

Guilherme Jenovencio

**ANÁLISE E IMPLEMENTAÇÃO DE MODELO
CONSTITUTIVO DE VISCOPLASTICIDADE EM REGIME DE
DEFORMAÇÃO FINITA: APLICAÇÃO EM POLÍMEROS
TERMOPLÁSTICOS**

Dissertação submetida ao Programa de
Pós graduação em Engenharia
Mecânica da Universidade Federal de
Santa Catarina para a obtenção do
Grau de Mestre em Engenharia
Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Eduardo A.
Fancello

Florianópolis
2014

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

Jenovencio, Guilherme

Análise e implementação de modelo constitutivo de viscoplasticidade em regime de deformação finita: aplicação em polímeros termoplásticos / Guilherme Jenovencio ; orientador, Eduardo Alberto Fancello - Florianópolis, SC, 2014.

144 p.

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

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Deformações Finitas. 3. Viscoplasticidade. 4. Análise Implícita. 5. Ajuste de Parâmetros. I. Fancello, Eduardo Alberto. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Guilherme Jenovencio

**ANÁLISE E IMPLEMENTAÇÃO DE MODELO
CONSTITUTIVO DE VISCOPLASTICIDADE EM REGIME DE
DEFORMAÇÃO FINITA: APLICAÇÃO EM POLÍMEROS
TERMOPLÁSTICOS**

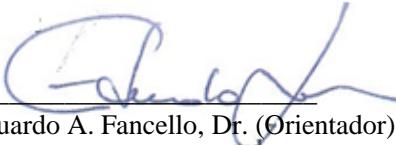
Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 26 de maio de 2014.



Prof. Armando Albertazzi Gonçalves Junior, Dr.
Coordenador do Curso de PósGraduação

Banca Examinadora:



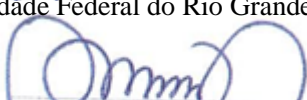
Prof. Eduardo A. Fancello, Dr. (Orientador)
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Paulo de Tarso Rocha de Mendonça, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina



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



Prof. Pablo Andrés Muñoz Rojas, Dr.
Universidade do Estado de Santa Catarina

Este trabalho é dedicado à minha
esposa Camilla Rigoni Medeiros.

AGRADECIMENTOS

Não foi sozinho que consegui alcançar meus objetivos de vida, sejam eles pessoais ou profissionais. Tive a contribuição de muitas pessoas, mas em especial agradeço:

À minha esposa, Camilla Rigoni Medeiros, pelo apoio diário, fazendo com que a vida nunca perca seu significado;

Aos meus pais, Carlos Alberto Jenovencio e Maria Valdeci Jenovencio, sem dúvida a pessoa que sou hoje é fundamentada nos pilares que vocês me ensinaram;

Ao meu orientador Eduardo A. Fancello, pelo aprendizado e auxílio que tornaram esse trabalho possível;

À empresa ESSS pelo apoio, em específico ao coordenador de MDO, Rodrigo Ferraz;

Ao colega de trabalho Fabiano Diesel pelo auxílio com o Ansys.

Ao colega de esporte e engenharia Luiz Fernando Vieira, pelas discussões e descontrações;

À UFSC e ao POSMEC, seus professores e demais funcionários;

A todos os amigos e colegas que contribuíram para a realização desse trabalho.

“Nós podemos tomar o estado presente do universo como o efeito do seu passado e a causa do seu futuro. Um intelecto que, em dado momento, conhecesse todas as forças que dirigem a natureza e todas as posições de todos os itens dos quais a natureza é composta, se este intelecto também fosse vasto o suficiente para analisar essas informações, compreenderia numa única fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e os do menor átomo; para tal intelecto nada seria incerto e o futuro, assim como o passado, seria presente perante seus olhos”

Pierre Simon Laplace - A Philosophical Essay on Probabilities

RESUMO

Nas últimas décadas a aplicação de componentes feitos de materiais poliméricos sofre um aumento expressivo. Muitas peças tradicionalmente feitas de metais e cerâmicos foram substituídos por algum tipo de polímero. O aumento de itens fabricados desses materiais se deve à grande versatilidade de propriedades mecânicas e químicas aliadas à baixa densidade dos mesmos. No entanto, do ponto de vista computacional esses materiais são extremamente complexos de serem modelados devido à intrínseca sensibilidade às variações de temperatura e taxa de deformações. Em vista disso, no presente trabalho buscou-se estudar e implementar um conjunto de modelos constitutivos viscoplásticos capazes de representar o comportamento de materiais termoplásticos. A abordagem variacional foi adotada para formulação do modelo, assim a atualização das tensões e variáveis internas é realizada através da extremização de um pseudo-potencial termodinamicamente consistente. Para o estudo do comportamento do modelo em geometrias tridimensionais foi escrita uma sub-rotina de material, *usermat*, no programa comercial de Elementos Finitos de análise implícita *ANSYS*. Ao se fazer a hipótese de isotropia material, a decomposição espectral foi utilizada implicando na redução do número de equações a serem resolvidas em cada ponto de integração. Curvas de força-deslocamento de três polímeros diferentes, PS, PLA e PC foram obtidas através do ensaio de tração para a realização de ajuste de um modelo. O corpo de prova foi modelado via CAD e uma análise de EF do ensaio de tração foi configurada via *ANSYS Workbench 14.5*. A minimização do erro quadrático das curvas, simulada e real, foi realizada pelo programa de PIDO (*Process Integration and Design Optimization*) modeFRONTIER®. As curvas força-deslocamento simuladas, após ajuste de parâmetros, ficaram muito próximas aos resultados de ensaio, mostrando a capacidade da formulação matemática escolhida em representar o comportamento mecânico de materiais poliméricos. Por fim, análises envolvendo contato entre corpos e torção foram executadas a fim de se verificar o comportamento e estabilidade do modelo material implementado em situações mais complexas.

Palavras-chave: Deformações Finitas. Viscoplasticidade. Análise Implícita. Ajuste de Parâmetros.

ABSTRACT

Demands for light weight and high strength structures lead to polymeric materials as a suitable choice for a large class of engineering applications. In some cases, components traditionally made of metals or ceramics have been replaced by some kind of polymer. This paradigm shift is related to good mechanical properties, low density, corrosion resistance, easy to manufacture, etc. However, computational modeling of such materials has become a challenge in mechanical and material science fields, mainly because of its intrinsic sensitivity with respect to temperature and rate strain variations. In the work reported here, the focus was constitutive modeling and implementation of viscoplastic materials submitted to finite strain kinematics.

Variational formulation was adopted for material modeling. Stress and internal variables updates are performed solving a minimization problem for each time increment. Material isotropy was admitted allowing spectral decomposition to describe the set of constitutive equations. User material sub-routine was written in the implicit Finite Element program ANSYS. Given arbitrary combinations of well know potentials as Odgen, Hencky, Perzyna and others, material free parameters were tuned by fitting experimental load-displacement data of PS, PLA and PC. Minimization of Mean Squared Error was performed making use of modeFRONTIER, a commercial *Process Integration and Design Optimization (PIDO)* software. Experimental and numerical results were very closed showing the ability of our model to represent the mechanical behavior of thermoplastic polymers. Finally, three-dimensional FE Analysis using frictionless contact and torsion is presented in order to verify the stability and applicability of our model in large-scale problems.

Keywords: Finite Strain. Viscoplasticity. Implicit Analysis. Curve Fitting.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2. 1 Alguns tipos de polímeros com suas respectivas unidades principais.	30
Figura 2. 2 Diferentes combinações de unidades principais, onde as cores azul e vermelho representam diferentes tipos de monômeros.	31
Figura 2. 3 a) Linear. b) Ramificada. c) Reticulada. d) Rede	32
Figura 2. 4 Representação esquemática da esferulita.	33
Figura 2. 5 A) Polímero frágil. B) Dúctil. C) Elastômero.	35
Figura 2. 6 Diferentes mecanismos de deformação em polímeros.	36
Figura 2. 7 Curva tensão/deformação de PMMA para diferentes temperaturas.	37
Figura 2. 8 Variação de comportamento em tração com diferentes taxas de deformação.	37
Figura 2. 9 a) Modelo de Kelvin-Voigt. b) Modelo de Maxwell.	38
Figura 2. 10 a) Modelo Zener. b) Modelo Alfrey.	39
Figura 2. 11 Movimento de um corpo.	41
Figura 2. 12 Decomposição polar do tensor gradiente de deformação.	42
Figura 2. 13 Medidas de deformação Lagrangeana para diferentes valores de m.	45
Figura 2. 14. Forças de tração na configuração de referência e deformada.	48
Figura 3. 1 Ilustração das parcelas energéticas conservativas e dissipativas.	70
Figura 4. 1 Fluxograma da sub-rotina <i>Usermar.f.</i>	84
Figura 5. 1 Esquerda: Cubo 3D submetido a cisalhamento. Direita: Posição de máximo deslocamento.	90
Figura 5. 2 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Tensão equivalente de von-Mises σ_{vM} .	91
Figura 5. 3 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Incremento de deformação plástica equivalente Δq .	92
Figura 5. 4 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Tensão equivalente de von-Mises σ_{xy} .	92
Figura 5. 5 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Tensão equivalente de von-Mises σ_{vM} .	92
Figura 5. 6 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Deformação plástica equivalente Δq .	93
Figura 5. 7 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Tensão equivalente de von-Mises σ_{xy} .	94
Figura 5. 8 Dimensões do corpo de prova utilizado no ensaio de tração.	94
Figura 5. 9 Curva de força-deslocamento para PS.	95
Figura 5. 10 Curva de força-deslocamento para PLA.	96
Figura 5. 11 Curva de força-deslocamento para PC.	96
Figura 5. 12 Geometria com simetria de 1/8 do corpo de prova.	98
Figura 5. 13 Malha do corpo de prova para ajuste de parâmetros.	98
Figura 5. 14 Fluxo de trabalho para a calibração dos parâmetros para PS.	102
Figura 5. 15 Histórico de μ^E em escala logarítmica.	103
Figura 5. 16 Histórico das curvas força-tempo.	104

Figura 5. 17 Curva força-deslocamento simulada e alvo para o PS.....	105
Figura 5. 18 Tensão deformação verdadeira para o PS.....	106
Figura 5. 19 Curva força-deslocamento simulada e alvo para o PLA.....	107
Figura 5. 20 Tensão deformação verdadeira para o PLA.....	108
Figura 5. 21 Histórico do erro quadrático para o PC.	110
Figura 5. 22 Curva força-deslocamento simulada e alvo para o PC.	111
Figura 5. 23 Tensão deformação verdadeira para o PC.	111
Figura 5. 24 Comportamento tridimensional do corpo de prova de PC.....	112
Figura 5. 25 Corpo de prova com entalhe (<i>Esquerda</i>). Malha do corpo de prova (<i>Direita</i>).....	113
Figura 5. 26 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PS).....	115
Figura 5. 27 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PC).	115
Figura 5. 28 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PC).	116
Figura 5. 29 Comportamento tridimensional do CP com entalhe (PC).....	117
Figura 5. 30 Placa engastada com punção rígido.....	118
Figura 5. 31 Configuração da placa em máximo deslocamento (<i>acima</i>). Configuração da placa após remoção do punção (<i>abaixo</i>).....	119
Figura 5. 32 Força versus deslocamento do punção.	120
Figura 5. 33 Evolução da tensão equivalente de von-Mises.	120
Figura 5. 34 Tubo engastado com punção semi-esférico.....	121
Figura 5. 35 Força versus deslocamento do punção para o caso do tubo.....	122
Figura 5. 36 Máxima tensão equivalente de von-Mises versus a máxima deformação plástica acumulada.	122
Figura 5. 37 Configuração do tubo em máximo deslocamento (<i>acima</i>). Configuração do tubo após remoção do punção (<i>abaixo</i>).....	123
Figura 5. 38 Dimensões da barra para torção.	124
Figura 5. 39 Malha na posição de referência.	124
Figura 5. 40 Barra na configuração de máxima rotação.	125
Figura 5. 41 Torque versus ângulo.	125
Figura 5. 42 Força axial versus ângulo.	126
Figura 5. 43 Máxima tensão de cisalhamento versus deformação cisalhante. .	126

LISTA DE QUADROS

Quadro 4. 1 Sequência de operações realizada pela rotina <i>usermat</i>	87
Quadro 4. 2 Rotina de minimização.	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 5. 1 Parâmetros materiais.	90
Tabela 5. 2 Condições de contorno para PS, PC e PLA.....	99
Tabela 5. 3 Parâmetros materiais calibrados para o PS.....	104
Tabela 5. 4 Parâmetros identificados para o PLA.	108
Tabela 5. 5 Parâmetros materiais identificados para o PC.	110
Tabela 5. 6 Deslocamento final e taxa de carregamento para corpo de prova com entalhe.....	114
Tabela 5. 7 Coeficiente de determinação para CP com entalhe	114

LISTA DE ABREVIATURAS

AIC – Akaike Information Criterion
B-BFGS – Bounded Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
CAE - *Computer-aided Engineering*
CAD - *Computer-aided Design*
CP – Corpo de Prova
FE – *Finite Element*
FEA - *Finite Element Analysis*
GPU - *Graphics Processing Unit*
MDF - Métodos de Diferenças Finitas
MEF – Método de Elementos Finitos
MSC - Mecânica dos Sólidos Computacional.
MVF - Método de Volumes Finitos
MOGA-II – Multi-Objective-Genetic-Algorithm
MSE – Mean Squared Error
NSGA-II – Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II
PC – Policarbonato
PIDO – Process integration and Design Optimization
PE - Polietileno
PLA – Poli-ácido-láctico
PMMA - Polimetilmetacrilato
PS – Poliestireno
PP - Polipropileno
SBR - Styrene Butadiene Rubber
SQP – Sequential Quadratic Programming

LISTA DE SÍMBOLOS

Alfabeto grego

Ω_o	Domínio de um corpo na configuração de referência
Ω	Domínio de um corpo na configuração deformada
Γ_o	Fronteira de um corpo na configuração de referência
Γ	Fronteira de um corpo na configuração deformada
χ	Mapeamento da posição do ponto na configuração material para a configuração deformada
ε	Tensor de deformação logarítmica
σ	Tensor de tensão de Cauchy
τ	Tensor de tensão de Kirchhoff
ρ	Massa específica na configuração deformada
ρ_o	Massa específica na configuração de referência
γ	Conjunto de variáveis internas
β	Multiplicador de Lagrange
π	Parâmetros livres para a calibração de força-deslocamento
π^{PS}	Parâmetros livres para a calibração de PS
π^{PC}	Parâmetros livres para a calibração de PC
π^{PLA}	Parâmetros livres para a calibração de PLA
μ	Módulo elástico do modelo de Hencky
μ_i, α_i	Constantes do modelo de Odgen
μ^E	Erro quadrático médio
φ^p	Parcela plástica do potencial de energia livre de Helmholtz
μ_i^p, α_i^p	Constantes do potencial plástico
σ_o^p	Tensão de escoamento
η	Viscosidade
λ_i	Autovalores dos tensores de deformação de Cauchy-Green
ε^m	Família de tensor de deformação da configuração deformada
Δt	Incremento de tempo
θ	Temperatura
σ_o^d	Parâmetro do modelo de Perzyna
κ	Magnitude da deformação volumétrica
δ_{ij}	Delta de Krönecker

Alfabeto latino

A	Força termodinamicamente conjugada a \mathbf{F}^i
b	Força de corpo na configuração deformada
\mathbf{B}	Tensor de Cauchy à esquerda
\mathbf{C}	Tensor de Cauchy à direita
\mathbf{D}	Tensor de taxa de deformação
E	Módulo de Young
\mathbf{E}	Tensor de deformação logarítmica na conf. deformada
e_i	Autovetores da família de tensores E^m
\mathbf{E}^m	Família de tensores de deformação na conf. deformada
\mathbf{F}	Tensor gradiente de deformação
$\mathbf{F}_{iso}, \hat{\mathbf{F}}$	Parcela isocórica do tensor gradiente de deformação
\mathbf{F}^{vol}	Parcela volumétrica do tensor gradiente de deformação
\mathbf{F}^P	Parcela plástica do tensor gradiente de deformação
\mathbf{F}^i	Parcela inelástica do tensor gradiente de deformação
H	Módulo de encruamento
\mathbf{I}	Tensor identidade de segunda ordem
\mathbf{I}	Tensor identidade de quarta ordem
j	Determinante do tensor gradiente de deformação
l_i	Autovetores da família de tensores ε^m
\mathbf{L}	Tensor gradiente de velocidade
K	Constante material do potencial volumétrico
m	Expoente nas famílias de tensores Lagrangiana e Euleriana
m_o	Constante do modelo de Perzyna
\mathbf{M}^{pr}	Autoprojeções do tensor de deformação preditor
n	Vetor normal a uma superfície arbitrária na conf. deformada
\mathbf{N}	Vetor normal a uma superfície arbitrária na conf. de ref.
\mathbf{P}	Tensor de Piola-Kirchhoff
q_i	Autovalores do tensor de taxa de deformação plástica
q	Deformação plástica acumulada
\dot{q}	Taxa de deformação plástica
\dot{q}_0	Constante do modelo de Perzyna
Q	Vetor de fluxo de calor
r^2	Coeficiente de determinação
\mathbf{R}	Tensor de rotação
s	Entropia
\mathbf{S}	Segundo tensor de Piola-Kirchhoff
\mathbf{S}^{vol}	Parcela volumétrica do segundo tensor de Piola-Kirchhoff

$\hat{\mathbf{S}}$	Parcela isocórica do segundo tensor de Piola-Kirchhoff
t	Tempo
\bar{t}	Força em uma superfície arbitrária na conf. deformada
\bar{T}	Força em uma superfície arbitrária na conf. de ref.
\mathbf{T}^c, T^d	Força termodinamicamente conjugada a z_k
u	Deslocamento
\mathbf{U}	Tensor de alongamento à direita
\mathbf{V}	Tensor de alongamento à esquerda
V_o	Volume na configuração de referência
v	Volume na configuração deformada
w	Potencial de deformação
\mathbf{W}	Tensor de vorticidade
W	Potencial de energia livre de Helmholtz
\hat{W}	Parcela isocórica do potencial de energia livre
W_{vol}	Parcela volumétrica do potencial de energia livre
\mathbf{x}	Vetor da posição do corpo na configuração deformada
\mathbf{X}	Vetor da posição do corpo na configuração de referência
z_k	Conjunto de variáveis internas

Caracteres especiais

β	Corpo de interesse.
\mathcal{C}	Tensor material de quarta ordem na configuração espacial.
\mathcal{C}	Tensor material de quarta ordem na configuração de referencia.
\mathcal{H}	Funcional de Hu-Washizu-Fraeijs
I	Potencial de energia interna
\mathcal{E}	Potencial de energia externa
\mathcal{R}	Energia gerada pelo sistema
\mathfrak{S}	Conjunto de variáveis de estado

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	25
1.1 OBJETIVOS.....	26
1.1.1 Objetivo Geral.....	26
1.1.2 Objetivos Específicos.....	27
1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO.....	27
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	29
2.1 FUNDAMENTOS DE MATERIAIS POLIMÉRICOS.....	29
2.1.1 Classificação dos Materiais Poliméricos.....	33
2.1.2 Propriedades Mecânicas dos Polímeros.....	34
2.1.3 Modelos Constitutivos para Polímeros.....	38
2.2 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA DO CONTÍNUO.....	39
2.2.1 Medidas de Deformação.....	40
2.2.2 Medidas de Tensão.....	47
2.2.3 Pares Conjugados de Potência de Deformação.....	50
2.2.4 Equação de Equilíbrio.....	50
2.2.5 Princípios Variacionais.....	52
2.2.6 Linearização do Princípio Variacional.....	54
2.2.7 Termodinâmica dos Meios Contínuos.....	56
3 MODELOS CONSTITUTIVOS.....	59
3.1 HIPERELASTICIDADE ISOTRÓPICA.....	62
3.1.1 Matriz Tangente.....	64
3.2 MODELO DE ELASTO-VISCOPLASTICIDADE.....	69
3.2.1 Potencial de Energia.....	69
3.2.2 Hipótese Cinemática.....	70
3.2.3 Solução do Problema Constitutivo Através de Minimização.....	74
4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL.....	83
4.1 FUNÇÃO PROGRAMÁVEL PELO USUÁRIO – UPF.....	83

5 RESULTADOS DO MODELO CONSTITUTIVO.....	89
5.1 PROBLEMA DE CISALHAMENTO.....	89
5.2 CURVAS DE FORÇA-DESLOCAMENTO PARA PS, PLA E PC.....	94
5.3 IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS VIA MÍNIMOS QUADRADOS.....	97
5.3.1 Identificação dos Parâmetros para Poliestireno.....	100
5.3.2 Identificação dos Parâmetros para Poli-ácido-láctico.....	106
5.3.3 Identificação dos Parâmetros para Policarbonato.....	108
5.4 VERIFICAÇÃO DO AJUSTE DE PARÂMETROS.....	112
5.5 APLICAÇÕES.....	118
5.5.1 Placa Engastada.....	118
5.5.2 Tubo Engastado.....	121
5.5.3 Torção Reversa de Eixo Circular.....	123
6 CONCLUSÃO.....	127
REFERÊNCIAS.....	129
ANEXO 1 – Tutorial para compilar a rotina usermat.....	135
ANEXO 2 – Utilizando o executável Ansys.exe compilado com a nova rotina <i>Usermat</i>.....	137
ANEXO 3 – Código APDL para inicializar as variáveis internas e informar os parâmetros materiais.....	139
ANEXO 4 – Exemplo da sub-rotina <i>Usermat</i> para o modelo hiperelástico de Neo-Hookean.....	141

1 INTRODUÇÃO

A área de concepção mecânica sofre uma constante demanda por menores tempos de projeto e custo reduzido de protótipo, a fim de inserir produtos no mercado com maior eficiência e competitividade. Em vista disso, métodos científicos, sejam experimentais ou numéricos, são incorporados nas fases de elaboração e avaliação de projeto. As aplicações se encontram principalmente nas indústrias de alta competitividade e tecnologia como os setores automotivos, aeronáutico, aeroespacial, óleo e gás, energia, dentre outros.

Nas últimas décadas as técnicas computacionais ganharam espaço na pesquisa e desenvolvimento devido ao crescimento da capacidade de processamento numérico e ao contínuo desenvolvimento de modelos de representação cada vez mais sofisticados. Em problemas de engenharia e em particular, os problemas vinculados à Mecânica do Contínuo, os sistemas são simulados numericamente via técnicas denominadas de CAE (*Computer-Aided Engineering*). As mesmas são baseadas nas diversos métodos de resolução aproximada de equações diferenciais (Diferenças Finitas-MDF, Volumes Finitos-MVF ou Elementos Finitos- MEF) assim como na adequada modelagem do fenômeno físico. Neste sentido, um dos aspectos essenciais na área de Mecânica do Contínuo e em particular na área de Mecânica dos Sólidos é o modelo matemático que descreve o comportamento do material. Malvern, 1969 aponta: “Materiais, especialmente em estado sólido, se comportam de uma maneira muito complexa quando todas as possibilidades de temperaturas e deformações são consideradas. Isso inviabiliza escrever uma equação ou conjunto de equações que descreva precisamente um material real sobre todo o domínio de comportamento”.

Dentre os diferentes materiais utilizados na engenharia, os polímeros enquadram-se num grupo particularmente complexo do ponto de vista de representação mecânica, dado que podem apresentar comportamentos bastante distintos quando submetidos a variações no seu contexto de aplicação: temperatura, taxa de deformação, história, amplitude e tipo de deformação, etc. Essa dependência origina uma difícil tarefa para a modelagem constitutiva destes materiais (Ames *et al*, 2009 ; Brassart, L. e Stainier, L., 2012). Assim, observam-se famílias de modelos constitutivos para atender diferentes fenômenos/características de comportamento como: hiperelasticidade, elastoplasticidade, viscoplasticidade, dano, acoplamento termomecânico, etc.

O uso de componentes feitos de materiais poliméricos tem se tornado importante nas últimas décadas. Muitas peças tradicionalmente feitas de metais e cerâmicos, por exemplo, foram substituídos por algum tipo de polímero devido à sua grande versatilidade de propriedades mecânicas e químicas aliadas à sua baixa densidade. Diferentes propriedades podem ser alcançadas através do controle das ligações secundárias entre espécies químicas presentes nesses materiais. Além disso, os parâmetros do processo de fabricação como velocidade de injeção e temperatura de moldagem podem influenciar nas propriedades finais desses materiais (Vieira, 2012). Para ilustrar, pode se citar algumas aplicações de polímeros como embalagens para alimentos, tubos e conexões, vidros de segurança, pára-choques automotivos, pneus, engrenagens, placas e parafusos para reconstrução óssea (Morita, 2006), colete a prova de balas (Frank e Brockmen, 2001), espumas para atenuação de ruídos, etc.

Os materiais poliméricos possuem comportamento, em geral, não linear e fortemente dependente da história das deformações. As não linearidades podem estar associadas a processos reversíveis (comportamento elástico não linear) ou irreversíveis (plasticidade, viscoplasticidade, dano, etc).

O presente trabalho toma como motivação tecnológica a modelagem do comportamento de polímeros termoplásticos, sendo que se concentra no estudo de um conjunto particular de modelos constitutivos capazes de representar um grupo importante de fenômenos mecânicos observados nestes materiais: hiperelasticidade, plasticidade e viscoplasticidade.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

A presente dissertação versa sobre o estudo, análise e implementação de uma família de modelos constitutivos hiperelásticos-viscoplásticos em regime de deformações finitas já estudados anteriormente por Vassoler, 2007 e Fancello *et al*, 2008 incluindo variação de volume no regime elástico.

1.1.2 Objetivos Específicos

A fim de alcançar o objetivo geral acima citado, propõe-se atingir os seguintes objetivos específicos:

- i. Estudo de uma família de modelos constitutivos variacionais, destacando a modelagem de dois fenômenos claramente presentes no comportamento de um grupo de termoplásticos: hiperelasticidade e viscoplasticidade.
- ii. Implementação do conjunto de modelos estudados na sub-rotina *usermat* do software comercial de elementos finitos *ANSYS Mechanical*.
- iii. Ajuste de parâmetros materiais através de técnicas inversas usando como alvo a curva de força-deslocamento gerada através do ensaio de tração realizados em alguns materiais poliméricos tradicionais: PS, PLA e PC.
- iv. Análise de geometrias de maior complexidade utilizando os parâmetros materiais encontrados através do ajuste de curvas.

1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO

No Capítulo 2 é realizada uma descrição dos materiais poliméricos em termos das espécies químicas presentes, microestrutura e propriedades mecânicas. Também são apresentados aspectos relevantes da mecânica do contínuo, com o objetivo de se estabelecer a notação do presente trabalho.

O modelo constitutivo é abordado no Capítulo 3, onde a formulação apresentada com detalhes é baseada nos trabalhos de Vassoler, 2007 e Fancello *et al* 2008. A implementação computacional na rotina *usermat* é mostrada no Capítulo 4, onde algumas relações em formato de taxas são estabelecidas a fim de se utilizar a formulação de equilíbrio do programa ANSYS em conjunto com o modelo constitutivo descrito no Capítulo 3.

O ajuste de parâmetros assim como resultados numéricos para alguns casos práticos estão descritos no Capítulo 5. Finalmente, no Capítulo 6 encontram-se as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 FUNDAMENTOS DE MATERIAIS POLIMÉRICOS

Polímeros são materiais, em sua maioria, de origem orgânica que tem como elemento principal em sua composição o carbono. Os primeiros polímeros a serem utilizados pelo homem foram os naturais como a madeira, a borracha e o algodão. Após a Segunda Guerra Mundial os polímeros sintéticos revolucionaram o campo dos materiais (Callister, 2009). Conforme Canevarolo, 2002, o desenvolvimento científico possibilitou entender a formação dos polímeros e iniciar a criação de uma diversidade muito grande desses materiais. A palavra polímero vem do grego “Poli” muitos e “Mero” partes, tendo como significado uma repetição de unidades principais (monômeros), no geral orgânicas, Painter, 1997. A Figura 2.1 apresenta alguns polímeros com os seus respectivos monômeros. Além disso, podem-se combinar diferentes unidades principais em uma mesma cadeia polimérica, gerando os chamados copolímeros, conforme apresentado na Figura 2.2.

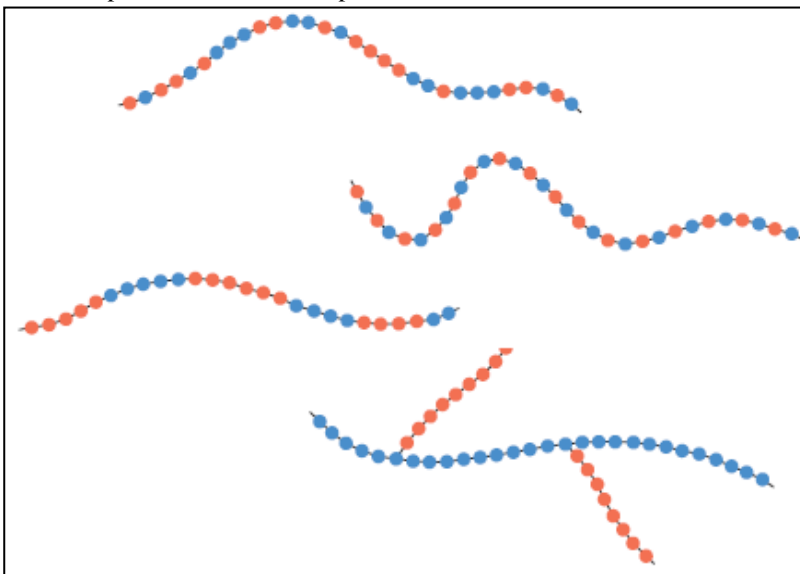
As propriedades dos polímeros não dependem exclusivamente do tipo de monômero e do número de repetições. A forma como as cadeias poliméricas estão ligadas entre si, resultando num arranjo tridimensional, também influencia nas propriedades finais. As técnicas de polimerização modernas permitem gerar diferentes tipos de ligações entre as macromoléculas como lineares, ramificada, reticulada e em rede, conforme ilustrado na Figura 2.3.

Figura 2. 1 Alguns tipos de polímeros com suas respectivas unidades principais.

Polímero	Unidade Principal
<i>Polietileno (PE)</i>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
<i>Poli-cloreto de Vinila (PVC)</i>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{Cl} \end{array}$
<i>Politetrafluoretileno (PTFE)</i>	$\begin{array}{c} \text{F} \quad \text{F} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{F} \quad \text{F} \end{array}$
<i>Polipropileno (PP)</i>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{CH}_3 \end{array}$
<i>Polimetilmetacrilato (PMMA)</i>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{CH}_3 \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{C}=\text{O} \quad \text{O}-\text{CH}_3 \end{array}$
<i>Nylon-66</i>	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \\ -\text{N}-\left[\text{C} \right]_6-\text{N}-\text{C}-\left[\text{C} \right]_4-\text{C}- \\ \quad \quad \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
<i>Polietileno Tereftalato (PET)</i>	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \quad \quad \quad \\ -\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{C}_2\text{H}_4-\text{O}- \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{O} \quad \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \end{array}$
<i>Policarbonato (PC)</i>	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{CH}_3 \quad \text{O} \quad \text{O} \quad \text{O} \\ \quad \quad \quad \quad \\ -\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{C}- \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{O} \quad \text{CH}_3 \quad \text{O} \quad \text{O} \quad \text{O} \end{array}$

Adaptado: Callister 2009.

Figura 2. 2 Diferentes combinações de unidades principais, onde as cores azul e vermelho representam diferentes tipos de monômeros.

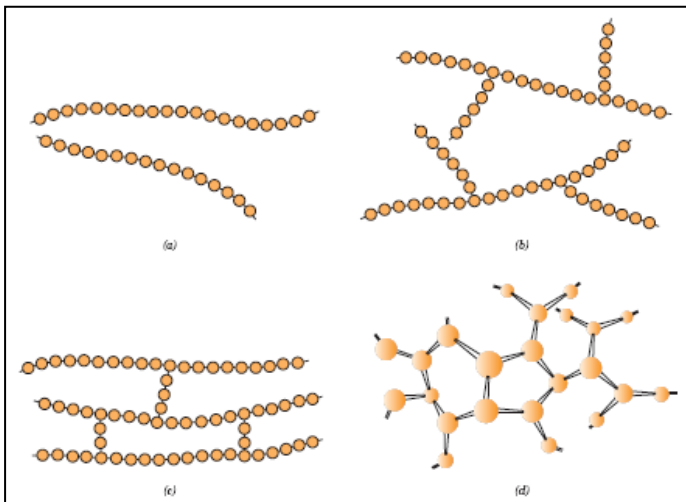


Fonte: Callister 2009.

As cadeias lineares, por exemplo, apresentam ligações fracas de van der Waals entre as macromoléculas, possibilitando o cisalhamento entre as mesmas. Os polímeros termoplásticos apresentam, em geral, esse tipo de ligação. As estruturas do tipo reticuladas e em rede, possuem ligações covalentes entre as macromoléculas dificultando o cisalhamento irreversível, sendo típicos de materiais elastoméricos.

A disposição tridimensional entre as cadeias é um fator importante a ser considerado nas propriedades finais dos polímeros. Em geral, materiais em estado sólido são classificados de acordo com a periodicidade em que os átomos estão posicionados um em relação aos outros. Quando o arranjo é repetitivo e ordenado o material é dito cristalino, em caso de uma distribuição não ordenada o material é considerado amorfo. Devido às grandes cadeias carbônicas dos polímeros, é praticamente impossível dispô-las de forma que elas gerem um arranjo periódico de longo alcance. Assim, esses materiais podem assumir estruturas completamente amorfas ou semicristalinas, sendo os esferulitos uma das estruturas mais importantes.

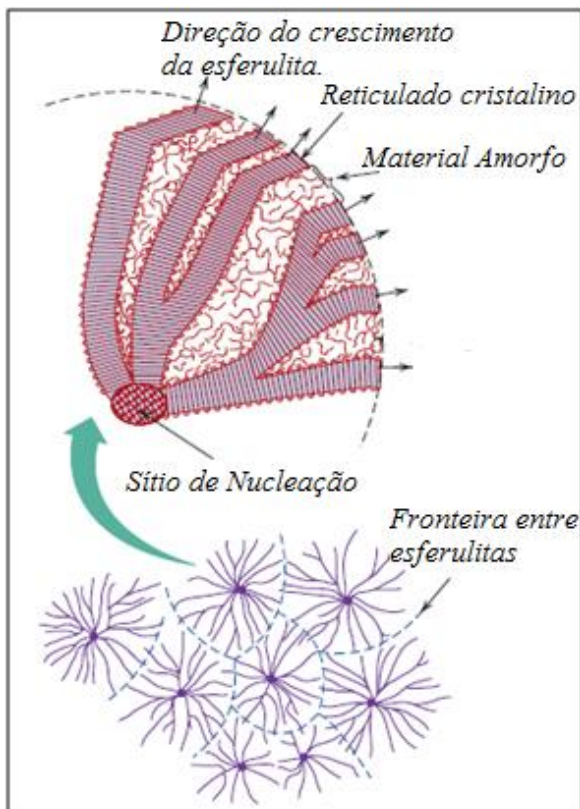
Figura 2. 3 a) Linear. b) Ramificada. c) Reticulada. d) Rede



Fonte: Callister 2009.

A distribuição e a morfologia dos esferulitos interferem diretamente nas propriedades dos polímeros. Essas estruturas são formadas por lamelas que partem radialmente do núcleo na forma de feixes. No início as lamelas, parte cristalina, são paralelas uma às outras, mas conforme crescem elas divergem, torcem e se ramificam, dando assim um formato esferulitizado. A parte amorfa do material fica entre as lamelas, conforme representação na Figura 2.4.

Figura 2. 4 Representação esquemática da esferulita.



Adaptado: Callister 2009.

2.1.1 Classificação dos Materiais Poliméricos

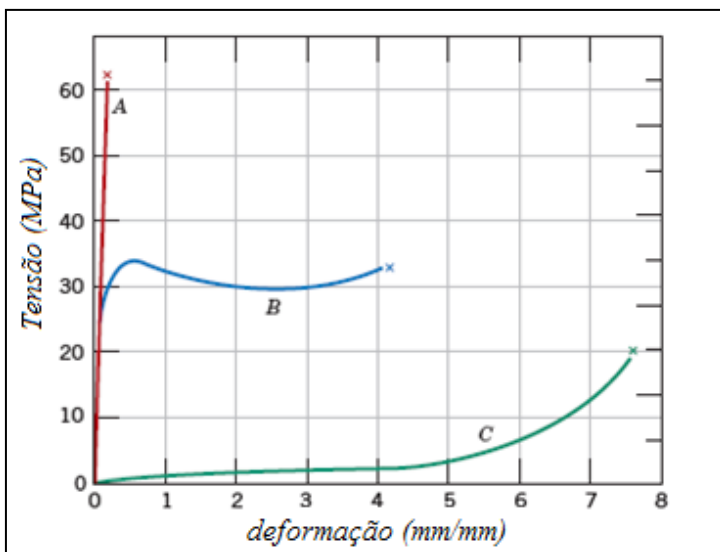
Existe uma variedade muito grande de polímeros, sendo assim uma maneira de tornar mais fácil o estudo desses materiais é dividi-los em classes. Os polímeros podem ser agrupados de acordo com a estrutura das cadeias, componentes químicos ou estado físico. No entanto, na área de engenharia mecânica e materiais são comumente classificados conforme o processo de fabricação. Segundo essa classificação tem-se dois ramos principais, os termoplásticos e termofixos. O último, como sugerido pelo nome, sofre uma reação química irreversível ao ser processado, impossibilitando que as peças fabricadas sejam remodeladas. Geralmente, as ligações covalentes entre

cadeias adjacentes são criadas através de altas temperaturas, num processo conhecido como vulcanização. Os elastômeros, resinas termoendurecíveis, como as baquelites e epóxis, fazem parte dessa classe de polímeros. Os termoplásticos são conhecidos por sua fácil moldabilidade e grande variedade de aplicações. Esse grupo possivelmente possui a maioria dos polímeros utilizados comercialmente. Devido ao grande número de combinações possíveis que o processo de polimerização pode alcançar, esses materiais possuem uma vasta gama de propriedades mecânicas e químicas. Podem variar desde completamente frágeis até materiais extremamente flexíveis. O Polietileno (PE), Polipropileno (PP), Poliestireno (PS), Policarbonato (PC), Polimetilmetacrilato (PMMA) e Poli-ácido-Lático (PLA) são exemplos de polímeros que por sua vez podem apresentar variações devido à presença de alguns aditivos. Diferentes dos termofixos, eles são capazes de serem remodelados após o processo de fabricação, possibilitando a reciclagem. Conseqüentemente os termoplásticos são excelentes materiais do ponto de vista econômico-ambiental desde que sejam descartados de maneira correta.

2.1.2 Propriedades Mecânicas dos Polímeros

Conforme mencionado anteriormente, os tipos de monômeros, a forma e o jeito como eles estão ligados definem as propriedades que o polímero possuirá, sejam elas físicas, químicas ou mecânicas. Por exemplo, pode se observar comportamentos bastante distintos da curva tensão deformação quando diferentes polímeros são ensaiados em tração, conforme ilustrado na Figura 2.5.

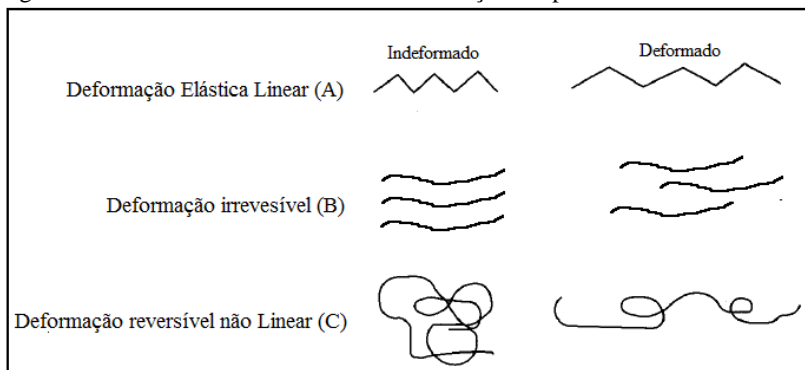
Figura 2. 5 A) Polímero frágil. B) Dúctil. C) Elastômero.



Fonte: Callister 2009.

As curvas A, B e C da Figura 2.5 representam três mecanismos distintos de acúmulo de energia interna no material. A curva A, típica de polímeros frágeis, como o Poliestireno (PS) ou Polimetil-metacrilato (PMMA) em temperatura ambiente, representa uma retenção de energia potencial elástica devido ao alongamento das cadeias poliméricas. Já a curva B possui um mecanismo similar a curva A, até determinada tensão (limite de escoamento). A partir desse ponto as cadeias começam a deslizar umas sobre as outras gerando um processo irreversível de endurecimento/amolecimento. Polímeros como o Polipropileno (PP), Polietileno (PE) e Policarbonato (PC) possuem esse tipo de comportamento a temperatura ambiente. As borrachas naturais ou as sintéticas como o SBR (Styrene Butadiene Rubber) possuem um comportamento similar ao da curva C. A energia de deformação é armazenada no sistema através da ordenação do emaranhado das cadeias poliméricas (Callister, 2009). Ao descarregar o componente, a energia acumulada nas cadeias é liberada, o que torna esse processo reversível. A Figura 2.6 ilustra os diferentes mecanismos em escala macromolecular.

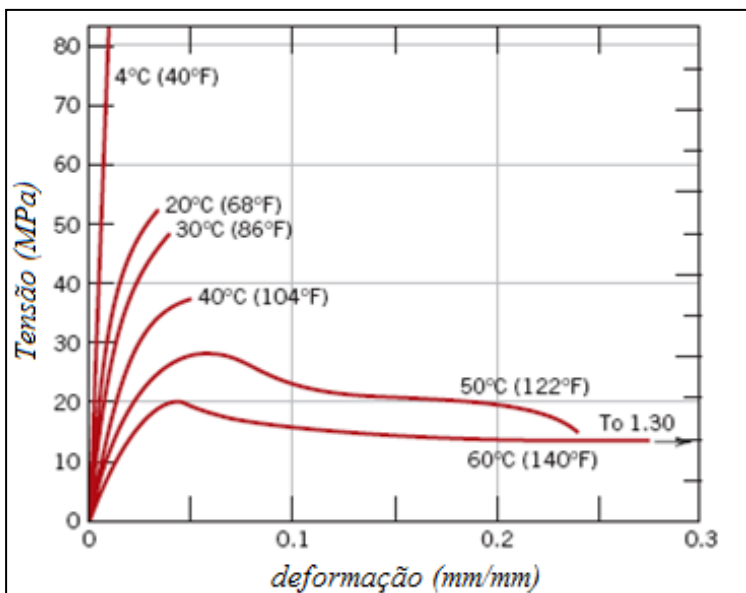
Figura 2. 6 Diferentes mecanismos de deformação em polímeros.



Adaptado: Brückner, 2001.

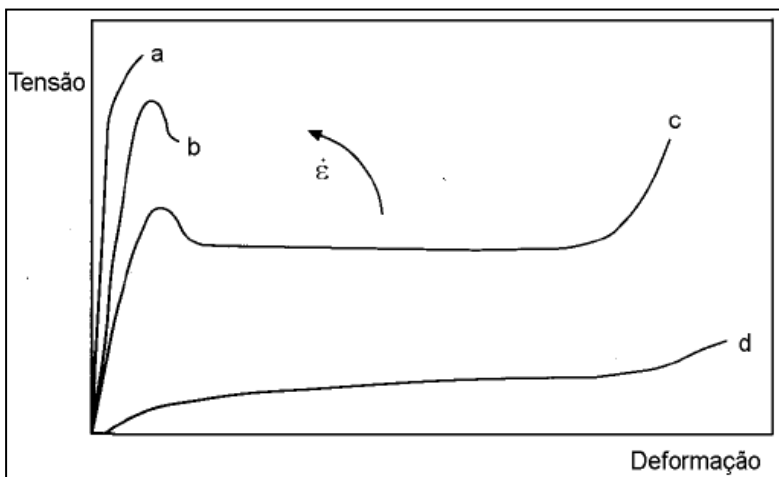
Os três mecanismos apresentados anteriormente são genéricos e podem estar presentes em maior ou menor grau em um determinado polímero dependendo de sua estrutura e composição química. Além disso, o mecanismo de deformação pode ser modificado com a temperatura ou com a taxa de deformação. A Figura 2.7 apresenta comportamentos distintos do PMMA para diferentes temperaturas. Já a Figura 2.8 representa a sensibilidade dos polímeros com a taxa de deformação. Essa alteração no comportamento ocorre, pois a mobilidade das macromoléculas é alterada devido a fenômenos microscópicos causados pela temperatura e taxa de deformação. Por exemplo, com o aumento da temperatura, existe um aumento da distância média entre as cadeias carbônicas, deixando as mesmas mais livres para se movimentarem, conseqüentemente o polímero fica mais flexível. Já com o aumento da taxa de deformação, diminui o tempo disponível para a organização das moléculas, gerando uma fragilidade no material. Dentre as classes apresentadas anteriormente, os termoplásticos são os que mais sofrem com esse tipo de variações de temperatura e taxa de deformação.

Figura 2. 7 Curva tensão/deformação de PMMA para diferentes temperaturas.



Fonte: Callister, 2009.

Figura 2. 8 Variação de comportamento em tração com diferentes taxas de deformação.



Fonte: Brückner, 2001.

2.1.3 Modelos Constitutivos para Polímeros

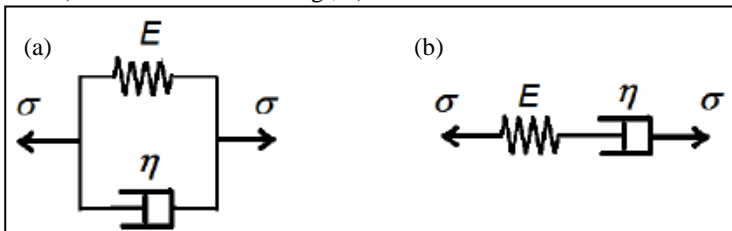
Nessa seção serão apresentados alguns modelos constitutivos básicos para a representação do comportamento dos polímeros. A construção de modelos constitutivos segue duas abordagens tradicionais: micromecânica (baseada na observação da microestrutura e estrutura molecular) e a macromecânica ou fenomenológica. Na micromecânica são observados os fenômenos que podem ocorrer em pequena escala, envolvendo a modelagem dos mecanismos de interações moleculares. A segunda técnica tenta correlacionar as tensões e deformações no interior do corpo com elementos de mecânica clássica como molas, amortecedores e blocos com atrito. Por exemplo, o modelo de Maxwell diz que a relação entre tensão e deformação pode ser determinada através da associação de uma mola e um amortecedor em série. A mola tem a característica elástica linear do material sendo caracterizada pela constante E da lei de Hooke. Já o amortecedor representa o comportamento viscoso dos materiais poliméricos. O amortecedor é descrito matematicamente pela lei de Newton, onde o mapeamento da taxa de cisalhamento para tensão de cisalhamento é feito através da constante de amortecimento, η . As relações citadas anteriormente estão mostradas nas equações abaixo:

$$\sigma = E\varepsilon \quad (2.1)$$

$$\tau = \eta \dot{\gamma} \quad (2.2)$$

Outros arranjos desses modelos simplificados podem ser feitos originando diferentes relações entre tensão e deformação. O modelo de Kelvin-Voigt associa esses dois componentes de forma paralela. A Figura 2.9 ilustra os modelos citados anteriormente.

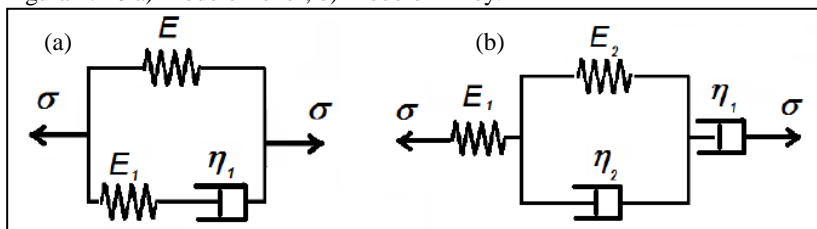
Figura 2. 9 a) Modelo de Kelvin-Voigt; b) Modelo de Maxwell.



Fonte: Vassoler, 2007.

Extensões dos modelos citados são feitas quando considerados mais de dois componentes em um arranjo espacial complexo. O modelo de Zener adiciona uma mola elástica linear ao braço viscoso do modelo de Kelvin-Voigt. Já o modelo de Alfrey faz uma combinação em série do modelo de Maxwell juntamente com Kelvin-Voigt. A Figura 2.10 ilustra os dois modelos citados anteriormente.

Figura 2. 10 a) Modelo Zener; b) Modelo Alfrey.



Fonte: Vassoler, 2007.

Pode-se ainda propor configurações ainda mais complexas, gerando uma infinidade de possibilidades e conseqüentemente inúmeras relações entre tensão e deformação. No entanto, a cada adição de um novo componente, amortecedor e/ou mola, corresponde a um novo parâmetro material a ser determinado via ensaio experimental, o que pode inviabilizar o completo conhecimento das constantes. Sistemas com muitos elementos podem acarretar em redundância, gerando uma relação não unívoca entre tensão e deformação. Por exemplo, podemos imaginar que um determinado material tenha um comportamento real linear entre tensão e deformação. Caso se modele esse material com diversas molas, existirão várias combinações entre os parâmetros que irão gerar o comportamento linear sem necessariamente anular a rigidez das diversas molas do sistema.

2.2 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA DO CONTÍNUO

Nesta seção, será apresentada uma revisão básica das principais grandezas físicas que governam a mecânica do contínuo, incluindo a notação para a lei constitutiva descrita no presente trabalho. Esse conteúdo é clássico e um texto completo sobre este tema pode ser encontrado em Malvern, 1969; Gurtin, 1981; Souza Neto *et al*, 2008.

2.2.1 Medidas de Deformação

Considere o corpo β num instante inicial t_0 , com volume V_0 , ocupando o espaço na configuração de referência Ω_0 e a fronteira Γ_0 ambos contidos no espaço euclidiano tridimensional. A posição de partícula p em t_0 é dada pelo vetor X , e após o movimento do corpo β , a partícula de interesse move-se para x . Admite-se a existência de uma função vetorial χ suficientemente suave que mapeia univocamente todo vetor X em Ω_0 para o vetor x na configuração deformada Ω com volume v , conforme Figura 2.11.

$$x = \chi(X, t) \quad (2.3)$$

A partir das configurações de referência e a deformada, pode-se definir o vetor deslocamento u , também apresentado na Figura 2.11.

$$u(X, t) = \chi(X, t) - X \quad (2.4)$$

Logo, para qualquer vetor dX definido a partir de X existe aproximação de Taylor tal que:

$$x(X + dX, t) = x(X, t) + dx = x(X, t) + \nabla_x \chi(X) dX + \mathbf{O}^2 \quad (2.5)$$

Fazendo o limite dos termos de ordem maior que dois tender a zero tem-se:

$$\lim_{dX \rightarrow 0} \mathbf{O}^2 = 0 \quad (2.6)$$

Então, se chega à expressão de mapeamento linear de dX em dx :

$$dx = \nabla_x \chi(X) dX \quad (2.7)$$

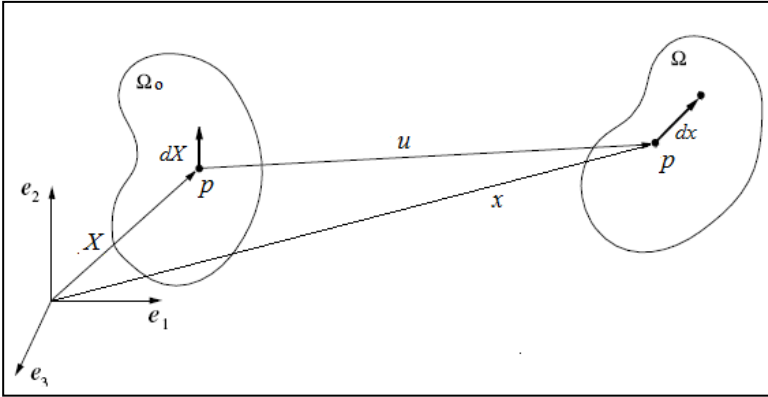
O tensor que faz esse mapeamento é conhecido como gradiente de deformação \mathbf{F} .

$$\mathbf{F} = \nabla_x \chi(X) = \frac{\partial x}{\partial X} \quad (2.8)$$

Recorrendo a equação 2.4 é possível expressar o gradiente de deformação em termos do deslocamento, u .

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \quad (2.9)$$

Figura 2. 11 Movimento de um corpo.



Deformação isocórica e volumétrica

A variação de volume do corpo β na configuração deformada em relação à configuração de referência pode ser calculada através do determinante do gradiente de deformação (2.10).

$$J = \frac{dv}{dV_o} = \det(\mathbf{F}) \quad (2.10)$$

Quando o processo de deformação preserva o volume inicial do corpo β , a deformação é dita isocórica, e o determinante do gradiente de deformação \mathbf{F} é igual à unidade:

$$J = \det(\mathbf{F}_{iso}) = 1 \quad (2.11)$$

Quando o processo de deformação é exclusivamente volumétrico o gradiente de deformação pode ser representado por:

$$\mathbf{F} = \kappa \mathbf{I} \quad (2.12)$$

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

Qualquer processo de deformação tem uma contribuição volumétrica e isocórica, sendo que é possível expressar o gradiente de deformação através dessas contribuições da seguinte forma:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{iso} \mathbf{F}_{vol} = \mathbf{F}_{vol} \mathbf{F}_{iso} \quad (2.13)$$

A expressão 2.13 é a decomposição multiplicativa das deformações volumétricas e isocóricas, sendo essas representadas pelas expressões:

$$\mathbf{F}_{vol} = (\det \mathbf{F})^{\frac{1}{3}} \mathbf{I} \quad (2.14)$$

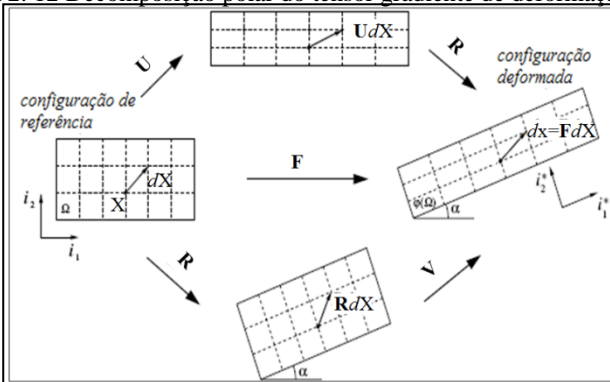
$$\mathbf{F}_{iso} = (\det \mathbf{F})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} \quad (2.15)$$

A expressão 2.15 tem a propriedade apresentada pela expressão 2.11.

Decomposição Polar

A transformação do vetor $d\mathbf{X}$ na posição de referência para o vetor na configuração deformada $d\mathbf{x}$ pode ser dividida em duas etapas. O vetor $d\mathbf{X}$ sofre primeiro uma rotação \mathbf{R} e depois um alongamento \mathbf{U} chegando em $d\mathbf{x}$. De forma equivalente, chega-se no mesmo resultado de configuração deformada ao se definir alongamento \mathbf{V} e posterior rotação \mathbf{R} . A Figura 2.12 ilustra esse processo.

Figura 2. 12 Decomposição polar do tensor gradiente de deformação.



Adaptado: Souza Neto *et al*, 2008.

A decomposição do tensor gradiente de deformação em rotação e alongamento é conhecida como decomposição polar. Matematicamente essa relação é expressa em (2.16),

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad (2.16)$$

onde \mathbf{R} é o tensor *rotação*, \mathbf{U} é o tensor de *alongamento à direita*, \mathbf{V} o tensor de *alongamento à esquerda*. Os tensores \mathbf{U} e \mathbf{V} podem ser obtidos através das relações abaixo:

$$\mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{C}} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{B}} \quad (2.18)$$

O tensor \mathbf{C} é denominado de tensor de *Cauchy Green à direita* e o tensor de \mathbf{B} é denominado de tensor de *Cauchy Green à esquerda*. Os tensores de deformação são funções do tensor \mathbf{F} , conforme (2.19) e (2.20).

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{V}^2 = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \quad (2.20)$$

Os tensores \mathbf{C} e \mathbf{B} são ambos tensores simétricos, positivos definidos, de posto três, sendo sempre possível representá-los através dos seus valores e vetores próprios:

$$\mathbf{C} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \mathbf{l}_i \otimes \mathbf{l}_i \quad (2.21)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (2.22)$$

Como o tensor de rotação \mathbf{R} é ortogonal, o mesmo tem a seguinte propriedade: $\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^T\mathbf{R} = \mathbf{I}$. Dessa forma, os tensores \mathbf{U} e \mathbf{V} possuem os mesmos autovetores de \mathbf{C} e \mathbf{B} , respectivamente:

$$\mathbf{U} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{l}_i \otimes \mathbf{l}_i \quad (2.23)$$

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (2.24)$$

Os autovetores de \mathbf{U} e \mathbf{V} definem respectivamente as direções principais Lagrangiana e Euleriana. Calculados os tensores de *alongamento*, o tensor de *rotação* \mathbf{R} é facilmente obtido através da resolução do sistema linear $\mathbf{F}=\mathbf{R}\mathbf{U}=\mathbf{V}\mathbf{R}$.

$$\mathbf{R} = \mathbf{F}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{F} \quad (2.25)$$

O tensor *rotação* \mathbf{R} tem a propriedade de mapear as direções principais Lagrangeana nas direções principais Eulerianas:

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{R}\mathbf{l}_i \quad (2.26)$$

Tensores de deformação Lagrangeanos e Eulerianos

Para a definição da medida de deformação de Green-Langrange considera-se primeiramente o quadrado dos vetores $d\mathbf{x}$ e $d\mathbf{X}$ na configuração de referência e deformada, respectivamente:

$$\|d\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{F}d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F}d\mathbf{X} = \mathbf{C}d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (2.27)$$

$$\|d\mathbf{X}\|^2 = d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = \mathbf{I}d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (2.28)$$

A diferença entre o quadrado da norma dos vetores $d\mathbf{x}$ e $d\mathbf{X}$ pode ser expressa em termos do tensor de Cauchy Green à direita e do tensor identidade de segunda ordem conforme expressão abaixo:

$$\|d\mathbf{x}\|^2 - \|d\mathbf{X}\|^2 = (\mathbf{C} - \mathbf{I})d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad (2.29)$$

Portanto, o tensor de Green Lagrange é definido como:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u})^T + (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u})^T \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}) \quad (2.30)$$

Ou em notação indicial:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) \quad (2.31)$$

Outra forma de apresentar o tensor de Green-Lagrange é através da decomposição espectral:

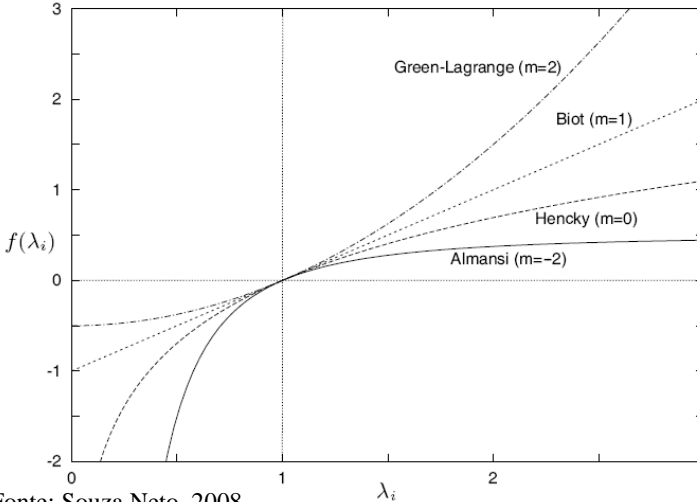
$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\lambda_i^2 - 1) \mathbf{l}_i \otimes \mathbf{l}_i \quad (2.32)$$

Onde os vetores próprios \mathbf{l}_i são conhecidos como a tríade de Lagrange. Existe uma família de tensores que tem como base essa tríade, conforme apresentado abaixo:

$$\mathbf{E}^m = \begin{cases} \frac{1}{m} (\mathbf{U}^m - \mathbf{I}) & m \neq 0 \\ \ln[\mathbf{U}] & m = 0 \end{cases} \quad (2.33)$$

A Figura 2.13 ilustra a relação entre os alongamentos principais λ com as deformações de Lagrange para valores diferentes de m .

Figura 2. 13 Medidas de deformação Lagrangeana para diferentes valores de m .



Fonte: Souza Neto, 2008.

Os autovetores do tensor de Cauchy-Green à esquerda formam a tríade de Euler. A família dos tensores de Lagrange representadas na base de Euler formam uma outra família de tensores na configuração deformada.

$$\boldsymbol{\varepsilon}^m = \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{V}^m - \mathbf{I}) & m \neq 0 \\ \ln[\mathbf{V}] & m = 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

Utilizando a expressão 2.26 pode se mostrar que tensores de deformação de Lagrange podem ser mapeados para os tensores de deformação de Euler através da relação:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^m = \mathbf{R}\mathbf{E}^m\mathbf{R}^T \quad (2.35)$$

Tensor gradiente espacial de velocidade

O tensor gradiente espacial de velocidade é definido por:

$$\mathbf{L} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} \quad (2.36)$$

Aplicando a regra da cadeia pode-se estabelecer a relação do tensor \mathbf{L} com o tensor gradiente de deformação.

$$\mathbf{L} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{x}} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{X}} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \quad (2.37)$$

É comum se decompor de maneira aditiva o tensor \mathbf{L} em uma parte simétrica \mathbf{D} e uma parte antissimétrica \mathbf{W} :

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (2.38)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \quad (2.39)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \quad (2.40)$$

A parte simétrica do tensor gradiente de deformação \mathbf{D} é chamada tensor de taxa de deformação e a parte antissimétrica \mathbf{W} é o tensor vorticidade.

Note que devido à simetria de \mathbf{D} , este admite decomposição espectral em autovalores e autovetores:

$$\mathbf{D} = \sum_{i=1}^3 d_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (2.41)$$

2.2.2 Medidas de Tensão

Até o presente momento foram mostrados aspectos cinemáticos sobre as deformações dos corpos. No entanto, para uma descrição completa da dinâmica do corpo β , é necessário incorporar as forças que agem sobre ele e como as mesmas são transmitidas ao longo do meio contínuo.

Tensor de Tensão de Cauchy

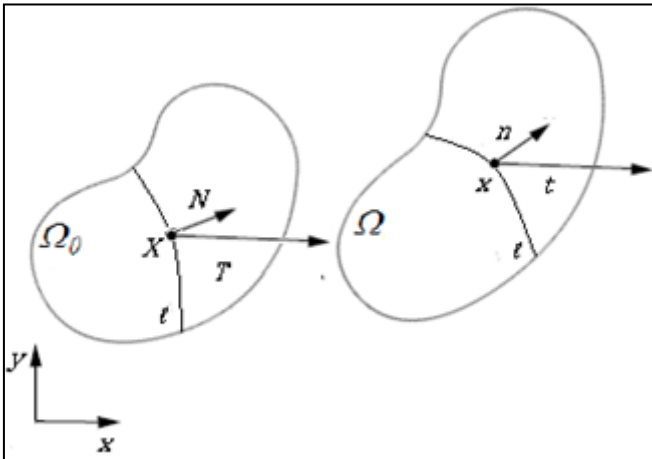
Considere o corpo β na configuração deformada Ω . Considere uma superfície arbitrária ℓ passando pelo ponto x , e que \mathbf{n} seja o vetor normal à ℓ no ponto x , conforme mostrado na Figura 2.14. No ponto estudado, existe um vetor de força por unidade de área \mathbf{t} , tal que mantém o lado interno de β cortado por ℓ em equilíbrio. O teorema de Cauchy, um dos mais fundamentais na mecânica dos meios contínuos, garante a existência de um tensor de segunda ordem (operador linear) tal que mapeia o vetor \mathbf{n} no vetor de força por unidade de área \mathbf{t} .

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \quad (2.42)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensão de Cauchy, o qual tem a propriedade de simetria.

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad (2.43)$$

Figura 2. 14. Forças de tração na configuração de referência e deformada.



O tensor de Cauchy também é conhecido como tensor de tensão verdadeira. Uma prova formal sobre o teorema de Cauchy pode ser encontrada em Gurtin, 1981.

Tensor de Kirchhoff

Outra medida importante de tensão é o tensor de Kirchhoff (2.44), o qual é definido simplesmente através da multiplicação do tensor de Cauchy pela variação de volume J (2.10):

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} \quad (2.44)$$

Como o tensor de tensão de Cauchy o tensor de Kirchhoff também é simétrico e conseqüentemente ambos permitem decomposição espectral.

Primeiro e Segundo tensor de Piola-Kirchhoff

Diferente do tensor de Cachy e de Kirchhoff os quais foram definidos na configuração deformada, o tensor de Piola-Kirchhoff é definido na posição de referência Ω_0 . Analogamente às grandezas definidas na configuração deformada, define-se uma superfície ℓ tal que corta o corpo β na configuração indeformada passando por X , com vetor normal N . Sendo assim, o tensor de Piola-Kirchhoff exerce o mesmo

papel que o tensor de Cauchy aplicado a configuração de referência. Ou seja, o tensor de Piola-Kirchhoff mapeia o vetor normal \mathbf{N} no vetor de força \mathbf{T} , conforme expressão:

$$\mathbf{T} = \mathbf{P}\mathbf{N} \quad (2.45)$$

Considerando que a força df que age em ambas as configurações é a mesma, pode-se gerar uma relação entre o tensor de Cauchy e de Piola-Kirchhoff

$$df = \mathbf{P}N dA = \boldsymbol{\sigma} n da \quad (2.46)$$

onde da representa a área infinitesimal na configuração deformada e dA representa a área infinitesimal na configuração de referência. Utilizando a relação de Nanson, chega-se na seguinte relação entre os tensores de Cauchy e Piola-Kirchhoff:

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad (2.47)$$

Diferentemente do tensor de Cauchy, o tensor de Piola-Kirchhoff é geralmente não simétrico. Por esta razão, define-se o Segundo Tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} , como:

$$\frac{df_o}{dA} = \mathbf{S}\mathbf{N} \quad (2.48)$$

onde df_o é uma força fictícia que age sobre área deformada com a mesma relação de mapeamento entre dx e dX .

$$df = \mathbf{F}df_o \quad (2.49)$$

Utilizando as expressões (2.46), (2.48) e (2.49) chega-se na seguinte relação entre o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff e o segundo tensor de Piola-Kirchhoff.

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} \quad (2.50)$$

Substituindo (2.47) em (2.50) pode-se mostrar que o tensor S é simétrico. Devido a essa propriedade o segundo tensor de Piola-Kirchhoff pode ser descrito em termos de sua decomposição espectral,

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^3 s_i \mathbf{l}_i^* \otimes \mathbf{l}_i^* \quad (2.51)$$

Onde s_i e \mathbf{l}_i^* são os valores e vetores próprios de S respectivamente. Note que para materiais isotrópicos, objeto de estudo do presente trabalho, os vetores próprios de S coincidem com os vetores próprios do tensor de deformação de Green-Lagrange.

2.2.3 Pares Conjugados de Potência de Deformação

A potência de deformação é definida através de pares conjugados de tensão e taxa de deformação (Holzapfel, 2000). Logo, para cada medida de tensão ha uma medida de deformação tal que gera a mesma potência de deformação no volume do corpo β . As expressões abaixo apresentam alguns desses pares:

$$w = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} dV = \int_{\Omega_o} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} dV_o = \int_{\Omega_o} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^{(2)} dV_o \quad (2.52)$$

Devido a relação entre o tensor de Green-Lagrange e o tensor de Cauchy-Green à direita é possível escrever a potencia de deformação como:

$$w = \int_{\Omega_o} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} dV_o \quad (2.53)$$

2.2.4 Equação de Equilíbrio

A conservação de momento no corpo β na configuração deformada pode ser expressa matematicamente através do seguinte conjunto de equações diferenciais parciais e condições de contorno:

$$\begin{aligned}
\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} &= \rho \ddot{\mathbf{u}} & \text{em } \Omega \\
\bar{\mathbf{t}} &= \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} & \text{em } \Gamma_f \\
\mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} & \text{em } \Gamma_u
\end{aligned} \tag{2.54}$$

onde \mathbf{b} representa as forças de corpo, $\bar{\mathbf{t}}$ é um vetor de força por unidade de área aplicado no contorno Γ_f , e \mathbf{u} é o campo de deslocamento prescrito na fronteira Γ_u . Para problemas em equilíbrio estático ou casos onde as forças inerciais são desprezíveis quando comparadas com as forças de corpo e superfície, o termo da direita presente na primeira equação de (2.54) é nulo:

$$\begin{aligned}
\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} &= 0 & \text{em } \Omega \\
\bar{\mathbf{t}} &= \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} & \text{em } \Gamma_f \\
\mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} & \text{em } \Gamma_u
\end{aligned} \tag{2.55}$$

O conjunto de equações apresentado anteriormente deve ser satisfeito ponto a ponto em \mathcal{B} , e por essa condição a relação (2.55) é conhecida como forma forte da conservação de momento linear. Outra forma comum de se expressar o equilíbrio é através da forma integral ou forma fraca:

$$\int_{\Omega} [\boldsymbol{\sigma} : \nabla \delta \mathbf{x} - \mathbf{b} \delta \mathbf{x}] dv - \int_{\Gamma} \mathbf{t} \delta \mathbf{x} da = 0, \quad \forall \delta \mathbf{x} \in \mathcal{G} \tag{2.56}$$

onde

$$\mathcal{G} = \{ f : \Omega \rightarrow \mathcal{U} \mid f = 0 \text{ em } \Gamma_u \} \tag{2.57}$$

De forma equivalente, pode-se definir o conjunto de equações de conservação de momento linear na configuração de referência:

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{P} + \mathbf{b}_o &= \rho_o \ddot{\mathbf{u}} & \text{em } \Omega_o \\
\mathbf{T} &= \mathbf{P} \mathbf{N} & \text{em } \Gamma_{of} \\
\mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}}_o & \text{em } \Gamma_{ou}
\end{aligned} \tag{2.58}$$

onde \mathbf{b}_o representa as forças de corpo na configuração de indeformada, \mathbf{T} representa as forças por unidade de área na região de fronteira Γ_{of}^1 e, \mathbf{u} é o campo de deslocamento no contorno Γ_{ou}^2 . Desprezando as forças inerciais, a conservação de momento na configuração de referência pode ser apresentada na formulação integral como:

$$\int_{\Omega_o} [\mathbf{P} : \nabla \delta \mathbf{x} - \mathbf{b}_o \delta \mathbf{x}] dV_o - \int_{\Gamma} \mathbf{T} \delta \mathbf{x} dA = 0, \quad \forall \delta \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (2.59)$$

onde

$$\mathcal{V} = \{ f : \Omega \rightarrow \mathcal{U} \mid f = 0 \text{ em } \Gamma_{ou} \} \quad (2.60)$$

Note que a equação (2.55), exceto pela condição de contorno em Γ_{ou} , não possui qualquer restrição em termos cinemáticos.

2.2.5 Princípios Variacionais

Frequentemente as equações de equilíbrio dinâmico ou estático são apresentadas na sua forma diferencial (forte) ou integral (fraca). Uma abordagem alternativa as citadas anteriormente é a utilização de princípios variacionais. Postula-se a existência de um funcional \mathcal{H} de maneira tal que as condições de estacionariedade em relação aos seus argumentos fornecem as equações que governam o problema. Como exemplo seja o potencial de Hu-Washizu-Fraeijs de Vaeubeke (Stainier 2006), definido pela expressão abaixo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{P}) = & \int_{\Omega_o} [W(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) + \mathbf{P}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} - \mathbf{F})] dV_o \\ & - \int_{\Omega_o} \rho_o \mathbf{b}_o \mathbf{x} dV_o - \int_{\Gamma_{of}} \mathbf{T} \mathbf{x} dA \end{aligned} \quad (2.61)$$

O funcional \mathcal{H} depende de três campos independentes \mathbf{x} , \mathbf{F} e \mathbf{P} , que são a posição do corpo na posição deformada, o gradiente de deformação e o

¹ Γ_{of} – parte da fronteira Γ onde a força é prescrita

² Γ_{ou} – parte da fronteira Γ onde o deslocamento é prescrito.

primeiro tensor de Piola-Kirchhoff, respectivamente. O campo W representa a energia livre acumulada no corpo β . A primeira variação de \mathcal{H} em relação aos seus argumentos fornece as equações:

$$\begin{aligned} D[\mathcal{H}]\delta\mathbf{x} = \int_{\Omega_o} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x} dV_o \\ - \int_{\Omega_o} \rho_o \mathbf{b}_o \delta\mathbf{x} dV_o - \int_{\Gamma_{of}} \mathbf{T} \delta\mathbf{x} dA = 0 \quad \forall \delta\mathbf{x} \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$D[\mathcal{H}]\delta\mathbf{F} = \int_{\Omega_o} \left(2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} - \mathbf{P} \right) \delta\mathbf{F} dV_o = 0 \quad \forall \delta\mathbf{F} \in \mathcal{V}' \quad (2.63)$$

$$D[\mathcal{H}]\delta\mathbf{P} = \int_{\Omega_o} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} - \mathbf{F}) \delta\mathbf{P} dV_o = 0 \quad \forall \delta\mathbf{P} \in \mathcal{V} \quad (2.64)$$

A expressão (2.62) é a conservação de momento linear na forma integral; (2.63) define a relação entre a cinemática do corpo β e o campo de tensões (lei constitutiva) enquanto (2.64) fornece a condição de compatibilidade cinemática. Note que o tensor de Piola-Kirchhoff em (2.61) age como multiplicador de Lagrange na condição de compatibilidade. Caso as relações constitutivas e de compatibilidade sejam satisfeitas a priori, isto é,

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad (2.65)$$

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} \quad (2.66)$$

é possível simplificar o potencial \mathcal{H} de forma que este dependa apenas do campo \mathbf{x} :

$$\mathcal{H}^P(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_o} W(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) dV_o - \int_{\Omega_o} \rho_o \mathbf{b}_o \mathbf{x} dV_o - \int_{\Gamma_{of}} \mathbf{T} \mathbf{x} dA = 0 \quad (2.67)$$

O funcional \mathcal{H}^P é denominado energia potencial total em β . Tomando a derivada de Gâteaux em (2.67) em relação a \mathbf{x} , e aplicando a condição de estacionariedade equivalente à (2.62), pode-se recuperar a formulação fraca de conservação de momento linear na configuração de referência (2.68), incluindo a lei constitutiva para o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff.

$$\int_{\Omega_o} [\mathbf{P} : \nabla \delta \mathbf{x} - \mathbf{b}_o \delta \mathbf{x}] dV_o - \int_{\Gamma} \mathbf{T} \delta \mathbf{x} dA = 0, \quad \forall \delta \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (2.68)$$

2.2.6 Linearização do Princípio Variacional

O processo de minimização do potencial \mathcal{H} geralmente resulta numa equação não linear em relação ao campo posição \mathbf{x} (2.62). A não linearidade no geral é vinda de contribuições geométricas e do material, Holzapfel, 2000. Devido à dificuldade de resolver (2.68) analiticamente são necessários métodos de aproximação numérica como o *MEF* em conjunto com o método de Newton-Raphson. Sendo assim, a solução do problema não linear é obtida através de uma seqüência de problemas lineares. Portanto, com o objetivo de linearizar (2.62), a energia será dividida em duas contribuições: interna I e externa \mathcal{E} .

$$I(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_o} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{x} dV_o \quad (2.69)$$

$$\mathcal{E}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_o} \rho_o \mathbf{b}_o \delta \mathbf{x} dV_o + \int_{\Gamma_{of}} \mathbf{T} \delta \mathbf{x} dA \quad (2.70)$$

Para simplificar, a parcela de energia externa \mathcal{E} é considerada independente do movimento do corpo β . Logo, a parcela de energia interna I é a única que necessita da linearização. Da mesma forma que existem pares conjugados de potência presentes em (2.52) há também pares conjugados que resultam na mesma energia interna:

$$I(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_o} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{x} dV_o = \int_{\Omega_o} \mathbf{S} : \delta \mathbf{E} dV_o = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \mathbf{e} dv \quad (2.71)$$

Deve se lembrar que tanto o segundo tensor de Piola-Kirchhoff, \mathbf{S} , como o tensor de deformações Lagrangeano, \mathbf{E} , dependem do campo de

deslocamentos. Portanto tomando a derivada de Gateaux de (2.71) e após algumas simplificações chega-se em:

$$D[I]\Delta\mathbf{x} = \int_{\Omega_0} \left(\underbrace{\nabla_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x} : \nabla_{\mathbf{x}}\Delta\mathbf{x}\mathbf{S}}_{K_{geo}} + \underbrace{\mathbf{F}^T\nabla_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x} : \mathcal{C} : \mathbf{F}^T\nabla_{\mathbf{x}}\Delta\mathbf{x}}_{K_{mat}} \right) dV_o \quad (2.72)$$

Onde

$$\mathcal{C} = \frac{\partial\mathbf{S}}{\partial\mathbf{E}} = 2 \frac{\partial\mathbf{S}}{\partial\mathbf{C}} \quad (2.73)$$

O primeiro termo de (2.72), depende somente do estado atual de tensão, é chamado de contribuição geométrica da matriz tangente. Já o segundo termo representa a contribuição material da equação de equilíbrio linearizada.

O mesmo processo realizado na versão material da equação de equilíbrio pode ser executado para se chegar ao formato de equilíbrio linearizado na configuração de referência:

$$D[I]\Delta\mathbf{x} = \int_{\Omega_0} \left(\nabla_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x} : \nabla_{\mathbf{x}}\Delta\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F}^T\nabla_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x} : \mathcal{c} : \mathbf{F}^T\nabla_{\mathbf{x}}\Delta\mathbf{x} \right) dV_o \quad (2.74)$$

É possível mapear as variáveis \mathbf{S} e \mathcal{C} definidas na configuração de referência para as variáveis $\boldsymbol{\sigma}$ e \mathcal{c} definidas na posição deformada através da transformação de Piola:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{J} F_{ia} S_{ab} F_{jb} \quad (2.75)$$

$$c_{ijkl} = \frac{1}{J} F_{ia} F_{jb} c_{ABCD} F_{kc} F_{ld} \quad (2.76)$$

O tensor de quarta ordem espacial \mathcal{c} mapeia o tensor taxa de deformação \mathbf{D} na taxa do tensor de Cauchy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ (Gurtin *et al*, 2009), isso é:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathcal{c}\mathbf{D} \quad (2.77)$$

Abordagens mais detalhadas da linearização do princípio variacional podem ser obtidas em Holzapfel, 2000; Noels, 2004; Stainer 2006; Gurtin *et al*, 2009.

2.2.7 Termodinâmica dos Meios Contínuos

As expressões (2.62), (2.63) e (2.64) não devem violar os princípios da termodinâmica. Tais leis servirão como restrições adicionais no princípio variacional (2.61) gerando conjunto de campos energeticamente admissíveis.

Primeira Lei da Termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica prevê a conservação de energia em um sistema fechado. A taxa de energia interna e por unidade de volume deve se igualar a potência mecânica introduzida no sistema mais o calor trocado no contorno juntamente com a energia produzida. Matematicamente a primeira lei pode ser expressa na forma de taxas na configuração de referência como (Gurtin *et al* 2009):

$$\dot{e} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} + \mathcal{R} - \text{Div}(\mathbf{Q}) \quad (2.78)$$

onde \mathcal{R} é a energia gerada no sistema e $\text{Div}(\mathbf{Q})$ é o calor trocado nas fronteiras.

Segunda Lei da Termodinâmica

O balanço energético apresentado na primeira lei não prevê ordem nas transformações de energia. A segunda lei postula a existência de uma variável de estado s , chamada de densidade entropia, que limita as direções em que certas conversões podem ocorrer. Fisicamente a entropia pode ser definida como uma medida do grau de desordem microscópico do sistema. A forma local da segunda lei é:

$$\dot{s} + \text{Div}\left(\frac{\mathbf{Q}}{\theta}\right) - \frac{\mathcal{R}}{\theta} \geq 0 \quad (2.79)$$

onde θ é a temperatura do sistema considerado.

Desigualdade de Clausius-Duhem

A primeira e a segunda lei podem ser unidas em uma única inequação:

$$\dot{s} + \text{Div}\left(\frac{\mathbf{Q}}{\theta}\right) - \frac{1}{\theta}(\dot{e} - \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} + \text{Div}(\mathbf{Q})) \geq 0 \quad (2.80)$$

Ao se introduzir o potencial de energia livre de Helmholtz (por unidade de volume de referência) como:

$$W = e - \theta s \quad (2.81)$$

chega-se na inequação conhecida como desigualdade de Clausius-Duhem:

$$(\dot{W} + \dot{\theta}s) - \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\nabla_x \theta}{\theta} \leq 0 \quad (2.82)$$

Para problemas puramente mecânicos, enfoque do presente trabalho, o fluxo de calor é considerado nulo e a temperatura é admitida constante. Assim, a inequação (2.82) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{D} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{W} \geq 0 \quad (2.83)$$

A expressão (2.83) representa uma restrição a ser satisfeita entre os campos de tensão, deformação e taxa de energia livre. Definindo o termo da esquerda da inequação como densidade de dissipação $\mathcal{D} \geq 0$, a expressão (2.83) tem a interpretação física que a dissipação do sistema não deve ser negativa. Para um processo conservativo \mathcal{D} é nulo.

3 MODELOS CONSTITUTIVOS

O presente trabalho está focado numa descrição puramente mecânica de materiais (gradiente térmico nulo e temperatura constante no tempo). Admite-se que o estado termodinâmico no instante t pode ser completamente definido pelos valores de um conjunto de variáveis denominadas variáveis de estado, classificadas em variáveis observáveis e variáveis internas:

$$\mathfrak{S} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}^i, z_k\}$$

onde \mathbf{F} é o gradiente de deformação no instante t , e:

$$\gamma = \{\mathbf{F}^i, z_k\}$$

é o conjunto de variáveis internas, sendo que \mathbf{F}^i representa a parte inelástica do tensor gradiente de deformação total e z_k representa um conjunto de variáveis arbitrárias que podem ser entidades escalares, vetoriais ou tensoriais. Admite-se que o potencial de energia livre de Helmholtz definida em (2.72) depende destas variáveis de estado, de maneira que sua variação é dada por

$$\dot{W} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W}{\partial z_k} * \dot{z}_k \quad (3.1)$$

onde o símbolo $*$ denota a correta operação de produto, dependente da natureza de z_k . Substituindo este resultado em (2.74) tem-se que:

$$\left(\mathbf{P} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \right) : \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i - \frac{\partial W}{\partial z_k} * \dot{z}_k \geq 0 \quad (3.2)$$

A equação (3.2) deve ser satisfeita para todos os processos cinematicamente admissíveis, $\dot{\mathbf{F}}$. Admitindo um processo sem variação de variáveis internas, chega-se à necessidade de satisfazer a seguinte equação para o tensor de Piola-Kirchhoff:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \quad (3.3)$$

Substituindo este resultado em (3.2), se obtém a desigualdade:

$$-\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i - \frac{\partial W}{\partial z_k} * \dot{z}_k \geq 0 \quad (3.4)$$

Os termos que realizam potência com a variação das variáveis internas são chamados de forças termodinamicamente conjugadas:

$$\mathbf{T}^c = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} \quad (3.5)$$

$$A^c = \frac{\partial W}{\partial z_k} \quad (3.6)$$

Por outro lado, para garantir a satisfação da inequação (3.4), isto é a segunda lei da termodinâmica, postula-se a existência do pseudo-potencial dissipativo $\psi(\mathbf{F}^i, \dot{z}_k; \mathbf{F}^i, z_k)$ convexo em relação às taxas das variáveis internas e nulo na origem tal que, Stainier, 2006:

$$\mathbf{T}^d = -\frac{\partial \psi(\mathbf{F}^i, \dot{z}_k; \mathbf{F}^i, z_k)}{\partial \dot{\mathbf{F}}^i} \quad (3.7)$$

$$A^d = -\frac{\partial \psi(\mathbf{F}^i, \dot{z}_k; \mathbf{F}^i, z_k)}{\partial \dot{z}_k} \quad (3.8)$$

A satisfação simultânea de (3.5), (3.6), (3.7) e (3.8) implica nas seguintes equações:

$$\mathbf{T}^d + \mathbf{T}^c = -\frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{F}}^i} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} = 0 \quad (3.9)$$

$$A^d + A^c = -\frac{\partial \psi}{\partial \dot{z}_k} + \frac{\partial W}{\partial z_k} = 0 \quad (3.10)$$

É possível notar que (3.9) e (3.10) correspondem à condição de otimalidade do seguinte problema, Fancello *et al*, 2006:

$$\min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k} \left\{ \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W}{\partial z_k} * \dot{z}_k + \psi(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k; \mathbf{F}^i, z_k) \right\} \quad (3.11)$$

Desta maneira, postula-se a existência de uma função cujas condições de otimalidade permitem recuperar as equações (3.4) à (3.10) e fornece o potencial para o tensor de Piola Kirchhoff (3.12):

$$\Gamma(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k) = \left\{ \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^i} : \dot{\mathbf{F}}^i + \frac{\partial W}{\partial z_k} * \dot{z}_k + \psi(\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k; \mathbf{F}^i, z_k) \right\} \quad (3.12)$$

$$\Gamma^{eff}(\dot{\mathbf{F}}) = \min_{\dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k} \Gamma(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{F}}^i, \dot{z}_k) \quad (3.13)$$

$$\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \Gamma^{eff}(\dot{\mathbf{F}}) \quad (3.14)$$

De fato, as condições de mínimo em relação à $\dot{\mathbf{F}}^i$ e \dot{z}_k reproduzem as condições (3.9) e (3.10) e definem o potencial Γ^{eff} cuja derivada em relação à $\dot{\mathbf{F}}$ fornece o tensor de Piola Kirchhoff. Diz-se então que Γ^{eff} é uma função potencial em taxas para o estado de tensão. Entretanto, esta função não fornece informação a respeito do incremento das variáveis de estado num processo de integração temporal. Para tal fim, define-se um potencial dependente agora dos incrementos das variáveis de estado, Vassoler, 2007:

$$\Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathbf{F}_n^i, z_n) = \min_{\Delta \mathbf{F}^i, \Delta z_k} \left\{ \Delta W(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{n+1}^i) + \Delta t \psi(\Delta \mathbf{F}^i, \Delta z_k) \right\} \quad (3.15)$$

onde

$$\Delta W(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{n+1}^i) = W(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{n+1}^i) - W(\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^i) \quad (3.16)$$

Este potencial, denominado potencial incremental, possui a propriedade que as condições de otimalidade em relação aos incrementos reproduzem as equações (3.9) e (3.10) no instante t_{n+1} e finalmente é um potencial para o tensor de Piola Kirchhoff também no instante $n+1$, isto é,

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \Psi(\mathbf{F}_{n+1}; \mathbf{F}_n^i, z_n) \quad (3.17)$$

O potencial incremental é consistente com (3.13) no sentido que aproxima o potencial em taxas na medida em que o incremento de tempo Δt tende à zero.

3.1 HIPERELASTICIDADE ISOTRÓPICA

Os modelos hiperelásticos são adequados para descrever comportamentos não lineares de materiais que possuem um comportamento conservativo durante o processo de deformação. Os elastômeros são materiais poliméricos que podem sofrer mais que 700% de deformação antes da ruptura e retornar completamente a sua forma original ao cessar o carregamento (Odgen 1984). Nos elastômeros a grande acúmulo de energia, sem dissipação, é conseguida através das ligações cruzadas, impedindo movimentos irreversíveis entre as cadeias poliméricas. Devido à característica de não dissipação dos materiais hiperelásticos, os modelos constitutivos são descritos postulando a existência de um potencial de energia dependente exclusivamente do gradiente de deformação:

$$W(\mathbf{F}) \quad (3.18)$$

O cálculo de tensão é obtido através de (3.3):

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}$$

Pelo axioma de objetividade material (Souza Neto, 2008; Holzapfel 2000; Gurtin 2009), o potencial W deve ser invariante para qualquer alteração de observador representada matematicamente pela rotação \mathbf{Q} :

$$W(\mathbf{QF}) = W(\mathbf{F}) \quad (3.19)$$

Logo, o potencial W pode ser expresso através do tensor \mathbf{U} , proveniente da decomposição polar, ou de maneira equivalente, pelo tensor de Cauchy-Green à direita, \mathbf{C} :

$$W(\mathbf{U}) = W(\sqrt{\mathbf{C}}) = \bar{W}(\mathbf{C}) \quad (3.20)$$

É comum decompor o potencial de energia em parcelas isocórica e volumétrica:

$$\bar{W}(\mathbf{C}) = \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}) + W_{vol}(J) \quad (3.21)$$

Partindo desta decomposição e utilizando a regra da cadeia, se obtém à seguinte expressão para o cálculo de tensão de Piola-Kirchhoff:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = 2\mathbf{F} \frac{\partial \bar{W}}{\partial \mathbf{C}} = 2\mathbf{F} \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W_{vol}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} \right) \quad (3.22)$$

Alguns termos em (3.22) não dependem da expressão particular escolhida para W e podem ser calculados à priori:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right] \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} = \frac{J}{2} \mathbf{C}^{-1} \quad (3.24)$$

Substituindo (3.23) e (3.24) em (3.22) chega-se na expressão para o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff, o qual dependente exclusivamente das derivadas dos potenciais isocórico e volumétrico:

$$\mathbf{P} = \mathbf{F} \left(J^{-\frac{2}{3}} \text{DEV} \left(2 \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right) + \frac{\partial W_{vol}}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1} \right) \quad (3.25)$$

onde DEV é a versão material do operador deviatórico:

$$\text{DEV}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} - \frac{1}{3} (\mathbf{A} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \quad (3.26)$$

Ao obter o tensor de Piola-Kirchhoff por (3.25), a tensão de Cauchy é facilmente recuperada invertendo a expressão (2.47):

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{P} \mathbf{F}^T \quad (3.27)$$

3.1.1 Matriz Tangente

Para a resolução do sistema não linear gerado ao se utilizar uma lei constitutiva hiperelástica na equação de equilíbrio (2.62) faz-se necessário o cálculo de matriz tangente de acordo com a expressão (2.73). Primeiramente, o segundo tensor de Piola-Kirchhoff é obtido através de:

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2 \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + 2 \frac{\partial W_{VOL}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} \quad (3.28)$$

onde \mathbf{S} pode ser dividido em sua contribuição deviatórica e volumétrica como:

$$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}} + \mathbf{S}^{vol} \quad (3.29)$$

$$\hat{\mathbf{S}} = 2J^{-\frac{2}{3}} \text{DEV} \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right) \quad (3.30)$$

$$\mathbf{S}^{vol} = \frac{\partial W_{VOL}}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1} \quad (3.31)$$

Substituindo (3.29) em (2.73) é possível obter uma expressão que relaciona as derivadas do segundo tensor de Piola-Kirchhoff com a matriz tangente na configuração de referência \mathbb{C} :

$$c_{ijkl} = 2 \overbrace{\left(\frac{\partial \hat{S}_{ij}}{\partial \hat{C}_{mn}} \frac{\partial \hat{C}_{mn}}{\partial C_{kl}} + \frac{\partial \hat{S}_{ij}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial C_{kl}} \right)}^{\hat{\mathbb{C}}} + 2 \overbrace{\left(\frac{\partial S_{ij}^{vol}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial C_{kl}} \right)}^{C^{vol}} \quad (3.32)$$

É possível expandir (3.32) para deixar a matriz tangente com dependência em termos dos potenciais isocórico e volumétrico, Noels, 2004:

$$\begin{aligned}
 \hat{C}_{ijkl} = & 4 \left[\frac{1}{J} \right]^{\frac{4}{3}} \left[\frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{C}_{ij} \partial \hat{C}_{kl}} - \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{C}_{uv} \partial \hat{C}_{kl}} \hat{C}_{uv} \hat{C}_{ij}^{-1} \right. \\
 & - \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{C}_{ij} \partial \hat{C}_{mn}} \hat{C}_{mn} \hat{C}_{kl}^{-1} \\
 & \left. + \frac{1}{9} \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{C}_{uv} \partial \hat{C}_{mn}} \hat{C}_{uv} \hat{C}_{mn} \hat{C}_{ij}^{-1} \hat{C}_{kl}^{-1} \right] \\
 & - \frac{4}{3} \left[\frac{1}{J} \right]^{\frac{4}{3}} \left[\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{C}_{kl}} \hat{C}_{ij}^{-1} - \frac{1}{3} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{C}_{mn}} \hat{C}_{mn} \hat{C}_{ij}^{-1} \hat{C}_{kl}^{-1} \right] \\
 & + \frac{2}{3} \left[\frac{1}{J} \right]^{\frac{4}{3}} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{C}_{uv}} \hat{C}_{uv}^{-1} \left[\hat{C}_{ik}^{-1} \hat{C}_{lj}^{-1} + \hat{C}_{il}^{-1} \hat{C}_{kj}^{-1} - \frac{2}{3} \hat{C}_{ij}^{-1} \hat{C}_{kl}^{-1} \right] \\
 & - \frac{4}{3} \left[\frac{1}{J} \right]^{\frac{4}{3}} \left[\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{C}_{ij}} \hat{C}_{kl}^{-1} - \frac{1}{3} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{C}_{uv}} \hat{C}_{uv} \hat{C}_{ij}^{-1} \hat{C}_{kl}^{-1} \right]
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

e,

$$\begin{aligned}
 C^{vol} = & J \left(\frac{dW_{vol}}{dJ} + J \frac{d^2 W_{vol}}{dJ^2} \right) \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \\
 & + 2J \frac{dW_{vol}}{dJ} (\mathcal{S})
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

onde,

$$\mathcal{S}_{ijkl} = -C_{ik}^{-1} C_{jl}^{-1} \tag{3.35}$$

Apesar da extensão das expressões (3.33) e (3.34) as únicas variáveis que são dependentes do modelo constitutivo para a montagem da matriz tangente material (2.73) são:

$$\left\{ \frac{dW_{vol}}{dJ}, \frac{d^2W_{vol}}{dJ^2}, \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}}, \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}} \partial \hat{\mathbf{C}}} \right\} \quad (3.36)$$

Esta separação permite que a implementação de diferentes modelos hiperelásticos envolva uma parcela comum a todos os modelos, associada as grandezas cinemáticas, e outra vinculada a (3.36) dependente do material específico utilizado.

Exemplos de modelos hiperelásticos

Encontra-se na literatura uma vasta variedade de funções potenciais que geram comportamentos próximos dos materiais existentes. Os modelos clássicos mais conhecidos são Mooney-Rivlin, neo-Hookean (Green e Zerna, 1954), Hencky, (1933) e Odgen (Odgen, 1984). Na sequência serão abordados somente os potenciais de Hencky e Odgen, pois os modelos de Mooney-Rivlin e neo-Hookean podem ser recuperados como casos particulares do modelo de Odgen.

Modelo de Hencky

O modelo de Hencky é baseado nas deformações logarítmicas, sendo uma extensão do clássico modelo linear elástico de Hooke (Souza Neto, 2008; Belytschko 2000). O potencial de energia W , em seu formato isotrópico, pode ser expresso através da adição do potencial isocórico e volumétrico tendo como argumentos as deformações logarítmicas principais:

$$W = \hat{W}(\hat{\mathbf{\epsilon}}) + W_{vol}(\epsilon^{vol}) \quad (3.37)$$

$$\hat{W} = \mu \sum_{i=1}^3 (\hat{\epsilon}_i)^2 \quad (3.38)$$

$$W_{vol} = \frac{1}{2} K (\epsilon^{vol})^2 \quad (3.39)$$

onde

$$\varepsilon^{vol} = \ln(J) = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad (3.40)$$

$$\hat{\varepsilon}_i = \varepsilon_i - \frac{1}{3} \varepsilon^{vol} \quad (3.41)$$

Para a resolução da equação de equilíbrio linearizada é necessário o cálculo do conjunto de variáveis presentes em (3.36). Para a parte volumétrica tem-se:

$$\frac{\partial W_{vol}}{\partial J} = K \frac{\ln(J)}{J} \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial^2 W_{vol}}{\partial J^2} = \frac{d}{dJ} \left(K \frac{\ln(J)}{J} \right) = \frac{K}{J^2} (1 - \ln(J)) \quad (3.43)$$

Para a parte deviatórica, primeiro calcula-se a derivada em relação aos autovalores da deformação logarítmica:

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_i} = 2\mu \hat{\varepsilon}_i \quad (3.44)$$

Utilizando a regra da cadeia chega-se a expressão de derivada do potencial em relação aos autovalores do tensor de Cauchy-Green à direita c_i :

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{c}_i} = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j} \frac{\partial \hat{\varepsilon}_j}{\partial \hat{c}_i} = 2\mu \hat{\varepsilon}_i \left(\frac{1}{2\hat{c}_i} \right) = \mu \ln(\hat{c}_i) \left(\frac{1}{2\hat{c}_i} \right) \quad (3.45)$$

Finalmente, chega-se na derivada de W em relação ao tensor de Cauchy à direita utilizando a expressão (3.46).

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{c}_i} \mathbf{1}_i \otimes \mathbf{1}_i \quad (3.46)$$

Para o cálculo da segunda derivada de W em relação a \mathbf{C} utiliza-se a propriedade de isotropia de W , recorrendo à formulação de derivada genérica de funções tensoriais isotrópicas presente no Apêndice A1.

Dessa forma, é necessário o cálculo da segunda derivada exclusivamente com base nos valores próprios:

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{c}_i \partial \hat{c}_j} = \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j \partial \hat{\varepsilon}_j} \left(\frac{1}{4 \hat{c}_i \hat{c}_j} \right) - \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j} \left(\frac{\delta_{ij}}{2 \hat{c}_j^2} \right) \quad (3.47)$$

onde,

$$\frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j \partial \hat{\varepsilon}_j} = 2\mu \quad (3.48)$$

Modelo de Odgen

O modelo de Odgen é conhecido pela capacidade de representar o comportamento de materiais hiperelásticos, mesmo em níveis de deformações elevados. No presente trabalho o potencial de Odgen será utilizado apenas para a parcela deviatórica. A forma geral do potencial é dada por:

$$\hat{W} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \frac{\mu_i}{\alpha_i} (\exp(\hat{\varepsilon}_j)^{\alpha_i} - 1) \quad (3.49)$$

Como mostrado anteriormente para o modelo de Hencky, para o cálculo de tensão e da matriz tangente é necessário o cálculo das derivadas primeira e segunda presentes em (3.50) e (3.51):

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j} = \sum_{i=1}^N \mu_i \exp(\hat{\varepsilon}_j)^{\alpha_i - 1} \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_j \partial \hat{\varepsilon}_j} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mu_i \exp(\hat{\varepsilon}_j)^{\alpha_i - 1} \quad (3.51)$$

Para o potencial volumétrico pode-se utilizar (3.39) ou o potencial volumétrico presente abaixo:

$$W_{vol} = \frac{1}{2} K (J - 1)^2 \quad (3.52)$$

Derivando (3.52) obtêm-se,

$$\frac{\partial W_{vol}}{\partial J} = K(J - 1) \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial^2 W_{vol}}{\partial J^2} = K \quad (3.54)$$

3.2 MODELO DE ELASTO-VISCOPLASTICIDADE

Nessa seção será detalhado o modelo matemático adotado com o intuito de descrever o comportamento elasto-viscoplástico de materiais poliméricos. As hipóteses cinemáticas e a estrutura de potenciais empregados seguem a mesma estrutura dos trabalhos de Ortiz e Stainier 1999, Fancello *et al* 2005 e 2006, Vassoler, 2007 e Fancello *et al* 2008. É dada atenção especial para decomposição multiplicativa do tensor gradiente de deformação \mathbf{F} , primeiramente proposto por Kroner em 1960 e seguido por Lee em 1967. O conjunto de modelos constitutivos que serão apresentados na sequência tem caráter isotrópico e utilizam decomposição espectral. Potenciais isotrópicos arbitrários podem ser incorporados no modelo constitutivo para descrever o comportamento não linear dos polímeros, seja na região elástica, seja na região viscoplástica.

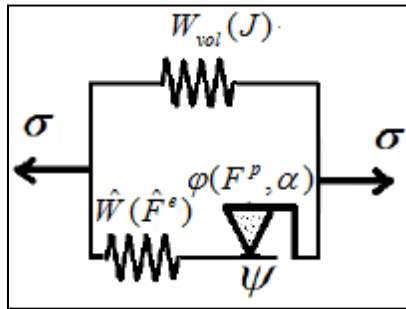
3.2.1 Potencial de Energia

O formato do potencial de energia para o modelo de elasto-viscoplasticidade tem as mesmas características do adotado para os modelos hiperelásticos. No entanto, para modelar os fenômenos de plasticidade e dissipação são incorporados pseudo-potenciais com dependência do conjunto de variáveis internas. Portanto admite-se potencial de energia definido como:

$$W = \hat{W}(\hat{\mathbf{F}}^e) + W_{vol}(J) + \phi(\mathbf{F}^p, z_k) \quad (3.55)$$

A Figura 3.1 ilustra as diferentes contribuições energéticas do potencial W .

Figura 3. 1 Ilustração das parcelas energéticas conservativas e dissipativas.



Adaptado: Vassoler, 2007.

Nesta representação \mathbf{F}^e é a parcela elástica, \mathbf{F}^p é a parcela inelástica de origem viscoplástica e J a deformação volumétrica no braço puramente elástico.

3.2.2 Hipótese Cinemática

Uma abordagem frequente nos modelos constitutivos de deformações finitas consiste na decomposição multiplicativa do tensor gradiente de deformação em uma parcela inelástica (neste caso plástica) seguida de uma deformação reversível (elástica). Matematicamente,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (3.56)$$

Admite-se neste modelo que a deformação viscoplástica é isocórica, de maneira tal que a deformação volumétrica deverá formar parte da deformação elástica:

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{F}^{vol} \hat{\mathbf{F}}^e \quad (3.57)$$

Portanto, a decomposição multiplicativa de \mathbf{F} (3.56) pode ser expressa em termos das contribuições volumétrica elástica, isocórica elástica e isocórica viscoplástica:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p = \mathbf{F}^{vol} \hat{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^p \quad (3.58)$$

Outras medidas de deformação como o tensor de Cauchy-Green à direita podem ser derivados de (3.58).

$$\hat{\mathbf{C}}^e = \hat{\mathbf{F}}^{eT} \hat{\mathbf{F}}^e \quad (3.59)$$

Devido à simetria do tensor de Cauchy-Green à direita, o mesmo pode ser representado em termos espectrais como:

$$\hat{\mathbf{C}}^e = \sum_{i=1}^p \hat{c}_i^e \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^p \hat{c}_i^e \mathbf{E}_i \quad (3.60)$$

onde \hat{c}_i^e e \mathbf{E}_i representam os autovalores e autoprojeções de $\hat{\mathbf{C}}^e$ respectivamente, e p representa o número de autovalores distintos.

Para a lei de evolução plástica primeiramente se define o tensor de taxa de deformação plástica \mathbf{D}^p como:

$$\mathbf{D}^p = \text{sym}(\mathbf{L}^p) = \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \quad (3.61)$$

A expressão (3.61) resulta da hipótese de que o fluxo plástico é irrotacional, assim o tensor de vorticidade plástico \mathbf{W}^p é considerado nulo (Anand *et al* 2009). Após rearranjar (3.61) se obtém a equação de evolução para o tensor gradiente de deformação plástica:

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{L}^p \mathbf{F}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p \quad (3.62)$$

Classicamente o tensor \mathbf{D}^p é decomposto em amplitude \dot{q} e direção \mathbf{M} , Souza Neto *et al*, 2008:

$$\mathbf{D}^p = \dot{q} \mathbf{M} \quad (3.63)$$

Seguindo o trabalho realizado por Vassoler 2007 e Fancelli 2008 a decomposição espectral é aplicada no tensor \mathbf{M} resultando em:

$$\mathbf{D}^p = \dot{q} \mathbf{M} = \dot{q} \sum_{i=1}^p q_i \mathbf{N}_i \quad (3.64)$$

onde p representa o número de autovalores distintos, q_i e \mathbf{N}_i são autovalores e autoprojeções de \mathbf{M} , respectivamente. Por sua vez, essas variáveis devem obedecer às seguintes propriedades:

$$\dot{q} \geq 0 \quad (3.65)$$

$$q_i \in K_Q = \left\{ x_i \in \Re : \sum_{i=1}^3 x_i = 0; \sum_{i=1}^3 x_i^2 = \frac{3}{2} \right\} \quad (3.66)$$

$$\mathbf{N}_i \in K_N = \left\{ \mathbf{N}_i \in \text{sym} : \mathbf{N}_i : \mathbf{N}_i = 1; \mathbf{N}_i : \mathbf{N}_j = 0, i \neq j \right\} \quad (3.67)$$

Ao se definir (3.64) o conjunto de variáveis internas passe a ser representado pelas novas variáveis \dot{q} , q_i e \mathbf{N}_i .

O incremento das variáveis internas é obtido mediante uma integração temporal das equações de evolução. A equação (3.62), por exemplo, pode ser resolvida numericamente utilizando o mapeamento exponencial (Souza Neto, 2008):

$$\Delta \mathbf{F}^p = \mathbf{F}_{n+1}^p \mathbf{F}_n^{p-1} = \Delta \mathbf{R} \exp[\Delta t \mathbf{D}^p] \quad (3.68)$$

$$\Delta \mathbf{C}^p = (\Delta \mathbf{F}^p)^T \Delta \mathbf{F}^p = \mathbf{F}^{p-T} \mathbf{C}_{n+1}^p \mathbf{F}^{p-1} = \exp[\Delta t \mathbf{D}^p]^2 \quad (3.69)$$

$$\mathbf{D}^p = \frac{1}{2\Delta t} \ln(\Delta \mathbf{C}^p) = \dot{q} \sum_{i=1}^3 q_i \bar{\mathbf{N}}_i = \frac{\Delta q}{\Delta t} \sum_{i=1}^3 q_i \mathbf{N}_i \quad (3.70)$$

Logo, os potenciais plástico φ^p e de dissipação ψ podem ser escritos em função do novo conjunto de variáveis internas. Sendo φ^p responsável pela evolução plástica no material, deve-se escolher uma expressão tal que descreva o encruamento isotrópico e/ou cinemático. No presente trabalho, optou-se por utilizar encruamento isotrópico, de forma que o potencial plástico dependente apenas da deformação plástica acumulada q :

$$\varphi^p = \varphi^p(q) \quad (3.71)$$

onde,

$$q(t) = \int_{t=0}^{t=\bar{t}} \dot{q} dt, \quad q_{n+1} = q_n + \Delta t \dot{q} = q_n + \Delta q \quad (3.72)$$

A dependência das tensões em relação à taxa de deformação plástica é controlada pelo potencial de dissipação ψ , neste caso dependente exclusivamente de \dot{q} .

$$\psi = \psi(\dot{q}) = \psi\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right) = \begin{cases} \bar{\psi}\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right) & \frac{\Delta q}{\Delta t} \geq 0 \\ +\infty & \frac{\Delta q}{\Delta t} < 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

O potencial ψ , como pode ser visto em (3.73) penaliza valores negativos de Δq , de maneira a garantir valores $\Delta q \geq 0$ no processo de minimização (3.15).

Potencial Plástico

Um dos modelos mais simplificados de plasticidade é o modelo de encruamento linear. O potencial que gera esse comportamento é expresso através de uma função quadrática:

$$\varphi^p(q) = \sigma_o^p q + \frac{H}{2} q^2 \quad (3.74)$$

Para representar o encruamento não linear em geral presente nos polímeros pode-se utilizar o modelo de Ramber-Osgood cujo potencial plástico assume a seguinte forma:

$$\varphi^p(q) = \sigma_o^p q + \mu_0^p \left(q + \frac{1}{\alpha_0^p} \exp[-\alpha_0^p q] \right) + \frac{\mu_1^p}{\alpha_1^p + 1} q^{\alpha_1^p + 1} \quad (3.75)$$

No presente trabalho decidiu-se utilizar o potencial plástico dado por:

$$\varphi^p(q) = \sigma_o^p q + \frac{H}{2} q^2 + \mu_0^p \left(q + \frac{1}{\alpha_0^p} \exp[-\alpha_0^p q] \right) + \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j^p}{\alpha_j^p + 1} q^{\alpha_j^p + 1} \quad (3.76)$$

o qual combina o modelo de encruamento linear e de Ramber-Osgood. Logo, comportamentos como encruamento não linear ou mesmo o fenômeno de amolecimento são possíveis de serem alcançados dependendo das constantes materiais escolhidas, Vassoler, 2007.

Potencial de Perzyna

O modelo de Perzyna foi escolhido para representar a dependência em relação à taxa de deformação plástica:

$$\psi(\dot{q}) = \begin{cases} \frac{m_0 \sigma_0^d \dot{q}_0}{m_0 + 1} \left(\frac{\dot{q}}{\dot{q}_0} \right)^{\frac{m_0 + 1}{m_0}} & \text{para } \dot{q} \geq 0 \\ +\infty & \text{para } \dot{q} < 0 \end{cases} \quad (3.77)$$

onde m_0, σ_0^d e \dot{q}_0 são as constantes que descrevem o material. Para tornar este modelo independente da taxa de deformação (modelo elasto-plástico) basta tomar o limite $m \rightarrow +\infty$, de maneira a obter um potencial homogêneo de grau 1 em relação a \dot{q} :

$$\psi(\dot{q}) = \begin{cases} \sigma_0^d \dot{q} & \text{para } \dot{q} \geq 0 \\ +\infty & \text{para } \dot{q} < 0 \end{cases} \quad (3.78)$$

3.2.3 Solução do Problema Constitutivo Através de Minimização

Dado o intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, o gradiente de deformação \mathbf{F}_{n+1} e conhecido o conjunto de variáveis internas no tempo t_n , isto é, $\{\mathbf{F}_n^i, z_n\}$, o problema constitutivo incremental puramente mecânico consiste em encontrar o tensor de tensão de Piola e o conjunto de variáveis internas em t_{n+1} isto é, $\{\mathbf{F}_{n+1}^i, z_{n+1}\}$.

No presente trabalho as variáveis de estado estão constituídas pelo conjunto $\{\mathbf{F}, \dot{q}, q_b, N_i\}$, isto é o gradiente de deformação total, deformação plástica equivalente, assim como os termos da decomposição espectral da direção de fluxo plástico. Seguindo o trabalho de Vassoler, 2007 e Fancello *et al* 2008, o potencial de energia livre (energia de deformação) W é decomposto nas suas parcelas dependentes destas variáveis de estado e o potencial dissipativo ψ dependente exclusivamente de \dot{q} :

$$\begin{cases} W = W_{vol}(J) + \hat{W}(\hat{\mathbf{F}}^e) + \varphi^p(q) \\ \psi = \psi(\dot{q}) \end{cases} \quad (3.79)$$

O pseudo-potencial incremental definido em (3.15), por sua vez toma a expressão:

$$\Psi = \Delta W_{vol}(J_{n+1}) + \min_{\Delta q, N_i, q_i} \left[\Delta \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) + \Delta \varphi^p(q_{n+1}) + \Delta t \psi \left(\frac{\Delta q}{\Delta t} \right) \right] \quad (3.80)$$

onde,

$$\Delta \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) = \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e) - \hat{W}(\hat{\mathbf{C}}_n^e) \quad (3.81)$$

$$\Delta \varphi^p(q_{n+1}) = \varphi^p(q_{n+1}) - \varphi^p(q_n) \quad (3.82)$$

$$\Delta W_{vol}(J_{n+1}) = W_{vol}(J_{n+1}) - W_{vol}(J_n) \quad (3.83)$$

A operação de minimização deve respeitar a parametrização cinemática (restrição) imposta ao conjunto de variáveis internas presentes nas expressões (3.65), (3.66) e (3.67).

Para se realizar a minimização (3.80) se inicializa a parcela elástica isocórica do tensor gradiente de deformação $\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e$ através de uma estimativa denominada $\hat{\mathbf{F}}^{pr}$, sendo $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}^{pr}$ estimativas para o tensor isocórico de Cauchy-Green à direita e deformação logarítmica, respectivamente :

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{p^{-1}} = \hat{\mathbf{F}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-1}, \quad \hat{\mathbf{F}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_n^{p^{-1}} \quad (3.84)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{e^T} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{C}}^{pr} (\exp[\Delta t \mathbf{D}^p])^{-2}, \quad \hat{\mathbf{C}}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_n^{p^{-T}} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \hat{\mathbf{F}}_n^{p^{-1}} \quad (3.85)$$

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \boldsymbol{\varepsilon}^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^p, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}^{pr} \quad (3.86)$$

onde o índice pr indica um valor preditor para o gradiente de deformação elástico. A expressão (3.85) é válida apenas se os tensores $\hat{\mathbf{C}}^{pr}$ e \mathbf{D}^p compartilham as mesmas autoprojeções. Verifica-se em Fancello et al 2008 que esta hipótese é satisfeita consequência da minimização de (3.80) em relação às autoprojeções N_i .

Para a resolução da minimização (3.80) sujeita as restrições presentes em (3.765), (3.66) e (3.67) pode se montar uma função

Lagrangiana tal que o ponto estacionário defina as condições de otimalidade do problema:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\Delta q, q_j, N_j, \lambda_k, \beta_s) = & \Psi(\Delta q, q_j, M_j) + \lambda_1(N_1 N_1 - 1) \\
 & + \lambda_2(N_1 N_2) + \lambda_3(N_1 N_3) \\
 & + \lambda_4(N_2 N_2 - 1) + \lambda_5(N_2 N_3) \\
 & + \lambda_6(N_3 N_3 - 1) + \beta_1(q_1 + q_2 + q_3) \\
 & + \beta_2(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 - 3/2)
 \end{aligned} \quad (3.87)$$

onde λ_k, β_s são os multiplicadores de Lagrange.

As derivadas de (3.87), necessárias para se obter o ponto estacionário, podem ser calculadas analiticamente, reduzindo a complexidade da implementação numérica ilustrada no próximo capítulo. A solução para os parâmetros $q_i, \Delta q$ e β resulta no sistema de equações:

$$r_j = -\frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} \Delta q + \beta_1 + 2\beta_2 q_j = 0 \quad j=1,2,3 \quad (3.88)$$

$$r_4 = -\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} q_j + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} + \frac{\partial \Delta \psi}{\partial \Delta \dot{q}} = 0 \quad (3.89)$$

$$r_5 = \sum_{j=1}^3 q_j = 0 \quad (3.90)$$

$$r_6 = \sum_{j=1}^3 q_j^2 - 3/2 = 0 \quad (3.91)$$

Para as autoprojeções N_j tem-se como resultado:

$$\varepsilon_j^e = 0.5 \ln(c_j^e) = \varepsilon_j^{pr} - q_j \Delta q \quad (3.92)$$

O método de Newton é utilizado para encontrar as raízes formadas pelo sistema de equações (3.88) à (3.92), satisfeita a relação de compatibilidade³ (3.93).

³ Caso não haja incremento plástico ($\Delta q=0$), então as deformações estão no interior da superfície de escoamento ($r_4 \neq 0$). Caso haja incremento plástico ($\Delta q > 0$) a deformação está na superfície de escoamento ($r_4 = 0$).

$$r_4 \Delta q = 0 \quad (3.93)$$

A atualização dos parâmetros da minimização é realizada através de:

$$\bar{\mathbf{x}}_{k+1} = \bar{\mathbf{x}}_k + \mathbf{K}_k^{-1} \mathbf{r}_k \quad (3.94)$$

onde,

$$\bar{\mathbf{x}} = \{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\} \quad (3.95)$$

e \mathbf{r}_k é o vetor de resíduos o e \mathbf{K}_k é a matriz Jacobiana, ambos avaliados na k -ésima iteração do método de Newton. Pode se adotar a mesma estratégia de Vassoler, 2007, ao se simplificar a forma que o potencial de energia \hat{W} pode assumir:

$$\hat{W}(\varepsilon_j^e) = \sum_{j=1}^3 \hat{w}_j(\varepsilon_j^e) \quad (3.96)$$

Sendo a matriz Jacobiana escrita como:

$$K = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial q_1} & \frac{\partial r_1}{\partial q_2} & \frac{\partial r_1}{\partial q_3} & \frac{\partial r_1}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_2}{\partial q_1} & \frac{\partial r_2}{\partial q_2} & \frac{\partial r_2}{\partial q_3} & \frac{\partial r_2}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_2}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_3}{\partial q_1} & \frac{\partial r_3}{\partial q_2} & \frac{\partial r_3}{\partial q_3} & \frac{\partial r_3}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_3}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_4}{\partial q_1} & \frac{\partial r_4}{\partial q_2} & \frac{\partial r_4}{\partial q_3} & \frac{\partial r_4}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_4}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_5}{\partial q_1} & \frac{\partial r_5}{\partial q_2} & \frac{\partial r_5}{\partial q_3} & \frac{\partial r_5}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_5}{\partial \beta_2} \\ \frac{\partial r_6}{\partial q_1} & \frac{\partial r_6}{\partial q_2} & \frac{\partial r_6}{\partial q_3} & \frac{\partial r_6}{\partial \Delta q} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_1} & \frac{\partial r_6}{\partial \beta_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.97)$$

onde,

$$K_{jj} = \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e \partial \varepsilon_j^e} \Delta q^2 + 2\beta_2 \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.98)$$

$$H_j = \frac{\partial^2 \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e \partial \varepsilon_j^e} q_j \Delta q - \frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.99)$$

$$H_4 = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e \partial \varepsilon_j^e} q_j^2 - \frac{\partial^2 \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q^2} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \dot{q}^2} \quad (3.100)$$

A resolução do sistema não linear presente em (3.94) é somente requerida quando existe um incremento de deformação plástica, matematicamente isso significa valores estritamente positivos de Δq :

$$\Delta q > 0 \quad (3.101)$$

A condição (3.101) pode ser verificada analiticamente utilizando a estratégia de se somar as três equações presentes em (3.88) e substituir o resultado em (3.90) chegando em:

$$\beta_1 = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} \quad (3.102)$$

Definindo-se o novo vetor:

$$\hat{d}_j = \frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Delta \hat{W}}{\partial \varepsilon_i^e} \quad (3.103)$$

Portanto q_i pode ser representado em termos de (3.103) como:

$$q_j = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hat{d}_j}{\|\hat{d}\|} \quad (3.104)$$

Substituindo (3.103) em (3.100) chega-se na condição para a existência de incremento plástico positivo:

$$-\sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \hat{d} \Big|_{\Delta q=0} \right\| + \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} \Big|_{\Delta q=0} + \frac{\partial \Delta \psi}{\partial \Delta \dot{q}} \Big|_{\Delta q=0} < 0 \quad (3.105)$$

Portanto (3.105) é a condição que deve ser satisfeita para se iniciar a resolução do sistema presente em (3.84), caso contrário o incremento de deformação é puramente elástico e não requer a solução do sistema não linear (3.88 à 3.91).

Cálculo de Tensão

Ao se chegar aos valores atualizados das variáveis internas $\{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\}$ a contribuição deviatórica do segundo tensor de Piola-Kirchhoff, S , presente em (3.28), é facilmente calculada recorrendo-se a (3.30). Logo a única incógnita para o cálculo de tensão é:

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} = \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_i^{pr}} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_i^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}} \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}^{pr}}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} = \mathbf{F}_n^{p-1} \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{E}}_i^e} \frac{1}{2\hat{\mathbf{C}}_i^{pr}} \mathbf{E}_i^{pr} \right) \mathbf{F}_n^{p-T} \quad (3.106)$$

A qual é obtida ao substituir a solução $\{q_1, q_2, q_3, \Delta q\}$ de (3.94).

A contribuição volumétrica em (3.28) é diretamente calculada ao se substituir (3.53) em (3.31). A tensão de Cauchy é diretamente calculada pela expressão abaixo:

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \frac{1}{J} \mathbf{F}_{n+1} \underbrace{\left[2J^{-\frac{5}{3}} \text{DEV} \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right) + \frac{\partial W_{VOL}}{\partial J} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} \right]}_{\mathbf{S}_{n+1}} \mathbf{F}_{n+1}^T \quad (3.107)$$

Cálculo de Tensor Material

O tensor material já mencionado anteriormente, ao se desenvolver as expressões para a hiperelasticidade, é imprescindível para a iteração de equilíbrio global requerida pelo Método de Elementos Finitos. Ao se desenvolver os cálculos de matriz tangente para os materiais hiperelásticos mostrou-se que (3.36) é o conjunto de variáveis necessárias para o cálculo do tensor material \mathcal{C} . Devido à escolha de arquitetura do modelo elasto-viscoplástico a contribuição volumétrica de \mathcal{C} é exatamente a mesma já desenvolvida para os materiais hiperelásticos (3.31), (3.34), (3.53) e (3.54).

A derivada do potencial isocórico em relação ao tensor de deformação de Cauchy à direita foi mostrada em (3.117) restando para o

cálculo de tensor material a segunda derivada de \hat{W} em relação à $\hat{\mathbf{C}}$. Considerando (3.69) e se definindo:

$$\mathbf{f} = \left(\hat{\mathbf{F}}^p \right)_n^{-1} \quad (3.108)$$

Chega-se na expressão:

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial C_{kl} \partial C_{ij}} = \mathbf{f}_{im} \mathbf{f}_{jt} \frac{\partial \hat{W}}{\partial C_{pq}^{pr} \partial C_{mt}^{pr}} \mathbf{f}_{kp} \mathbf{f}_{lq} \quad (3.109)$$

Como o potencial isocórico \hat{W} é uma função isotrópica com relação ao tensor \mathbf{C} utiliza-se a expressão presente no Apêndice A1, a qual torna necessário apenas o cálculo da derivada em relação aos autovalores c_j^{pr} . Portanto, deve-se possuir as seguintes derivadas:

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial c_j^{pr}} = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} \frac{1}{2c_j^{pr}} \quad (3.110)$$

$$\frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial c_j^{pr} \partial c_i^{pr}} = \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e \partial \varepsilon_i^e} \frac{\partial \varepsilon_j^e}{\partial \varepsilon_i^{pr}} \frac{1}{4c_j^{pr} c_i^{pr}} - \frac{\partial \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e} \frac{\delta_{ji}}{2(c_j^{pr})^2} \quad (3.111)$$

Nota-se que diferente do caso hiperelástico (3.47) a expressão (3.111) possui um novo termo que necessita da resolução do sistema não linear presente em (3.94). Para tal, considera-se a derivada da expressão (3.92) a qual relaciona os autovalores da deformação logarítmica com os autovalores de deformação logarítmica preditora:

$$\frac{\partial \varepsilon_j^e}{\partial \varepsilon_i^{pr}} = \delta_{ij} - \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon_i^{pr}} q_j - \Delta q \frac{\partial q_j}{\partial \varepsilon_i^{pr}} \quad (3.112)$$

Portanto, seja a matriz \mathbf{K}^* (3.94) avaliada na solução do problema de mínimo (3.87), a resolução de (3.112) é dada por:

$$\tilde{\mathbf{x}}_j = \mathbf{K}^{*-1} \tilde{\mathbf{y}}_j \quad (3.113)$$

onde,

$$\tilde{\mathbf{x}}_j = \left\{ \frac{\partial q_1}{\partial \varepsilon_j^{pr}}, \frac{\partial q_2}{\partial \varepsilon_j^{pr}}, \frac{\partial q_3}{\partial \varepsilon_j^{pr}}, \frac{\partial \Delta q}{\partial \varepsilon_j^{pr}}, \frac{\partial \beta_1}{\partial \varepsilon_j^{pr}}, \frac{\partial \beta_2}{\partial \varepsilon_j^{pr}} \right\} \quad (3.114)$$

$$\tilde{y}_j = \left\{ \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \varepsilon_i^e \partial \varepsilon_i^e} \delta_{ij} \Delta q; \frac{\partial^2 \hat{W}}{\partial \varepsilon_j^e \partial \varepsilon_j^e} q_j; 0; 0 \right\} \quad i=1 \text{ até } 3 \quad (3.115)$$

Nota-se que caso não haja incremento plástico o vetor $\bar{\mathbf{x}}$ presente em (3.95) é nulo tornando o termo da esquerda da igualdade presente em (3.112) igual à identidade, fazendo que (3.111) seja equivalente ao resultado presente no caso hiperelástico (3.47).

4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Um dos objetivos específicos deste trabalho é implementar a formulação apresentada para o modelo elasto-viscoplástico no programa comercial ANSYS®, Ansys Inc Help Manual, 2013. Este código utiliza o Método de Elementos Finitos para a resolução de problemas de mecânica dos sólidos. A vantagem desta implementação consiste em testar o modelo material usufruindo das facilidades do código para tratamento de geometrias, condições de contorno, deformações finitas, condições de contato, etc.

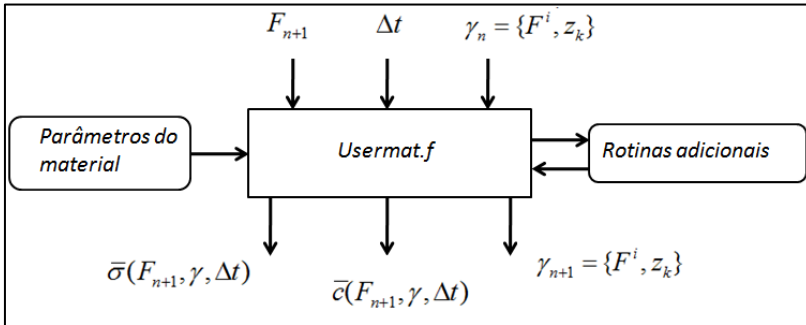
Apesar de ser um código comercial o ANSYS® tem apresentado crescentes facilidades para que o usuário crie novos elementos, materiais, *solvers*, etc., utilizando as *UPF* (User Programmable Features) ANSYS Inc. Help Manual 2013. No presente trabalho foi utilizada a rotina *Usermat*, a qual será descrita com mais detalhes na próxima seção. Para a utilização das rotinas programáveis pelo usuário (*UPF*) existe a necessidade do emprego do compilador *Intel® Visual Fortran* e um vinculador *Microsoft Windows SDK*. Os passos para compilar e executar a rotina *Usermat* estão descritos nos Anexos 1 e 2, respectivamente.

4.1 FUNÇÃO PROGRAMÁVEL PELO USUÁRIO – UPF

A sub-rotina *Usermat* permite que sejam escritos algoritmos constitutivos personalizados utilizando a tecnologia de elementos baseados em puro deslocamento já existentes no software ANSYS. Nessa rotina é definida a relação entre tensão e deformação do material, a qual pode ser aplicada para análises estáticas e transientes utilizando o *solver* implícito do ANSYS Mechanical. A função é chamada em cada ponto de integração com o objetivo de se montar a matriz tangente global do Método de Elementos Finitos, Szabó e Babuska, 1991. Para isso, a sub-rotina *Usermat* recebe como parâmetros de entrada o gradiente de deformações F_{n+1} e o conjunto de variáveis internas, no passo de tempo anterior, devendo-se calcular a tensão de Cauchy. As variáveis internas como a matriz tangente material também devem ser atualizadas para a montagem da matriz tangente consistente com a iteração de equilíbrio global. As variáveis internas no instante inicial e os parâmetros do material podem ser enviados para a sub-rotina *Usermat* através do comando *TB* da linguagem ANSYS APDL, Ansys Inc Help Manual, 2013, introduzidas na configuração de pré-

processamento do modelo de Elementos Finitos, conforme exemplo presente no Anexo 3. O fluxograma presente na *Figura 4.1* ilustra as variáveis recebidas e enviadas pela sub-rotina *Usermat*.

Figura 4. 1 Fluxograma da sub-rotina *Usermat*.



A formulação implícita presente no ANSYS considera que o deslocamento, deformação e tensão foram resolvidos no passo de tempo anterior t_n . No instante atual t_{n+1} um conjunto de equações linearizadas tendo o deslocamento como variável primária devem ser solucionadas utilizando o *solver* linear padrão. Os elementos baseados unicamente no deslocamento presentes no código seguem as equações desenvolvidas no trabalho de McMeeking e Rice, 1975. O formato de potência interna w (2.52) é apresentado em função da taxa do tensor de Kirshhoff conforme (4.1).

$$w = \int_V (\dot{\mathbf{t}} - \dot{\mathbf{t}}^T) : \delta \mathbf{L} dV = \int_V (\dot{\boldsymbol{\sigma}} - \dot{\boldsymbol{\sigma}}^T) : \delta \mathbf{L} dv \quad (4.1)$$

As expressões (2.10) e (2.44) foram usadas para se expressar a potencia w em termos da taxa do tensor de Cauchy. A taxa de Kirshhoff e de Cauchy são afetadas por alteração de observador Gurtin, 2009, Holzapfel, 2000. Portanto as formulações de elementos finitos comumente trabalham com taxas objetivas como a de Zaumann, Trusdell, Green-Naghdi entre outras. A taxa de Jaumann, a qual é utilizada na formulação do ANSYS, é definida como:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W} - \mathbf{W} \boldsymbol{\sigma} \quad (4.2)$$

onde $(\overset{\nabla}{\cdot})$ representa a taxa de Jaumann, $(\dot{\cdot})$ representa a derivada temporal na coordenada de referência e \mathbf{W} é o tensor vorticidade (2.40). A relação (4.2) pode ser representada em termos da matriz tangente espacial \mathcal{C} (2.77), do tensor de taxa de deformação \mathbf{D} (2.39) e o tensor de tensão de Cauchy (2.43) conforme (Lin, 2002):

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathcal{C}\mathbf{D} + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{D}\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{C}^J\mathbf{D} \quad (4.3)$$

onde \mathcal{C}^J é o tensor de quarta ordem de Jaumann. Utilizando (4.3) a expressão (4.1) pode ser reescrita como:

$$w = \int_v \left[\underbrace{\mathcal{C}^J\mathbf{D}:\delta\mathbf{D}}_{K_{mat}} - \underbrace{2\boldsymbol{\sigma}:(\mathbf{D}\delta\mathbf{D}) + \boldsymbol{\sigma}:(\mathbf{L}^T\delta\mathbf{L})}_{K_{geo}} \right] dv \quad (4.4)$$

A expressão (4.4) é o formato linearizado de (4.1) representado através da taxa de Jaumann do tensor de Cauchy, McMeeking e Rice, 1975. Portanto, para a montagem de matriz tangente global é necessário o cálculo da tensão de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ e o tensor de quarta ordem de Jaumann \mathcal{C}^J .

No modelo constitutivo descrito no capítulo 3 foram desenvolvidas as relações para cálculo do tensor tangente espacial \mathcal{C} (2.76). Essa expressão pode ser aproveitada para o cálculo do tensor tangente de Jaumann \mathcal{C}^J (Ji *et al*, 2013):

$$\mathcal{C}_{ijkl}^J = \mathcal{C}_{ijkl} + \frac{1}{2}(\delta_{ik}\sigma_{jl} + \sigma_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\sigma_{jk} + \sigma_{il}\delta_{jk}) \quad (4.5)$$

O tratamento de deformações finitas é realizado no sistema de coordenadas co-rotacionais definido pelo tensor de rotação \mathbf{R}^T , ANSYS Mechanical APDL Technology Demonstration Guide, 2013 (veja páginas 609 à 621). Assim, o tensor de tensão de Cauchy calculado pela rotina *Usermat* deve ser rotacionado conforme (4.6).

$$\bar{\sigma}_{ij} = R_{mi}\sigma_{mn}R_{nj} \quad (4.6)$$

O tensor material de Jaumann \mathcal{C}^J também deve ser rotacionado por \mathbf{R}^T conforme (4.7):

$$\bar{\mathcal{C}}_{ijkl} = R_{mi} R_{nj} \mathcal{C}_{mnop}^J R_{ok} R_{pl} \quad (4.7)$$

O quadro 4.1 ilustra a seqüência de operações executadas na rotina *usermat* para o modelo constitutivo elasto-viscoplástico discutido no capítulo 3. Já o quadro 4.2 mostra as operações feitas pela rotina de minimização cujo resultado é o valor atualizado das variáveis internas. As operações complementares, como inversão de matriz, cálculo de autovalores, entre outras requeridas pela rotina foram implementadas utilizando o *Numerical Recipes in FORTRAN 77*, 1992. O Anexo 4 descreve a sub-rotina *Usermat* para a implementação do modelo hiperelástico de Neo-Hookean (Souna Neto *et al*, 2008).

Quadro 4. 1 Sequência de operações realizada pela rotina *usermat*.

- (i) Dado $F_{n+1}, \gamma_n \{F^p; z_k\}, \Delta t$ e as constantes do material, realizar decomposição isocórica e volumétrica, assim como a decomposição polar:

$$F_{n+1} = F_{n+1}^{vol} \hat{F}_{n+1} = R_{n+1} U_{n+1}$$

- (ii) Realizar a decomposição espectral C^{pr} e calcular a deformação logarítmica preditora ε^{pr} :

$$\hat{F}^{pr} = \hat{F}_{n+1} \hat{F}_n^{p^{-1}}; \quad \hat{C}^{pr} = \hat{F}_n^{p^{-1}} (\hat{F}_{n+1}^T \hat{F}_{n+1}) \hat{F}_n^{p^{-1}}; \quad \hat{C}^{pr} = \sum_{i=1} \hat{C}_i^{pr} M_i^{pr}; \quad \varepsilon_i^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{C}_i^{pr}$$

- (iii) Verificar se $\Delta q > 0$:

$$\begin{cases} \text{if} & -\sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \hat{d}_j \right\|_{\Delta q=0} + \left\| \frac{\partial \Delta \varphi^p}{\partial \Delta q} \right\|_{\Delta q=0} + \left\| \frac{\partial \Delta \psi}{\partial \Delta q} \right\|_{\Delta q=0} < 0 \quad \text{goto (Quadro 4.2)} \\ \text{else} & \{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\} = \{0, 0, 0, 0, 0, 0\} \end{cases}$$

- (iv) Dado $\{q_1, q_2, q_3, \Delta q\}$ calcular a tensão de Cauchy na coordenado co-rotacional:

$$\hat{\varepsilon}_j = \varepsilon_j^{pr} - q_j \Delta q$$

$$S = 2J^{-\frac{2}{3}} DEV \left(F_n^{p^{-1}} \left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{\varepsilon}_i^s} \frac{1}{2 \hat{C}_i^{pr}} M_j^{pr} \right) F_n^{p^{-1}} \right) + \frac{\partial W_{VOL}}{\partial J} J C_{n+1}^{-1}$$

$$\sigma_{mn} = \frac{1}{J} F_{ma} S_{ab} F_{nb} \quad ; \quad \bar{\sigma}_{ij} = R_{mi} \sigma_{mn} R_{nj}$$

- (v) Calcular tensor material na coordenada co-rotacional:

$$C_{ABCD} = 2 \left(\frac{\partial \hat{S}_{AB}}{\partial \hat{C}_{mn}} \frac{\partial \hat{C}_{mn}}{\partial C_{CD}} + \frac{\partial \hat{S}_{AB}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial C_{CD}} \right) + \frac{\partial \hat{C}^{vol}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial C_{CD}}$$

$$c_{ijk l} = \frac{1}{J} F_{iA} F_{jB} C_{ABCD} F_{kC} F_{lD}$$

$$c_{ijk l}^J = c_{ijk l} + \frac{1}{2} (\delta_{ik} \sigma_{jl} + \sigma_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \sigma_{jk} + \sigma_{il} \delta_{jk})$$

$$\bar{c}_{ijk l}^J = R_{mi} R_{nj} c_{mnop}^J R_{ok} R_{pl}$$

Quadro 4. 2 Rotina de minimização.

- (i) Inicializar o vetor x como zero:

$$x = \{q_1, q_2, q_3, \Delta q, \beta_1, \beta_2\} = \{0, 0, 0, 0, 0, 0\}$$

- (ii) Dado deformação logarítmica preditora ε^{pr} e x verificar a norma do vetor de resíduo r :

$$\hat{\varepsilon}_j = \varepsilon_j^{pr} - q_j \Delta q$$

$$\text{if } \|r\| \leq 10^{-5} \quad \text{goto (v)}$$

- (iii) Montar a matriz K :

$$K = \begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 & H_1 & 1 & 2q_1 \\ 0 & K_{22} & 0 & H_2 & 1 & 2q_2 \\ 0 & 0 & K_{33} & H_3 & 1 & 2q_3 \\ H_1 & H_2 & H_3 & H_4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2q_1 & 2q_2 & 2q_3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- (iv) Atualizar vetor x de acordo com o método de Newton-Raphson

$$x_{k+1} = x_k + K_k^{-1} r_k \quad \text{goto (ii)}$$

- (v) EXIT

5 RESULTADOS DO MODELO CONSTITUTIVO

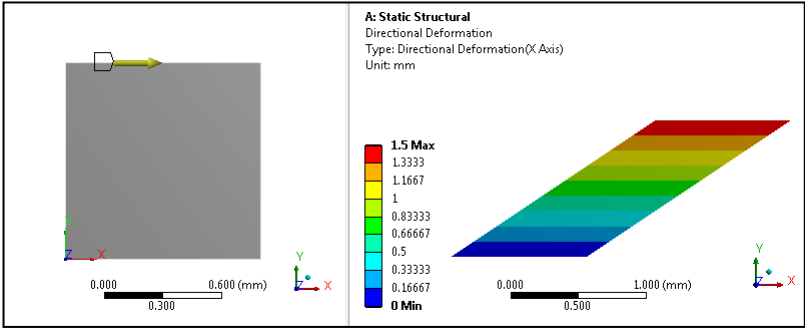
Esse capítulo visa mostrar o resultado numérico para diferentes casos práticos ao se aplicar o modelo constitutivo elasto-viscoplástico descrito no capítulo 4. Na seção 5.1 é reproduzido o estudo feito por Fancello e Vassoler, 2008 para o problema de cisalhamento simples com um único elemento. Na seção 5.2 são apresentadas curvas experimentais de ensaios de tração realizadas com corpos de prova para três polímeros diferentes, PS, PC e PLA, as quais são reproduzidas pelo modelo estudado após a correspondente identificação de parâmetros via minimização do erro quadrático. Na seção 5.4 verifica-se como estes parâmetros identificados se comportam na reprodução de outro ensaio experimental de tração de corpo de prova com entalhe. Já a seção 5.5 utiliza as informações obtidas do ajuste de parâmetros (seção 5.3) para simular alguns casos práticos.

5.1 PROBLEMA DE CISALHAMENTO

Devido ao formato genérico do modelo elasto-viscoplástico descrito no capítulo 4, buscou-se analisar soluções particulares com o intuito de visualizar as relações entre tensão e deformação. Portanto, foi reproduzido o estudo realizado por Fancello e Vassoler, 2008 utilizando os mesmos potenciais e parâmetros materiais.

Gerou-se um elemento 3D, com dimensões $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$ no ANSYS Mechanical para se analisar o comportamento em cisalhamento puro. Foi prescrito um deslocamento cíclico na face superior na direção X de $[-1.5, 1.5] \text{ mm}$ com taxas constantes de 1 mm/s , 0.5 mm/s e 0.1 mm/s . A Figura 5.1 ilustra o caso de cisalhamento criado no *Ansys Mechanical* na posição de referência e na posição de máximo deslocamento.

Figura 5. 1 Esquerda: Cubo 3D submetido a cisalhamento. Direita: Posição de máximo deslocamento.



Os potenciais de Hencky (3.37) e de Odgen (3.49) foram testados, ambos considerando as mesmas constantes para o potencial plástico (3.71) e dissipativo (3.73). O potencial volumétrico logarítmico (3.39) foi utilizado com $K=100$, no entanto ele não exerce qualquer influência no resultado devido ao caráter isocórico do cisalhamento puro. A Tabela 5.1 mostra os parâmetros materiais escolhidos para as simulações.

Tabela 5. 1 Parâmetros materiais.

Potencial \hat{W}				
Odgen			Hencky	
μ_i	0.7	-0.7	M	20
α^i	5	-5		
Potencial φ^p	Quadrático	Potencial ψ	Perzyna	
σ_o	7	Y_0	7	
H	1	M	1.2	
		\dot{q}_0	1.1	

Utilizando a linguagem *APDL* dentro do *Ansys Mechanical* foi possível escrever, para cada passo de tempo, algumas variáveis mecânicas de interesse em arquivos texto no formato ASCII. Para comparar o comportamento dos materiais com diferentes taxas de carregamento, os arquivos de resultado foram lidos no programa *Matlab*[®] onde se reconstruiu as curvas de interesse.

A evolução da tensão equivalente de vonMises σ_{vM} , tensão de cisalhamento τ_{xy} e deformação equivalente plástica Δq para o modelo de Hencky estão mostradas nas Figuras 5.2 à 5.4, e para o modelo de

Odgen estão nas Figuras 5.5 à 5.7, respectivamente. Ao analisar as figuras é possível notar a dependência da taxa de carregamento após se atingir o regime plástico em ambos os casos. Além disso, fica evidente que ao se escolher o modelo de Odgen se obtém uma resposta não linear no domínio elástico.

Como pode ser visto, estes resultados reproduzem fielmente os obtidos em Fancello et al 2008, permitindo obter certo grau de confiança em relação à implementação realizada para o cálculo de tensão e variáveis internas.

Figura 5. 2 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Tensão equivalente de von-Mises σ_{vM} .

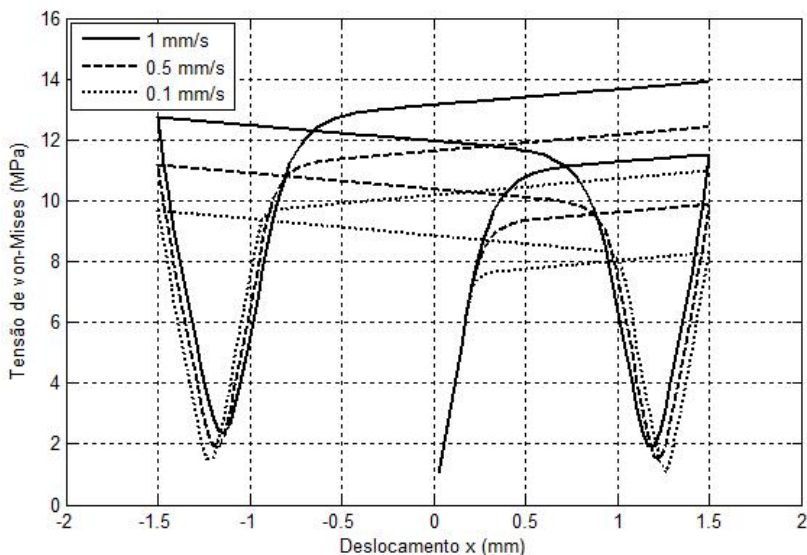


Figura 5. 3 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Incremento de deformação plástica equivalente Δq .

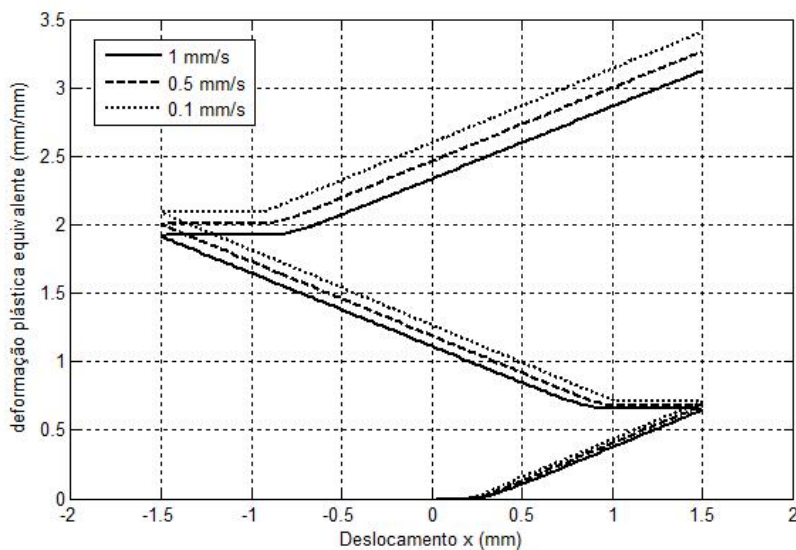


Figura 5. 4 Teste de cisalhamento no modelo de Hencky. Tensão de cisalhamento σ_{xy} .

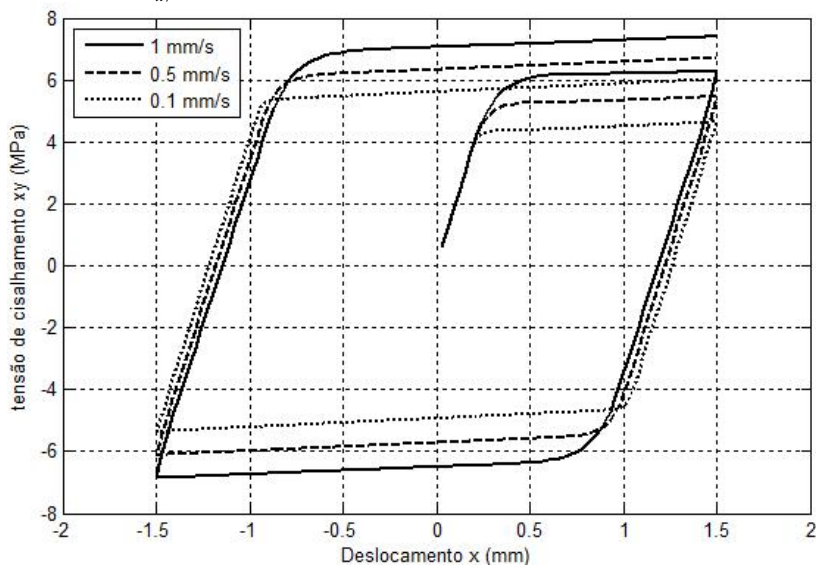


Figura 5. 5 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Tensão equivalente de von-Mises σ_{vM} .

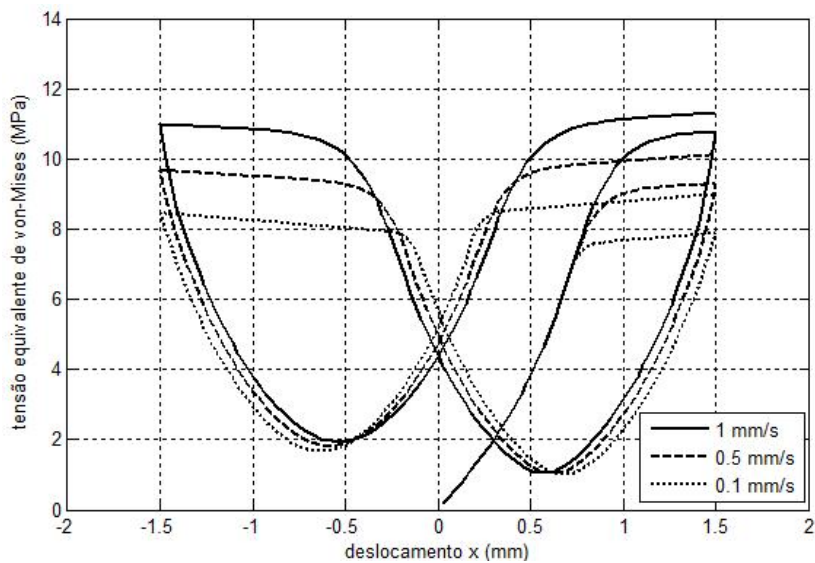


Figura 5. 6 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Deformação plástica equivalente Δq .

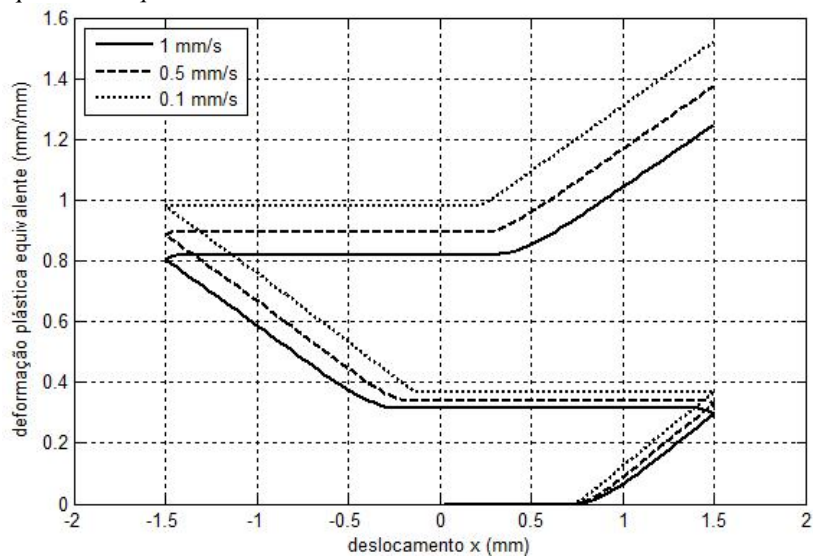
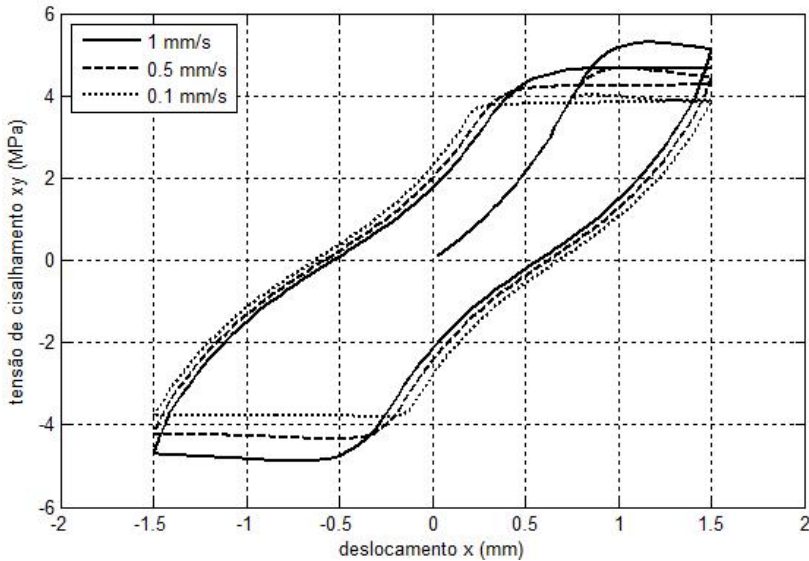


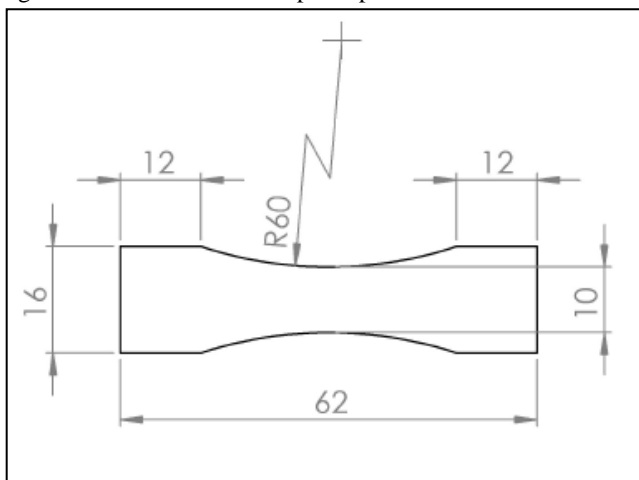
Figura 5. 7 Teste de cisalhamento no modelo de Odgen. Tensão de cisalhamento σ_{xy} .



5.2 CURVAS DE FORÇA-DESLOCAMENTO PARA PS, PLA E PC

O teste de cisalhamento apresentado na seção 5.1 ilustra diferentes comportamentos mecânicos que podem ser obtidos a partir do modelo constitutivo descrito no capítulo 4. No entanto, os potenciais e parâmetros utilizados foram meramente ilustrativos e não condizem com nenhum material específico. Para testar a capacidade do modelo de reproduzir o comportamento de materiais reais, se decidiu utilizar curvas de força-deslocamento de três polímeros distintos: PS, PLA e PC. Os ensaios foram realizados por Vieira, 2012, em seu estudo sobre a relação entre os parâmetros de processo e as propriedades mecânicas desses polímeros. O corpo de prova utilizado para o ensaio de tração possui espessura de 2mm e o restante das dimensões ilustradas na Figura 5.8. A velocidade de deslocamento imposta nas garras do corpo de prova foi de 1 mm/min para o PS e PLA e de 10mm/min para o PC.

Figura 5. 8 Dimensões do corpo de prova utilizado no ensaio de tração.



Fonte: Vieira, 2012.

As curvas força-deslocamento para os corpos de prova de PS, PLA e PC estão mostradas nas Figuras 5.9, 5.10 e 5.11, respectivamente.

Figura 5. 9 Curva de força-deslocamento para PS.

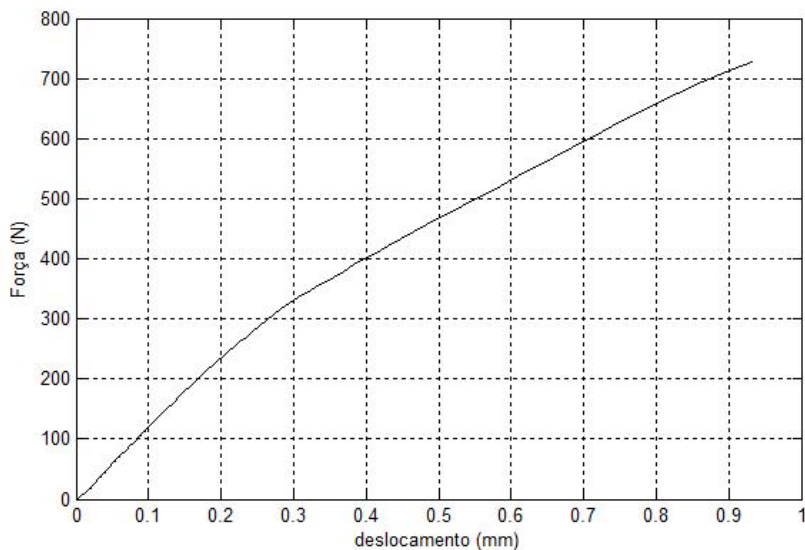


Figura 5. 10 Curva de força-deslocamento para PLA.

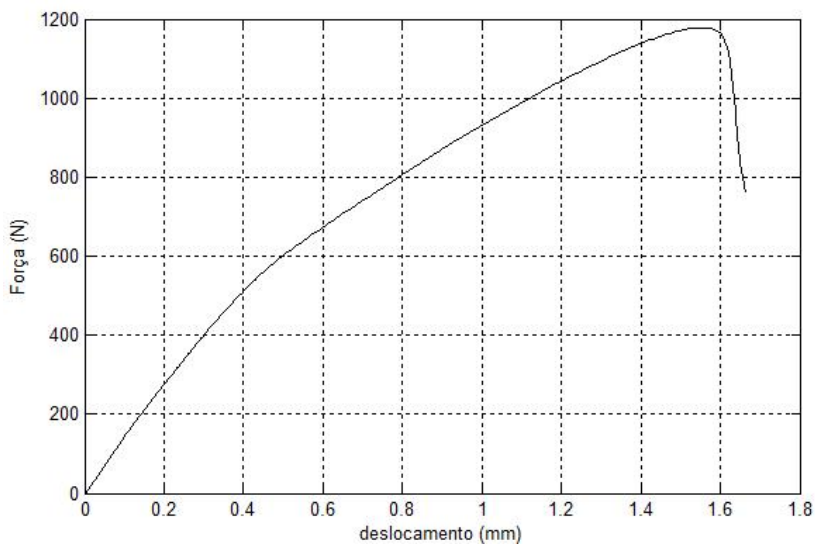
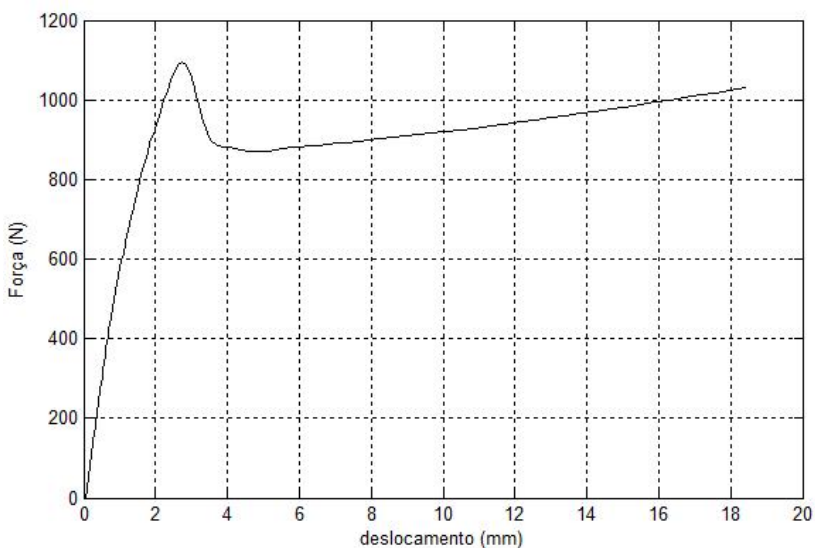


Figura 5. 11 Curva de força-deslocamento para PC.



Os três polímeros mostram comportamentos mecânicos bastante distintos. O poliestireno apresenta uma resposta com duas regiões praticamente lineares e sofre ruptura antes de chegar à estricção, Figura 5.9. Já o Poli-ácido-lático possui um comportamento semelhante ao PS na região elástica e início da fase plástica, Figura 5.10. Apesar disso, no caso do PLA há presença de estricção seguida de decréscimo de força apreciável provavelmente associado ao dano que se propaga rapidamente gerando a ruptura. A Figura 5.11 sugere que o policarbonato apresenta um comportamento elástico não linear, seguido de uma forte estricção com queda brusca de força e finalmente um crescimento linear moderado até a ruptura.

5.3 IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS VIA MÍNIMOS QUADRADOS

Dadas as curvas experimentais de força-deslocamento do PS, PLA e PC apresentadas na seção anterior, deseja-se determinar expressões para os potenciais termodinâmicos e de dissipação assim como o valor dos parâmetros correspondentes capazes de reproduzir adequadamente estas curvas. A proposta consiste em reproduzir numericamente o ensaio de tração através do Método de Elementos Finitos com o auxílio do software comercial ANSYS a fim de se simular a resposta de força-deslocamento. Para isso, a simetria de um oitavo da geometria do corpo de prova, Figura 5.8, foi recriada no *Ansys Design Modeler* conforme apresentado na Figura 5.12. Na malha utilizada no estudo o elemento SOLID186 foi utilizado, ANSYS Help Manual, 2013. O número total de elementos foi de 378, onde buscou gerar um maior número de elementos na região a qual ocorrerá à estricção, Figura 5.13.

Figura 5. 12 Geometria com simetria de 1/8 do corpo de prova.

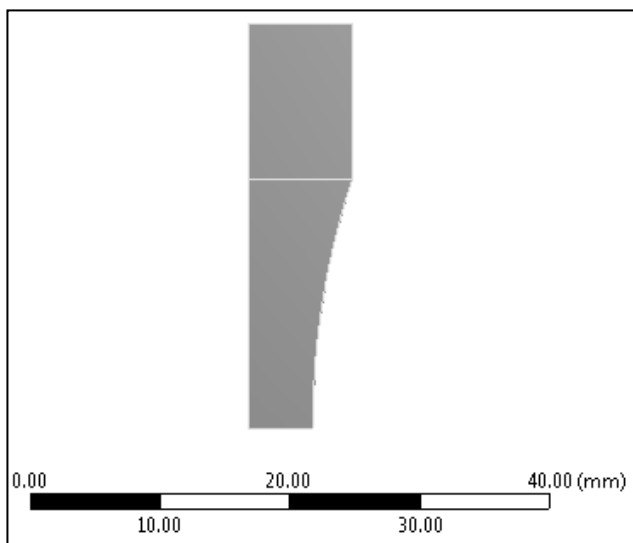
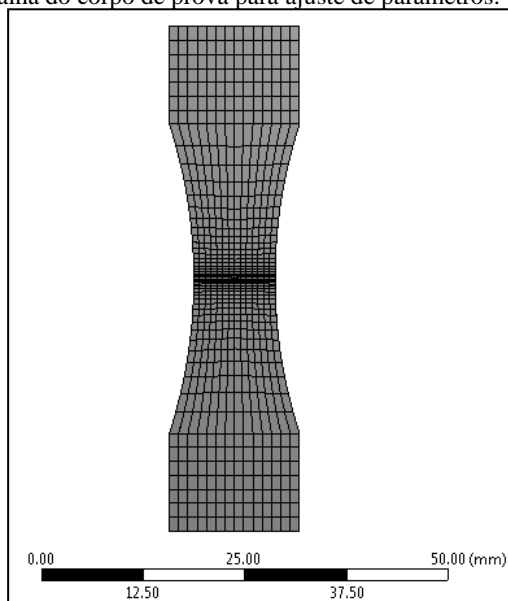


Figura 5. 13 Malha do corpo de prova para ajuste de parâmetros.



Para simular a condição do ensaio foi prescrito o deslocamento na face superior do corpo de prova, e nas outras faces foram aplicadas condições de contorno de simetria (deslocamento nulo normal a face). A Tabela 5.2 ilustra o deslocamento e taxa de carregamento das análises para cada um dos polímeros estudados.

Tabela 5. 2 Condições de contorno para PS, PC e PLA.

Polímero	Taxa de carregamento (mm/min)	Deslocamento (mm)
PS	1	1
PLA	1	1.5
PC	10	18.5

O segundo aspecto necessário para uma reprodução satisfatória diz respeito à escolha das expressões que melhor se adaptam ao comportamento experimental e da determinação dos seus parâmetros, (também denominados constantes de material). Isto foi feito através da resolução de um problema inverso que visa reduzir as diferença entre o experimento e a simulação. Para tal, arbitra-se um valor inicial para os parâmetros e gera-se uma curva força-deslocamento mediante uma simulação. Esta é comparada com a correspondente curva experimental mediante o cálculo da diferença quadrática média μ^E :

$$\mu^E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (F_i^S - F_i^{Alvo})^2 \quad (5.1)$$

Em (5.1), N é o número de pontos da curva força-deslocamento, F^{Alvo} é o valor experimental da força e F^S é a força de reação simulada dependente dos parâmetros do modelo. Esta norma da diferença é inserida num algoritmo de minimização. Embora o mínimo valor teórico de μ^E seja zero, o valor numérico mínimo depende da escala dos argumentos F^S e F^{Alvo} . Assim, é usual em análise de regressão se calcular o coeficiente de determinação r^2 , definido por

$$r^2 = 1 - \frac{\mu^E}{\sigma_{Falvo}^2} = 1 - \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (F_i^S - F_i^{Alvo})^2}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (F_i^{Alvo} - \mu^{Falvo})^2} \quad (5.2)$$

onde μ^{Falvo} e σ^2_{Falvo} são a média e a variância da força no ensaio de tração, respectivamente. O coeficiente de determinação passa a ser uma variável adimensional que deve chegar a valores próximos da unidade. Por outro lado, como os argumentos do ponto ótimo não são alterados com a adição e multiplicação de constantes, μ^E e r^2 possuirão os mesmos otimizadores. Logo, o problema de identificação pode ser escrito como:

$$\min \mu^E(\pi) = \max r^2(\pi) \quad (5.3)$$

onde π representa o conjunto de parâmetros que controlam o modelo adotado. Como já dito, o sucesso na identificação irá depender fortemente da base de aproximação oferecida pela estrutura matemática dos potenciais escolhidos. Assim, as diferentes características de comportamento mecânico dos polímeros estudados devem ser incorporadas no modelo matemático constitutivo. Todavia, essa tarefa é difícil de realizar a priori, pois as informações experimentais possuem contribuições que dependem ao mesmo tempo da geometria e do material. Existe assim uma relação de compromisso para a seleção do potencial. Bases excessivamente flexíveis, com muitos parâmetros podem reproduzir adequadamente um experimento, mas podem deixar o modelo redundante conduzindo à não unicidade de solução. Esta falta de unicidade freqüentemente conduz a resultados claramente inadequados quando os mesmos parâmetros são usados para reproduzir um experimento diferente. Do outro lado, um modelo limitado ou pouco flexível pode ser incapaz de reproduzir as respostas típicas do fenômeno. O procedimento aconselhável é hierárquico, passando dos modelos mais simples para os mais complexos à medida que os primeiros se mostram insuficientes.

5.3.1 Identificação dos Parâmetros para Poliestireno

Como já mencionado anteriormente, o ensaio com PS apresentou duas regiões praticamente lineares. É razoável relacionar a primeira ao comportamento elástico reversível e a segunda ao processo de plastificação irreversível⁴. Levando isso em consideração, os potenciais

⁴ Para se confirmar essa hipótese são necessários dados experimentais de carregamento cíclico.

escolhidos para calibração das constantes materiais estão apresentados abaixo:

$$\hat{W} = \mu \sum_{i=1}^3 (\hat{\varepsilon}_i)^2 \quad (5.4)$$

$$W_{vol} = \frac{1}{2} K (\varepsilon^{vol})^2 \quad (5.5)$$

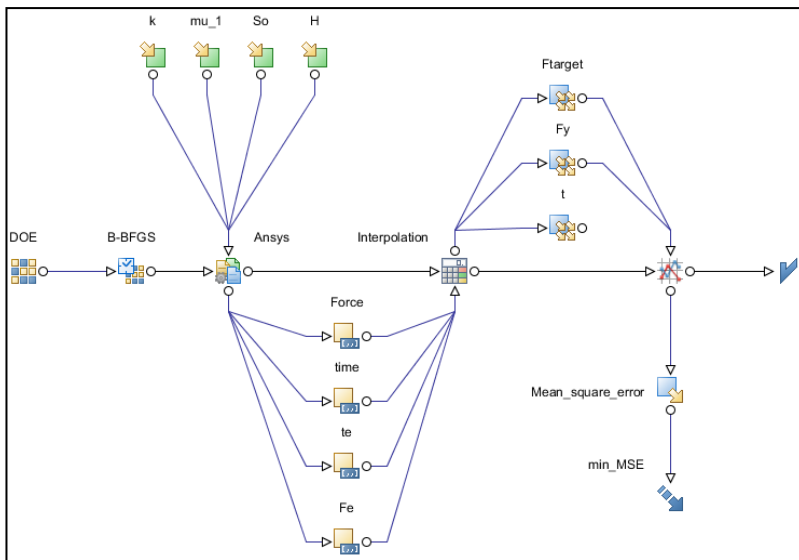
$$\varphi^p(\bar{q}) = \sigma_o^p \bar{q} + \frac{H}{2} \bar{q}^2 \quad (5.6)$$

Portanto, os parâmetros livres π para a minimização do erro quadrático no caso do poliestireno são:

$$\pi^{PS} = \{\mu, K, \sigma_o^p, H\} \quad (5.7)$$

Como não se tem uma expressão analítica entre μ^E e π^{PS} , o procedimento de calibração foi realizado com o auxílio do programa comercial modeFRONTIER®. Essa ferramenta permite a automatização dos processos de cálculo assim como otimização de funções e projetos paramétricos. A seqüência de operações é determinada através de um fluxo de trabalho que transmite as variáveis de entrada e saída para cada ferramenta de cálculo. A Figura 5.14 ilustra o fluxo de trabalho para a calibração das variáveis π^{PS} . Valores arbitrários iniciais são passados para um nó de cálculo que executa a simulação no ANSYS extraindo o vetor de forças de reação. Na seqüência, uma interpolação linear é feita para garantir que as forças calculadas, F^S , sejam avaliadas nos mesmos tempos de carregamento que os pontos na curva alvo de tração (F^{Alvo}). Finalmente a variável μ^E é calculada e associada com um objetivo de minimização.

Figura 5. 14 Fluxo de trabalho para a calibração dos parâmetros para PS.



Após se fazer a automatização das operações, basta selecionar um algoritmo de otimização capaz de resolver o problema de mínimo de maneira robusta e eficiente. Dentre os algoritmos de otimização destacam-se os métodos baseados em gradiente como o BFGS, Levenberg-Marquard, NLPQLP entre outros e os métodos heurísticos como os Algoritmos Genéticos (GAs). Os métodos heurísticos se caracterizam pela elevada robustez, pois dificilmente ficam aprisionados em ótimos locais. Essa característica é controlada pelos seus operadores não determinísticos como a mutação e cruzamento nos GAs. Em contrapartida são métodos com velocidade de convergência baixa quando comparados com os métodos baseados em gradiente que por sua vez conduzem a ótimos locais (Rao, 2009, Martinez, 1998).

Deste modo, para o ajuste de parâmetros optou-se por realizar uma estratégia mista, a qual possua robustez e velocidade de convergência. Em vista disso, o algoritmo de otimização *Hybrid* (Turco, 2011) foi escolhido para a calibração de parâmetros. A inicialização do algoritmo foi realizada utilizando vinte configurações distintas geradas através da técnica de Hipercubo Latino Uniforme. O algoritmo *Hybrid* executa 3/4 das simulações usando operadores genéticos, Deb e Goel, 2001, e 1/4 utilizando programação sequencial quadrática, Turco, 2009. O GA agrega características de paralelização computacional e robustez,

enquanto as operações de *SQP* tendem a acelerar o processo de otimização. A evolução de μ^E e das curvas força-tempo estão ilustradas nas Figura 5.15 e 5.16, respectivamente.

Figura 5. 15 Histórico de μ^E em escala logarítmica.

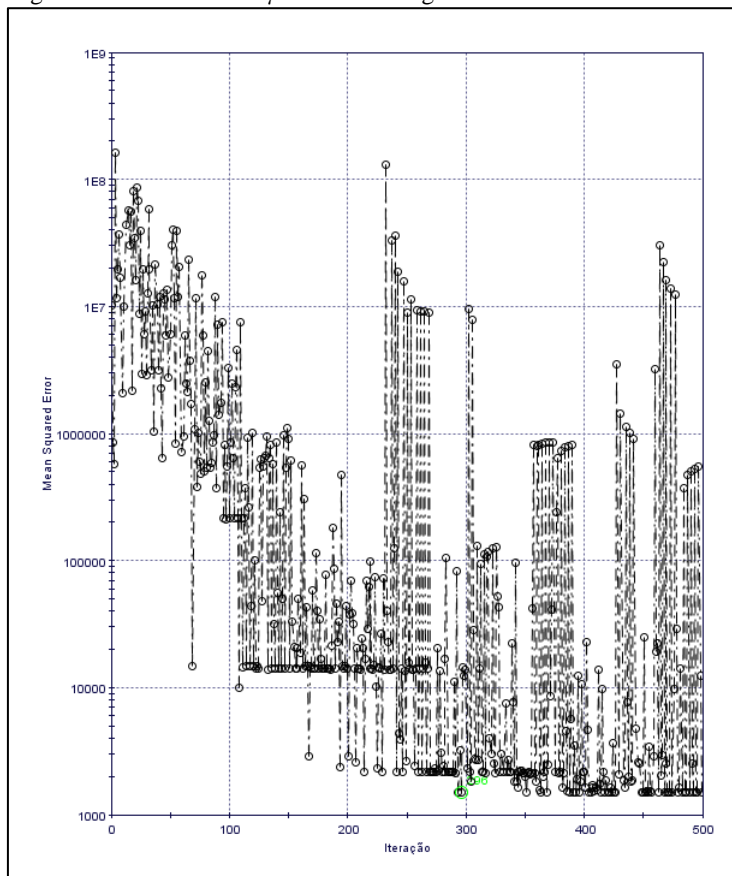
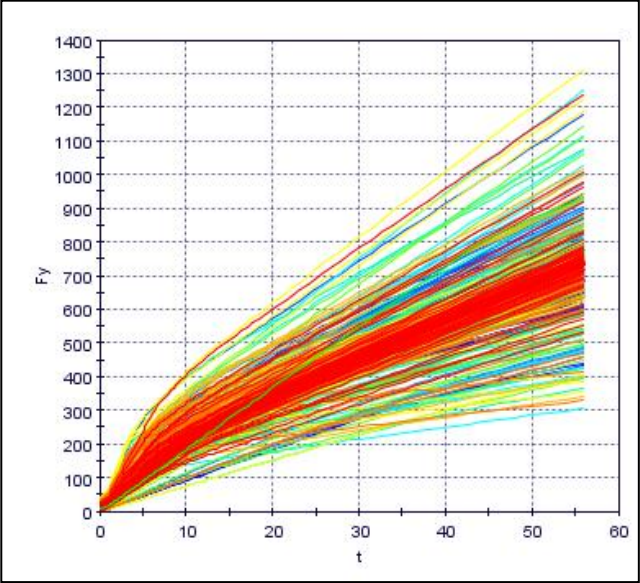


Figura 5. 16 Histórico das curvas força-tempo.

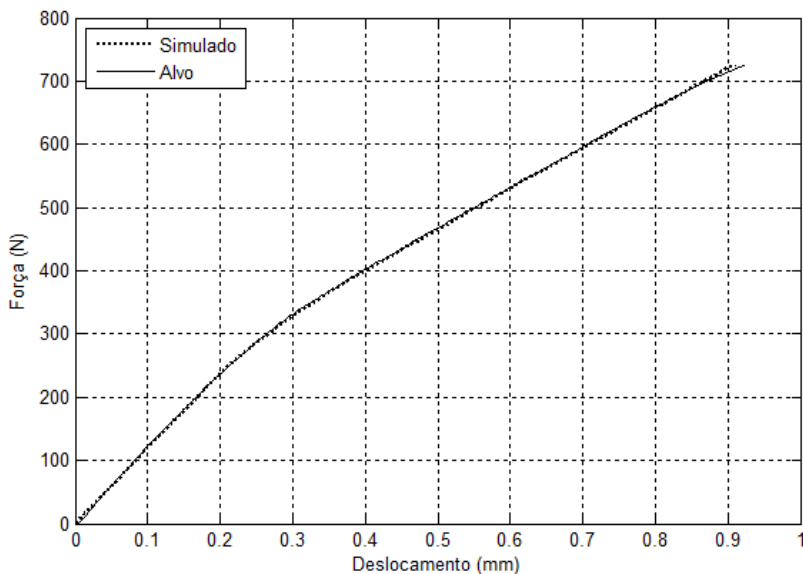


O valor do coeficiente de determinação r^2 atingido foi de 0.9992 caracterizando um modelo com excelente aderência nos dados experimentais. Os parâmetros materiais alcançados estão apresentados na Tabela 5.3. A curva força-deslocamento dos parâmetros ótimos e a curva alvo estão mostradas na Figura 5.17.

Tabela 5. 3 Parâmetros materiais calibrados para o PS.

Parâmetro	Valores (MPa)
μ	2053.0
K	5142.7
σ_0^p	49.00
H	6530.6

Figura 5. 17 Curva força-deslocamento simulada e experimental (alvo) do PS.



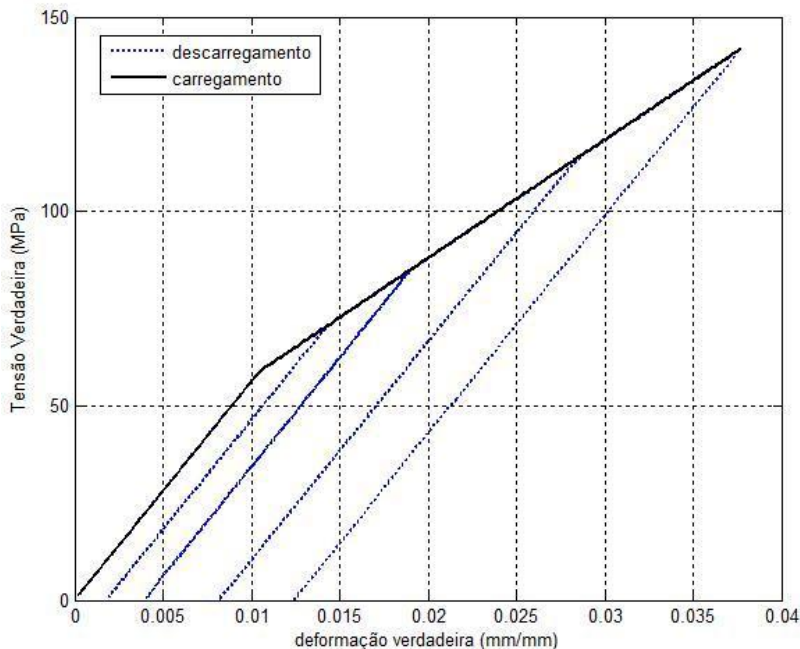
Os valores encontrados para os coeficientes elásticos estão próximos da faixa de valores encontrados na literatura $\mu = [1 - 2 \text{ GPa}]$ e $K = [3.5 - 5 \text{ GPa}]$ Callister, 2002. O limite de escoamento é dificilmente encontrado devido às características frágeis do PS. Apesar disso, pode-se comparar o limite de escoamento com o limite de resistência que está na faixa de 36 à 52 MPa. O valor elevado do módulo de encruamento H indica a resistência a deformação plástica desse material. Isso fica evidente ao se visualizar a expressão analítica do multiplicador plástico para o modelo de Hencky com encruamento linear (5.8), Fancello et al 2008.

$$\Delta q = \frac{\sqrt{\frac{3}{2}} \|\mu \varepsilon^{pr}\| - (\sigma_o^p + H q_n)}{3\mu + H} \quad (5.8)$$

Quanto maiores os valores de H , menor o incremento plástico Δq e menor a tendência do material de sofrer deformações plásticas até a ruptura. Como já mencionado, a curva força-deslocamento contém informações do material e geometria, assim depois de realizado o ajuste de parâmetros pode-se isolar o comportamento material ao se analisar

um único elemento com deslocamento prescrito. A Figura 5.18 ilustra o resultado de tensão-deformação para um caso de tração uniaxial homogênea.

Figura 5. 18 Tensão deformação verdadeira para o PS.



5.3.2 Identificação dos Parâmetros para Poli-ácido-lático

Ao analisar as curvas de tração do PS e PLA se observa que esses polímeros possuem um comportamento bastante similar. A diferença é percebida no processo de fratura, pois o primeiro sofre ruptura antes da estricção, enquanto no segundo a quebra ocorre rapidamente após a força alcançar seu valor máximo. Apesar dessa diferença, como o fenômeno de ruptura foge ao escopo do presente trabalho, não se fez distinção no comportamento mecânico desses dois polímeros.

Dessa forma, para o ajuste de parâmetros do PLA, o deslocamento imposto foi prescrito até o início da estricção, deixando o modelo material escolhido para o PS como uma boa opção para representar o comportamento do poli-ácido-lático. Assim os parâmetros para a minimização do μ^E são:

$$\pi^{PLA} = \{\mu, K, \sigma_0^p, H\} \quad (5.9)$$

A calibração dos parâmetros foi realizada com o auxílio do programa modeFRONTIER[®] de forma equivalente ao procedimento realizado para o PS. O valor do coeficiente de determinação r^2 ao final da minimização foi de 0.9993. Os valores das constantes π^{PLA} alcançadas através da otimização estão mostradas na Tabela 5.4. A curva de força-deslocamento gerada por esses parâmetros juntamente com a curva alvo estão mostradas na Figura 5.19. A curva tensão deformação gerado a partir de um único elemento material utilizando o modelo ajustado para o PLA está mostrado na Figura 5.20.

Figura 5. 19 Curva força-deslocamento simulada e experimental(alvo) do PLA.

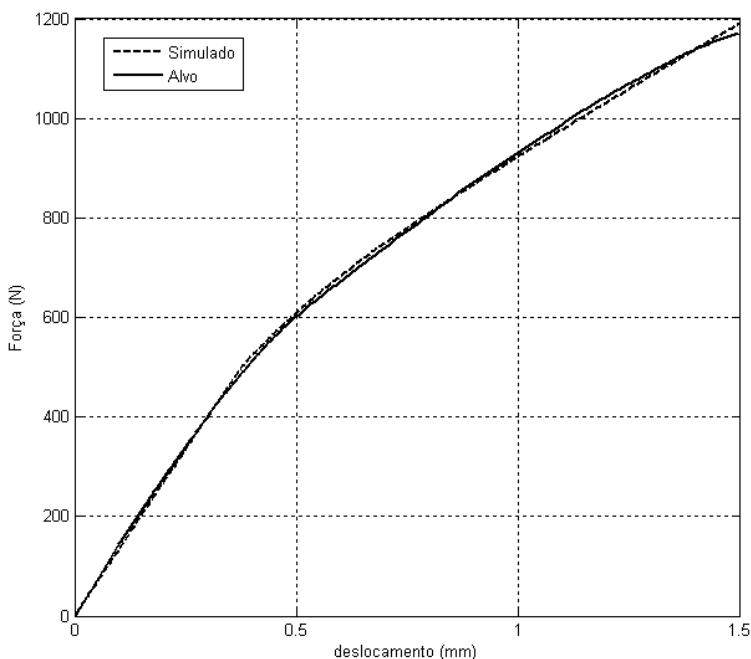
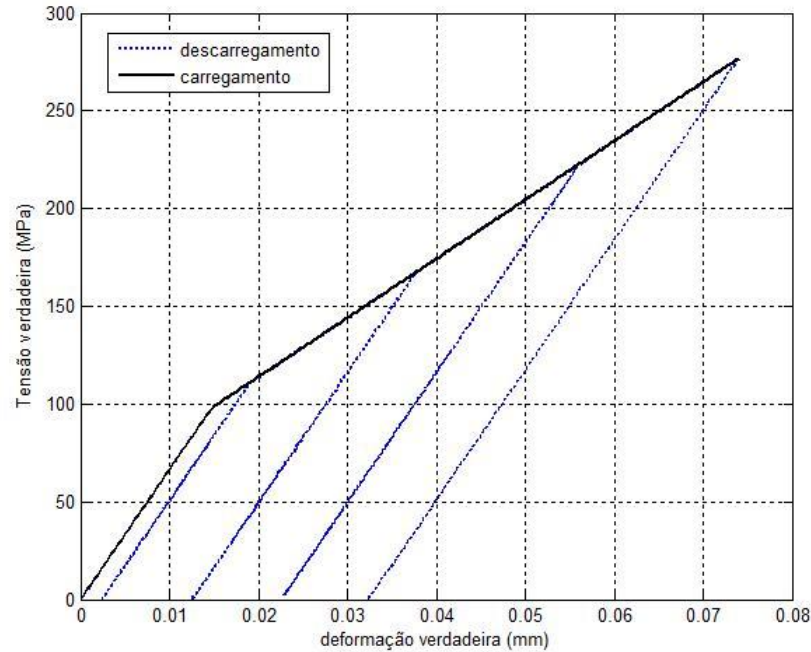


Tabela 5. 4 Parâmetros identificados para o PLA.

Parâmetro	Valores (MPa)
μ	2194.1
K	27690.0
σ_0^p	97.9
H	5346.6

Figura 5. 20 Tensão deformação verdadeira numa tração uniaxial para o PLA.



5.3.3 Identificação dos Parâmetros para Policarbonato

Diferente do PS e PLA, a curva força-deslocamento do policarbonato apresenta um comportamento altamente não linear. Logo, um potencial termodinâmico mais complexo deve ser escolhido a fim de se reproduzir via simulação numérica às características desse material.

O modelo de Odgen de segunda ordem, assim como o potencial plástico genérico (3.76) foram selecionados para modelar o PC, conforme apresentado abaixo.

$$\hat{W} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\mu_i}{\alpha_i} (\exp(\varepsilon_j)^{\alpha_i} - 1) \quad (5.12)$$

$$W_{vol} = \frac{1}{2} K(J-1)^2 \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \varphi^p(\bar{q}) &= \sigma_o^p \bar{q} + \frac{H}{2} \bar{q}^2 + \\ &\mu_0^p \left(\bar{q} + \frac{1}{\alpha_0^p} \exp[-\alpha_0^p \bar{q}] \right) + \frac{\mu_1^p}{\alpha_1^p + 1} \bar{q}^{\alpha_1^p + 1} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Dessa forma, os parâmetros livres π para a minimização do erro quadrático no caso do policarbonato são:

$$\pi^{PC} = \{\mu_1, \mu_2, \alpha_1, \alpha_2, K, \sigma_o^p, H, \mu_0^p, \mu_1^p, \alpha_0^p, \alpha_1^p\} \quad (5.15)$$

De forma análoga aos ajustes anteriores, um fluxo no código modeFRONTIER® foi criado para se realizar a automatização de processos e minimização do erro quadrático. O histórico do μ^E está mostrado na Figura 5.21, aonde se chegou ao valor de r^2 de 0.9965. Novamente isso mostra uma boa compatibilidade entre as curvas experimental, F^{Alvo} , e simulada, F^S , ambas apresentadas na Figura 5.22. A Tabela 5.5 apresenta os valores dos parâmetros enquanto a Figura 5.24 ilustra o comportamento tridimensional do corpo de prova simulado utilizando as constantes π^{PC} identificadas. Observa-se que após a estricção a deformação plástica se estende rapidamente pelo CP, deixando-o menos suscetível a concentração de tensões geradas pela formação de pescoço.

A curva tensão-deformação verdadeira do material para um estado de tração uniaxial é mostrada na Figura 5.23, a qual se observa uma região elástica, seguida de um patamar plástico bastante extenso e posterior crescimento exponencial das tensões. Microscopicamente pode-se associar a primeira região como um alongamento local das cadeias poliméricas. Ao se ultrapassar o limite de escoamento, as cadeias adjacentes deslizam uma sobre as outras iniciando um processo irreversível de deformação (ver Figura 2.6). Ao final, as cadeias se

encontram desemaranhadas e começam a se orientar limitando a capacidade de deslizamento e fazendo a tensão aumentar rapidamente até a ruptura.

Figura 5. 21 Histórico do erro quadrático para o PC.

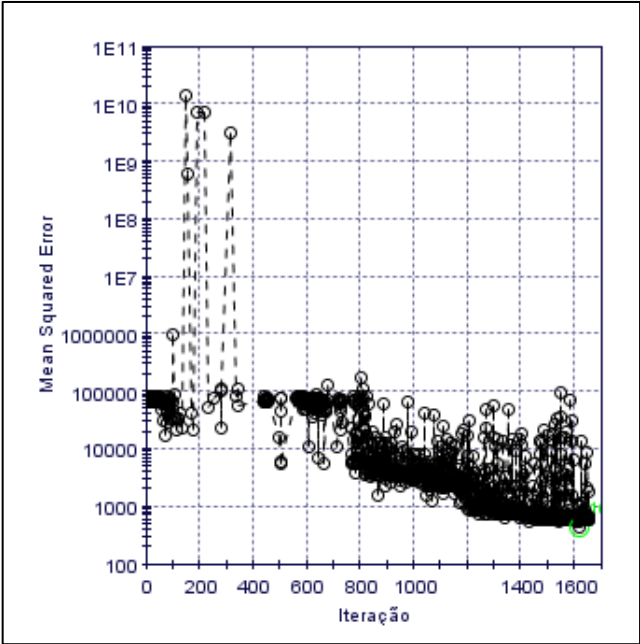


Tabela 5. 5 Parâmetros materiais identificados para o PC.

Potencial \hat{W}				
Odgen (MPa)			Volumétrico (MPa)	
μ_i	1503	1.38	K	3152
α^i	243	4.98		
Potencial φ^p (MPa)				
σ_0	86.67	H	162.60	
μ_0^p	148.00	μ_1^p	54.14	
α_0^p	4.28	α_1^p	17.44	

Figura 5. 22 Curva força-deslocamento simulada e experimental (alvo) do PC.

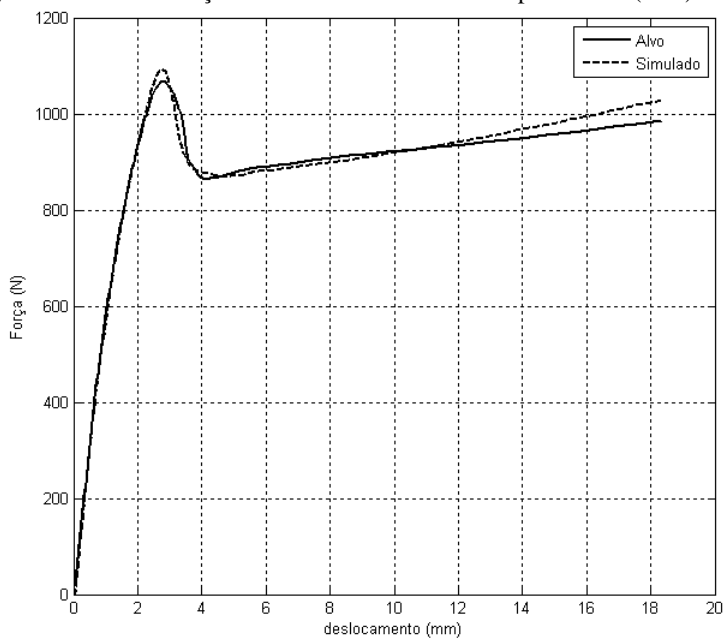


Figura 5. 23 Tensão deformação verdadeira para o PC.

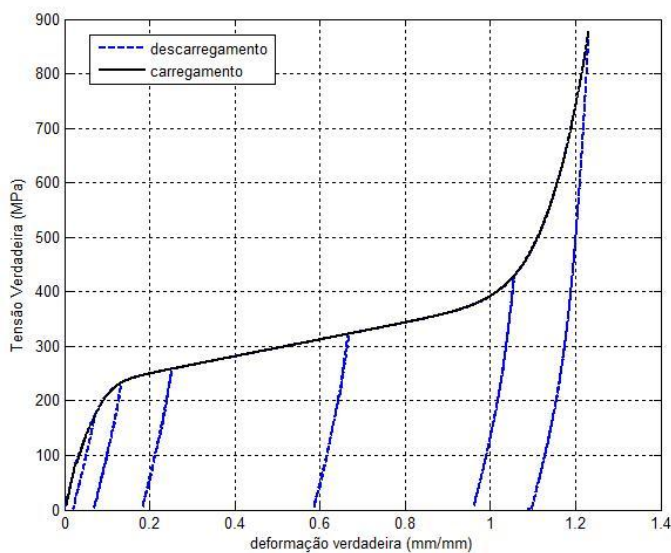
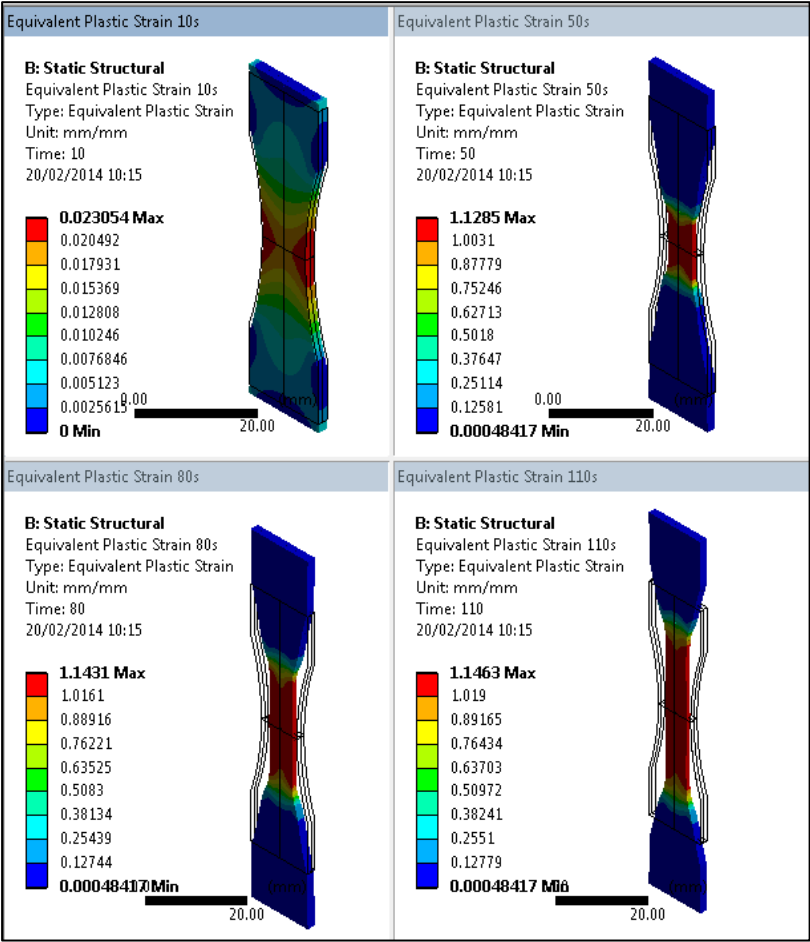


Figura 5. 24 Comportamento tridimensional do corpo de prova de PC.



5.4 VERIFICAÇÃO DO AJUSTE DE PARÂMETROS

A identificação de parâmetros em modelos complexos baseada num número pequeno de experimentos traz consigo o risco de se obter uma boa reprodução do caso analisado, mas insucesso quando estes parâmetros são utilizados para simular casos diferentes daquele utilizado para a identificação. No presente caso dispõe-se de valores experimentais obtidos com o mesmo material, todavia com geometria diferente, incorporando um entalhe presente na Figura 5.25. Assim, os

parâmetros identificados na seção anterior foram utilizados para simular o corpo de prova com entalhe e finalmente comparar os resultados. Foi reconstruída a geometria de 1/8 do corpo de prova e imposto condições de simetria. A Figura 5.25 apresenta a malha com as reflexões simétricas. O deslocamento simulado da garra foi definido a partir dos dados experimentais e segue a Tabela 5.6.

Figura 5. 25 Corpo de prova com Entalhe (*Esquerda*). Malha do corpo de prova (*Direita*).

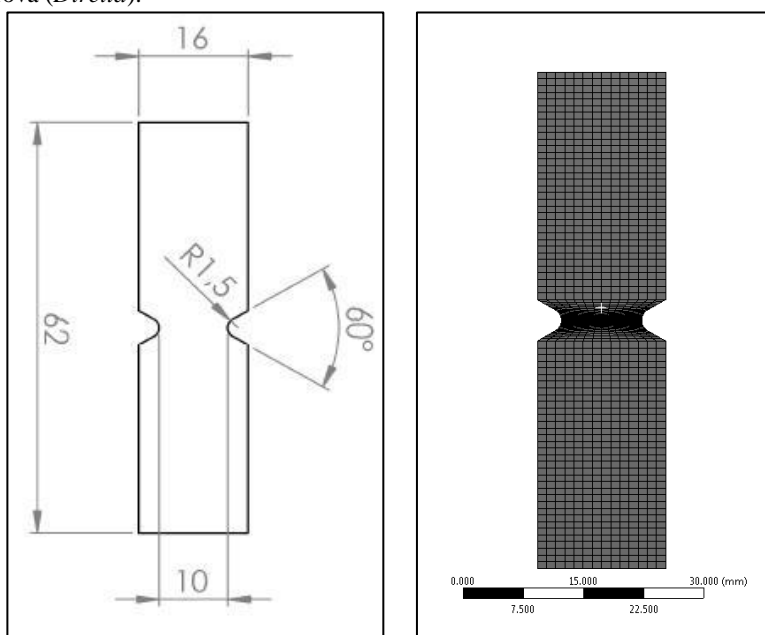


Tabela 5. 6 Deslocamento final e taxa de carregamento para corpo de prova com entalhe.

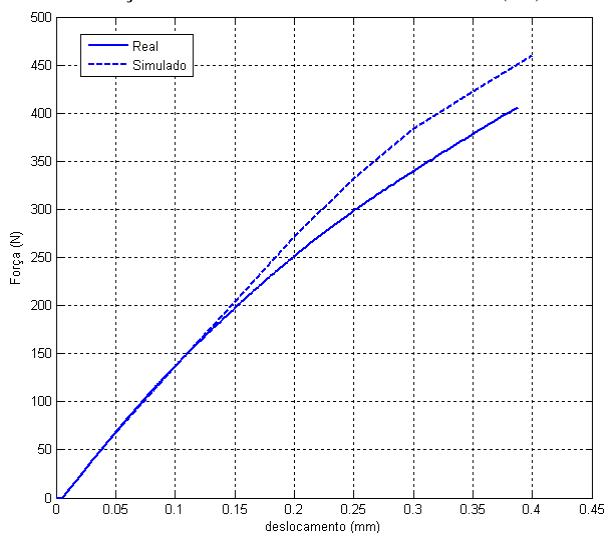
Polímero	Taxa (mm/min)	Deslocamento (mm)
PS	1	0.4
PLA	1	1.2
PC	10	4.5

A curva força-deslocamento, reais e simuladas, para o PS, PLA e PC estão mostradas na Figura 5.26, 5.27, 5.28 respectivamente. Visualmente os dados experimentais e numéricos apresentam semelhanças, no entanto, o PS e PLA se distanciam do comportamento simulado ao entrar na região plástica. Dentre os aspectos que podem contribuir com esta diferença cita-se a característica relativamente frágil desses materiais, a presença de dano distribuído (ausente no modelo) que se localiza para gerar o início de trinca. A geometria pode também ser considerada um fator de alteração de propriedades do material pois as condições de preenchimento do molde são diferentes, ocasionando modificações nas características morfológicas locais do polímero. O modelo de policarbonato apresenta comportamento mais não linear dentre os três polímeros analisados, no entanto apresentou boa concordância com o experimento em todo domínio das deformações observado pela Figura 5.28.

Tabela 5. 7 Coeficiente de determinação para CP com entalhe

Polímero	r^2
PS	0.9419
PLA	0.9690
PC	0.9890

Figura 5. 26 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PS).



De qualquer forma, os coeficientes de determinação para os três casos então próximos de um, conforme Tabela 5.7, evidenciando a qualidade dos modelos ajustados. A configuração deformada da análise realizada para o PC está apresentada na Figura 5.29.

Figura 5. 27 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PLA).

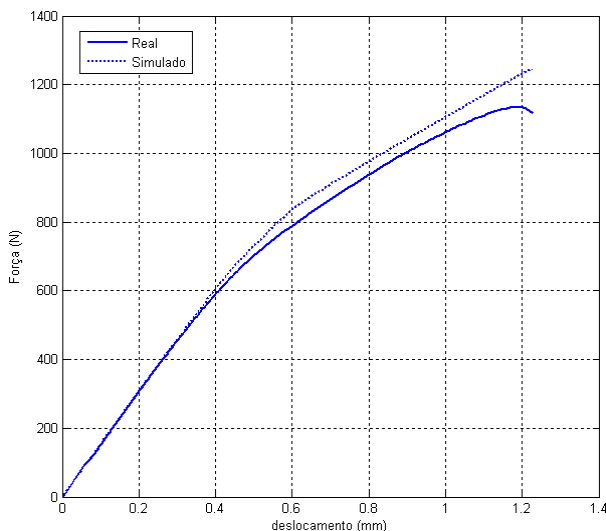


Figura 5. 28 Curva força-deslocamento do CP com entalhe (PC).

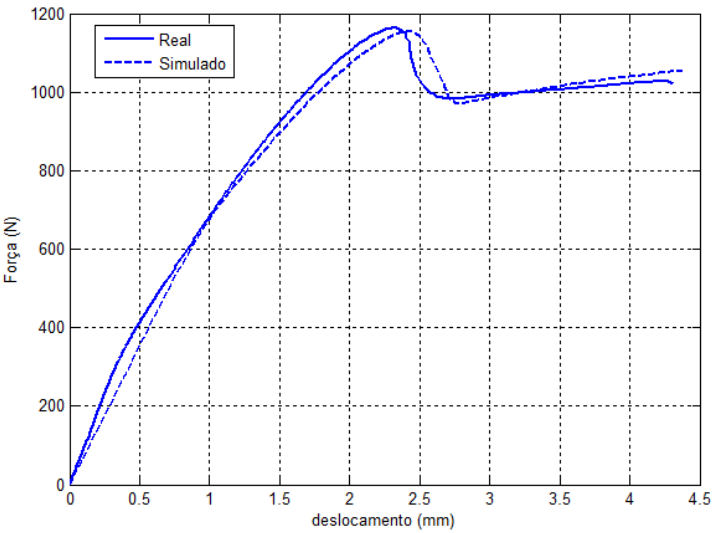
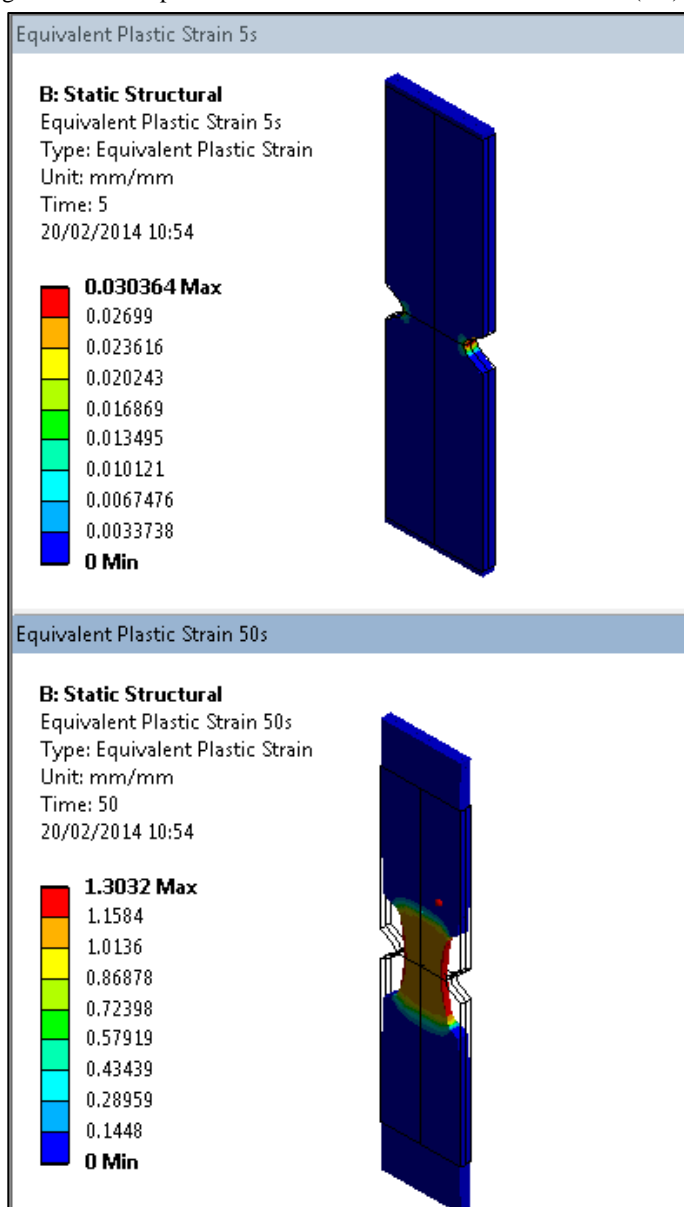


Figura 5. 29 Comportamento tridimensional do CP com entalhe (PC).



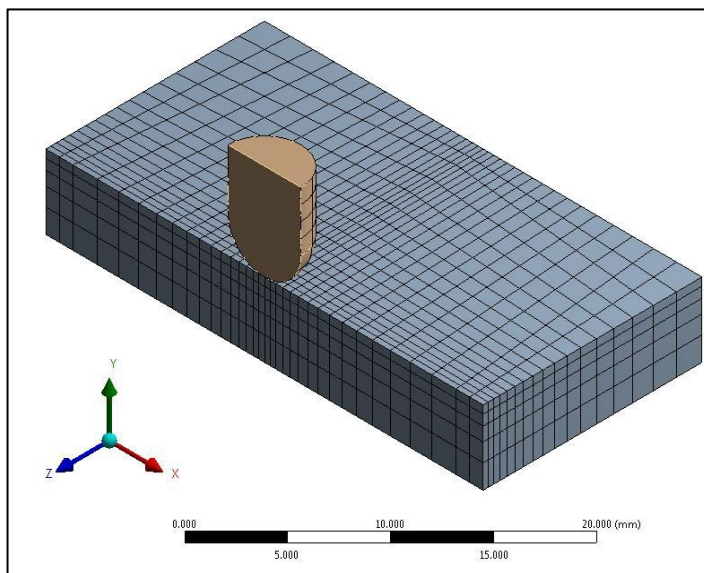
5.5 APLICAÇÕES

A vantagem de se implementar um modelo material em um código comercial como o Ansys é se beneficiar de toda a estrutura de Elementos Finitos que o programa proporciona. Assim, análises de deformações finitas com geometrias complexas, contato entre corpos, entre outras, podem ser incorporadas à análise. Nessa seção são apresentadas algumas aplicações genéricas utilizando o modelo material do PC obtido via ajuste de parâmetros.

5.5.1 Placa Engastada

Esse exemplo mostra uma placa espessa fixa nas extremidades, em contato com um punção rígido que se desloca 3.5 mm na direção -Y, conforme ilustrado Figura 5.30. Ao alcançar o deslocamento máximo o punção retorna a posição inicial. A condição de simetria nos planos ZY e XY foi utilizada para o modelo e as dimensões da placa são $L=30\text{mm}$, $C=30\text{mm}$, $e=5\text{mm}$.

Figura 5. 30 Placa engastada com punção rígido.



A Figura 5.31 mostra a configuração da placa no deslocamento máximo do punção como também a configuração final após a remoção

da ferramenta. Nas Figuras 5.32 e 5.33 são apresentadas a força versus deslocamento do punção e a evolução da máxima tensão principal.

Figura 5. 31 Configuração da placa em máximo deslocamento (*acima*).
Configuração da placa após remoção do punção (*abaixo*).

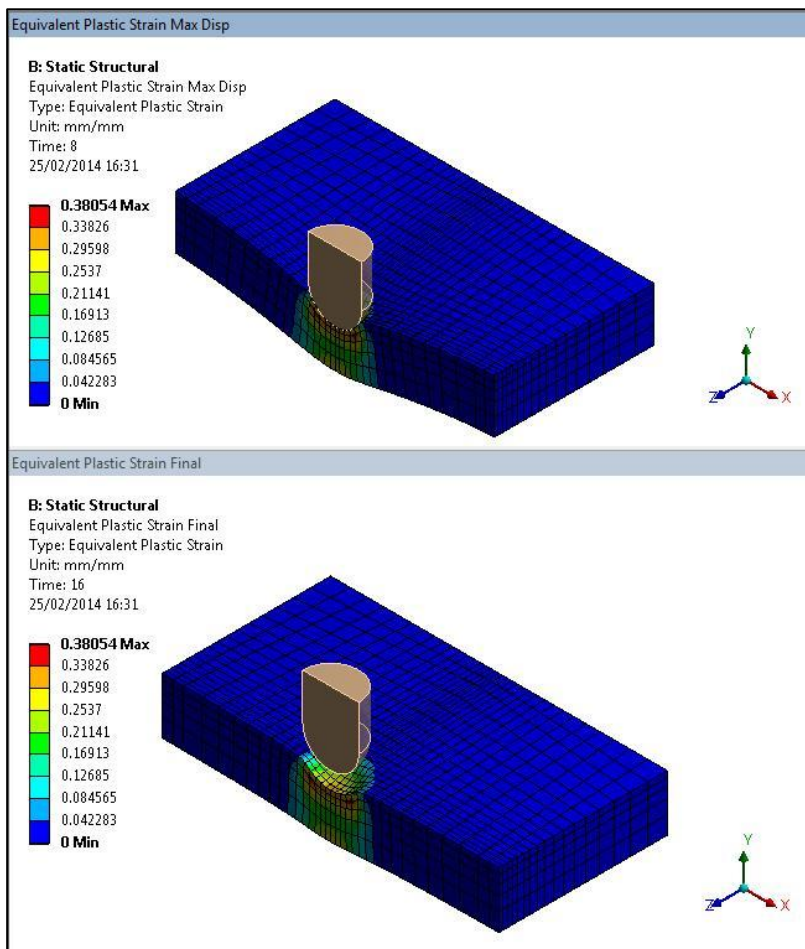


Figura 5. 32 Força versus deslocamento do punção.

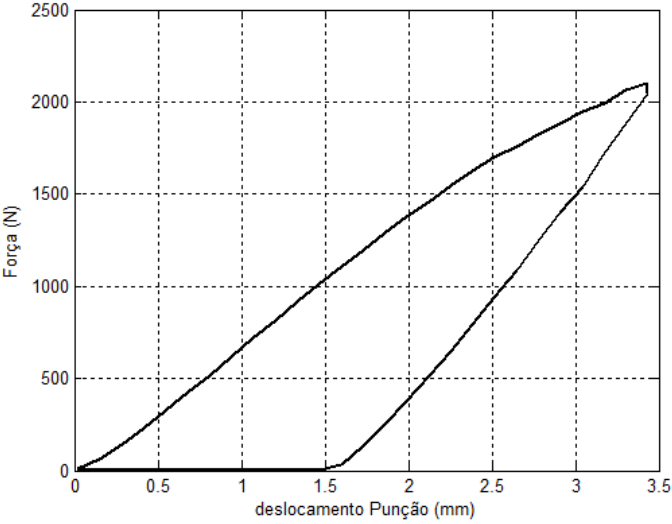
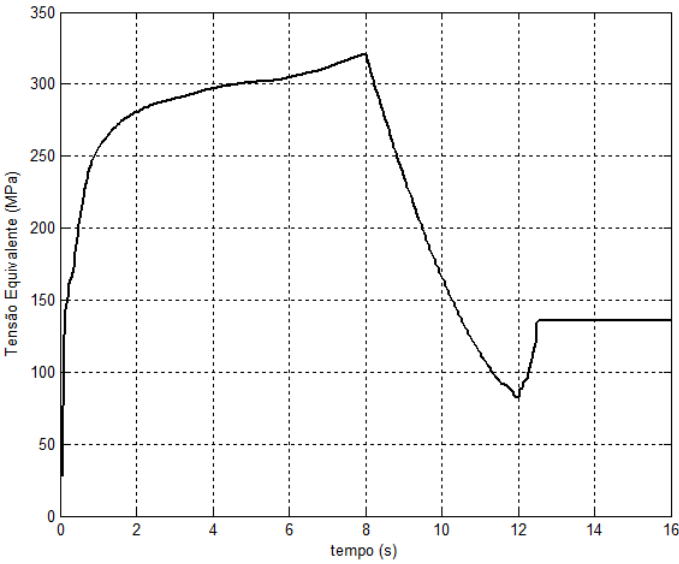


Figura 5. 33 Evolução da máxima tensão principal na coordenada (0,0,0).



5.5.2 Tubo Engastado

Nesse exemplo, um tubo com as extremidades engastadas é comprimido através de um punção semi-esférico considerado rígido conforme ilustrado na Figura 5.34. As dimensões do cilindro são $R_i=12$ mm, $R_e=16$ mm e $L=40$ mm. O punção, cujo raio mede 2.5 mm, foi deslocado de 5mm na direção Y e ao final retorna a posição de origem. O modelo ajustado de policarbonato com constantes presentes na Tabela 5.5 foi considerado para a análise. As simetrias nos planos XY e YZ foram utilizadas no modelo de Elementos Finitos e o contato entre os corpos foi considerado sem atrito.

O resultado da força de reação e deslocamento do punção está mostrado na Figura 5.35. A evolução da tensão equivalente com a deformação plástica acumulada é apresentada na Figura 5.36. A representação tridimensional do tubo no deslocamento máximo do punção e a forma final após remoção do carregamento estão ilustradas na Figura 5.37.

Figura 5. 34 Tubo engastado com punção semi-esférico.

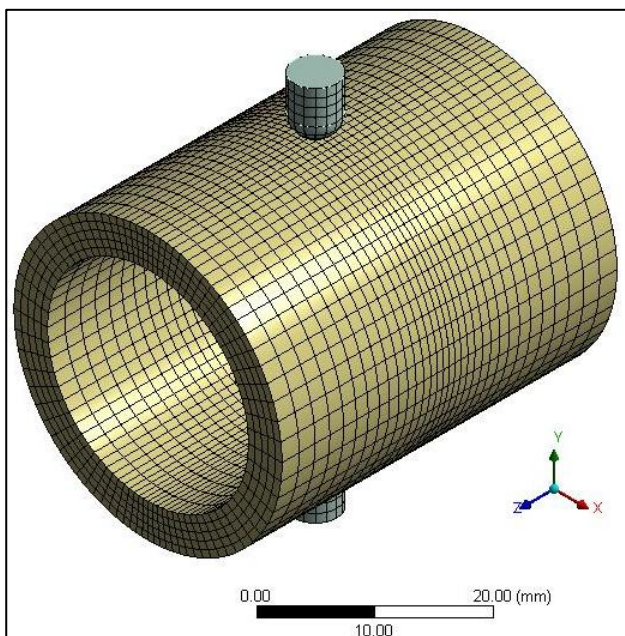


Figura 5. 35 Força versus deslocamento do punção para o caso do tubo.

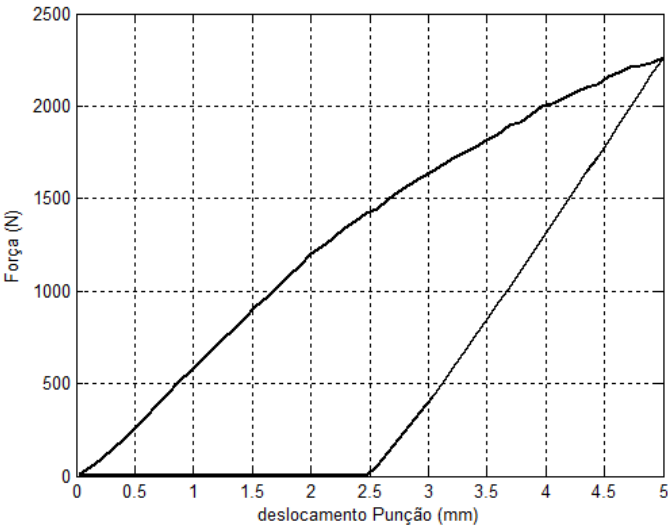


Figura 5. 36 Máxima tensão equivalente de von-Mises versus a máxima deformação plástica acumulada.

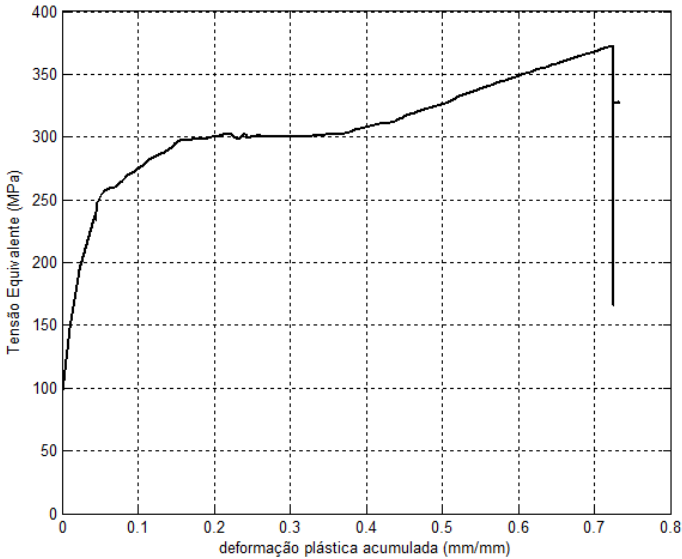
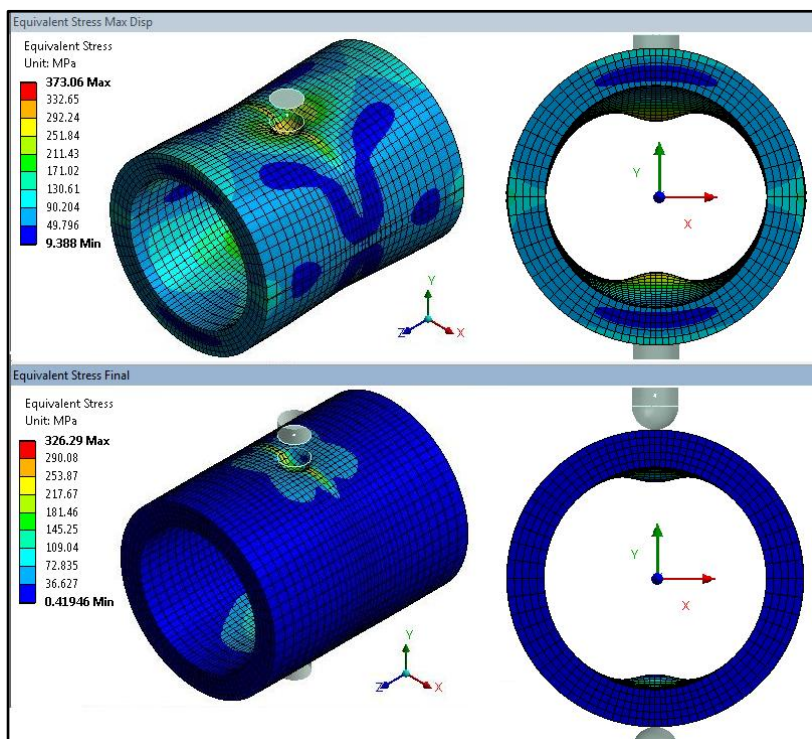


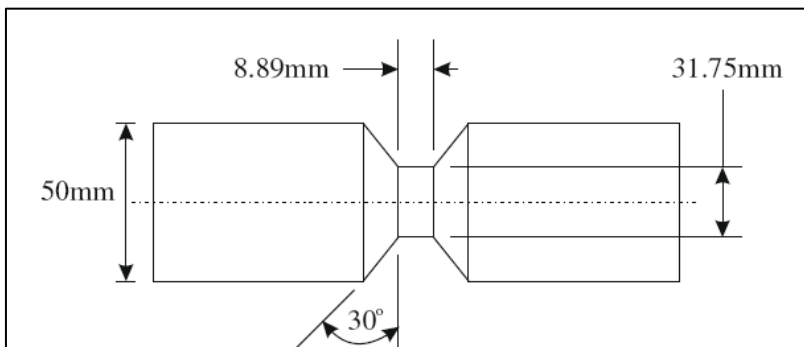
Figura 5. 37 Configuração do tubo em máximo deslocamento (*acima*).
Configuração do tubo após remoção do punção (*abaixo*).



5.5.3 Torção Reversa de Eixo Circular

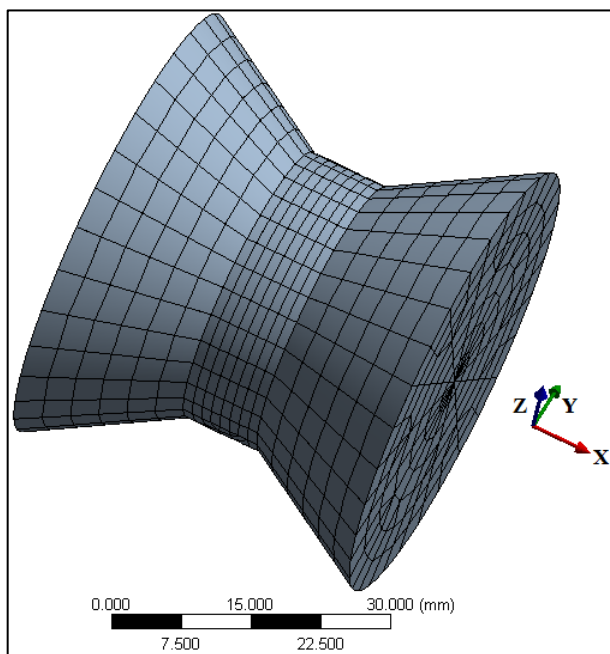
Esse exemplo foi inspirado em um dos problemas de aplicação descrito no artigo de Ames e Anand 2009, onde uma barra de seção variável de policarbonato sofre torção. A Figura 5.38 ilustra as dimensões do eixo considerada para a análise. Uma das extremidades é engastada e a outra sofre um deslocamento angular no eixo de rotação X, conforme Figura 5.39. Inicialmente é aplicado um ângulo de torção de 45° , depois o carregamento é invertido chegando a -45° , finalmente se retorna à posição referência. O movimento axial na face de torção é impedido, resultando em uma força de reação na direção X devido ao efeito de *Swift*.

Figura 5. 38 Dimensões do eixo para torção.



Fonte. Ames e Anand, 2009.

Figura 5. 39 Malha na posição de referência.



A configuração deformada do eixo na condição de máxima rotação é mostrada na Figura 5.40. As curvas de torque e força axial versus ângulo então presentes nas Figuras 5.41 e 5.42 respectivamente.

A Figura 5.43 ilustra a evolução da máxima tensão de cisalhamento com a máxima deformação cisalhante.

Figura 5. 40 Eixo na configuração de máxima rotação.

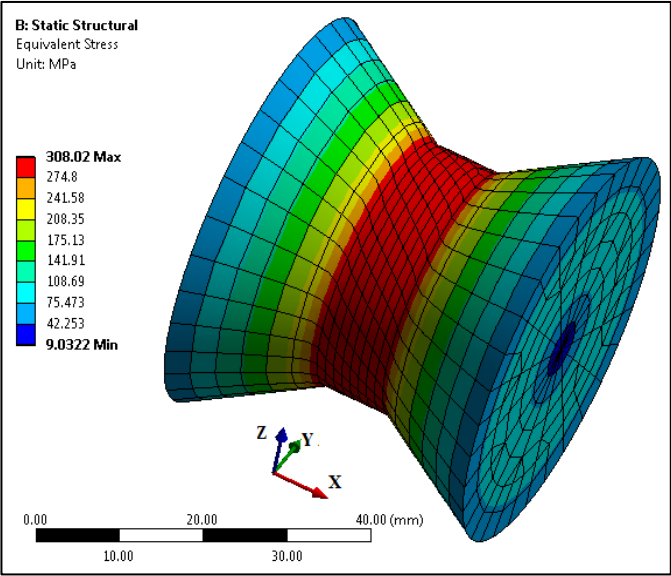


Figura 5. 41 Torque versus ângulo.

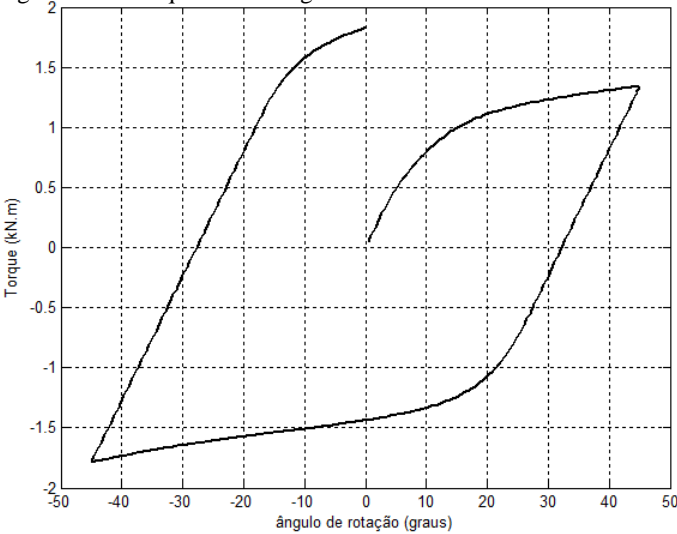


Figura 5. 42 Força axial versus ângulo.

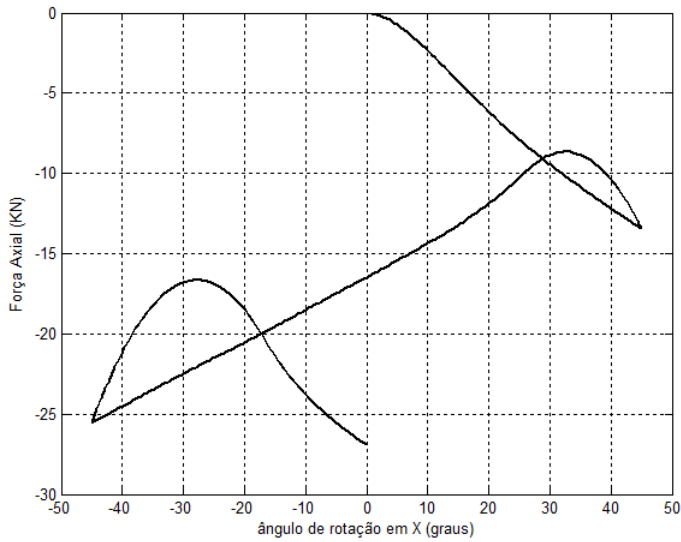
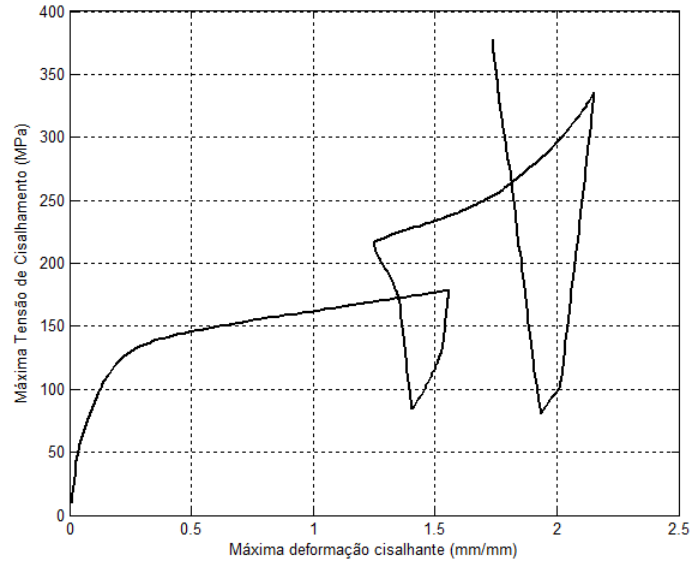


Figura 5. 43 Máxima tensão de cisalhamento versus deformação cisalhante.



6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi executada uma análise e implementação de um conjunto de modelos constitutivos de viscoplasticidade em regime de deformações finitas de acordo com os trabalhos de Ortiz e Stainier 1999, Vassoler 2007 e Fancello et al 2008. A hipótese de isotropia foi adotada de forma a se formular as equações constitutivas através da decomposição espectral dos tensores de deformação elástico e plástico. Utilizou-se a abordagem variacional para se determinar a evolução das variáveis internas e do tensor de tensões, onde um problema de mínimo é resolvido nos pontos de integração para cada incremento de tempo.

A estrutura genérica do modelo constitutivo adotado permite a escolha de potenciais arbitrários, que por sua vez podem gerar diferentes comportamentos não lineares entre tensão e deformação. Ao combinar expressões de potenciais já existentes como o de Odgen, Hencky, Perzyna, Ramber-Osgood, pôde-se implementar soluções particulares no código de análise implícita *ANSYS* utilizando a sub-rotina de material *usermat.f*.

O modelo é capaz de descrever o comportamento de materiais termoplásticos, fato comprovado após identificação de parâmetros utilizando dados experimentais de força-deslocamento de três polímeros diferentes, PS, PLA e PC. Para execução do processo de minimização contou-se com o auxílio do código de otimização *modeFRONTIER*®, sendo que o algoritmo *Hybrid* se mostrou robusto em vista dos resultados dos coeficientes de determinação, r^2 , alcançados para os três casos.

Os parâmetros ajustados foram posteriormente utilizados para simular um ensaio de tração usando CP com entalhe. No caso do PC os resultados foram satisfatórios ao comparar os resultados simulados e experimentais. Os polímeros com características mais frágeis como o PS e PLA apresentaram diferenças ao entrar na região plástica. Estes resultados confirmaram que o ajuste de parâmetros deve ser executado utilizando simultaneamente todos os dados experimentais disponíveis para o material que deseja ser representado. Além disso, ensaios com ciclos de carregamento e descarregamento são extremamente importantes para se confirmar as hipóteses de existência do fenômeno de plasticidade.

Análises tridimensionais, com carregamento de torção e contato sem atrito, foram realizadas com a finalidade de se verificar a estabilidade do modelo implementado em simulações mais complexas. A convergência das análises mostra que o cálculo do tensor de quarta

ordem de Jaumann é a correta escolha para a matriz tangente material no código comercial ANSYS.

É importante ressaltar que a escolha do potencial para o ajuste de parâmetros foi arbitrária, sendo que outros potenciais podem resultar no mesmo nível de erro encontrado nesse trabalho. Ao invés da métrica de erro quadrático médio, trabalhos futuros, podem utilizar o critério AIC (Akaike Information Criterion), Akaike, 1974, o qual leva em conta a maximização da verossimilhança e a redução do grau de liberdade do modelo.

Para trabalhos futuros, seria interessante realizar uma comparação de dados experimentais de torção, compressão e carregamento cíclico com as simulações realizadas com modelo material ajustado via mínimos quadrados. Além disso, em futuros desenvolvimentos, modelos de evolução plástica anisotrópicos, incorporação de dano, sensibilidade a temperatura e pressão hidrostática, podem ser implementados na rotina *usermat* a fim de se gerar um modelo representativo em todo domínio de comportamento.

REFERÊNCIAS

ANSYS INC HELP MANUAL14.5, Ansys Inc., PA, EUA, 2013.

ANSYS MECHANICAL APDL TECHNOLOGY DEMONSTRATION GUIDE, ANSYS Inc. Release 15.0, Southpointe, 2013.

AKAIKE, HIROTUGU, **A new look at the statistical model identification**, IEEE Transactions on Automatic Control 19 (6): 716–723, 1974.

AMES, N.M., SRIVASTAVA V., ANAND, L. **A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part II: Application**. International Journal of Plasticity 25 2009, p 1495–1539.

BELYTSCHKO, T., LIU, W. K., MORAN B., **Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures**, J. Wiley & Sons, New York, 2000, 600pp. ISBN 0471987735.

BRASSART, L., STAINIER, L. **On convergence properties of variational constitutive updates for elasto-visco-plasticity**. GAMM-Mitt. 35, No. 1, 2012, p 26-42.

BRÜCKNER, S. ALLEGRA, G. PEGORARO, M. LAMANTIA, F. P. **Scienza e tecnologia dei materiali polimerici**, EdiSES s.r.l, Napoli, 2001.

CALLISTER, W. **Materials Science and Engineering – An Introduction**. John Wiley & Sons, Inc. 7th ed. New York, NY 2009.

CANEVAROLO JR, S.V. **Ciência dos Polímeros: um Texto Básico para Tecnólogos e Engenheiros**. Artliber Editora, São Paulo, 2002.

DEB, K. GOEL, T., **Controlled Elitist Non-dominated Sorting Genetic Algorithms for Better Convergence**. KanGal Report, 200004, 2001.

FRANK, G.J. BROCKMEN R.A., **A Viscoelastic-Viscoplastic Constitutive Model for Glassy Polymers**, International Journal of

Solids and Structures, Volume 38, Issues 30-31, July 2001, pp 5149-5164.

FANCELLO, E.A., PONTHOT, J.P., STAINIER L., **A variational framework for nonlinear viscoelastic models in finite deformation regime**. Journal of Computational and Applied Mathematics 215 400 – 408, 2005.

FANCELLO, E.A., PONTHOT, J.P., STAINIER L., **A variational formulation of constitutive models and updates in non-linear finite viscoelasticity**. International journal for numerical methods in engineering, 2006.

FANCELLO, E. VASSOLER J. M. STAINIER L., **A variational framework for a set of hyperelastic-viscoplastic isotropic models**. Mechanics of Solids in Brazil 2007.

FANCELLO, E. VASSOLER J. M. 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, 2008.

GURTIN, M. E. **An Introduction to Continuum Mechanics**. Academic Press, New York, 1981

GURTIN, M.E., FRIED E., ANAND, L., **The Mechanics and Thermodynamics of Continua**. Cambridge University, 2009.

Jl, W., WAAS, A. M., BAZANT Z.P. **On the Importance of Work-Conjugacy and Objective Stress Rates in Finite Deformation Incremental Finite Element Analysis**. Journal of Applied Mechanics, 2013.

HOLZAPFEL G., **Non Linear Solid Mechanics**, Wiley, 2000.

KRONER, E.. **Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen**. Archive for Rational Mechanics and Analysis 4, 273–334, 1960.

LEE, E.H., & LIU, D.T.. **Finite-strain elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis**. Journal of Applied Physics 38, 19–27, 1967.

LIN R., **Numerical Study of Consistency of Rate Constitutive Equations with Elasticity at Finite Deformation**. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2002.

MALVERN, L.E. **Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium**. Prentice-Hall, Inc. New Jersey, 1969.

MARTINEZ M. J., SANTOS S. A., **Métodos Computacionais de Otimização**, Campinas: Departamento de Matemática Aplicada – IMECC-UNICAMP, 1998.

MCMECKING, R.M. AND RICE, J.R. **Finite Element Formulations for Problems of Large Elastic-Plastic Deformation**. International Journal of Solids and Structures. Vol. 121. 601-616. 1975.

MORITA, A. T. **Placas e Parafusos Poliméricos auto-reforçados para a Fixação Interna Rígida de Fraturas**. Tese (Tese Doutorado), Universidade Estadual de Campinas, 2006.

NOELS, L., **Derivation de L'element Hyper-élastique**. Université de Liège – LTAS-Milieux continus & Themomécanique. Liège, Belgique 2004.

ORTIZ, M., REPETTO E.A., **Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals**, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999, 47, pp 397-462.

ORTIZ M., MARTIN J.B., **Symmetry-preserving return mapping algorithms and incrementally extremal paths: an unification of concepts**, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1989, 28, pp 1839-1853.

ORTIZ, M., STAINIER, L., **The variational formulation of viscoplastic constitutive updates**. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 171, num. 3-4, 1999, pp 419-444.

OGDEN, R.W. 1984. **Non-Linear Elastic Deformations**. Chichester: EllisHorwood.

PAINTER, PAUL C., COLEMAN, MICHAEL M. **Fundamentals of Polymer Science : An Introductory Text**. Lancaster, Pa.: Technomic Pub, 1997.

PRESS H. W., TEUKOLSHY A. S., VETTERLING T. W., FLANNERY P. B.. **Numerical Recipes in Fortran 77 – The Art of Scientific Computing 2nd ed.** Cambridge University, New York, 1992.

RAO, SINGIRESU S., **Engineering Optimization Theory and Practice 4th Edition**, New Jersey: John Wiley & Sonc, 2009.

SOUZA NETO, EA; PERÍC, D.; OWEN, DRJ. **Computational Methods for Plasticity – Theory and Applications**. John Wiley & Sons Ltd, Torquay, UK., 2008.

STAINIER L., **Approche variationnelle en thermomécanique des solides**. Montpellier, France, 2006.

SZABO, B. A., BABUSKA, I., **Finite Element Analysis**. New York: John Wiley & Sonc Inc, 1991.

TURCO, ALESSANDRO. **Hybrid – description**. Esteco Technical Report, 2011.

TURCO, ALESSANDRO. **Adaptive Filter SQP - description**. Esteco Technical Report, 2009.

VASSOLER J. M. **Modelos Constitutivos Variacionais de Viscoelasticidade e Viscoplasticidade para Materiais Termoplásticos Submetidos a Deformações Finitas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.

VIERA, L. F. **Influência de Parâmetros de Processamento e Geometria em Propriedades Mecânicas de Peças de PS, PC e PLA Moldadas por Injeção**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Universidade Federal de Santa Catarina, 2012.

APÊNDICE A – Cálculo da derivada de uma função tensorial isotrópica genérica $Y(X)$ (Souza Neta *at al*, 2008):

- (i) Dado um tensor \mathbf{X} , calcular os autovalores x_i e as autoprojeções, \mathbf{E}_i ($i=1,2,3$).
- (ii) Calcular os autovalores y_i e suas derivadas $\partial y_i / \partial x_j$ para ($i,j=1,2,3$)
- (iii) Montar da derivada $D(\mathbf{X})$

$$\begin{aligned}
 D(\mathbf{X}) \left\{ \begin{aligned}
 & \sum_{a=1}^3 \frac{y_a}{(x_a - x_b)(x_a - x_c)} \left\{ \frac{d\mathbf{X}^2}{d\mathbf{X}} - (x_b + x_c)I s \right. \\
 & \quad - [(x_a - x_b) + (x_a - x_c)] \mathbf{E}_a \otimes \mathbf{E}_a \\
 & \quad \left. - (x_b - x_c)(\mathbf{E}_b \otimes \mathbf{E}_b - \mathbf{E}_c \otimes \mathbf{E}_c) \right\} \\
 & \quad + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \mathbf{E}_i \otimes \mathbf{E}_j \quad \text{para } x_1 \neq x_2 \neq x_3 \\
 & s_1 \frac{d\mathbf{X}^2}{d\mathbf{X}} + s_2 I s - s_3 \mathbf{X} \otimes \mathbf{X} + s_4 \mathbf{X} \otimes I + s_5 I \otimes \mathbf{X} \\
 & \quad - s_6 I \otimes I \quad \text{para } x_a \neq x_b = x_c \\
 & \left(\frac{\partial y_1}{\partial x_1} - \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \right) I s + \frac{\partial y_1}{\partial x_2} I \otimes I \quad \text{para } x_1 = x_2 = x_3
 \end{aligned} \right. \quad (A.1)
 \end{aligned}$$

Onde,

$$I s_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (A.2)$$

$$\left(\frac{d\mathbf{X}^2}{d\mathbf{X}} \right)_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} X_{lj} + \delta_{il} X_{kj} + \delta_{jl} X_{ik} + \delta_{kj} X_{il}) \quad (A.3)$$

$$s_1 = \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^2} + \frac{1}{(x_a - x_c)} \left(\frac{\partial y_c}{\partial x_b} - \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) \quad (\text{A.4})$$

$$s_2 = 2x_c \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^2} + \frac{(x_a + x_c)}{(x_a - x_c)} \left(\frac{\partial y_c}{\partial x_b} - \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) \quad (\text{A.5})$$

$$s_3 = 2 \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^3} + \frac{1}{(x_a - x_c)^2} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_c} + \frac{\partial y_c}{\partial x_a} - \frac{\partial y_a}{\partial x_c} - \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) \quad (\text{A.6})$$

$$s_4 = 2x_c \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^3} + \frac{1}{(x_a - x_c)} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_c} - \frac{\partial y_c}{\partial x_b} \right) + \frac{x_c}{(x_a - x_c)^2} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_c} + \frac{\partial y_c}{\partial x_a} - \frac{\partial y_a}{\partial x_a} - \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) \quad (\text{A.7})$$

$$s_5 = 2x_c \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^3} + \frac{1}{(x_a - x_c)} \left(\frac{\partial y_c}{\partial x_a} - \frac{\partial y_c}{\partial x_b} \right) + \frac{x_c}{(x_a - x_c)^2} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_c} + \frac{\partial y_c}{\partial x_a} - \frac{\partial y_a}{\partial x_a} - \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) \quad (\text{A.8})$$

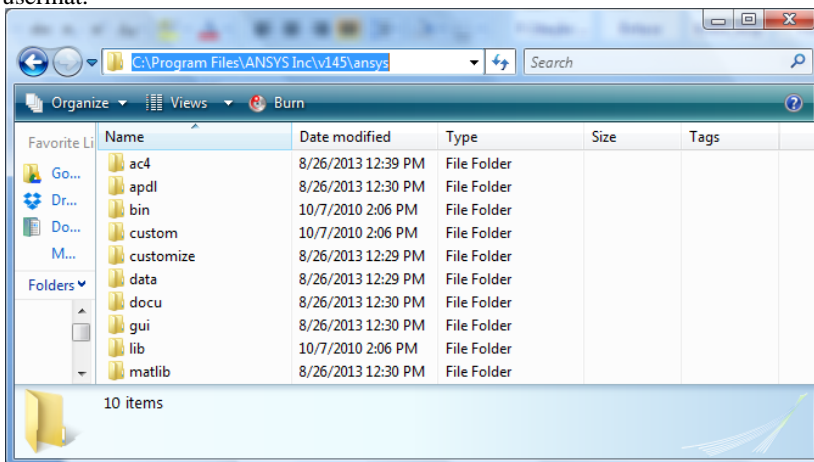
$$s_6 = 2x_c^2 \frac{(y_a - y_c)}{(x_a - x_c)^3} + \frac{x_a x_c}{(x_a - x_c)} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_c} + \frac{\partial y_c}{\partial x_a} \right) - \frac{x_c^2}{(x_a - x_c)^2} \left(\frac{\partial y_a}{\partial x_a} + \frac{\partial y_c}{\partial x_c} \right) - \frac{(x_a + x_c)}{(x_a - x_c)} \frac{\partial y_c}{\partial x_b} \quad (\text{A.9})$$

Os índices a,b,c representam uma permutação cíclica dos índices 1,2,3.

ANEXO 1 – Tutorial para compilar a rotina usermat

Os arquivos para a utilização das UPF (User Programmable Features) não são instaladas por padrão, portanto o usuário deve solicitar no momento da instalação do programa Ansys. Sendo assim, tenha certeza que dentro do diretório de instalação (*C:\Program Files\Ansys Inc\vXXX\ansys*) estão contidos os diretórios *Custom* e *Customize*, conforme ilustrado na Figura A1.

Figura A1. Localização dos diretórios necessários para a compilação da rotina usermat.

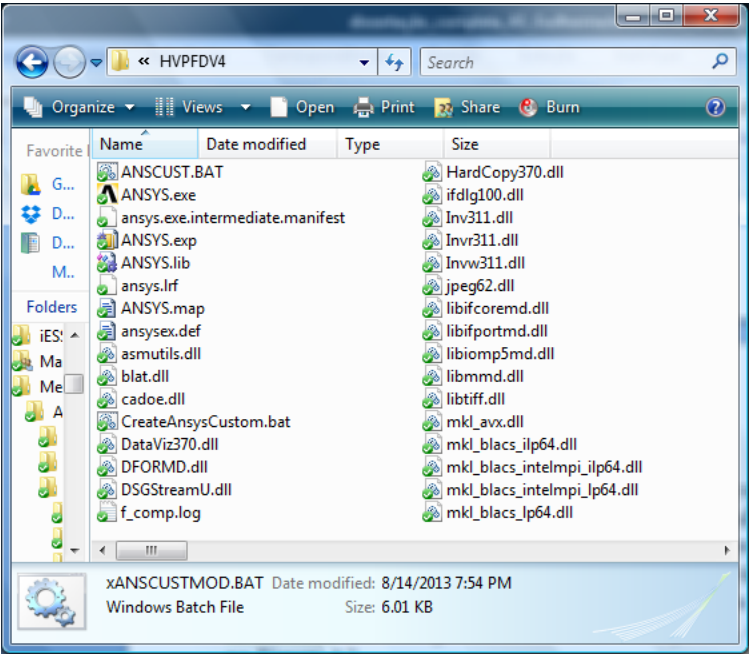


Dentro do diretório *Customize\User* estão diversas rotinas que podem ser modificadas pelo usuário, inclusive a rotina *usermat.f* a qual foi modificada e utilizada para a implementação descrita nesse trabalho. Caso seja necessário o uso de subrotinas adicionais coloque-as no mesmo arquivo da rotina *usermat*. No diretório *custom\user\winx64* são encontrados os arquivos necessários para recompilar o programa Ansys. É recomendado que se copie a rotina *usermat* junto com outros arquivos necessários:

- ANSCUST.BAT
- ansys.lrf
- ansysex.def

para um novo diretório onde será gerado o novo executável Ansys. Após isso basta executar o arquivo *ANSCUST.BAT* o qual tem uma variável interna que aponta para o Compilador *Intel Fortran 11*. Verifique se a variável de ambiente *%IFORT_COMPILER11%* está apontando para o caminho correto de instalação do compilador. Após a execução código *ANSCUST.BAT* será gerado o executável *ANSYS.exe*, conforme ilustrado na Figura A2.

Figura A2. Diretório de compilação da rotina *usermat*.



Caso essa operação não tenha gerado o executável *ANSYS.exe* observe o arquivo de *f_comp.log*, pois ele irá informar o que pode ter ocorrido de errado durante a compilação.

ANEXO 2 – Utilizando o executável Ansys.exe compilado com a nova rotina *Usermat*

Uma vez gerado o novo *ANSYS.exe* existem duas possibilidades de se utilizar esse executável, por linha de comando ou via Ansys Workbench. Para rodar uma análise via linha de comando basta criar um caso de Elementos Finitos no Ansys *APDL* chamando de, por exemplo, *ansysCase.dat* e executar a seguinte linha de comando de *DOS*:

```
%AnsysDir%\ansys140 -b -i ansysCase.dat -o solve.out -np 1 -custom  
"%customDir%\ansys.exe"
```

onde a variável *%AnsysDir%* contém o caminho do Ansys, por exemplo, *C:\Program Files\ANSYS Inc\v140\ansys\bin\winx64* e a variável *%customDir%* contém o caminho para o diretório onde está o novo executável *ansys.exe* (Anexo 2). O comando *-np* identifica o número de processos em paralelo e deve ser deixado igual a um caso não se tenha realizado algum procedimento que possibilite o Ansys rodar com processos em paralelo.

É possível utilizar o novo *Ansys.exe* através do Ansys Workbench, basta configurar o novo executável em Ansys Mechanical > Tools > Solve Process Settings, adicione um novo executável em *Add local*, por exemplo *NewMat*. Personalize seu executável em *Advanced* informando o número de processadores e o local do novo *ansys.exe*, conforme Figura A3. Após isso, basta utilizar esse novo executável no momento de rodar a análise *Solve > NewMat*.

Figura A3. Adicionando um novo executável no Ansys Mechanical .

Advanced Properties

☐ Distribute Solution (if possible)

Use GPU acceleration (if possible) **None** ▼

Max number of utilized processors: **1**

☐ Manually specify Mechanical APDL solver memory settings

Workspace: **0** MB

Database: **0** MB

Additional Command Line Arguments:

Custom Executable Name (with path):
C:\myNewAnsys\ansys.exe

☐ Manually specify Linux settings

User Name:

Working Folder:

☐ License Queuing: Wait for Available License

☐ Use Shared License, if possible

☐ Solve in synchronous mode (Mechanical APDL solver only)

OK Cancel

ANEXO 3 – Código APDL para inicializar as variáveis internas e informar os parâmetros materiais

! Delete propriedades definidas pela interface gráfica

mpdele,all,matid

tbdele,all,matid

! Índice do tipo de potencial utilizado na rotina USETMAT

t1=2

t2=2

t3=2

t4=1

! Número de constantes para cada material

ne=7

nvol=1

np=11

nv=3

!-----

! Constantes Materiais

!-----

!Constantes para o potencial Elástico

p1=1.503E3

p2=2.430E0

p3=0.000E0

p4=1.383E0

p5=4.985E1

p6=1.000E0

p7=1.0

! Constante para o potencial volumétrico

p8=3.152E3

!Constantes para o potencial Plástico

p9= 8.667E1 ! S0

p10=1.626E2 ! H

p11=1.480E2 ! mu

p12=4.285E1 ! alfa

p13=3 ! N

p14=5.414E1 ! mu1

p15=0.000E0 ! mu2

p16=0.000E0 ! mu3

p17=1.744E1 ! a1

p18=1.000E0 ! a2

p19=1.000E0 ! a3

! Constantes para o potencial dissipativo

p20= 0.0 !YO

p21= 0.1 ! Qp

p22= 0.8 ! m

! número total de parâmetros para a rotina USERMAT

total=8+22

!Envia informações para a rotina USERMAT

tb,user,matid,1,total ! Define material 1 como o material do usuário

TBDATA,1,t1,t2,t3,t4

TBDATA,5,ne,nvol,np,nv

TBDATA,9,p1,p2,p3,p4,p5,p6

TBDATA,15,p7

TBDATA,16,p8

TBDATA,17,p9,p10,p11,p12

TBDATA,21,p13

TBDATA,22,p14,p15,p16

TBDATA,25,p17,p18,p19

TBDATA,28,p20,p21,p22

!-----

! Inicializa variáveis internas

!-----

c1=1.0 ! Fp(1,1)

c2=1.0 ! Fp(2,2)

c3=1.0 ! Fp(3,3)

c4=0 ! Fp(1,2)

c5=0 ! Fp(2,3)

c6=0 ! Fp(1,3)

c7=0 ! Fp(2,1)

c8=0 ! Fp(3,2)

c9=0 ! Fp(3,1)

c10=0 ! q

tb,state,matid,,10

tbddata,1,c1,c2,c3,c4,c5,c6

tbddata,7,c7,c8,c9,c10

m1 = matid

ANEXO 4 – Exemplo da sub-rotina *Usermat* para o modelo hiperelástico de Neo-Hookean

```

*deck,usermat3d parallel      user                      jmgerken
  subroutine usermat3d(matId, elemId,kDomIntPt, kLayer, kSectPt,
&      ldstep,isubst,keycut,
&      nDirect,nShear,ncomp,nStatev,nProp,
&      Time,dTime,Temp,dTemp,
&      stress,ustatev,dsdePl,sedEl,sedPl,epseq,
&      Strain,dStrain, epsPl, prop, coords,
&      var0, F0, F1,
&      tsstif, epsZZ,
&      var1, var2, var3, var4, var5,
&      var6, var7, var8)
!-----
!- user material constitutive routine
!- - 3D Neo-Hookean hyperelastic material
!-----
  IMPLICIT NONE
  INTEGER,PARAMETER :: RK=KIND(1.D0) ! real kind
! external procedures
  EXTERNAL polarRU ! polar decomposition subroutine
  EXTERNAL trans_matrx_6 ! 6D voigt rotation matrix subroutine
! arguments
  INTEGER,INTENT(IN) :: matID    ! material ID number
  INTEGER,INTENT(IN) :: elemID   ! element ID number
  INTEGER,INTENT(IN) :: kDomIntPt ! integration point
  INTEGER,INTENT(IN) :: kLayer   ! layer number
  INTEGER,INTENT(IN) :: kSectPt  ! section number
  INTEGER,INTENT(IN) :: ldstep   ! load step number
  INTEGER,INTENT(IN) :: isubst   ! substep number
  INTEGER,INTENT(OUT) :: keycut   ! time step reduction
  INTEGER,INTENT(IN) :: ncomp    ! no. stress components
  INTEGER,INTENT(IN) :: nDirect  ! no. direct stress components
  INTEGER,INTENT(IN) :: nShear   ! no. shear stress components
  INTEGER,INTENT(IN) :: nStatev  ! size of state variable array
  INTEGER,INTENT(IN) :: nProp    ! size of property array
  REAL(RK),INTENT(IN) :: Time    ! time at beginning of increment
  REAL(RK),INTENT(IN) :: dTime   ! time increment
  REAL(RK),INTENT(IN) :: Temp    ! temperature at beginning of increment
  REAL(RK),INTENT(IN) :: dTemp   ! temperature increment
  REAL(RK),INTENT(INOUT) :: sedEl ! stored (elastic) energy
  REAL(RK),INTENT(INOUT) :: sedPl ! dissipated (plastic) energy
  REAL(RK),INTENT(INOUT) :: epseq ! equivalent plastic strain
  REAL(RK),INTENT(INOUT) :: epsZZ ! plane stress thickness strain

```

```

REAL(RK),INTENT(INOUT) :: stress(ncomp) !stress
REAL(RK),INTENT(INOUT) :: ustatev(nStatev) !state variables
REAL(RK),INTENT(OUT) :: dsdePl(ncomp,ncomp) !tangent stiffness
REAL(RK),INTENT(IN) :: Strain(ncomp) !strain at begining of inc
REAL(RK),INTENT(IN) :: dStrain(ncomp) !strain increment
REAL(RK),INTENT(IN) :: epsPl(ncomp) !work space
REAL(RK),INTENT(IN) :: prop(nProp) ! mat props, user input
REAL(RK),INTENT(IN) :: coords(3) ! coordinates of material point
REAL(RK),INTENT(IN) :: F1(3,3) ! deformation gradient at t+dt
REAL(RK),INTENT(IN) :: F0(3,3) ! deformation gradient at t
REAL(RK),INTENT(OUT) :: tsstif(2) ! transverse shear stiffness
REAL(RK),INTENT(IN) :: var0(*),var1,var2,var3,var4 !place holder
REAL(RK),INTENT(IN) :: var5,var6,var7,var8 !place holder

! local
REAL(RK) :: R(3,3), Q(6,6) !rotations
REAL(RK) :: U(3,3) !stretch
REAL(RK) :: Bbar(6) ! vector form isochoric left cauchy green
REAL(RK) :: tauiso(6),tauvol ! isochoric and volumetric stress
REAL(RK) :: s(6) ! Cauchy stress
REAL(RK) :: M(6,6) ! material jacobian
REAL(RK) :: G,K ! shear & bulk modulus
REAL(RK) :: I1bar3,detF,detF23 ! deformation invariants
REAL(RK) :: C1,C2 ! constants

!-----
! deformation gradient determinant
  detF = F1(1,1) * (F1(2,2)*F1(3,3) - F1(2,3)*F1(3,2))
  & + F1(1,2) * (F1(2,3)*F1(3,1) - F1(2,1)*F1(3,3))
  & + F1(1,3) * (F1(2,1)*F1(3,2) - F1(2,2)*F1(3,1))
  if(detF<=0._RK)then
    keycut=1
    return
  else
    detF23 = detF**(-2._RK/3._RK)
  endif

! isochoric left Cauchy Green
  Bbar(1)=(F1(1,1)*F1(1,1)+F1(1,2)*F1(1,2)+F1(1,3)*F1(1,3))*detF23
  Bbar(2)=(F1(2,1)*F1(2,1)+F1(2,2)*F1(2,2)+F1(2,3)*F1(2,3))*detF23
  Bbar(3)=(F1(3,1)*F1(3,1)+F1(3,2)*F1(3,2)+F1(3,3)*F1(3,3))*detF23
  Bbar(4)=(F1(2,1)*F1(1,1)+F1(2,2)*F1(1,2)+F1(2,3)*F1(1,3))*detF23
  Bbar(5)=(F1(3,1)*F1(2,1)+F1(3,2)*F1(2,2)+F1(3,3)*F1(2,3))*detF23
  Bbar(6)=(F1(3,1)*F1(1,1)+F1(3,2)*F1(1,2)+F1(3,3)*F1(1,3))*detF23

  I1bar3 = (Bbar(1) + Bbar(2) + Bbar(3))/3._RK ! 1st invariant / 3

```

!stress update, spatial frame

$G = \text{prop}(1)/2_RK/(1_RK + \text{prop}(2))$! Shear modulus
 $K = \text{prop}(1)/3_RK/(1_RK - 2_RK * \text{prop}(2))$! Bulk modulus

!Cauchy stress

$s(1:3) = G * (Bbar(1:3) - I1bar3) / \det F + K * (\det F - 1_RK)$
 $s(4:6) = G * (Bbar(4:6)) / \det F$

!material Jacobian, spatial frame

$C1 = 2_RK/3_RK * G / \det F$
 $C2 = 3_RK/4_RK * C1$

! shear modulus terms

$M(1,1) = C1 * (Bbar(1) + I1bar3)$
 $M(2,1) = -C1 * (Bbar(1) + Bbar(2) - I1bar3)$
 $M(3,1) = -C1 * (Bbar(1) + Bbar(3) - I1bar3)$
 $M(4,1) = C1 * Bbar(4) / 2_RK$
 $M(5,1) = -C1 * Bbar(5)$
 $M(6,1) = C1 * Bbar(6) / 2_RK$

$M(1,2) = M(2,1)$
 $M(2,2) = C1 * (Bbar(2) + I1bar3)$
 $M(3,2) = -C1 * (Bbar(2) + Bbar(3) - I1bar3)$
 $M(4,2) = C1 * Bbar(4) / 2_RK$
 $M(5,2) = C1 * Bbar(5) / 2_RK$
 $M(6,2) = -C1 * Bbar(6)$

$M(1,3) = M(3,1)$
 $M(2,3) = M(3,2)$
 $M(3,3) = C1 * (Bbar(3) + I1bar3)$
 $M(4,3) = -C1 * Bbar(4)$
 $M(5,3) = C1 * Bbar(5) / 2_RK$
 $M(6,3) = C1 * Bbar(6) / 2_RK$

$M(1,4) = M(4,1)$
 $M(2,4) = M(4,2)$
 $M(3,4) = M(4,3)$
 $M(4,4) = C2 * (Bbar(1) + Bbar(2))$
 $M(5,4) = C2 * Bbar(6)$
 $M(6,4) = C2 * Bbar(5)$

$M(1,5) = M(5,1)$
 $M(2,5) = M(5,2)$
 $M(3,5) = M(5,3)$
 $M(4,5) = M(5,4)$

$$M(5,5) = C2 * (Bbar(2) + Bbar(3))$$

$$M(6,5) = C2 * Bbar(4)$$

$$M(1,6) = M(6,1)$$

$$M(2,6) = M(6,2)$$

$$M(3,6) = M(6,3)$$

$$M(4,6) = M(6,4)$$

$$M(5,6) = M(6,5)$$

$$M(6,6) = C2 * (Bbar(1) + Bbar(3))$$

! bulk modulus terms

$$M(1:3,1:3) = M(1:3,1:3) + K*(2*_RK*\det F - 1*_RK)$$

!Change from spatial to corotated frame

call polarRU(F1,R,U) ! rotation from polar decomposition

call trans_matrx_6(Q,transpose(R)) ! dim 6 rotation matrix

stress(:) = matmul(Q,s)

dsdePl(:, :) = matmul(Q,matmul(M,transpose(Q)))

!stored and dissipated energy

$$sedEl = G/2*_RK*(I1bar^3*3*_RK - 3*_RK) + K/2*_RK*(\det F - 1*_RK)**2$$

$$sedEl = sedEl/\det F$$

$$sedPl = 0*_RK$$

! transverse shear stiffness

$$tsstif(:, :) = dsdePl(6,6)$$

end subroutine usermat3d