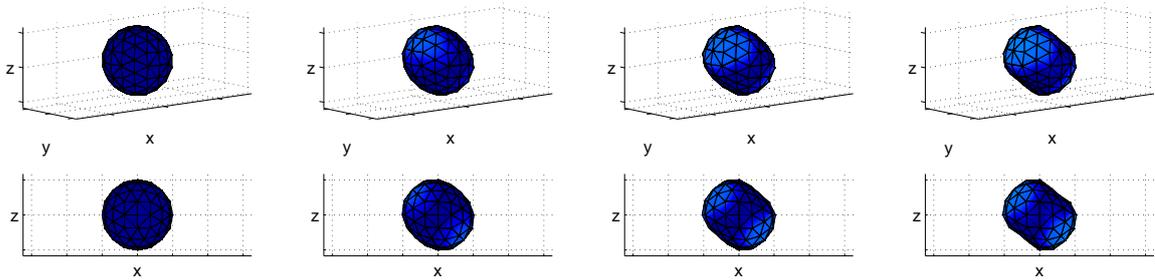
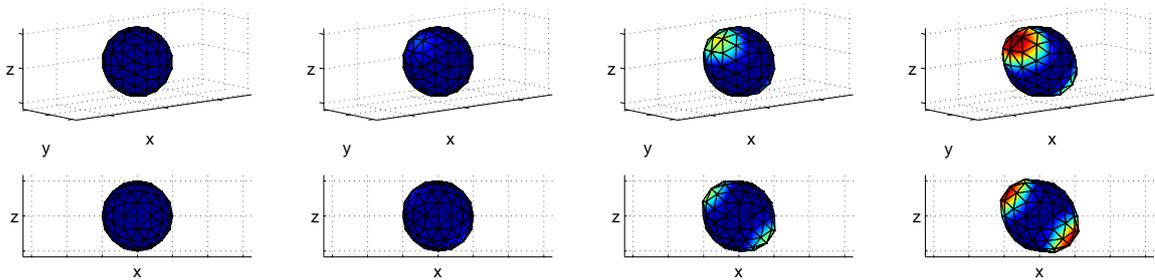


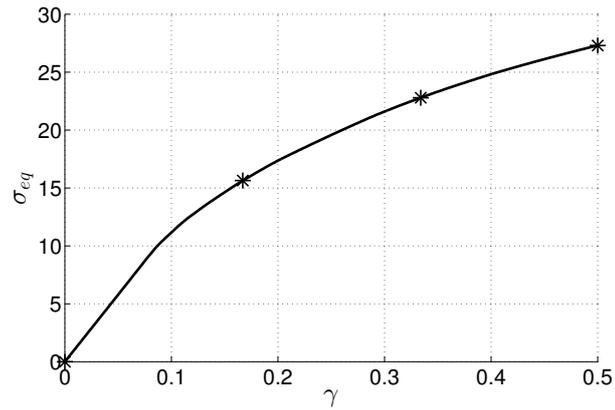
(f) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantes de tempo

Figura 5.26 – Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 7$

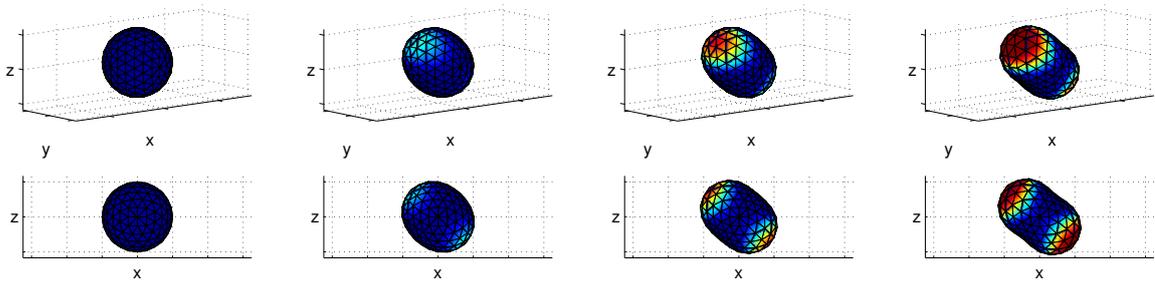
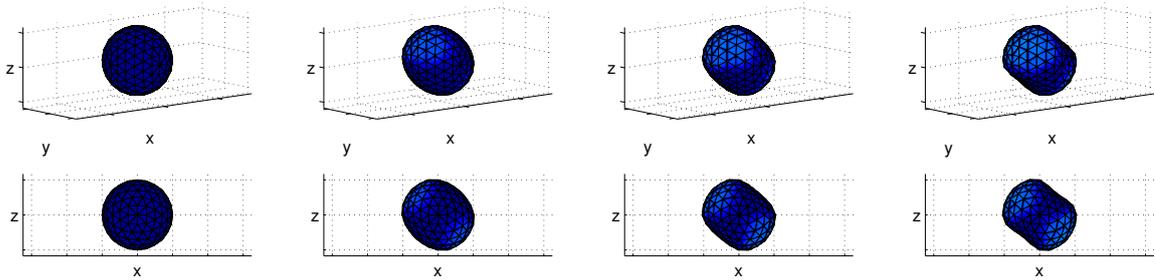
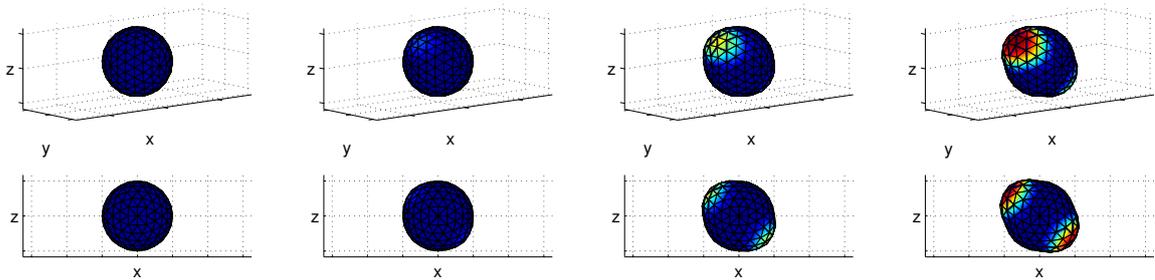


(a) Tensão equivalente

(b) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes de tempo(c) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes de tempo(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantes de tempoFigura 5.27 – Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 43$



(a) Tensão equivalente

(b) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ em diferentes instantes de tempo(c) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^e em diferentes instantes de tempo(d) Duas vistas da resposta do CODF usando a medida λ^p em diferentes instantes de tempoFigura 5.28 – Resposta de um ponto do corpo para o caso cisalhante com $\bar{m} = 85$

Como no caso de carregamento de tração, no caso de carregamento de cisalha-

mento simples a evolução das variáveis de estado é a mesma na direção x para diferentes quantidades de termos de integração. Isso ocorre pois a deformação imposta é a mesma para todos os casos estudados, portanto a medida λ apresenta o mesmo valor na direção x para todos os casos. Por fim, observa-se que ao empregar $\bar{m} = 85$, ou mais termos de integração, a resposta da curva tensão deformação não se altera, assim esta quantidade de termos de integração será utilizada para o restante dos testes empregando o modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação.

5.4 Casos de estudo utilizando o modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação

Nesta seção são apresentados alguns testes numéricos que demonstram os resultados obtidos empregando o modelo com viscoplasticidade anisotrópica induzida pela deformação aplicada para o caso de materiais termoplásticos amorfos. Para tanto, nesta seção é empregado o modelo apresentado na seção 4.2.1. Os testes apresentados buscam representar o comportamento deste material em relação às suas características viscoplásticas de maneira a elucidar as capacidades do modelo proposto. Para todos os testes apresentados nesta seção empregou-se para o procedimento de integração $\bar{m} = 85$.

5.4.1 Cíclico unidirecional

Para este caso de estudo seja um cubo unitário submetido a um carregamento cíclico com dois ciclos de carga com mesma direção (direção y), conforme Figura 5.29. As propriedades mecânicas empregadas neste estudo são apresentadas na Tabela 5.8.

Tabela 5.8 – Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos

$\bar{\omega}^e$	$\bar{\omega}^p$	$\bar{\omega}^v$	s
$\mu = 1000$ [MPa]	$\mu_R = 2$ [MPa]	$\dot{\epsilon}_0^p = 1$	$h_0 = 50$
	$\lambda_{lock} = 1,8$	$m = 0$	$s_0 = 15$ [MPa]
			$s^* = 8$ [MPa]

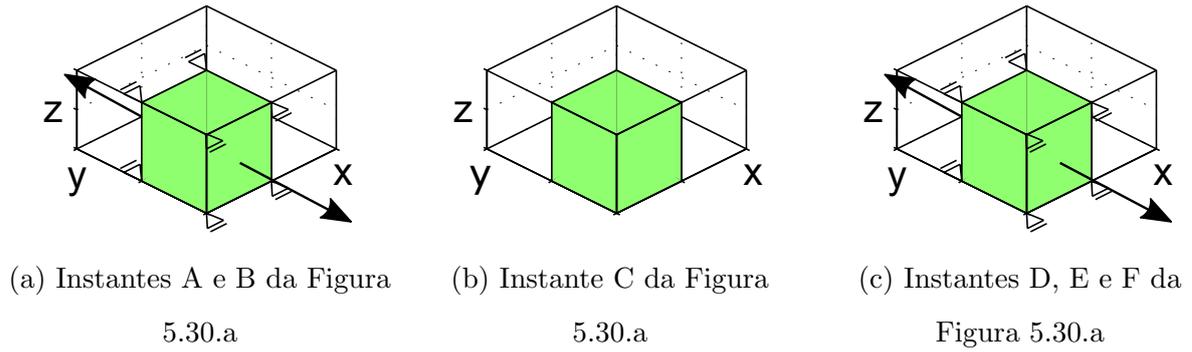
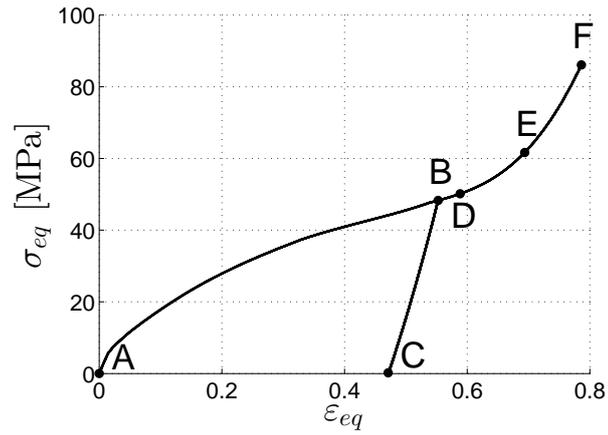
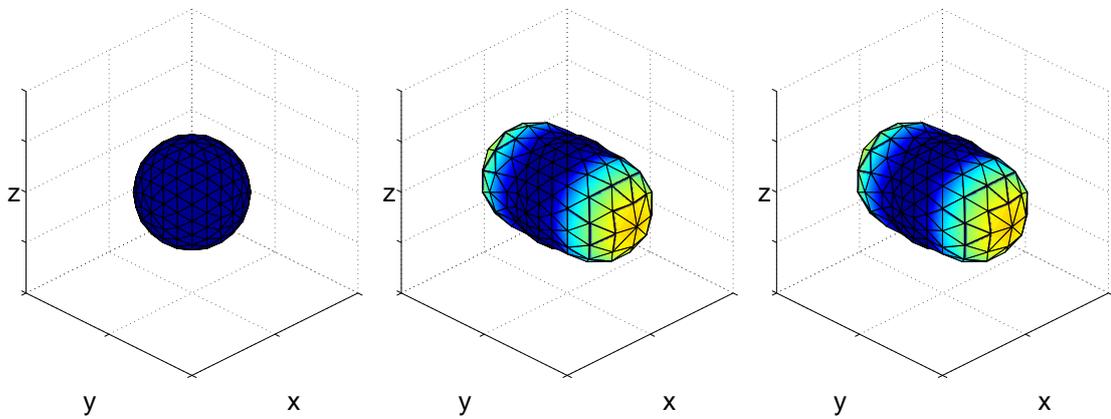


Figura 5.29 – Condições de contorno do caso cíclico unidirecional para os diferentes instantes apresentados na Figura 5.30.a

Conforme tabela 5.8, neste teste foi utilizado o valor $m = 0$ para o parâmetro viscoso, tornando o modelo independente da taxa de deformação. Os resultados para este caso estão apresentados na Figura 5.30. Diferentes instantes estão indicados por pontos na curva tensão deformação da Figura 5.30.a. Para cada um destes instantes a respectiva forma do CODF usando a medida λ^p do modelo variacional é apresentada.



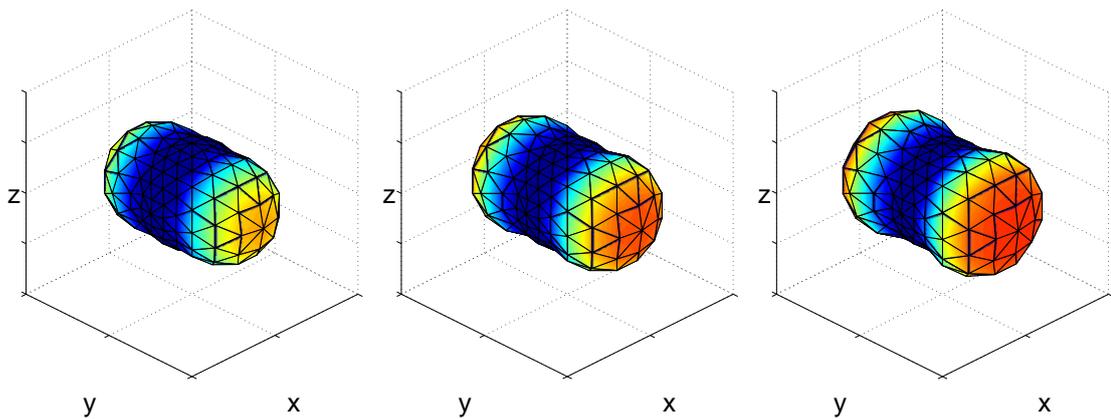
(a) Curva tensão deformação do modelo



(b) Instante A

(c) Instante B

(d) Instante C



(e) Instante D

(f) Instante E

(g) Instante F

Figura 5.30 – Resposta de tensão e distribuição do CODF usando a variável λ^p em diferentes instantes com carregamento unidirecional

A curva tensão deformação da Figura 5.30 apresenta a resposta usual de plasti-

cidade, onde o corpo ao ser carregado pela segunda vez apresenta na região elástica a mesma resposta de tensão observada ao descarregar o corpo. Para este caso, o corpo ao acumular deformação plástica novamente apresenta uma curva tensão deformação com a mesma tendência observada antes do corpo ser descarregado. Observa-se também que a forma do CODF usando a medida λ^p não evolui nas direções ortogonais ao carregamento.

5.4.2 Cíclico bidirecional

Para este caso de estudo foi realizado um teste similar ao caso cíclico unidirecional apresentado na subseção 5.4.1, mas com o segundo ciclo de carregamento imposto na direção ortogonal ao ciclo anterior (primeiro ciclo na direção y e segundo ciclo na direção x), conforme Figura 5.31. Para este caso também foram utilizadas as propriedades mecânicas apresentadas na Tabela 5.8. Diferentes instantes estão indicados por pontos na curva tensão deformação da Figura 5.32.a. Para cada um destes instantes a respectiva forma do CODF usando a medida λ^p do modelo variacional é apresentada.

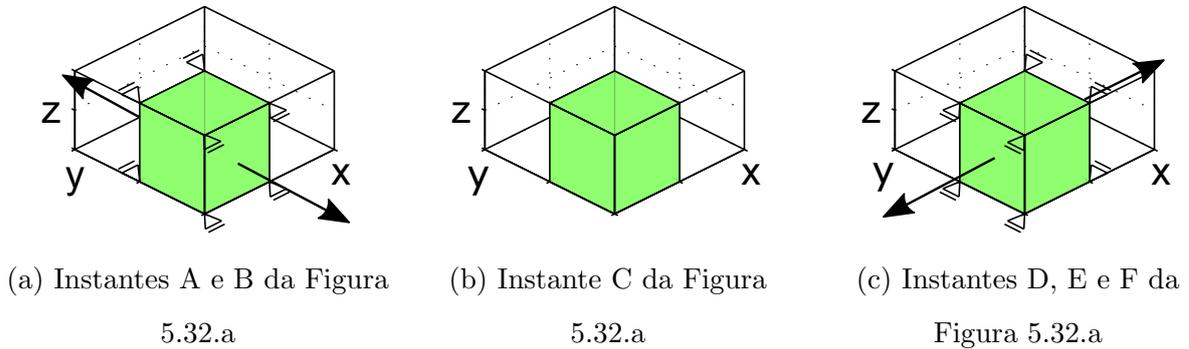
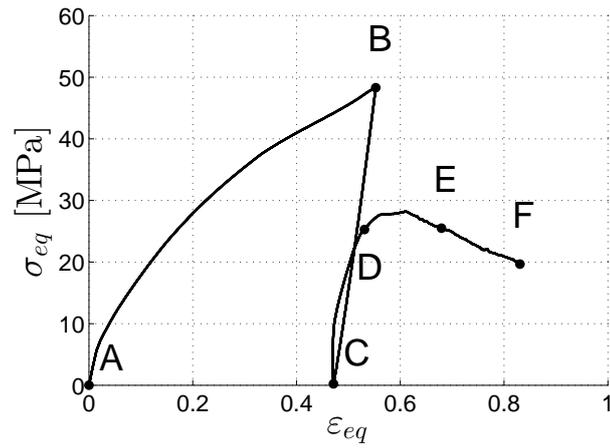
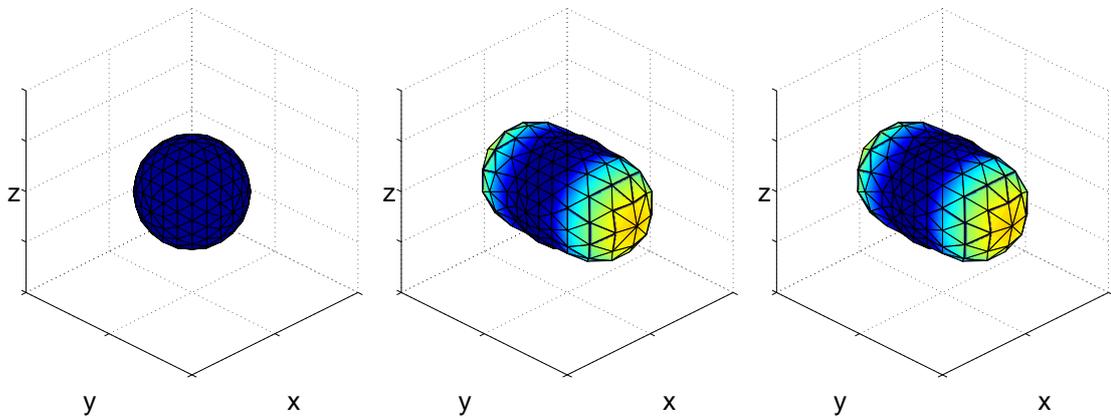


Figura 5.31 – Condições de contorno do caso cíclico bidirecional para os diferentes instantes apresentados na Figura 5.32.a



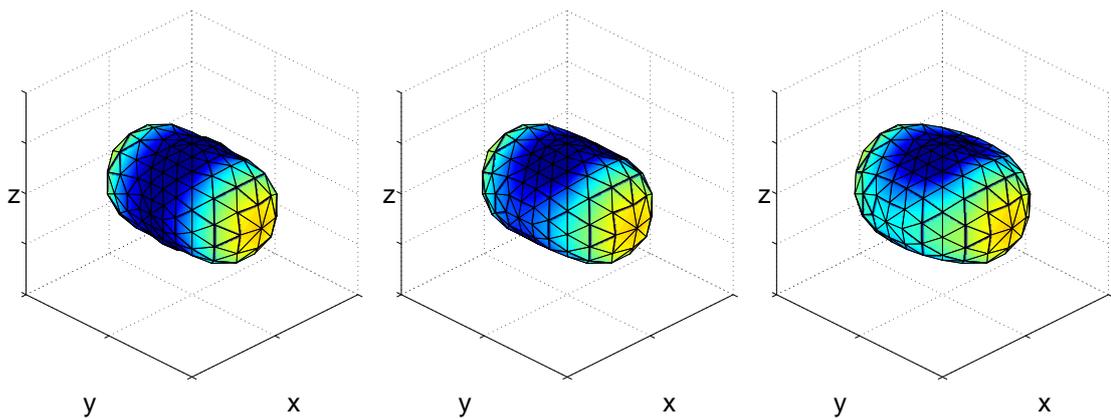
(a) Curva tensão deformação do modelo



(b) Instante A

(c) Instante B

(d) Instante C



(e) Instante D

(f) Instante E

(g) Instante F

Figura 5.32 – Resposta de tensão e distribuição do CODF usando a variável λ^p em diferentes instantes no caso com carregamento bidirecional

Para este caso a resposta obtida apresenta uma significativa alteração no segundo

ciclo da curva tensão deformação em comparação com a resposta do caso unidirecional, apresentada na Figura 5.30. A deformação equivalente apresenta uma sutil redução no início do processo de tração na direção x , para depois retomar o aumento da deformação equivalente em maiores valores de deslocamento na direção x .

Note que para o caso bidirecional estudado, uma significativa redução da rigidez do corpo ocorre na direção ortogonal ao primeiro carregamento. Isso se deve a perda de rigidez na direção y do corpo devido ao carregamento inicial que acumula deformações plásticas nessa direção, afetando a rigidez do corpo ao ser carregado em outras direções, como ocorre no caso apresentado ao ser carregado na direção ortogonal x . O resultado apresentado difere fortemente de um caso isotrópico indicando a forte característica de plasticidade anisotrópica do modelo estudado.

5.4.3 Caso viscoplástico uniaxial

Para este caso de estudo é apresentado um exemplo uniaxial monotônico com resposta viscoplástica. Para tanto o parâmetro m escolhido é diferente de zero, e foram utilizadas três diferentes taxas de alongamento. Na tabela 5.9 são apresentados os parâmetros constitutivos do modelo, e na Figura 5.33 são apresentadas as curvas tensão deformação para as diferentes taxas de deformação impostas.

Tabela 5.9 – Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos com viscoplasticidade

$\bar{\omega}^e$	$\bar{\omega}^p$	$\bar{\omega}^v$	s
$\mu = 1000$ [MPa]	$\mu_R = 2$ [MPa]	$\dot{\epsilon}_0^p = 1$	$h_0 = 500$
	$\lambda_{lock} = 3,5$	$m = 0,6$	$s_0 = 800$ [MPa]
			$s^* = 200$ [MPa]

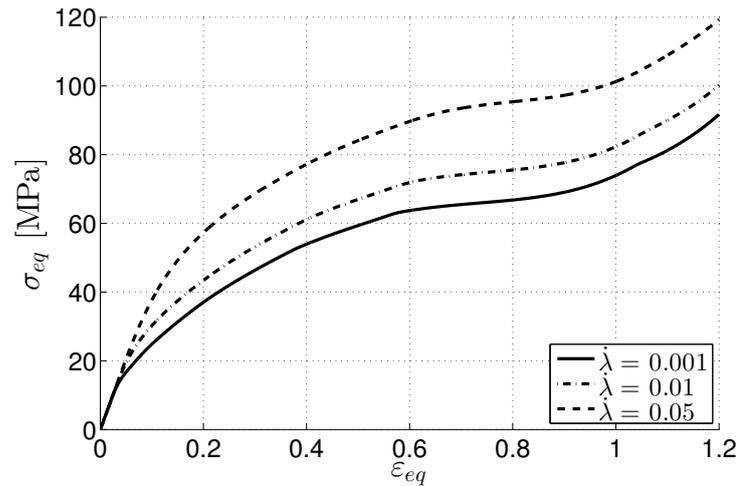


Figura 5.33 – Curvas tensão deformação para diferentes taxas de deformação

Neste estudo é apresentada a característica viscoplástica do presente modelo, com uma região elástica inicial e posterior comportamento viscoplástico. O modelo estudado apresenta características comumente observadas na resposta mecânica de materiais termoplásticos como: a alteração no patamar de tensão na região viscoplástica ao alterar a taxa de deformação e; enrijecimento em grandes deformações.

5.4.4 Deformações heterogêneas

Para este último caso de estudo duas geometrias diferentes são estudadas, uma geometria corresponde a uma barra com dois rasgos circulares alinhados e a outra geometria com rasgos desalinhados, conforme apresentado na Figura 5.34. As geometrias escolhidas promovem uma condição com deformações heterogêneas, com uma localização das deformações na região com o entalhe.

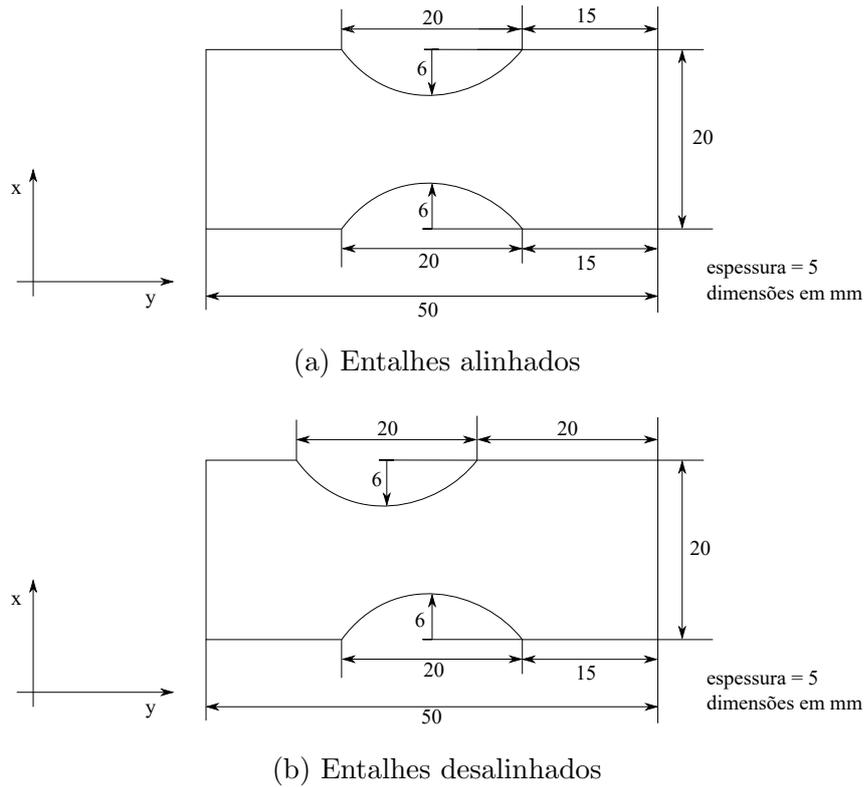


Figura 5.34 – Geometrias do caso com deformações heterogêneas

O corpo é submetido a um carregamento monotônico na direção y de 10 milímetros em um intervalo de tempo de 100 segundos. Para este caso de estudo foram empregadas as propriedades mecânicas apresentadas na Tabela 5.10.

Tabela 5.10 – Parâmetros constitutivos do modelo para materiais termoplásticos

$\bar{\omega}^e$	$\bar{\omega}^p$	$\bar{\omega}^v$	s
$\mu = 1000$ [MPa]	$\mu_R = 1$ [MPa]	$\dot{\epsilon}_0^p = 1$	$h_0 = 1,5$
	$\lambda_{lock} = 1,6$	$m = 0$	$s_0 = 4$ [MPa]
			$s^* = 1,5$ [MPa]

Nas Figuras 5.35 e 5.36 são apresentados, respectivamente, os resultados do estudo com os entalhes alinhados e desalinhados. Nas curvas tensão deformação apresentadas nas Figuras 5.35.a até 5.35.c estão marcados com pontos os instantes de tempo em que são apresentadas as representações da resposta de tensão e a distribuição do alongamento plástico na Figura 5.35.d. Esta mesma organização foi utilizada para a apresentação dos resultados na Figura 5.36.

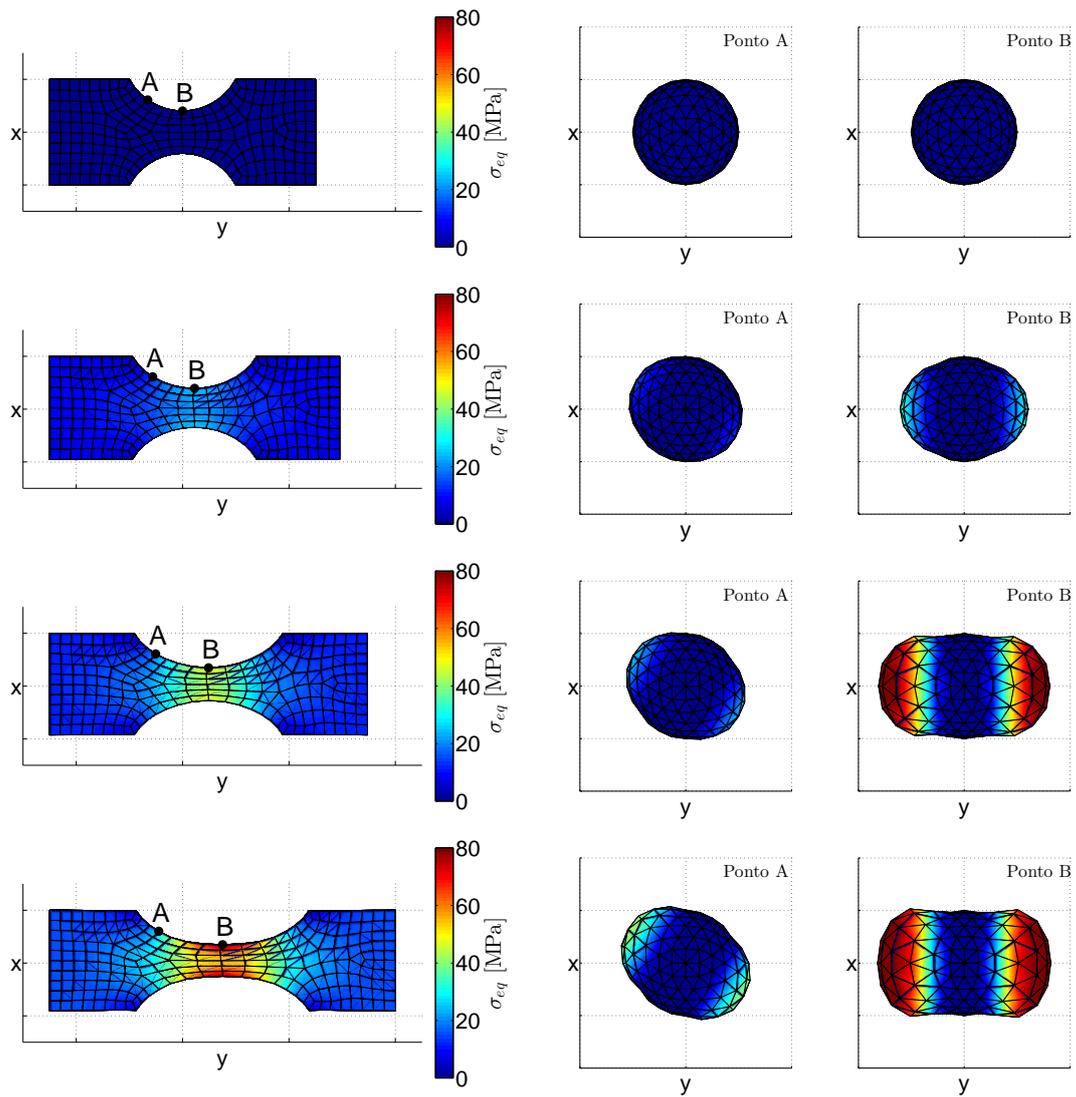
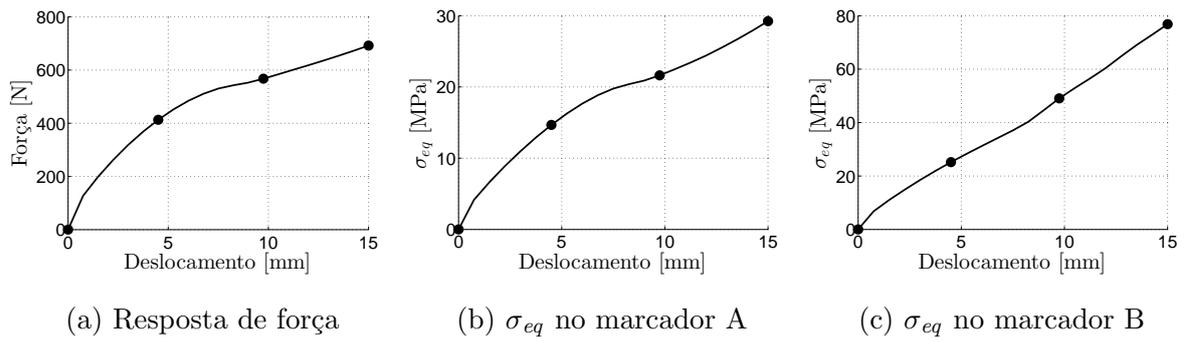


Figura 5.35 – Respostas de tensão e da distribuição de alongamento plástico em pontos do problema com os entalhes alinhados

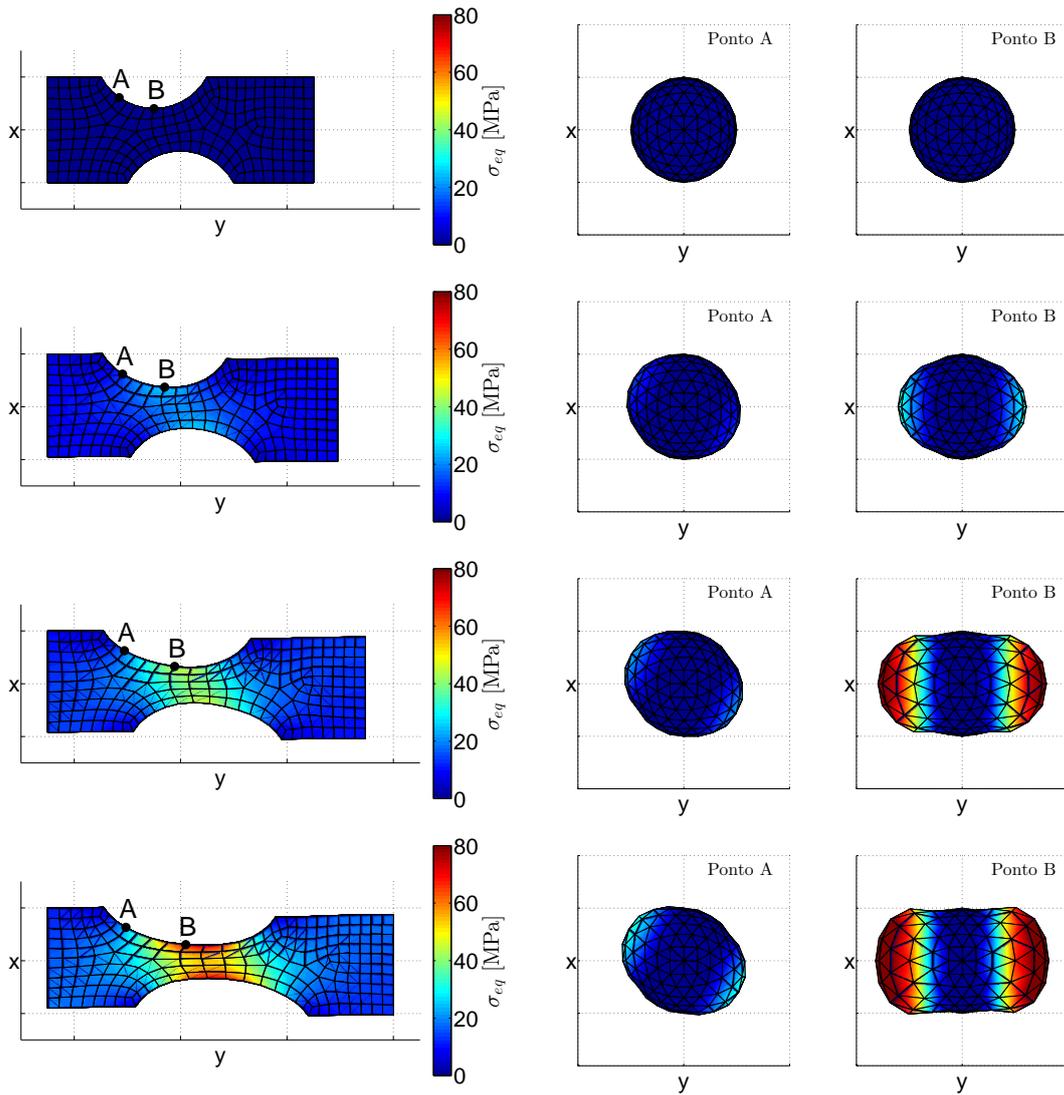
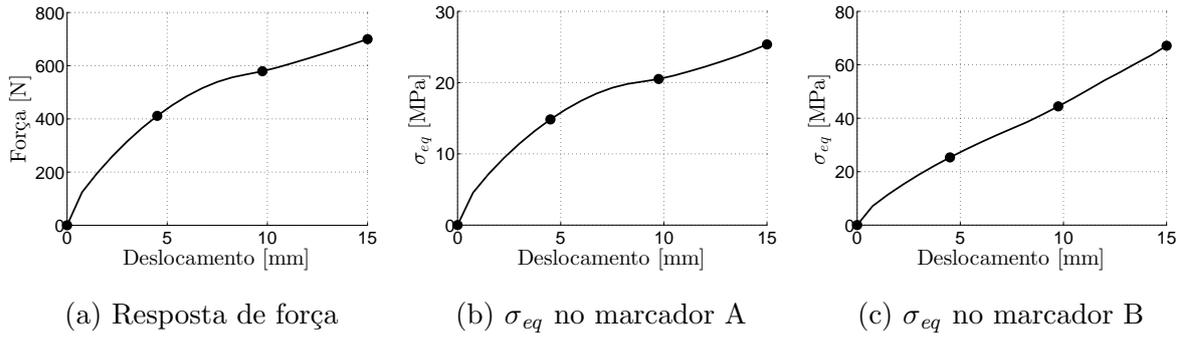


Figura 5.36 – Respostas de tensão e da distribuição de alongamento plástico em pontos do problema com os entalhes desalinhados

A solução dos problemas com entalhes alinhados e desalinhados apresentados, res-

pectivamente, nas Figuras 5.35 e 5.36 exibem concentração de tensão na região do entalhe com deformações finitas nesta região, mostrando o processo de estrição e estiramento. Pode ser verificado também que os dois diferentes pontos marcados na geometria, com os marcadores A e B, apresentam uma evolução da forma do CODF orientada com as direções principais dos esforços resultantes nestas posições.

Conforme apresentado, ambos os casos apresentam uma distribuição de alongamento plástico distintas em diferentes pontos do corpo e, por consequência, diferentes características e orientações da anisotropia resultantes do processo de deformação.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada uma proposta de estrutura matemática variacional, que emprega o conceito de função de distribuição da orientação da cadeia (CODF), para desenvolver uma família de modelos constitutivos com o comportamento de inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação. A estrutura proposta foi particularizada de forma a se obter dois modelos constitutivos: um modelo para viscoelasticidade e dano anisotrópicos acoplados; e um modelo viscoelastoplástico anisotrópico. Na literatura não existem modelos que acoplem fenômenos anisotrópicos de viscoelasticidade e anisotrópicos de dano mecânico, ou que apresentem plasticidade anisotrópica empregando o CODF. Tal estrutura amplia de forma significativa a capacidade de representação de comportamentos mecânicos observados em materiais com complexos mecanismos de inelasticidade.

O modelo com dano e viscosidade anisotrópicos, especializado para borrachas, apresenta uma abordagem CODF similar a diferentes modelos com dano anisotrópico, desenvolvidos para borrachas com carga, porém adicionando o comportamento de viscosidade anisotrópica. Já o modelo viscoplástico anisotrópico, especializado para materiais termoplásticos, fornece uma estrutura completamente distinta dos modelos clássicos da literatura, considerando comportamentos mecânicos inelásticos equivalentes nas direções da integração numérica.

Com os modelos de material propostos, foram apresentados exemplos numéricos demonstrando a capacidade de reproduzir diferentes comportamentos observados em materiais sujeitos a inelasticidade anisotrópica induzida pela deformação, como por exemplo, o fenômeno de dano e de relaxação em elastômeros com carga, formação de aneurismas em tecidos biológicos e a estrição e estiramento de corpos de prova de termoplásticos amorfos. Estes comportamentos foram reproduzidos de forma qualitativa com o intuito de representar a tendência da resposta mecânica esperada dos materiais estudados. Este objetivo foi alcançado graças aos fenômenos inelásticos de viscosidade, dano e plasticidade anisotrópicos induzidos pela deformação presentes nos modelos desenvolvidos neste trabalho.

Testes numéricos do número de pontos na quadratura foram realizados com o objetivo de estudar as características da estrutura inelástica. Foi observado que é necessário utilizar no mínimo 85 direções para problemas de grandes deformações para os modelos

testados ($> 100\%$). Para deformações menores, é possível reduzir o número de direções de integração, e conseqüentemente o custo computacional. Com relação a integração temporal, mostrou-se que ao utilizar o parâmetro de integração α_{min} o erro da integração temporal incremental foi reduzido significativamente, mesmo para grandes incrementos de tempo.

Visto que neste trabalho a representação das variáveis inelásticas não pode ser feita por tensores, foi utilizada uma forma de avaliação gráfica de variáveis escalares e suas direções, que serve bem ao propósito desta análise. Com esta representação, foi possível evidenciar claramente o comportamento de anisotropia induzida pela deformação nos modelos propostos.

Os modelos foram implementados em um software comercial, onde os resultados obtidos apresentaram convergência e distribuições suaves das variáveis inelásticas, demonstrando assim a capacidade dos modelos propostos para seu uso em simulação de geometrias complexas. Por fim, a estrutura matemática apresentada, que reduz o problema de minimização em \bar{m} problemas escalares desacoplados, pode facilmente fazer uso de algoritmos de paralelização, o que pode reduzir de forma significativa o tempo computacional.

Quanto a trabalhos futuros, sugere-se que sejam estudados: i) o número necessário de pontos de integração para quadraturas diferentes daquela utilizada neste trabalho; ii) validar experimentalmente as respostas observadas para os dois modelos propostos, calibrando os parâmetros de material com dados experimentais reais; iii) comparar a resposta do modelo viscoplástico com modelos de encruamento cinemático usualmente utilizados em aplicações de termoplásticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alastrué, V., Martínez, M., Doblaré, M., e Menzel, A. Anisotropic micro-sphere-based finite elasticity applied to blood vessel modelling, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 57(1), p. 178–203, 2009.

Alastrué, V., Rodríguez, J., Calvo, B., e Doblaré, M. Structural damage models for fibrous biological soft tissues, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 44(18-19), p. 5894–5911, 2007.

Anand, L. e Gurtin, M. E. A theory of amorphous solids undergoing large deformations, with application to polymeric glasses, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 40(6), p. 1465–1487, 2003.

Ansys Inc. **Programmer’s Manual for Mechanical APDL**. Ansys, 2016a.

Ansys Inc. **Theory Reference for the Mechanical APDL and Mechanical Applications**. Ansys, 2016b.

Argon, A. S. A theory for the low-temperature plastic deformation of glassy polymers, **Philosophical Magazine**, vol. 28(4), p. 839–865, 1973.

Arruda, E. M. e Boyce, M. C. Evolution of plastic anisotropy in amorphous polymers during finite straining, **International Journal of Plasticity**, vol. 9(6), p. 697–720, 1993a.

Arruda, E. M. e Boyce, M. C. A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 41(2), p. 389 – 412, 1993b.

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

Arruda, E. M., Boyce, M. C., e Quintus-Bosz, H. Effects of initial anisotropy on the finite strain deformation behavior of glassy polymers, **International Journal of Plasticity**, vol. 9(7), p. 783–811, 1993.

Badel, P.-B. e Leblond, J.-B. A note on integration schemes for the microplane model of the mechanical behaviour of concrete, **Communications in Numerical Methods in Engineering**, vol. 20(1), p. 75–81, 2003.

Balieu, R., Lauro, F., Bennani, B., Haugou, G., Chaari, F., Matsumoto, T., e Mottola, E. Damage at high strain rates in semi-crystalline polymers, **International Journal of Impact Engineering**, vol. 76, p. 1–8, 2015.

Boehler, J. P., editor. **Applications of Tensor Functions in Solid Mechanics**. Springer Vienna, Vienna, 1987.

Boyce, M. C., Parks, D. M., e Argon, A. S. Large inelastic deformation of glassy polymers. Part I: rate dependent constitutive model, **Mechanics of Materials**, vol. 7(1), p. 15–33, 1988.

Boyce, M. C., Socrate, S., e Llana, P. G. Constitutive model for the finite deformation stress–strain behavior of poly (ethylene terephthalate) above the glass transition, **Polymer**, vol. 41(6), p. 2183–2201, 2000.

Brown, N. e Ward, I. M. Deformation bands in oriented polyethylene terephthalate, **Philosophical Magazine**, vol. 17(149), p. 961–981, 1968.

Bucher, A., Görke, U.-J., e Kreißig, R. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure, **International Journal of Plasticity**, vol. 20(4-5), p. 619–642, 2004.

Buckley, C. P. e Jones, D. C. Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition, **Polymer**, vol. 36(17), p. 3301–3312, 1995.

Callister, W. e Rethwisch, D. G. **Materials Science and Engineering: An Introduction**. John Wiley & Sons, 2007.

Chuong, C. J. e Fung, Y. C. On Residual Stresses in Arteries, **Journal of Biomechanical Engineering**, vol. 108(2), p. 189–192, 1986.

Dafalias, Y. F. Orientation distribution function in non-affine rotations, **J. Mech. Phys. Solids**, page 24, 2001.

Dargazany, R. e Itskov, M. A network evolution model for the anisotropic Mullins effect in carbon black filled rubbers, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 46(16), p. 2967–2977, 2009.

de Castro, P. B. e Fanello, E. A. Coupled ductile-hydrolytic damage model based on variational constitutive updates, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2017.

Diani, J., Brieu, M., e Vacherand, J. M. A damage directional constitutive model for Mullins effect with permanent set and induced anisotropy, **European Journal of Mechanics, A/Solids**, vol. 25(3), p. 483–496, 2006.

Diani, J. e Le Tallec, P. A fully equilibrated microsphere model with damage for rubberlike materials, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 124, p. 702–713, 2019.

Ehret, A. E. e Itskov, M. Modeling of anisotropic softening phenomena: Application to soft biological tissues, **International Journal of Plasticity**, vol. 25(5), p. 901–919, 2009.

Ehret, A. E., Itskov, M., e Schmid, H. Numerical integration on the sphere and its effect on the material symmetry of constitutive equations-A comparative study, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, pages 189–206, 2009.

Fanello, E., Ponthot, J.-P., e Stainier, L. A variational formulation of constitutive models and updates in non-linear finite viscoelasticity, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 65(11), p. 1831–1864, 2006.

Fancello, E., Vassoler, J. M., e Stainier, L. A variational constitutive update algorithm for a set of isotropic hyperelastic–viscoplastic material models, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 197(49-50), p. 4132–4148, 2008.

Fang, Q.-Z., Wang, T., e Li, H.-M. Large tensile deformation behavior of PC/ABS alloy, **Polymer**, vol. 47(14), p. 5174–5181, 2006.

Farias, J.-M. C., Stainier, L., e Fancello, E. A. A variational framework for the modeling of glassy polymers under finite strains, **Continuum Mechanics and Thermodynamics**, 2019.

Fathi, F., Hatefi Ardakani, S., Fatemi Dehaghani, P., e Mohammadi, S. A finite strain integral-type anisotropic damage model for fiber-reinforced materials: Application in soft biological tissues, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 322, p. 262–295, 2017.

Frank, F. C., Keller, A., O’connor, A., e Wills, H. H. Deformation processes in polyethylene interpreted in terms of crystal plasticity, **Philosophical Magazine**, vol. 3(25), p. 64–74, 1958.

Frank, G. J. e Brockman, R. A. A viscoelastic–viscoplastic constitutive model for glassy polymers, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 38(30-31), p. 5149–5164, 2001.

Garcia-Gonzalez, D., Jérusalem, A., Garzon-Hernandez, S., Zaera, R., e Arias, A. A continuum mechanics constitutive framework for transverse isotropic soft tissues, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 112, p. 209–224, 2018.

Ghorbel, E. A viscoplastic constitutive model for polymeric materials, **International Journal of Plasticity**, vol. 24(11), p. 2032–2058, 2008.

Göktepe, S. e Miehe, C. A micro–macro approach to rubber-like materials. Part III: The micro-sphere model of anisotropic Mullins-type damage, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 53(10), p. 2259–2283, 2005.

Gültekin, O., Dal, H., e Holzapfel, G. A. Numerical aspects of anisotropic failure in soft biological tissues favor energy-based criteria: A rate-dependent anisotropic crack phase-field model, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 331, p. 23–52, 2018.

Goldwyn, R. M. e Watt, T. B. Arterial Pressure Pulse Contour Analysis Via a Mathematical Model for the Clinical Quantification of Human Vascular Properties, **MEDICAL ENGINEERING**, page 7, 1967.

Govindjee, S. e Simo, J. A micro-mechanically based continuum damage model for carbon black-filled rubbers incorporating Mullins’ effect, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 39(1), p. 87 – 112, 1991.

Grytten, F., Daiyan, H., Polanco-Loria, M., e Dumoulin, S. Use of digital image correlation to measure large-strain tensile properties of ductile thermoplastics, **Polymer Testing**, vol. 28(6), p. 653–660, 2009.

G'sell, C., Hiver, J. M., e Dahoun, A. Experimental characterization of deformation damage in solid polymers under tension, and its interrelation with necking, **International Journal of solids and structures**, vol. 39(13), p. 3857–3872, 2002.

G'sell, C. e Jonas, J. J. Determination of the plastic behaviour of solid polymers at constant true strain rate, **Journal of Materials Science**, vol. 14(155), p. 583–591, 1979.

Gu, G., Xia, Y., Lin, C.-h., Lin, S., Meng, Y., e Zhou, Q. Experimental study on characterizing damage behavior of thermoplastics, **Materials & Design**, vol. 44, p. 199–207, 2013.

Gunel, E. e Basaran, C. Damage characterization in non-isothermal stretching of acrylics. Part I: Theory, **Mechanics of Materials**, vol. 43(12), p. 979–991, 2011.

Hachour, K., Zaïri, F., Naït-Abdelaziz, M., Gloaguen, J., Aberkane, M., e Lefebvre, J. Experiments and modeling of high-crystalline polyethylene yielding under different stress states, **International Journal of Plasticity**, vol. 54, p. 1–18, 2014.

Harren, S. V. Toward a new phenomenological flow rule for orientationally hardening glassy polymers, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 43(7), p. 1151 – 1173, 1995.

Harren, S. V. A yield surface and flow rule for orientationally hardening polymers subjected to arbitrary deformations, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 45(1), p. 1 – 20, 1997.

Harrysson, M., Harrysson, A., e Ristinmaa, M. Spatial representation of evolving anisotropy at large strains, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 44(10), p. 3514–3532, 2007.

Harrysson, M. e Ristinmaa, M. Two different approaches to model evolving directional properties at finite deformations, **Acta Mechanica**, vol. 199(1-4), p. 97–116, 2008.

Harrysson, M., Ristinmaa, M., Wallin, M., e Menzel, A. Framework for deformation induced anisotropy in glassy polymers, **Acta Mechanica**, vol. 211(3-4), p. 195–213, 2010.

Harwood, J. A. C., Mullins, L., e Payne, A. R. Stress softening in natural rubber vulcanizates. Part II. Stress softening effects in pure gum and filler loaded rubbers, **Journal of Applied Polymer Science**, vol. 9(9), p. 3011–3021, 1965.

Hasan, O. A. e Boyce, M. C. A constitutive model for the nonlinear viscoelastic viscoplastic behavior of glassy polymers, **Polymer Engineering & Science**, vol. 35(4), p. 331–344, 1995.

Haward, R. N. e Thackray, G. The Use of a Mathematical Model to Describe Isothermal Stress-Strain Curves in Glassy Thermoplastics, **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, vol. 302(1471), p. 453–472, 1968.

Holzappel, G. a. **Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering**. John Wiley & Sons, 2001.

Holzapfel, G. A. **Similarities between soft biological tissues and rubberlike materials**. In Austrell, P.-E., editor, *Constitutive Models for Rubber IV*, pages 607–617. Routledge, 1 edition, 2017.

Holzapfel, G. A., Gasser, T. C., e Ogden, R. W. **A new Constitutive Framework for Arterial Wall Mechanics and a Comparative Study of Material Models**. In Cowin, S. C. e Humphrey, J. D., editors, *Cardiovascular Soft Tissue Mechanics*, pages 1–48. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000a.

Holzapfel, G. A., Schulze, C. A. J., e Stadler, M. **MECHANICS OF ANGIOPLASTY: WALL, BALLOON AND STENT**, page 17, 2000b.

Hope, P. S., Duckett, R. A., e Ward, I. M. Effect of free monomer content on the drawing behavior of poly(methyl methacrylate), **Journal of Applied Polymer Science**, vol. 25(7), p. 1373–1379, 1980a.

Hope, P. S., Ward, I. M., e Gibson, A. G. The hydrostatic extrusion of polymethylmethacrylate, **Journal of Materials Science**, vol. 15(9), p. 2207–2220, 1980b.

Itskov, M. e Knyazeva, A. A rubber elasticity and softening model based on chain length statistics, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 80, p. 512–519, 2016.

Laiarinandrasana, L., Klinkova, O., Nguyen, F., Proudhon, H., Morgeneyer, T. F., e Ludwig, W. Three dimensional quantification of anisotropic void evolution in deformed semi-crystalline polyamide 6, **International Journal of Plasticity**, vol. 83, p. 19–36, 2016.

Le Cam, J.-B., Huneau, B., e Verron, E. Fatigue damage in carbon black filled natural rubber under uni- and multiaxial loading conditions, **International Journal of Fatigue**, vol. 52, p. 82–94, 2013.

Li, W. Damage Models for Soft Tissues: A Survey, **Journal of Medical and Biological Engineering**, vol. 36(3), p. 285–307, 2016.

Mai, T.-T., Morishita, Y., e Urayama, K. Induced anisotropy by Mullins effect in filled elastomers subjected to stretching with various geometries, **Polymer**, vol. 126, p. 29 – 39, 2017.

Menzel, A. e Waffenschmidt, T. A microsphere-based remodelling formulation for anisotropic biological tissues, **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, vol. 367(1902), p. 3499–3523, 2009.

Meyer, R. e Pruitt, L. The effect of cyclic true strain on the morphology, structure, and relaxation behavior of ultra high molecular weight polyethylene, **Polymer**, vol. 42(12), p. 5293–5306, 2001.

Miehe, C., Göktepe, S., e Lulei, F. A micro-macro approach to rubber-like materials Part I: the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 52(11), p. 2617–2660, 2004.

Miehe, C., Göktepe, S., e Méndez Diez, J. Finite viscoplasticity of amorphous glassy polymers in the logarithmic strain space, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 46(1), p. 181–202, 2009.

Miehe, C. e Keck, J. Superimposed finite elastic–viscoelastic–plastoelastic stress response with damage in filled rubbery polymers. Experiments, modelling and algorithmic implementation, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, page 43, 2000.

Miley, J. T., Rodriguez, G. J., e Qureshi, A. I. Traumatic Intracranial Aneurysm Formation following Closed Head Injury., **Journal of vascular and interventional neurology**, vol. 1(3), p. 79–82, 2008.

Mills, N. e Gilchrist, A. Finite-element analysis of bicycle helmet oblique impacts, **International Journal of Impact Engineering**, vol. 35(9), p. 1087–1101, 2008.

Miranda, D. F., Yin, C., Zhang, S., e Runt, J. Fluoropolymer microstructure and dynamics: Influence of molecular orientation induced by uniaxial drawing, **Polymer**, vol. 91, p. 211–221, 2016.

Morishita, Y., Tsunoda, K., e Urayama, K. Universal relation between crack-growth dynamics and viscoelasticity in glass-rubber transition for filled elastomers, **Polymer**, vol. 179, p. 121651, 2019.

Mullins, L. Effect of Stretching on the Properties of Rubber, **Rubber Chemistry and Technology**, vol. 21(2), p. 281–300, 1948.

Mullins, L. Softening of Rubber by Deformation, **Rubber Chemistry and Technology**, vol. 42(1), p. 339–362, 1969.

Murthy, N. S., Bray, R. G., Correale, S. T., e Moore, R. A. F. Drawing and annealing of nylon-6 fibres: studies of crystal growth, orientation of amorphous and crystalline domains and their influence on properties, **Polymer**, vol. 36(20), p. 3863 – 3873, 1995.

Neto, E. A. d. S., Perić, D., e Owen, D. R. J. **Computational methods for plasticity: theory and applications**. Wiley, Chichester, West Sussex, UK, 2008.

Ogden, R. W. e Roxburgh, D. G. A pseudo–elastic model for the Mullins effect in filled rubber, **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, vol. 455(1988), p. 2861–2877, 1999.

Ortiz, M. e Stainier, L. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 171(3-4), p. 419–444, 1999.

Ottosen, N. S. e Ristinmaa, M. **The mechanics of constitutive modeling**. Elsevier, 2005.

Pipkin, A. e Wineman, A. Material symmetry restrictions on non-polynomial constitutive equations, **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, vol. 12(1), p. 420–426, 1963.

Qiu, L., Yin, S., e Xie, Z. Failure analysis and performance comparison of Triple-LET and LET flexure hinges, **Engineering Failure Analysis**, vol. 66, p. 35–43, 2016.

Rabinowitz, S., Ward, I. M., e Parry, J. S. C. The effect of hydrostatic pressure on the shear yield behaviour of polymers, **Journal of Materials Science**, vol. 5(1), p. 29–39, 1970.

Roland, C. M. Mechanical Behavior of Rubber at High Strain Rates, **Rubber Chemistry and Technology**, vol. 79(3), p. 429–459, 2006.

Saï, K., Lailarinandrasana, L., Naceur, I. B., Besson, J., Jeridi, M., e Cailletaud, G. Multi-mechanism damage-plasticity model for semi-crystalline polymer: Creep damage of notched specimen of PA6, **Materials Science and Engineering A**, vol. 528(3), p. 1087–1093, 2011.

Schultz, J. **Polymer materials science**. Prentice-Hall international series in the physical and chemical engineering sciences. Prentice-Hall, 1974.

Sáez, P., Alastrué, V., Peña, E., Doblaré, M., e Martínez, M. A. Anisotropic microsphere-based approach to damage in soft fibered tissue, **Biomechanics and Modeling in Mechanobiology**, vol. 11(5), p. 595–608, 2012.

Shepherd, J., Mcdowell, D., e Jacob, K. Modeling morphology evolution and mechanical behavior during thermo-mechanical processing of semi-crystalline polymers, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 54(3), p. 467–489, 2006.

Shuaeib, F., Hamouda, A., Wong, S., Umar, R. R., e Ahmed, M. M. A new motorcycle helmet liner material: The finite element simulation and design of experiment optimization, **Materials & Design**, vol. 28(1), p. 182–195, 2007.

Souza, E. A. D. e Owen, D. R. J. A phenomenological three-dimensional rate-independent continuum damage model for highly filled polymers : formulation and computational aspects, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, page 18, 1994.

Spencer, A. J. M. Part III. Theory of invariants, **Continuum physics**, vol. 1, p. 239–353, 1971.

Sperling, L. H. **Introduction to Physical Polymer Science**. volume 78. John Wiley & Sons, 2006.

Sriring, M., Nimpaiboon, A., Kumarn, S., Takahara, A., e Sakdapipanich, J. Enhancing viscoelastic and mechanical performances of natural rubber through variation of large and small rubber particle combinations, **Polymer Testing**, vol. 81, p. 106225, 2020.

Tehrani, M. e Sarvestani, A. Effect of chain length distribution on mechanical behavior of polymeric networks, **European Polymer Journal**, vol. 87, p. 136–146, 2017.

Tomita, Y., Azuma, K., e Naito, M. Computational evaluation of strain-rate-dependent deformation behavior of rubber and carbon-black-filled rubber under monotonic and cyclic straining, **International Journal of Mechanical Sciences**, vol. 50(5), p. 856–868, 2008.

Tomita, Y. e Tanaka, S. Prediction of deformation behavior of glassy polymers based on molecular chain network model, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 32(23), p. 3423 – 3434, 1995.

Treloar, L. **The Physics of Rubber Elasticity**. Monographs on the physics and chemistry of materials. Oxford University Press, USA, 1975.

Vassoler, J. M., Stainier, L., e Fancello, E. A. A variational framework for fiber-reinforced viscoelastic soft tissues including damage, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2016.

Verron, E. Questioning numerical integration methods for microsphere (and microplane) constitutive equations, **Mechanics of Materials**, vol. 89, p. 216–228, 2015.

Wang, S. e Chester, S. A. Experimental characterization and continuum modeling of inelasticity in filled rubber-like materials, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 136-137, p. 125–136, 2018.

Ward, I. M. e Sweeney, J. **Mechanical properties of solid polymers**. John Wiley & Sons, 2012.

Watanabe, H. Viscoelasticity and dynamics of entangled polymers, **Progress in Polymer Science (Oxford)**, vol. 24, p. 1253–1403, 1999.

Wu, P. e van der Giessen, E. On improved 3-D non-Gaussian network models for rubber elasticity, **Mechanics Research Communications**, vol. 19(5), p. 427–433, 1992.

Wu, P. e Van der Giessen, E. On improved network models for rubber elasticity and their applications to orientation hardening in glassy polymers, **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, vol. 41(3), p. 427–456, 1993.

Wu, W., Argon, A. S., e Turner, A. P. L. Plastic deformation of polyethylene crystals on copper and NaCl crystal substrates, **Journal of Polymer Science Part A-2: Polymer Physics**, vol. 10(12), p. 2397–2407, 1972.

Ye, J., André, S., e Farge, L. Kinematic study of necking in a semi-crystalline polymer through 3D Digital Image Correlation, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 59, p. 58–72, 2015.

Zheng, Q. S. Theory of representations for tensor functions, **Appl. Mech. Rev.**, vol. 47(11), p. 545–587, 1994.

Zheng, Q.-S. e Spencer, A. J. M. Tensors which characterize anisotropies, **International Journal of Engineering Science**, vol. 31(5), p. 679–693, 1993.

APÊNDICE A – Resultados do modelo anisotrópico variacional viscoelástico isocórico com dano usando o CODF

Neste apêndice apresentadas algumas expressões do modelo de viscoelasticidade com dano usando o CODF. Estas expressões podem ser úteis principalmente na implementação em códigos de simulação numérica.

A.1 Tensor tensão

O tensor tensão para este modelo é dado por,

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{iso} + \mathbf{S}^{vol} \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{S}^{iso} = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \text{Dev} \left(\sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} \right) \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{S}^{vol} = J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1} \quad (\text{A.3})$$

a derivada do potencial Ψ_k pelo alongamento corresponde a,

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} = 2h_k \left(\frac{\partial \lambda_{n+1,k}^e}{\partial \lambda_k^{trial}} \frac{\partial \lambda_k^{trial}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{A.4})$$

$$= 2h_k \left(\frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \exp(-\Delta t \varepsilon_k^v) \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{A.5})$$

$$= 2h_k \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{A.6})$$

finalmente, a expressão para o tensor tensão \mathbf{S}^{iso} resulta em,

$$\mathbf{S}^{iso} = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \text{Dev} \left(2h_k \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}^2} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} \right) \quad (\text{A.7})$$

$$= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \text{Dev} (\bar{s}_k \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \text{Dev} (\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \quad (\text{A.8})$$

$$= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \quad (\text{A.9})$$

A.2 Matriz tangente

Na sequência é apresentada a matriz tangente do modelo viscoelástico com dano,

$$\mathbb{C} = 2 \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{C}} = \mathbb{C}^{vol} + \mathbb{C}^{iso} \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbb{C}^{vol} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1} \right) \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbb{C}^{iso} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^m \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) \quad (\text{A.12})$$

o termo \mathbb{C}^{vol} pode ser facilmente encontrado na literatura e não sera desenvolvido e o termo s_k é dada na Equação 3.67 pela expressão $s_k = \frac{2h_k(1-\eta_{n+1,k})}{\lambda_{n+1,k}^2 \lambda_{n+1,k}^{e-1} \partial \lambda_{n+1,k}^e}$. O termo desviador \mathbb{C}^{iso} corresponde a,

$$\mathbb{C}^{iso} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) \quad (\text{A.13})$$

$$= 2 J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(\bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) + \quad (\text{A.14})$$

$$+ 2 \frac{\partial J_{n+1}^{-\frac{2}{3}}}{\partial \mathbf{C}} \otimes \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right)$$

$$= 2 J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \left(\frac{d\bar{s}_k}{d\mathbf{C}} \otimes \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) + \right. \quad (\text{A.15})$$

$$\left. - \frac{\bar{s}_k}{3} \left(\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) + \mathbf{C}^{-1} \otimes (\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) +$$

$$- \frac{2}{3} J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right)$$

e o termo $ds_k/d\mathbf{C}$ da Equação B.13 se torna,

$$\begin{aligned}
\frac{ds_k}{d\mathbf{C}} &= \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(\frac{2h_k(1-\eta_{n+1,k})}{\lambda_{n+1,k}^2 \lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \right) \\
&= 2h_k \frac{d}{d\lambda_{n+1,k}} \left(\frac{(1-\eta_{n+1,k})}{\lambda_{n+1,k}^2 \lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \right) \\
&\quad \frac{\partial \lambda_{n+1,k}}{\partial \lambda_{n+1,k}^2} \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} \cdot \frac{\partial \lambda_{n+1,k}^2}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \\
&= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \frac{h_k}{\lambda_{n+1,k}^3} \left((1-\eta_{n+1,k}) \left(-\frac{2\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \left(\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2 \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e{}^2} \right) \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}} \right) \text{Dev}(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k})
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Para a correta determinação das derivadas $\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}}$ e $\frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}}$ passos adicionais devem ser tomados. Para este procedimento são combinadas derivadas do alongamento elástico $\lambda_{n+1,k}^e$ e o resíduo da minimização $r_{\Delta q_k}$ and $r_{\Delta \eta_k}$. Então, usando a expressão para $\lambda_{n+1,k}^e$ (da Equação 4.9) a derivada $\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}}$ determina a seguinte expressão,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\lambda_k^{trial}} \left(\lambda_{n+1,k}^e = \lambda_k^{trial} \exp(-\Delta q_k) \right) \\
\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} = \exp(-\Delta q_k) - \lambda_k^{trial} \exp(-\Delta q_k) \frac{d\Delta q_k}{d\lambda_k^{trial}}
\end{aligned} \tag{A.17}$$

com a derivada do resíduo viscoso $\frac{dr_{\Delta q_k}}{d\lambda_{n+1,k}}$ (da Equação 4.18) a seguinte expressão é obtida,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\lambda_{n+1,k}} \left(-\lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} (1-\eta_{n+1,k}) + \frac{\partial \bar{\phi}^v}{\partial d^v} \right) = 0 \\
(1-\eta_{n+1,k}) \left(\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2 \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e{}^2} \right) \frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} + \\
- \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}} - \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \frac{\partial^2 \bar{\phi}^v}{\partial d_k^v{}^2} \frac{d\Delta q_k}{d\lambda_k^{trial}} = 0
\end{aligned} \tag{A.18}$$

a com a derivada do resíduo de dano $\frac{dr_{\Delta \eta_k}}{d\lambda_{n+1,k}}$ (da Equação 4.19),

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\lambda_{n+1,k}} \left(-\bar{\omega}^e + \frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} \right) = 0 \\
- \frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} + \frac{d}{d\eta_{n+1,k}} \left(\frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} \right) \frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}} = 0
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Finalmente, combinando as Equações A.17, A.18 e A.19 é possível determinar a derivada $\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}}$ e $\frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}}$ como mostrado na sequência,

$$\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} = \frac{\frac{1}{\Delta t \lambda_{n,k}^v \lambda_k^{trial}} \frac{\partial^2 \bar{\phi}^v}{\partial d_k^{v^2}} \frac{d}{d\eta_{n+1,k}} \left(\frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} \right)}{\left((1 - \eta_{n+1,k}) \left(\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2 \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e{}^2} \right) \frac{1}{\lambda_{n,k}^v} + \frac{1}{\Delta t \lambda_{n,k}^v \lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial^2 \bar{\phi}^v}{\partial d_k^{v^2}} \right) \frac{d}{d\eta_{n+1,k}} \left(\frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} \right) - \frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n,k}^v} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e}{}^2} \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{d\eta_{n+1,k}}{d\lambda_{n+1,k}} = \frac{\frac{1}{\lambda_{n,k}^v} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e}}{\frac{d}{d\eta_{n+1,k}} \left(\frac{\partial \bar{\phi}^\eta}{\partial \dot{\eta}_k} \right)} \quad (\text{A.21})$$

APÊNDICE B – Resultados do modelo anisotrópico variacional viscoplástico isocórico usando o CODF

Neste apêndice são apresentadas algumas expressões do modelo de viscoplasticidade usando o CODF. Estas expressões podem ser úteis principalmente na implementação em códigos de simulação numérica.

B.1 Tensor tensão

O tensor tensão para este modelo é dado por,

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{iso} + \mathbf{S}^{vol} \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{S}^{iso} = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \text{Dev} \left(\sum_{k=1}^{\bar{m}} \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{S}^{vol} = J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1} \quad (\text{B.3})$$

a derivada do potencial Ψ_k pelo alongamento corresponde a,

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial \lambda_{n+1,k}} = 2h_k \left(\frac{\partial \lambda_{n+1,k}^e}{\partial \lambda_k^{trial}} \frac{\partial \lambda_k^{trial}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{B.4})$$

$$= 2h_k \left(\frac{1}{\lambda_{n,k}^p} \exp(-\Delta t \varepsilon_k^p) \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{B.5})$$

$$= 2h_k \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \quad (\text{B.6})$$

finalmente, a expressão para o tensor tensão \mathbf{S}^{iso} resulta em,

$$\mathbf{S}^{iso} = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \text{Dev} \left(2h_k \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}^2} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} \right) \quad (\text{B.7})$$

$$= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \text{Dev} (\bar{s}_k \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) = J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \text{Dev} (\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \quad (\text{B.8})$$

$$= J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \quad (\text{B.9})$$

B.2 Matriz tangente

Para o emprego deste modelo em soluções numéricas como o método de elementos finitos, a matriz tangente do problema constitutivo é apresentada,

$$\mathbb{C} = 2 \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{C}} = \mathbb{C}^{vol} + \mathbb{C}^{iso} \quad (\text{B.10})$$

$$\mathbb{C}^{vol} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(J_{n+1} \frac{\partial U}{\partial J_{n+1}} \mathbf{C}^{-1} \right) \quad (\text{B.11})$$

$$\mathbb{C}^{iso} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{\bar{m}} \bar{s}_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) \quad (\text{B.12})$$

a parcela \mathbb{C}^{vol} possa ser facilmente encontrada na literatura e não será desenvolvida. Por outro lado, a parcela desviadora da matriz tangente \mathbb{C}^{iso} fica,

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{iso} = & 2 J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^m \left(\frac{d s_k}{d\mathbf{C}} \otimes \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) + \right. \\ & \left. - \frac{s_k}{3} \left(\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) + \mathbf{C}^{-1} \otimes (\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \right) + \\ & - \frac{2}{3} J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \sum_{k=1}^m s_k \left(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

e a expressão $d\bar{s}_k/d\mathbf{C}$ da Equação B.13 acima fica,

$$\frac{d\bar{s}_k}{d\mathbf{C}} = \frac{d}{d\mathbf{C}} \left(2h_k \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \right) \quad (\text{B.14})$$

$$= 2h_k \frac{d}{d\lambda_{n+1,k}} \left(\frac{\lambda_{n+1,k}^e}{\lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \frac{\partial \lambda_{n+1,k}}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \lambda_{n+1,k}^2}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned} = & J_{n+1}^{-\frac{2}{3}} \frac{h_k}{\lambda_{n+1,k}} \left(\frac{\partial \lambda_{n+1,k}^{-2}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \right. \\ & + \frac{1}{\lambda_{n+1,k}^2} \left(\frac{\partial \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e} + \lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2 \bar{\omega}^e}{\partial \lambda_{n+1,k}^e{}^2} \right) \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} \frac{\partial \lambda_k^{trial}}{\partial \lambda_{n+1,k}} + \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \lambda_{n+1,k}} \left(\frac{1}{\lambda_{n+1,k}} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \lambda_{n+1,k}} \right) \right) \text{Dev}(\mathbf{m}_{0,k} \otimes \mathbf{m}_{0,k}) \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Para os casos onde não ocorre evolução da deformação inelástica $\lambda_{n+1,k}^e = \lambda_{n+1,k}$, a derivada $d\lambda_{n+1,k}^e/d\lambda_k^{trial}$ pode ser facilmente determinada. Por outro lado, a correta determinação desta expressão para o caso onde a deformação plástica se acumula necessita de passos adicionais. Para tanto são empregadas as expressões $\lambda_{n+1,k}^e$, da Equação 4.9, e a expressão do resíduo da minimização, da Equação 4.51. Para o caso da expressão

$d\lambda_{n+1,k}^e/d\lambda_k^{trial}$, empregando a expressão $\lambda_{n+1,k}^e$,

$$\frac{d}{d\lambda_k^{trial}} \left(\lambda_{n+1,k}^e = \lambda_k^{trial} \exp(-\Delta\varepsilon_k^p) \right) \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} = \exp(-\Delta\varepsilon_k^p) - \lambda_k^{trial} \exp(-\Delta\varepsilon_k^p) \frac{d\Delta\varepsilon_k^p}{d\lambda_k^{trial}} \quad (\text{B.18})$$

com relação à expressão do resíduo a seguinte expressão é obtida,

$$\frac{d}{d\lambda_k^{trial}} \left(-\frac{\partial\bar{\omega}^e}{\partial\lambda_{n+1,k}^e} \lambda_{n+1,k}^e + \frac{\partial\bar{\omega}^p}{\partial\lambda_{n+1,k}^p} \lambda_{n+1,k}^p + \frac{\partial\bar{\omega}^v}{\partial\varepsilon_k^p} \right) = 0 \quad (\text{B.19})$$

$$\begin{aligned} & -\lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2\bar{\omega}^e}{\partial\lambda_{n+1,k}^e{}^2} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} - \frac{\partial\bar{\omega}^e}{\partial\lambda_{n+1,k}^e} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} + \\ & + (\lambda_{n+1,k}^p)^2 \frac{\partial^2\bar{\omega}^p}{\partial(\lambda_{n+1,k}^p)^2} \frac{d\Delta\varepsilon_k^p}{d\lambda_k^{trial}} + \lambda_{n+1,k}^p \frac{\partial\bar{\omega}^p}{\partial\lambda_{n+1,k}^p} \frac{d\Delta\varepsilon_k^p}{d\lambda_k^{trial}} + \\ & + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2\bar{\omega}^v}{\partial(\varepsilon_k^p)^2} \frac{d\Delta\varepsilon_k^p}{d\lambda_k^{trial}} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

isolando uma das expressões para $d\Delta\varepsilon_k^p/d\lambda_k^{trial}$, e substituindo na outra equação, a seguinte expressão para $d\lambda_{n+1,k}^e/d\lambda_k^{trial}$ é determinada,

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_{n+1,k}^e}{d\lambda_k^{trial}} = & \frac{\lambda_{n+1,k}^e \left((\lambda_{n+1,k}^p)^2 \frac{\partial^2\bar{\omega}^p}{\partial(\lambda_{n+1,k}^p)^2} + \lambda_{n+1,k}^p \frac{\partial\bar{\omega}^p}{\partial\lambda_{n+1,k}^p} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2\bar{\omega}^v}{\partial(\varepsilon_k^p)^2} \right)}{\lambda_k^{trial} \left(\lambda_{n+1,k}^e \left(\lambda_{n+1,k}^e \frac{\partial^2\bar{\omega}^e}{\partial\lambda_{n+1,k}^e{}^2} + \frac{\partial\bar{\omega}^e}{\partial\lambda_{n+1,k}^e} \right) + \right.} \\ & \left. + (\lambda_{n+1,k}^p)^2 \frac{\partial^2\bar{\omega}^p}{\partial(\lambda_{n+1,k}^p)^2} + \lambda_{n+1,k}^p \frac{\partial\bar{\omega}^p}{\partial\lambda_{n+1,k}^p} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2\bar{\omega}^v}{\partial(\varepsilon_k^p)^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

APÊNDICE C – Teoremas de representação

De modo a avaliar a resposta mecânica de um dado modelo constitutivo representada por uma dada função, diferentes medidas tensoriais podem ser necessárias para sua avaliação. Com o objetivo de simplificar o desenvolvimento destas expressões algébricas, e suas posteriores avaliações, por meio dos teoremas de representação é possível determinar medidas escalares invariantes para estas funções, as quais não podem ser determinadas através de argumentos simples. Sendo capazes, dessa forma, de representar adequadamente a correta resposta que seria obtida usando a medida tensorial original [Boehler, 1987; Zheng, 1994].

Diferentes simetrias que uma dada função pode assumir (isotropia, isotropia transversal, ortotropia, etc.) representam restrições sobre a forma de uma dada função tensorial. Através dos teoremas de representação estas restrições são definidas de forma precisa, onde o tipo e a quantidade dos escalares envolvidos são determinados de forma completa e irreduzível. Sendo possível assim determinar formas invariantes que representem as simetrias da função estudada [Boehler, 1987; Ottosen e Ristinmaa, 2005] e garantam o princípio de invariância do observador (princípio da objetividade [Holzapfel, 2001]).

As funções tensoriais, em geral, dependem do sistema de coordenadas em que estão sendo avaliadas, e para o exemplo estudado, são definidas como possuindo domínio e imagem tensoriais. Assim, seja um sistema de coordenadas cartesiano definido por um conjunto de vetores unitários ortogonais \mathbf{e}_i , onde uma função tensorial \mathbf{g} está definida. Este sistema de coordenadas pode ser transformado por um tensor \mathbf{R} , que pertença ao grupo ortogonal próprio SO^1 , de modo a definir um segundo sistema de coordenadas $\mathbf{e}_i^+ = \mathbf{R}\mathbf{e}_i$. Neste sistema de coordenadas rotacionado a função tensorial \mathbf{g} , que foi previamente definida, é dada pela expressão \mathbf{g}^+ [Ottosen e Ristinmaa, 2005]. Existem grupos de transformações especiais (grupos de simetria \mathcal{G}) no qual ao avaliarmos as funções tensoriais, a resposta da função não se altera para uma mesma entrada ($\mathbf{g}(\mathbf{A}) = \mathbf{g}^+(\mathbf{A}) \forall \mathbf{R} \in \mathcal{G}$).

Por meio das características do grupo de simetria da função tensorial, diferentes tipos de simetrias podem ser associadas à uma dada função tensorial. Conforme colocado, para o caso de transformações que pertençam ao grupo de simetria de uma dada função, ao realizar uma transformação que pertença ao grupo de simetria desta dada função,

¹Grupo ortogonal próprio, ou SO , corresponde à todas as transformações que possuem as seguintes propriedades: $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T$, $\det \mathbf{R} = 1$. Estas transformações correspondem às transformações de rotação.

a resposta da função é a mesma daquela do sistema de coordenadas original, para um mesmo argumento de entrada. Como forma de ilustrar os tipos de simetrias existentes, uma das simetrias mais usuais é dada pela função tensorial isotrópica, para esta função o grupo de simetria \mathcal{G} é dada pelo próprio grupo ortogonal completo SO_3 ². Outro tipo de simetria bastante usual corresponde a função tensorial transversalmente isotrópica, para este caso existe um vetor unitário \mathbf{c} que corresponde a uma direção privilegiada, e que faz parte de uma tríade ortogonal de vetores unitários \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} . O grupo de simetria da função tensorial para este caso corresponde à $\mathcal{G} = \{\pm\mathbf{I}, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3, \mathbf{H}(\theta), (0 \leq \theta < 2\pi)\}$, onde \mathbf{I} é o tensor identidade, \mathbf{S}_i são, respectivamente, as reflexões sobre os planos (\mathbf{b}, \mathbf{c}) , (\mathbf{a}, \mathbf{c}) e (\mathbf{a}, \mathbf{b}) , e $\mathbf{H}(\theta)$ são todas as rotações em torno do eixo \mathbf{c} [Boehler, 1987].

No entanto, deve-se ressaltar que esta estrutura não viola o princípio da objetividade, no qual a resposta é independente do sistema de coordenadas, mesmo para os casos com funções anisotrópicas. Para ilustrar este princípio, seja uma dada função tensorial \mathbf{g} , que resulta em uma medida tensorial de segunda ordem simétrica \mathbf{B} , e uma medida tensorial de segunda ordem simétrica \mathbf{A} , conforme apresentado na Figura C.1. Ao considerarmos uma transformação $\mathbf{R} \in SO$ aplicada ao sistema de coordenadas são obtidas uma função tensorial \mathbf{g}^+ , e uma medida tensorial $\mathbf{A}^+ = \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T$. Pelo princípio da objetividade a resposta da função no sistema de coordenadas transformado corresponde a resposta da função no sistema de coordenadas original transformado para o novo sistema de coordenadas, ou seja, $\mathbf{g}^+(\mathbf{A}^+) = \mathbf{R}\mathbf{g}(\mathbf{A})\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in SO$. Pode-se verificar que está relação é satisfeita mesmo para funções tensoriais \mathbf{g} que apresentem grupos de simetria \mathcal{G} com grupos de simetria mais restritos que SO . Especificamente no caso de uma função tensorial isotrópica combinando a isotropia e a objetividade, a seguinte relação é respeitada $\mathbf{g}(\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T) = \mathbf{R}\mathbf{g}(\mathbf{A})\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in SO$.

Os teoremas de representação apresentam como resultado que as relações constitutivas, formadas por funções tensoriais, podem ser descritas por meio de relações algébricas de funções escalares invariantes e medidas tensoriais. Uma das hipóteses comumente empregadas ao utilizar teoremas de representação é de que estas funções tensoriais, que representam uma relação constitutiva, são polinomiais ou podem ser aproximadas com suficiente precisão através de polinômios tensoriais de relativo alto grau [Spencer, 1971;

²Grupo ortogonal completo, ou SO_3 , corresponde à todas as transformações que possuem as seguintes propriedades: $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T$, $\det \mathbf{R} = \pm 1$. Estas transformações correspondem a transformações de reflexão, além de rotação.

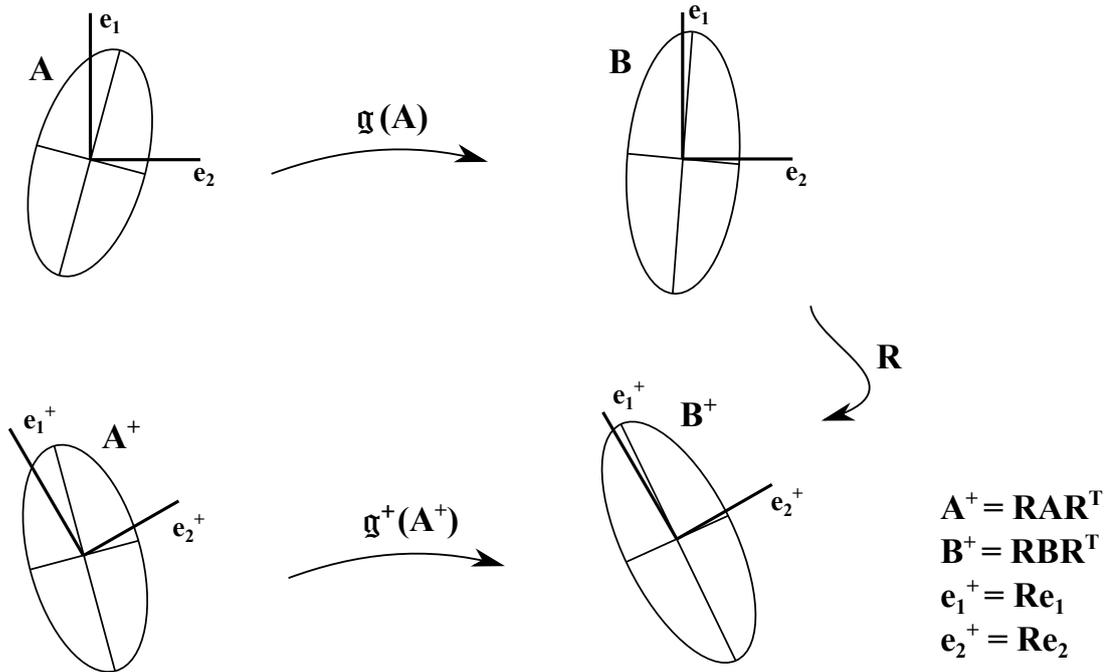


Figura C.1 – Representação da objetividade para dois sistemas de coordenadas distintos, onde e_1 e e_2 são as direções do sistema de coordenadas

Pipkin e Wineman, 1963; Zheng, 1994]. Contudo, o emprego de equações polinomiais para a representação destas relações constitutivas é utilizada por conveniência matemática somente, e os resultados obtidos através desta teoria podem ser aplicadas mesmo para o caso em que as funções tensoriais \mathbf{g} , e as expressões escalares desta função tensorial, não possam ser aproximadas por polinômios [Pipkin e Wineman, 1963; Zheng, 1994]. Com o objetivo de ilustrar esta colocação, em funções que apresentam isotropia especificamente, sejam duas funções tensoriais isotrópicas $\mathbf{g}_1 = \mathbf{g}_1(\mathbf{A})$ e $\mathbf{g}_2 = \mathbf{g}_2(\mathbf{A}, \mathbf{a})$, com \mathbf{A} um tensor de segunda ordem simétrico, \mathbf{a} um vetor e $\mathbf{M} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{a}$, tal que,

$$\mathbf{B} = \mathbf{g}_1(\mathbf{A}) = \varphi_1 \mathbf{I} + \varphi_2 \mathbf{A} + \varphi_3 \mathbf{A}^2 \quad (\text{C.1})$$

$$\varphi_i = \varphi_i(\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3)) \quad i = 1, 2, 3$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{g}_2(\mathbf{A}, \mathbf{a}) = \varphi_1 \mathbf{I} + \varphi_2 \mathbf{A} + \varphi_3 \mathbf{A}^2 + \varphi_4 \mathbf{M} +$$

$$+ \varphi_5(\mathbf{M}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{M}) + \varphi_6(\mathbf{M}\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\mathbf{M}) \quad (\text{C.2})$$

$$\varphi_i = \varphi_i(\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3), \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{M}\mathbf{A}^2)) \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

A colocação do parágrafo acima, sobre o emprego de expressões polinomiais, corresponde à afirmação que, mesmo para casos onde as funções tensoriais \mathbf{g}_i não sejam polinomiais, ou as funções escalares φ_i não sejam polinomiais, os resultados obtidos pelo

teorema das representações são aplicáveis [Pipkin e Wineman, 1963]. Os termos escalares invariantes empregados nas funções φ_i correspondem à base funcional de cada uma das funções tensoriais, enquanto os termos tensoriais de cada uma das funções tensoriais \mathbf{g}_i correspondem aos geradores tensoriais. A base funcional é obtida ao empregar em sua determinação outras funções, além das polinomiais, enquanto a base íntegra é obtida apenas com a ajuda de funções polinomiais. As bases funcionais, dessa forma, apresentam o mesmo número de termos ou menos que as bases íntegras [Boehler, 1987]. No caso das funções C.1 e C.2 as bases íntegras são as mesmas que as bases funcionais, e portanto apresentam o mesmo número de invariantes e geradores.

De modo a modelar de forma concisa uma dada relação constitutiva deve ser empregado o número mínimo de variáveis, de forma que a representação seja completa e irreduzível [Zheng, 1994]. Empregando os teoremas de representação é possível determinar o número irreduzível de variáveis escalares para uma dada função tensorial. Por meio desta é possível determinar para uma dada função, que possua como argumentos de entrada um conjunto de variáveis que podem ser tensores com diferentes características, um conjunto mínimo de invariantes, os quais todos os outros invariantes podem ser obtidos. Com base neste problema um invariante é denominado redutível caso ele possa ser definido através de outros invariantes por meio de uma expressão, ou então irreduzível. O conjunto de invariantes irreduzíveis é denominado base funcional [Spencer, 1971]. Listas extensas com bases funcionais, bases íntegras e geradores para diferentes tipos de funções, e com diferentes tipos e quantidades de tensores, podem ser encontradas em Spencer, 1971; Boehler, 1987; Zheng, 1994.

Para funções tensoriais isotrópicas que apresentem um tensor de segunda ordem simétrico como entrada, como é o caso da equação C.1, é possível provar que são necessários somente três invariantes para avaliar a função [Spencer, 1971; Zheng, 1994], os quais podem ser representados de formas distintas $\{\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3)\}$, $\{\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A})^2 - \text{tr}(\mathbf{A}^2), \det(\mathbf{A})\}$ e os autovalores de \mathbf{A} . A resposta desta função independe da escolha de qualquer um destes conjuntos de invariantes dado que a escolha de qualquer um deles determina unicamente os outros. Ao empregar uma quantidade maior de argumentos tensoriais de entrada de uma função isotrópica, além do tensor simétrico de segundo ordem, a quantidade de invariantes necessária para a base funcional aumenta bastante, principalmente para os casos com muitos tensores de entrada. Conforme tabela C.1, vol-

tando para o caso de uma função isotrópica com diferentes entradas e uma saída tensorial de segunda ordem, ao utilizar um tensor de segunda ordem simétrico e um vetor são necessários cinco invariantes e seis geradores, dois tensores de segunda ordem simétricos como argumento de entrada são necessários dez invariantes e oito geradores, e para o caso de três tensores de segunda ordem simétricos, que não está representado na tabela, são necessários vinte e dois invariantes.

Tabela C.1 – Bases funcionais e geradores, para diferentes conjuntos de medidas escalares (a), vetoriais (\mathbf{a}) e tensoriais simétricas (\mathbf{A}, \mathbf{B}) empregadas em funções tensoriais isotrópicas com uma saída tensorial de segunda ordem

Argumentos	Base funcional (escalares)	Geradores (tensores)
\mathbf{A}	$\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3)$	$\mathbf{I}, \mathbf{A}, \mathbf{A}^2$
\mathbf{A}, a	$\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3), a$	$\mathbf{I}, \mathbf{A}, \mathbf{A}^2$
\mathbf{A}, \mathbf{a}	$\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3), \text{tr}(\mathbf{MA}),$ $\text{tr}(\mathbf{MA}^2)$	$\mathbf{I}, \mathbf{A}, \mathbf{A}^2, \mathbf{M}, \mathbf{MA} + \mathbf{AM},$ $\mathbf{MA}^2 + \mathbf{A}^2\mathbf{M}$
\mathbf{A}, \mathbf{B}	$\text{tr}(\mathbf{A}), \text{tr}(\mathbf{A}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^3), \text{tr}(\mathbf{B}),$ $\text{tr}(\mathbf{B}^2), \text{tr}(\mathbf{B}^3), \text{tr}(\mathbf{AB}), \text{tr}(\mathbf{A}^2\mathbf{B}),$ $\text{tr}(\mathbf{AB}^2), \text{tr}(\mathbf{A}^2\mathbf{B}^2)$	$\mathbf{I}, \mathbf{A}, \mathbf{A}^2, \mathbf{B}, \mathbf{B}^2, \mathbf{AB} + \mathbf{BA},$ $\mathbf{A}^2\mathbf{B} + \mathbf{BA}^2, \mathbf{AB}^2 + \mathbf{B}^2\mathbf{A}$

Com relação ao tratamento de modelos constitutivos, assumindo que uma dada função tensorial apresenta como domínio e imagem tensores de segunda ordem simétricos, como exemplo de uma função que apresenta uma resposta de tensão para uma dada deformação, uma das alternativas para tratar de modelos anisotrópicos é através do emprego de funções tensoriais anisotrópicas. Em analogia às simetrias da função tensorial, a presença de anisotropia faz com que as suas autoprojeções do tensor deformação (domínio da função) não sejam as mesmas do tensor tensão (imagem da função). Por outro lado, no caso de funções tensoriais isotrópicas, a resposta apresenta as mesmas autoprojeções para os tensores tensão e deformação, conforme representado na Figura C.2. Estes resultados também podem ser determinados empregando os teoremas de representação [Boehler, 1987].

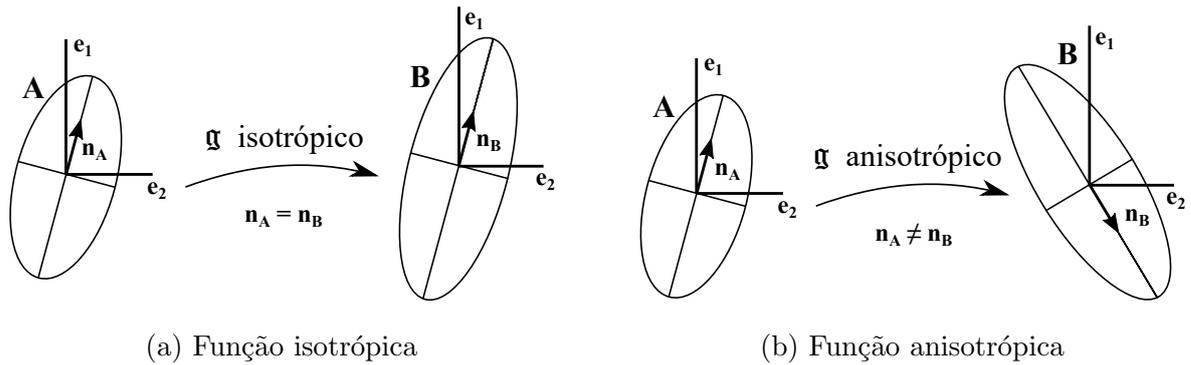


Figura C.2 – Representações de funções tensoriais isotrópica e anisotrópica

C.1 Resultados relativos ao tensor estrutural

Nesta seção foi dada ênfase aos resultados de funções tensoriais isotrópicas, esta escolha se justifica dado a capacidade destas funções de representarem materiais anisotrópicos empregando tensores estruturais. Por meio deste abordagem, ao invés de se aplicar uma função tensorial anisotrópica para a modelagem de um dado material anisotrópico, é possível utilizar uma função constitutiva isotrópica, em conjunto com um tensor estrutural adequado para as simetrias do problema estudado, de modo a representar um dado material anisotrópico. Ao empregar esta abordagem, os efeitos da anisotropia nas relações constitutivas se tornam mais claros por meio dos tensores estruturais, além da relação constitutiva ser independente do sistema de coordenadas [Zheng, 1994]. Dado que o desenvolvimento de representações por invariantes para funções anisotrópicas é mais restrito que para funções isotrópicas, essa abordagem permite utilizar o grande desenvolvimento de representação por invariantes, para os diversos tipos de tensores em funções isotrópicas, também para materiais anisotrópicos [Zheng e Spencer, 1993].

Para ilustrar o emprego do conceito do tensor estrutural, e de suas propriedades, seja uma função tensorial isotrópica \mathfrak{g} que apresenta como resposta um tensor simétrico de segunda ordem, e como entrada um tensor simétrico de segunda ordem e um tensor estrutural \mathbf{M} . Como a função tensorial apresenta comportamento isotrópico, ao empregar o princípio da objetividade a seguinte relação é satisfeita $\mathfrak{g}(\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T, \mathbf{R}\mathbf{M}\mathbf{R}^T) = \mathbf{R}\mathfrak{g}(\mathbf{A}, \mathbf{M})\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in SO$. Uma das propriedades exibidas por esta abordagem corresponde ao grupo de transformações \mathcal{D} , as quais não alteram o tensor estrutural tal que $\mathbf{R}\mathbf{M}\mathbf{R}^T = \mathbf{M} \forall \mathbf{R} \in \mathcal{D}$. Ao combinar com a expressão anterior, resulta na seguinte

expressão $\mathfrak{g}(\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^T, \mathbf{M}) = \mathbf{R}\mathfrak{g}(\mathbf{A}, \mathbf{M})\mathbf{R}^T \forall \mathbf{R} \in \mathcal{D}$. Conforme esperado, a função tensorial estudada, por ser isotrópica, apresenta como grupo de simetria \mathcal{G} o grupo ortogonal próprio SO. Por outro lado, o grupo de simetrias do material \mathcal{D} , que correspondem às simetrias da relação constitutiva, são aquelas que não alteram o tensor estrutural \mathbf{M} .

Diferentemente das funções tensoriais isotrópicas com somente um tensor de segunda ordem como entrada, para os casos onde o tensor estrutural não é coaxial com o tensor simétrico de entrada da função tensorial, então a resposta da função tensorial isotrópica não é coaxial com o tensor de entrada, conforme representado na Figura C.3 [Boehler, 1987]. Para o caso de um material isotrópico, o tensor estrutural corresponde a matriz identidade que pode ser multiplicada por um escalar, tal que $\mathbf{M} = a\mathbf{I}$. Para este caso pode-se facilmente provar que a relação $\mathbf{R}\mathbf{M}\mathbf{R}^T = \mathbf{M} \forall \mathbf{R} \in \text{SO}3$ é satisfeita. Seguindo os resultados apresentados anteriormente, para o caso de um material transversalmente isotrópico o tensor estrutural é dado por $\mathbf{M} = \mathbf{c} \otimes \mathbf{c}$, onde \mathbf{c} é o vetor que corresponde ao eixo privilegiado de isotropia transversal e que faz parte da tríade ortogonal \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} . Para este caso o grupo de simetria do material $\mathcal{D} = \{\pm\mathbf{I}, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3, \mathbf{H}(\theta), (0 < \theta < 2\pi)\}$, onde \mathbf{S}_i são as reflexões sobre os planos da tríade ortogonal e $\mathbf{H}(\theta)$ todas as rotações sobre \mathbf{c} . Este conjunto corresponde ao grupo de simetria da função tensorial transversalmente isotrópica apresentada anteriormente nesta seção, e também corresponde ao grupo de transformações que satisfazem $\mathbf{R}(\mathbf{c} \otimes \mathbf{c})\mathbf{R}^T = (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}) \forall \mathbf{R} \in \mathcal{D}$. Finalmente, para o caso mais geral de anisotropia o grupo de simetria do material \mathcal{D} corresponde ao grupo $\mathcal{D} = \{\mathbf{I}, -\mathbf{I}\}$ [Boehler, 1987].

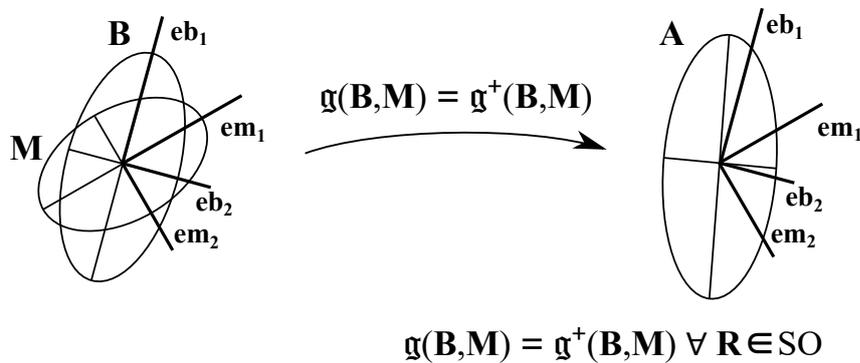


Figura C.3 – Representação de uma função tensorial isotrópica com tensor estrutural

Embora não tenha sido colocado de forma explícita, a abordagem apresentada nesta seção se aplica para modelos constitutivos que apresentem mecanismos de dissipação. Por

meio das teorias termodinâmicas com variáveis internas diferentes mecanismos de dissipação podem ser utilizados na modelagem de materiais. Por meio desta tratativa, o comportamento constitutivo e a evolução das variáveis internas são governados por potenciais energéticos, que possuem como entrada diferentes variáveis de estado externas, que podem estar associados à deformação, temperatura entre outros, e variáveis de estado internas, que geralmente estão associadas a mecanismos dissipativos como plasticidade, dano, viscosidade entre outros. Mesmo quando estes potenciais energéticos sejam avaliados numericamente, como por exemplo, em casos onde o problema constitutivo envolva um mecanismo dissipação e a sua solução necessite da determinação de um mínimo, os resultados apresentados nesta seção podem ser aplicados. Em problemas nos quais a modelagem constitutiva apresente anisotropia, esta também pode vir a ser associada a fenômenos dissipativos como plasticidade e dano. Assim, os tensores estruturais podem não ser necessariamente fixos, podendo ser dependentes das variáveis de estado internas ou externas, evoluindo com os carregamentos aplicados [Zheng, 1994].

Finalmente, uma interessante característica apresentada pelo emprego de tensores estruturais é que: a quantidade e os tipos de simetrias apresentadas pelo material, que está se buscando modelar, são diretamente dependente da quantidade e do tipo das variáveis que compõe o tensor estrutural, a qual a função tensorial isotrópica estudada é dependente. Dessa forma, ao desenvolver um modelo constitutivo, e verificar que as medidas associadas a anisotropia são dependentes de uma certa medida vetorial ou tensorial, então o tensor estrutural resultante vai estar associado a esta medida e a anisotropia resultante do modelo vai corresponde a esta escolha. Por outro lado, ao ter conhecimento prévio das características do material é possível montar o tensor estrutural, de forma que o comportamento constitutivo resultante represente o comportamento almejado para o material.