



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**MODELAMENTO DO CONTÍNUO DE SIMULAÇÕES  
MICROMECAÑICAS COM BASE EM NOVAS TEORIAS  
DE COMPORTAMENTO PLÁSTICO DO MATERIAL**

**ARMANDO MARGOTTO ESTEVES**

**Tese apresentada como parte dos  
requisitos para obtenção do Grau de  
Doutor em Ciências na Área de  
Tecnologia Nuclear - Materiais.**

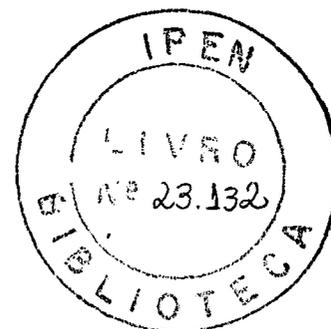
**Orientador:  
Prof. Dr. Arnaldo H. Paes de Andrade**

**São Paulo  
2005**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES  
Autarquia associada à Universidade de São Paulo

MODELAMENTO DO CONTÍNUO DE SIMULAÇÕES MICROMECAÑICAS  
COM BASE EM NOVAS TEORIAS DE COMPORTAMENTO PLÁSTICO DO MATERIAL

ARMANDO MARGOTTO ESTEVES



Tese apresentada como parte dos requisitos para  
obtenção do grau de Doutor em Ciências na  
Área de Tecnologia Nuclear - Materiais.

Orientador:  
Prof. Dr. Arnaldo H. Paes de Andrade

SÃO PAULO  
2005

A “Da.” Helena e “Seu” João (meus pais),  
e Arnaldo Pinto (mentor musical/intelectual).



## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Arnaldo Homobono Paes de Andrade (IPEN), pela orientação e apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Michael Lawrence Falk (UofM), pela receptividade, supervisão e conhecimentos transmitidos.

Ao Prof. Dr. Gary Was (UofM), pela disponibilidade de acesso a recursos de pesquisa na Universidade de Michigan.

Ao Dr. Alix Cauvin (Benteler Automotive/Columbia University), pelo suporte teórico em mecânica do contínuo.

A Dra. Teresinha Ferreira Lima Daltro (IPEN), pelo suporte e incentivo.

Ao Dr. Homero Bañados Perez (IPEN), pelo suporte e incentivo.

Ao IPEN-CNEN/SP, pelos recursos de pesquisa disponíveis.

A Universidade de Michigan - Ann Arbor, por ter-me como pesquisador visitante e pela disponibilidade de recursos de pesquisa.

A todos aqueles que direta ou indiretamente colaboraram para a realização deste trabalho de pesquisa.

## RESUMO

### MODELAMENTO DO CONTÍNUO DE SIMULAÇÕES MICROMECAÑICAS COM BASE EM NOVAS TEORIAS DE COMPORTAMENTO PLÁSTICO DO MATERIAL

por

*Armando Margotto Esteves*

O presente trabalho propõe um método alternativo à descrição dos estados de plasticidade e visco-plasticidade dos materiais. Este método tem seus fundamentos na teoria STZ de “Zonas de Transformação Cisalhante” a qual prove uma melhor representação dos fenômenos de deslocamento que ocorrem à escala molecular e que induzem consequências diretas ao comportamento macroscópico dos sólidos. Um sistema de equações constitutivas derivadas desta abordagem é implementado em uma subrotina computacional de material definida por usuário (UMAT) e com interface a um código de análise em elementos finitos. Simulações analíticas baseadas na teoria STZ e simulações numéricas baseadas no critério de escoamento de Von Mises são desenvolvidas para validação dos resultados UMAT. Desta feita, esta investigação aproxima análises convencionais de fratura a técnicas de simulação molecular.

## ABSTRACT

### CONTINUUM MODELING OF MICROMECHANICAL SIMULATIONS BASED ON NOVEL THEORIES OF MATERIAL PLASTIC BEHAVIOUR

by

*Armando Margotto Esteves*

The present work proposes an alternative method to describe the states of plasticity and viscoplasticity of materials. This method has its foundations in the STZ- Shear Transformation Zones theory that provides a better representation of dislocation phenomena which occur at the microscopic scale and bear direct consequences on the macroscopic behaviour of solids. A set of constitutive equations derived from this approach is implemented into a User defined Material subroutine (UMAT) linked to a finite element analysis code. Analytical simulations based on the STZ-theory and numerical simulations based on the Von Mises yield criterion are performed in order to validate the UMAT results. As such, this investigation helps to bridge the gap between conventional continuum approaches to fracture and techniques of molecular simulation.

## SUMÁRIO

|   |    |
|---|----|
| 1.- Teoria STZ de “Zonas de Transformação Cisalhante” .....                                       | 1  |
| 1.1- Introdução .....   | 1  |
| 1.2- Simulações de Sólidos Não-cristalinos .....  | 4  |
| 1.3- Definição das Equações Constitutivas STZ .....   | 8  |
| 2- Implementação Numérica e Analógica das Equações Constitutivas STZ .....                        | 16 |
| 2.1- Implementação Numérica, UMAT .....   | 16 |
| 2.1.1- UMAT- Subrotina de Material Definida por Usuário .....                                     | 16 |
| 2.1.2- Adequação das Equações STZ à Subrotina UMAT .....  | 18 |
| 2.1.3- Solução Numérica do Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias STZ .....                  | 22 |
| 2.2- Implementação da Solução Analítica STZ ao Programa Mathematica .....                         | 24 |
| 3- Correlação dos Resultados Numéricos e Analíticos .....   | 29 |
| 3.1- Correlações Numéricas e Analíticas em Cubo Simples .....                                     | 29 |
| 3.2- Correlações Numéricas de Modelos em Elementos Finitos .....                                  | 36 |
| 4.- Conclusão .....   | 50 |
| Apêndices   |    |
| A- Métodos Computacionais para Resolução de Sistemas<br>de Equações Diferenciais Ordinárias ..... | 54 |
| B- Receitas Numéricas em FORTRAN 77 .....   | 60 |
| C- Subrotina STZ UMAT .....   | 65 |
| D- Rotina STZ <i>Mathematica</i> .....  | 72 |
| Referências .....   | 75 |

## LISTA DE FIGURAS

|   |    |
|---|----|
| Figura-1.1: Simulações MD apresentando características de fratura frágil e dúctil.....  | 4  |
| Figura-1.2: Diagrama esquemático de uma STZ, antes e depois de ocorrer transformação. ....  | 5  |
| Figura-1.3: Diagrama de zonas STZ sob diferentes orientações.....   | 8  |
| Figura-1.4: Gráfico das curvas de condição de estado permanente de $\Delta$<br>a um dado valor fixo da tensão deviatória $S$ .....                                | 13 |
| Figura-1.5: Gráfico da tensão deviatória $S$ como função da deformação final. ....  | 14 |
| Figura-2.1: Diagrama da subrotina UMAT .....  | 17 |
| Figura-3.1: Cubo apresentando orientação local e faces .....  | 29 |
| Figura-3.2: Curva tensão-deformação, rotina <i>Mathematica</i> , caso uniaxial de tensão.....   | 31 |
| Figura-3.3: Curva tensão-deformação, subrotina UMAT, caso uniaxial de tensão. ....  | 31 |
| Figura-3.4: Curva tensão-deformação, comparação de resultados <i>Mathematica</i><br>e UMAT pela superposição das Figuras-3.2 e 3.3, caso uniaxial de tensão.....  | 31 |
| Figura-3.5: Curva tensão-deformação, rotina <i>Mathematica</i> , caso biaxial de tensão.....  | 32 |
| Figura-3.6: Curva tensão-deformação, subrotina UMAT, caso biaxial de tensão. ....   | 32 |
| Figura-3.7: Curva tensão-deformação, comparação de resultados <i>Mathematica</i><br>e UMAT pela superposição das Figuras-3.5 e 3.6, caso biaxial de tensão.....   | 32 |
| Figura-3.8: Curva tensão-deformação, rotina <i>Mathematica</i> , caso triaxial de tensão. ....  | 33 |
| Figura-3.9: Curva tensão-deformação, subrotina UMAT, caso triaxial de tensão.....   | 33 |
| Figura-3.10: Curva tensão-deformação, comparação de resultados <i>Mathematica</i><br>e UMAT pela superposição das Figuras-3.8 e 3.9, caso triaxial de tensão..... | 33 |
| Figura-3.11: Curva tensão-deformação, comparação de resultados<br>de análises analítica e numéricas, $\bar{\mu} = 10$ . MPa.....                                  | 34 |
| Figura-3.12: Curva tensão-deformação, comparação de resultados<br>de análises analítica e numéricas, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa.....                                | 35 |
| Figura-3.13: Diagrama de carregamento e engastamento do modelo de trinca<br>em elementos finitos.....   | 36 |
| Figura-3.14: Malha do modelo de trinca em elementos finitos.....  | 37 |
| Figura-3.15: Malha do modelo de trinca em elementos finitos deformado .....   | 38 |
| Figura-3.16: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 10$ . MPa.....   | 40 |
| Figura-3.17: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 10$ . MPa.....  | 40 |

|   |    |
|---|----|
| Figura-3.18: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 10$ . MPa.....           | 41 |
| Figura-3.19: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 10$ . MPa (zoom). ....   | 41 |
| Figura-3.20: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 10$ . MPa.....                                    | 42 |
| Figura-3.21: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 10$ . MPa (zoom). ....                            | 42 |
| Figura-3.22: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 100$ . MPa.....          | 43 |
| Figura-3.23: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 100$ . MPa.....                                   | 43 |
| Figura-3.24: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 100$ . MPa.....          | 44 |
| Figura-3.25: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 100$ . MPa (zoom). ....  | 44 |
| Figura-3.26: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 100$ . MPa.....                                   | 45 |
| Figura-3.27: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 100$ . MPa (zoom). ....                           | 45 |
| Figura-3.28: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa.....         | 46 |
| Figura-3.29: Gráfico contorno de tensão de Von Mises,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa.....                                  | 46 |
| Figura-3.30: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa.....         | 47 |
| Figura-3.31: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>critério de escoamento de Von Mises, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa (zoom). .... | 47 |
| Figura-3.32: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa.....                                  | 48 |
| Figura-3.33: Gráfico contorno de deformação plástica,<br>teoria STZ, $\bar{\mu} = 1000$ . MPa (zoom). ....                          | 48 |

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

|          |   |
|----------|---|
| DELGDELY | - Função numérica definida na subrotina UMAT  |
| EDO      | - Equação Diferencial Ordinária   |
| FEA      | - Análise de Elementos Finitos (“ <i>Finite Element Analysis</i> ”)                           |
| GEEYV    | - Função numérica definida na subrotina UMAT  |
| LUBKSB   | - Subrotina numérica de solução de equação linear por decomposição LU                         |
| LUDCMP   | - Subrotina numérica de solução de equação linear por substituição inversa                    |
| MD       | - Dinâmica Molecular (“ <i>Molecular Dynamics</i> ”)  |
| soln     | - Função numérica definida no programa Mathematica  |
| STZ      | - Zonas de Transformação Cisalhante (“ <i>Shear Transformation Zones</i> ”)                   |
| UMAT     | - Subrotina computacional de material definida por usuário (“ <i>User defined MATerial</i> ”) |

## LISTA DE SÍMBOLOS

| Variável                                    | Descrição  | Unidade         |
|---|--|-----------------|
| $\Lambda$                                   | densidade de STZs  |                 |
| $\Delta$                                    | anisotropia das orientações STZ                                      |                 |
| $\Delta_{final}$                            | estado final da anisotropia das orientações STZ                      |                 |
| $\dot{\Delta}$                              | taxa de anisotropia das orientações STZ                              | s <sup>-1</sup> |
| $\Delta_{ij}$                               | tensor de anisotropia das orientações STZ                            |                 |
| $\Delta_{11} \dots \Delta_{33}$             | componentes do tensor de anisotropia das orientações STZ             |                 |
| $\underline{\Delta}$                        | vetor dos componentes do tensor de anisotropia das orientações STZ   |                 |
| $\dot{\Delta}_{ij}, \dot{d}_{ij}$           | tensor de taxa de anisotropia das orientações STZ                    |                 |
| $\dot{\Delta}_{11} \dots \dot{\Delta}_{33}$ | componentes do tensor de taxa de anisotropia das orientações STZ     |                 |
| $\underline{\dot{\Delta}}$                  | vetor componentes do tensor taxa de anisotropia das orientações STZ  |                 |
| $\dot{\Delta}_{ij}^p$                       | tensor de taxa de anisotropia das orientações STZ em regime plástico |                 |
| $n_+$                                       | densidade (ou população) de zonas STZ orientadas na direção “+”      |                 |
| $n_-$                                       | densidade (ou população) de zonas STZ orientadas na direção “-”      |                 |
| $n_{\pm}$                                   | densidade de transformação de orientação STZ de “+” para “-”         |                 |
| $n_{\mp}$                                   | densidade de transformação de orientação STZ de “-” para “+”         |                 |
| $n_{\infty}$                                | densidade (ou população) total de zonas STZ                          |                 |
| $R_+ / R_{\pm}$                             | taxa de transformação de orientação STZ de “+” para “-”              |                 |
| $R_- / R_{\mp}$                             | taxa de transformação de orientação STZ de “-” para “+”              |                 |
| $\xi$                                       | área média de uma zona STZ   | mm <sup>2</sup> |
| $\varepsilon_0$                             | fração da área total do sistema sob influência de transformação STZ  |                 |
| $\sigma$                                    | tensão   | MPa             |
| $\sigma_{ij}$                               | tensor de tensões  |                 |
| $\sigma_{11} \dots \sigma_{33}$             | componentes do tensor de tensões                                     | MPa             |
| $\underline{\sigma}$                        | vetor dos componentes do tensor de tensões                           |                 |
| $\dot{\sigma}_{ij}$                         | tensor de taxa de tensões  |                 |
| $\dot{\sigma}_{11} \dots \dot{\sigma}_{33}$ | componentes do tensor de taxa de tensões                             | MPa             |

|  |   |          |
|--|---|----------|
| $\underline{\dot{\sigma}}$   | vetor dos componentes do tensor de taxa de tensões                        |          |
| $\dot{\sigma}_{ij}^e$  | tensor de taxa de tensões elásticas                                       |          |
| $S$  | tensão deviatórica  | MPa      |
| $S_{ij}$   | tensor de tensões deviatóricas  |          |
| $S_{11} \dots S_{33}$  | componentes do tensor de tensões deviatóricas                             | MPa      |
| $\tilde{S}$  | tensão deviatórica / módulo STZ ( $\sim S / \bar{\mu}$ )                  |          |
| $\tilde{S}_{ij}$   | tensor de tensões deviatóricas / módulo STZ ( $\sim S_{ij} / \bar{\mu}$ ) |          |
| $\varepsilon$  | deformação  |          |
| $\varepsilon_{11} \dots \varepsilon_{33}$  | componentes do tensor de deformações                                      |          |
| $\varepsilon^e$  | deformação elástica   |          |
| $\varepsilon^p$  | deformação plástica   |          |
| $\varepsilon_{final}$  | estado final de deformação  |          |
| $\dot{\varepsilon}$  | taxa de deformação  | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}^e$  | taxa de deformação elástica   | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}^p$  | taxa de deformação plástica   | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}_c^p$  | taxa de deformação plástica limite  | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}_{ij}$   | tensor de taxa de deformações   |          |
| $\dot{\varepsilon}_{11} \dots \dot{\varepsilon}_{33}$                                      | componentes do tensor de taxa de deformações                              | $s^{-1}$ |
| $\underline{\dot{\varepsilon}}$  | vetor dos componentes do tensor de taxa de deformações                    |          |
| $\dot{\varepsilon}_{ij}^{tot}$   | tensor de taxa de deformações totais                                      | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}_{11}^{tot}, \dot{\varepsilon}_{22}^{tot}, \dot{\varepsilon}_{33}^{tot}$ | taxa de deformação total na direção de referência 1,2,3                   | $s^{-1}$ |
| $\dot{\varepsilon}_{ij}^e$   | tensor de taxa de deformações elásticas                                   |          |
| $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$   | tensor de taxa de deformações plásticas                                   |          |
| $\dot{\varepsilon}_{11}^p \dots \dot{\varepsilon}_{33}^p$                                  | componentes do tensor de taxa de deformações plásticas                    | $s^{-1}$ |
| $etot$   | taxa de deformação total (dado de entrada)                                | $s^{-1}$ |
| $etot_{11}$  | taxa de deformação total na direção 1 (dado de entrada)                   | $s^{-1}$ |
| $\gamma_{12}, \gamma_{23}, \gamma_{31}$  | componentes de deformação cisalhante                                      | MPa      |
| $t$  | tempo   | s        |
| $\tau$   | tempo de processo STZ   | s        |
| $\bar{\mu}$  | módulo STZ  | MPa      |

|   |   |                          |
|---|---|--------------------------|
| $S_0$                                   | tensão limite de escoamento   | MPa                      |
| $\delta_{ij}$                           | símbolo de Kronecker  |                          |
| $J$                                     | matriz Jacobiana  |                          |
| $C$                                     | matriz de flexibilidade   |                          |
| $E$                                     | módulo de elasticidade  | MPa                      |
| $E_{ef}$                                | módulo de elasticidade efetivo  | MPa                      |
| $G$                                     | módulo de cisalhamento  | MPa                      |
| $G_{ef}$                                | módulo de cisalhamento efetivo  | MPa                      |
| $\nu$                                   | coeficiente de Poisson  |                          |
| $\underline{\underline{A}}, \mathbf{A}$ | matriz A  |                          |
| $\underline{\underline{A}}^\dagger$     | matriz A transposta   |                          |
| $\underline{\underline{B}}$             | matriz B  |                          |
| $\underline{\underline{B}}^\dagger$     | matriz B transposta   |                          |
| $\underline{\underline{C}}$             | matriz C  |                          |
| $\underline{\underline{C}}^\dagger$     | matriz C transposta   |                          |
| $\underline{\underline{D}}, \mathbf{D}$ | matriz D  |                          |
| $\underline{\underline{E}}$             | matriz E  |                          |
| $\underline{\underline{E}}^\dagger$     | matriz E transposta   |                          |
| $\underline{\underline{I}}, \mathbf{I}$ | matriz identidade   |                          |
| $\underline{\underline{0}}$             | matriz nula   |                          |
| $W^p$                                   | trabalho plástico por unidade de volume   | $10^{-3} \text{ J/mm}^3$ |
| $h$                                     | intervalo de tempo entre iterações (“timestep”)                                 | s                        |
| $y^n$                                   | $y$ na $n$ -ésima iteração  |                          |
| $\mathbf{y}^n$                          | matriz $y$ na $n$ -ésima iteração   |                          |
| $K_{ijkl}, \underline{\underline{K}}$   | matriz de constantes elásticas  |                          |
| $\lambda, \mu$                          | coeficientes de Lamé  |                          |
| R                                       | carregamento  |                          |
| L                                       | dimensão  | mm                       |
| $m$                                     | equivalente a anisotropia das orientações STZ ( $\sim \Delta$ )                 |                          |
| $m_{ij}$                                | equivalente ao tensor de anisotropia das orientações STZ ( $\sim \Delta_{ij}$ ) |                          |

|                  |  |   |
|------------------|--|---|
| $\dot{m}_{ij}$   | equivalente ao tensor taxa de anisotropia das orientações STZ ( $\sim \dot{\Delta}_{ij}$ ) |   |
| $\tilde{\Gamma}$ | função balanço de energia  |   |
| $T$              | temperatura  | K |

*Nota:-* Notação na forma matricial/tensorial e notação na forma de componentes são ambas utilizadas neste trabalho. Notação matricial/tensorial é utilizada quando possível. Entretanto, vetores, matrizes e tensores utilizados na teoria devem eventualmente ser escritos na forma de componentes quando da necessidade de manipulação de variáveis numéricas para fins computacionais.

## 1.- Teoria STZ de “Zonas de Transformação Cisalhante”

### 1.1- Introdução

O fenômeno da dinâmica da fratura, na qual uma trinca se propaga a velocidades próximas da velocidade do som, é de interesse em diversos campos e contextos: da manufatura em alta velocidade à geofísica e sismologia. Esta linha de pesquisa também envolve aplicações diretas à indústria nuclear provendo predição de falha mecânica em tubulação, varetas combustíveis do núcleo do reator ou qualquer outro componente estrutural crucial à planta nuclear. Atualmente, engenheiros e cientistas podem somente realizar simulações de trincas maiores do que um micron e movendo-se a pequenas velocidades em comparação à velocidade do som, ou então, confinadas a caminhos pré-determinados.

A dinâmica da fratura se mantém como um tópico desafiante de pesquisa na ciência de materiais, na engenharia mecânica, na matemática, e na física do não-equilíbrio. Apesar de quase um século de intensa investigação, diversos problemas básicos ainda permanecem sem solução. Em particular, não há ainda uma compreensão fundamental da distinção entre a falha frágil e dúctil, como também ainda não há nenhuma explanação definitiva de como tensões de fratura se desenvolvem nas zonas de deformação plástica próxima a ponta de trinca, nem há uma compreensão adequada do porque a taxa de energia liberada mesmo em fratura frágil é frequentemente ordens de magnitude maior do que a taxa de energia de formação da superfície. Estas dificuldades se devem principalmente à falta de uma teoria adequada de deformação próxima às pontas de trinca onde as taxas de tensões e deformações são elevadas.

Investigações experimentais da fratura dinâmica demonstram claramente as dificuldades envolvidas no modelamento e simulação de trincas de propagação rápidas. Observações têm demonstrado que, em uma grande variedade de materiais isotrópicos homogêneos, fraturas frágeis de alta velocidade nunca atingem a velocidade limite teórica pré-estabelecida, a velocidade da onda de Rayleigh. Ravi-Chandar e Knauss [1] primeiro associaram o baixo limite de velocidade com a propagação intermitente, ramificação e microfissuras na vizinhança da ponta de trinca. Os recentes trabalhos de Fineberg, Gross, Sharon e outros [2,3,4,5,6] têm indicado que este fator talvez se deva a instabilidade de ramificação. Esta aparente instabilidade apresenta um desafio imediato à teoria de mecânica da fratura

clássica. Enquanto a teoria clássica continua a ser uma poderosa ferramenta para o entendimento de vários aspectos da propagação de trincas estáticas e dinâmicas, a teoria não provê informações acerca dos processos que ocorrem na vizinhança da ponta de trinca onde as tensões são extremamente elevadas e a suposição de linearidade é quebrada. Por esta razão, a mecânica da fratura clássica não provê informações suficientes para a definição de propagação da trinca em alta velocidade, nem quando esta se ramifica.

O propósito da presente pesquisa é ilustrar como a moderna capacitação computacional pode fornecer um novo caminho para observação de deformação e fratura em sólidos. Esta investigação tem por base o trabalho de Falk e Langer [7,8,9,10,11,12], os quais desenvolveram simulações de dinâmica molecular (MD- *Molecular Dynamics*) em um sistema amorfo, bi-dimensional, onde obtiveram uma gama de novas informações a respeito de rearranjos moleculares que ocorrem em materiais não-cristalinos sob condições de deformação plástica irreversível. Estas simulações os levaram a propor uma teoria totalmente dinâmica de “taxa-e-estado”\* da plasticidade [13,14], a qual inclui equações de movimento das variáveis de estado que descrevem a estrutura molecular interna do sólido. Esta teoria descreve, naturalmente e concisamente, a resposta visco-elástica da aplicação de pequenas tensões, a transição dinâmica para visco-plasticidade acima da tensão de escoamento, deformação de encruamento e histerese [15,16,17,18,19].

Embora esta teoria tenha sido desenvolvida especificamente para sistemas amorfos, pode ser generalizada a qualquer sólido em que os processos que controlam a deformação são isotropicamente distribuídos. As abordagens da teoria da plasticidade convencional, tal como descritos nos livros de Lubliner [20] ou Hill [21], geralmente supõem superfícies de escoamento bem-definidas no espaço das tensões principais e fazem distinções arbitrárias entre formulações dependentes e independentes do tempo. Estas aproximações parecem insatisfatórias à Falk e Langer, pois que estas não podem, de forma natural, descrever a larga escala dos comportamentos que ocorrem em materiais deformáveis. Por exemplo, Falk e Langer abrangem fenômenos tais como a deformação de encruamento, a transição de visco-elasticidade para comportamento visco-plástico, e a histerese através da especificação de regras fenomenológicas aplicadas a certas características particulares e históricos de deformação do

---

\* Taxa-e-estado (“rate-and-state”); leis de taxa-e-estado representam a redução de um processo microscópico à processos materiais macroscópicos descritos por relações de força e em termos termodinâmicos que caracterizam o sistema.

material. Em sua opinião, estes necessitavam construir um nível de fenomenologia inteiramente novo a fim de trazer a teoria de deformação plástica ao ponto em que poderia ser utilmente aplicada a problemas como fratura.

Desta feita, o objetivo do presente trabalho é o desenvolvimento e implementação de uma subrotina computacional de material definida por usuário (UMAT- "*User defined MATerial*"), interligada a um código de elementos finitos comercial genérico, com base em equações constitutivas que representam a teoria desenvolvida por Falk e Langer (a *Teoria "STZ"* apresentada a seguir). A intenção é definir modelos do contínuo mais realísticos que possam prover um maior entendimento dos processos de deformação que se desenvolvem em regiões de elevada tensão (por exemplo, regiões próximas à ponta de trinca).

## 1.2- Simulações de Sólidos Não-cristalinos

O ponto inicial da investigação de Falk e Langer, é uma simulação MD de fratura em um material poli-disperso, bi-dimensional, não-cristalino, de sólido Lennard-Jones [8]. Para sua surpresa, este sistema simplificado reproduziu muitos dos aspectos da fratura que são tipicamente associados a materiais muito mais complexos, tais como aços. O mais impressionante fora que pequenas mudanças no potencial interatômico resultaram em drásticas mudanças na resistência a fratura. As mudanças na resistência à fratura foram acompanhadas por tipos de mudanças qualitativas na morfologia da trinca de fratura - uma trinca de propagação aguda versus propagação rombuda, e formação de vazios - que tipicamente caracterizam, respectivamente, falhas frágeis e dúcteis. Figura-1.1 apresenta as simulações MD de dois sistemas contendo 90,000 partículas, amorfos e bidimensionais que enfatizam a fratura frágil e dúctil (regiões de rearranjo plástico são destacadas).

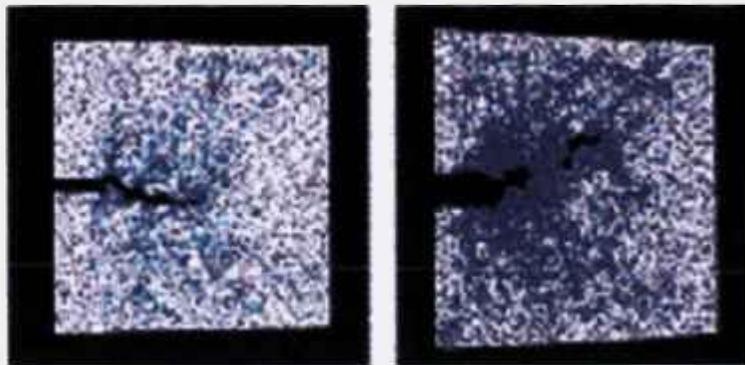


Figura-1.1: Simulações MD apresentando características de fratura frágil (esquerda) e dúctil (direita).

Problemas microscópicos são mais simplesmente abordados através de simulação computacional do que experimentalmente [22,23,24]. Falk e Langer enfocam sua pesquisa sobre o que estimam ser o processo físico mais saliente, deformação sob cisalhamento puro. Para reduzir complicações, esta investigação foi restringida a um vidro de dois componentes e as propriedades relevantes examinadas em uma célula em que podiam cuidadosamente controlar a tensão ou deformação de cisalhamento como funções do tempo. Estas simulações também foram consideradas em investigações computacionais preliminares da deformação em metais amorfos [25,26,27,28]. A maior limitação das simulações MD é a escala de tempo onde simulações raramente excedem mesmo alguns nanossegundos. Entretanto, tais curtas janelas de

tempo eram justificáveis devido ao interesse primário na fratura dinâmica, onde as taxas de deformação na ponta de trinca podem ser tão ou mais rápidas. Mais uma vez, as investigações revelaram uma gama de comportamentos típicos de sólidos reais. Um aspecto importante destas simulações é que permitiram estudos dentro do sistema para verificação em detalhe do comportamento molecular durante deformação plástica. Desta forma, definiram um processo para instruir o computador a mostrar onde rearranjos moleculares não-colineares estavam ocorrendo, isto é, onde grupos de moléculas se movem de maneira que não podem ser descritas por tensores lineares de tensão. Verificaram que estes rearranjos são localizados em pequenas regiões que se deformam no sentido da tensão aplicada e a que Argon [30,31,33] primeiro denominou como "zonas de transformação cisalhante" (STZs- *Shear Transformation Zones*) [7,8]. Uma vez deformada, estas regiões são desativadas; isto é, "truncadas" e não podem mais se deformar no mesmo sentido, mas podem retornar à sua condição anterior quando a tensão é invertida. A Figura-1.2 apresenta um diagrama esquemático de uma STZ. As moléculas que não seguem o comportamento linear após transformação são indicadas no diagrama e as setas mostram o sentido da tensão de cisalhamento externamente aplicada. As marcas ovais são incluídas como guias e indicam a direção de transformação.

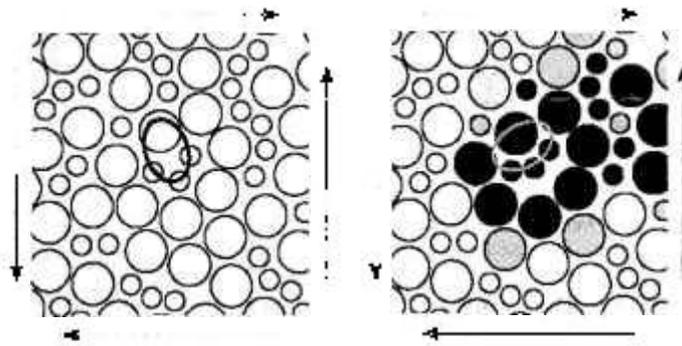


Figura-1.2: Diagrama esquemático de uma STZ, antes (esquerda) e depois (direita) de ocorrer transformação.

Sob carregamento reverso da configuração inicial, as regiões do sólido que se submeteram à deformação são inteiramente diferentes daquelas que se deformaram na experiência original. Desta forma, STZs são análogas a segmentos de deslocamentos aleatoriamente distribuídos e limitados a mover-se para frente e para trás a uma distância de um vetor de Burgers, mas não mais adiante. Uma vez que Falk e Langer tenham desenvolvido uma intuição para a física da deformação neste modelo através da observação dos rearranjos moleculares, estes incorporaram estas idéias em uma teoria simples de dinâmica da

deformação. O resultado foi uma teoria baseada na observação da variação destas regiões sob duas condições de estado. Em uma extensão desta idéia, interpretaram que a mudança de comportamento do material próximo à tensão de escoamento se deva ao resultado da criação e aniquilação de STZs a taxas proporcionais ao trabalho plástico desenvolvido. Como novas e ativas STZs são criadas, tão rapidamente como STZs existentes são desativadas, o material se deforma contínua e indefinidamente sob a aplicação de tensão constante.

Falk e Langer então testaram vários aspectos de sua teoria rudimentar, executando uma variedade de experiências numéricas e comparando os resultados com as previsões teóricas. Iniciaram pelo levantamento de medidas de tensão-deformação padrão sob diferentes taxas de deformação. Estes primeiros experimentos eram comparáveis a testes uniaxiais de tensão comumente desenvolvidos em laboratório. Além disto, puderam executar testes que seriam até mais complexos de reprodução em laboratório. Em particular, puderam (na ordem de um picosegundo) elevar a tensão de escoamento até o limite que desejassem. Assim, com a tensão de escoamento mantida constante, foi observado o início da resposta plástica. A baixas tensões aplicadas, observaram encruamento; sob maiores tensões, observaram fluxo. Além destes experimentos isolados, sujeitando o material a seqüências de carregamento e descarregando, e em vezes invertendo o sentido da tensão cisalhante, investigaram a dependência do histórico de resposta plástica. Desta forma, foi possível testar diferentes formas e parâmetros cruciais da teoria, e verificar que somente uma versão descreve acuradamente os resultados obtidos. Através desta inter-relação de simulação e teoria, entenderam que a transição da resposta plástica à visco-plasticidade sob tensão acima da tensão limite de escoamento é dinâmica; o tempo característico na qual o sistema tende ao estado de condição permanente diverge quando a tensão de cisalhamento aplicada se aproxima acima ou abaixo da tensão de escoamento limite. Também compreenderam porque este sistema ostensivamente isotrópico se torna anisotrópico durante deformação, "lembrando" o sentido da última deformação. Como em um material real quando este é cisalhado em um sentido e então descarregado, este responde elasticamente quando recarregado no mesmo sentido, mas deforma-se inelasticamente quando carregado no sentido oposto. Quando o processo é desta forma repetido, pode-se traçar uma curva de histerese no plano tensão-deformação. A natureza de dois estados da teoria STZ parece explicar estes efeitos de memória, assim como também outras propriedades típicas de materiais sólidos.

Esta abordagem da teoria STZ é baseada em trabalhos anteriores e similares desenvolvidos por Argon, Spaepen e outros, os quais descrevem fluência em ligas metálicas amorfas em termos de transições ativadas em materiais intrinsecamente heterogêneos [29,30,31,32,33]. Estas teorias, por sua vez, foram extraídas de formulações preliminares de volume livre das taxas de transição em vidro desenvolvidas por Turnbull, Cohen e outros [34,35,36]. Nenhuma destas teorias, entretanto, foi direcionada a descrever os diferentes tipos de deformações irreversíveis que ocorrem abaixo e acima de uma tensão inicial e do histórico de dependência e resposta do sistema quando submetido às cargas aplicadas. Em nenhuma destas teorias as propriedades das STZs são permitidas se modificarem em resposta às deformações de forma que as mudanças dinâmicas no estado interno do sistema pudessem, por sua vez, determinar seu comportamento subsequente.

### 1.3- Definição das Equações Constitutivas STZ

O cerne da teoria STZ esta no rearranjo molecular estrutural do material. Em geral, a base da interpretação teórica das STZs e experimentos numéricos se iniciam com a suposição básica de que a plasticidade é um fenômeno intrinsecamente dependente do tempo. Assim, é assumido que a relação constitutiva fundamental deve ser uma expressão para o tensor de taxa de deformação plástica  $\dot{\epsilon}_{ij}^p$  em função do tensor de tensão deviatorica aplicada  $S_{ij}$  e variáveis internas de estado. As variáveis de estado relevantes na teoria STZ são  $\Lambda$ , um escalar que mede a densidade local de STZs, e  $\Delta_{ij}$ , um tensor simétrico sem traço que descreve a anisotropia das orientações STZ. Estas duas variáveis podem ser entendidas como o primeiro de dois momentos de uma distribuição grosseira de STZs. Para completar a teoria, Falk e Langer deduziram equações de movimento para  $\Lambda$  e  $\Delta_{ij}$ .

Para ilustrar esta interpretação, considere um par de zonas e orientações STZ simples, representadas por quatro moléculas (ou grãos) e alinhados ao longo dos eixos principais do tensor de tensões como esquematizado na Fig.-1.3.

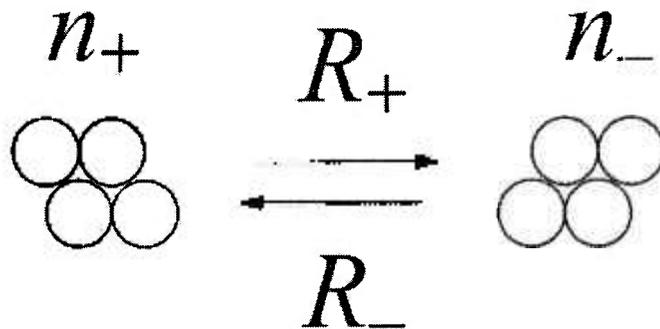


Figura-1.3: Diagrama de zonas STZ sob diferentes orientações.

As populações de STZs são denotadas por  $n_+$  e  $n_-$ .  $R_+$  e  $R_-$  representam a taxa de transformação de “+” para “-” e de “-” para “+”, respectivamente. Estas transformações são ativadas por volume livre e flutuações de forças. É assumido um sistema bi-dimensional não cristalino e onde a orientação do tensor de tensões e deformações permanece fixa. Dada à restrição da orientação de tensões, é suficiente assumir que a população de STZs consiste

simplesmente de zonas orientadas ao longo dos eixos do tensor bi-dimensional de tensões. Como variações de volume não são consideradas,  $R_+$  e  $R_-$  podem ser escritas como funções do tensor de tensões. Nesta configuração, é considerado que uma dada tensão deviatórica  $S$  é aplicada ao sistema. A deformação plástica macroscópica pode então ser observada como a soma de todos os rearranjos locais dado por:

$$\dot{\epsilon}^p = \xi (R_+(S)n_+ - R_-(S)n_-) \quad (1.1)$$

Onde  $\xi$  é um parâmetro específico de material, e que de forma genérica, equivale à área média de uma STZ (ou seja, a área de apenas algumas moléculas). As relações entre parênteses representam a taxa de transformação por unidade de área em que as zonas STZ são transformadas de orientações “-” para “+”. Por simplificação, é assumido que estas taxas são funções explícitas e diretas da tensão deviatórica  $S$ , apesar de que implicitamente dependem das condições de temperatura e pressão (e provavelmente outras variáveis).

A densidade de zonas orientadas na direção +/- é denotada por  $n_{\pm}$ , e inversamente por  $n_{\mp}$ . Equações de movimento para as populações  $n_{\pm}$  podem ser escritas para o sistema, e têm a forma:

$$\dot{n}_{\pm} = R_{\mp}(S)n_{\mp} - R_{\pm}(S)n_{\pm} + \Gamma(S, \dots) \left( \frac{n_{\infty}}{2} - n_{\pm} \right) \quad (1.2)$$

Na Eq.(1.2), os dois últimos termos entre parênteses descrevem a criação e aniquilação de STZs. A constante  $n_{\infty}$  é a densidade total das zonas a serem geradas em um sistema sob estado de condição permanente de deformação plástica. A função  $\Gamma$  determina então as taxas de variação de  $n_{\pm}$  em função da tensão deviatórica e da densidade de zonas de transformação. Em outros termos,  $\Gamma$  pode ser associada às variáveis de estado  $\Lambda$  e  $\Delta$  definidas como:

$$\Lambda \equiv \frac{n_+ + n_-}{n_{\infty}} \quad (1.3)$$

e

$$\Delta \equiv \frac{n_+ - n_-}{n_{\infty}} \quad (1.4)$$

De forma genérica,  $\Lambda$  é considerado como um escalar de densidade, enquanto que  $\Delta$  assume a forma de tensor simétrico sem traço com as mesmas características do tensor de tensões deviatóricas.

Dada a seguinte representação:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &\equiv 1/2(R_- - R_+) \\ \mathcal{C} &\equiv 1/2(R_- + R_+) \\ \mathcal{T} &\equiv \frac{\mathcal{S}}{\mathcal{C}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

as equações de movimento STZ podem ser escritas como:

$$\dot{\varepsilon}^p = \varepsilon_0 \mathcal{C}(S)(\Lambda \mathcal{T}(S) - \Delta) \quad (1.6)$$

$$\dot{\Delta} = 2\mathcal{C}(S)(\Lambda \mathcal{T}(S) - \Delta) - \Gamma(S, \Lambda, \Delta)\Delta \quad (1.7)$$

e

$$\dot{\Lambda} = \Gamma(S, \Lambda, \Delta)(1 - \Lambda) \quad (1.8)$$

Onde  $\varepsilon_0 \equiv \xi n_w$ , é o único parâmetro material explicitamente remanescente nestas equações. Em termos gerais,  $\varepsilon_0$  representa a fração da área total do sistema sob influência de transformação STZ (e desta forma, deve ser muito menor que a unidade).

Assumindo-se um enfoque “quase-linear” para as Eqs.(1.6) a (1.8), é possível a seguinte aproximação:

$$\mathcal{T}(S) \cong S \quad \text{e} \quad \mathcal{C}(S) \cong 1 \quad (1.9)$$

Assim, as Eqs.(1.6) e (1.7) tomam a forma:

$$\dot{\varepsilon}^p = \varepsilon_0 (\Lambda S - \Delta) \quad (1.10)$$

e

$$\dot{\Delta} = 2(\Lambda S - \Delta) - \Gamma(S, \Lambda, \Delta)\Delta \quad (1.11)$$

Pode-se notar que esta versão quase-linear da teoria STZ parece diretamente comparável a algumas fenomenologias convencionais. Em particular, na Eq.(1.10) a variável  $\Delta$  parece atuar como uma contra-tensão (“*back stress*”) ou parâmetro de encruamento, apesar de ter uma interpretação física diferente de qualquer outra abordagem. Se o termo  $-\Gamma\Delta$  não-linear da Eq.(1.11) não existisse, seria então possível a integração de ambos os lados da equação em relação ao tempo e deduzir-se que  $\Delta$  é diretamente proporcional à deformação plástica total. A natureza efêmera das zonas STZ, como expressadas em  $-\Gamma\Delta$  é que impedem esta interpretação, com exceção talvez, de situações onde a deformação plástica seja tão pequena que o termo não-linear se torne negligível.

Esta representação quase-linear da teoria STZ é qualitativamente correta para uma larga escala de tensões, com o mérito de talvez ser a descrição mais simplista de plasticidade dinâmica e comparável em utilidade ao que às equações de Navier-Stokes são para a dinâmica dos fluidos.

Ao invés de discutir em detalhes as equações de plasticidade STZ como desenvolvidas na Ref.[7], uma versão simplificada e em extensão as Eqs.(1.10) e (1.11) é apresentada. Este desenvolvimento captura a essência da resposta material com um mínimo de parâmetros livres como utilizado por Langer e Lobkovsky [37,38] para explorar as relações entre a teoria STZ e as teorias convencionais de plasticidade. Esta abordagem assume que a densidade de STZs rapidamente atinge um valor de equilíbrio e, conseqüentemente,  $\Lambda$  se mantém constante sem nenhuma atuação na dinâmica do sistema ( $\Lambda=1$ ). Desta feita, linearizando-se em relação às tensões deviatóricas  $S_{ij}$ , as equações constitutivas STZ têm a seguinte forma:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{1}{\tau} \left( \frac{S_{ij}}{\bar{\mu}} - \Delta_{ij} \right) \quad (1.12)$$

e

$$\dot{\Delta}_{ij} = \dot{\epsilon}_{kl}^p \left( \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\bar{\mu} S_{kl}}{2S_0^2} \Delta_{ij} \right) \quad (1.13)$$

Para uma maior simplificação, as Eqs.(1.12) e (1.13) são reduzidas à condição unidimensional, na qual têm a forma:

$$\dot{\varepsilon}^p = \frac{1}{\tau} \left( \frac{S}{\bar{\mu}} - \Delta \right) \quad (1.14)$$

e

$$\dot{\Delta} = \dot{\varepsilon}^p \left( 1 - \frac{\bar{\mu} S}{2S_0^2} \Delta \right) \quad (1.15)$$

Cada um dos três parâmetros aqui introduzidos,  $\tau$ ,  $\bar{\mu}$  e  $S_0$ , possuem interpretação física discutidas a seguir. Note que a taxa de deformação é reduzida por  $\Delta$ . Maiores valores de  $\Delta$  indicam que um maior número de STZs se adequaram à direção da deformação cisalhante e não podem mais se submeter a transições. Quando  $\Delta$  atinge o valor  $S/\bar{\mu}$ , o sistema se torna “travado”, e a taxa de deformação se anula. O parâmetro  $\tau$  simplesmente fixa uma escala de tempo para o sistema. Na teoria STZ mais extensa,  $\tau$  é altamente dependente da tensão, e é esta propriedade que provê os efeitos de memória. Estes efeitos não estão presentes na teoria simplificada aqui discutida, onde  $\tau$  é considerado constante.

Na equação da taxa de conversão de  $\Delta$ , o primeiro termo da equação expressa o fato de que a taxa em que STZs são convertidos é a mesma da taxa de deformação plástica, e conseqüentemente, na ausência de aniquilação e criação de STZs,  $\Delta$  cresce à taxa  $\dot{\varepsilon}^p$ . Aniquilação e criação são descritos pelo segundo termo, o qual é proporcional à taxa de trabalho plástico  $(S - \dot{\varepsilon}^p)$ .

Como ilustrado na Figura-1.4, para  $S < S_0$ ,  $\Delta(t)$  têm estabilidade nos pontos da linha  $\Delta = S/\bar{\mu}$ , onde  $\dot{\varepsilon}^p = 0$ . Opostamente, para  $S > S_0$ , os pontos estáveis de  $\Delta$  estão na linha  $\Delta = S_0^2/\bar{\mu}S$ , onde a taxa de deformação  $\dot{\varepsilon}^p$  não se anula. Assim, o ponto de cruzamento destas duas curvas é a tensão limite de escoamento  $S_0$ .

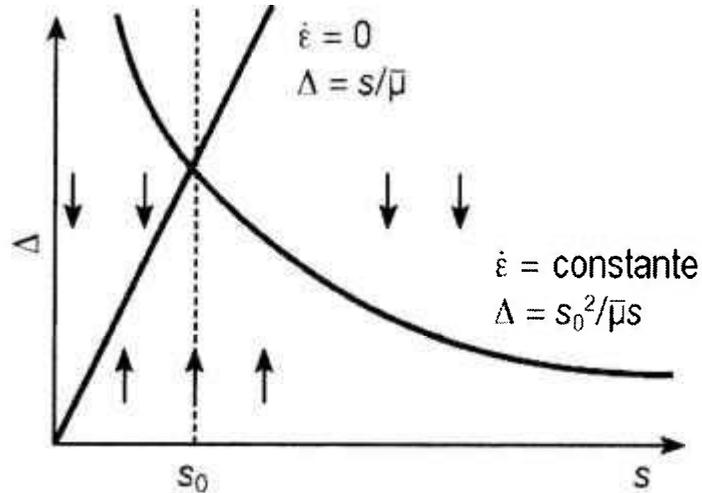


Figura-1.4: Gráfico das curvas de condição de estado permanente de  $\Delta$  a um dado valor fixo da tensão deviatória  $S$  (setas indicam a direção de  $\dot{\Delta}$  à  $S$  fixo).

Na região  $S < S_0$ , o material é visco-elástico; ou seja, é dissipativo mas não flui indefinidamente em resposta às tensões aplicadas. Para  $S \ll S_0$  ou  $(\bar{\mu}/S_0) \rightarrow 0$ , a não-linearidade do segundo termo da Eq.(1.15) se torna negligível e desta forma  $\Delta \approx \varepsilon^p$ . Assim, Eq.(1.14) se torna:

$$\dot{\varepsilon}^p + \frac{1}{\tau} \varepsilon^p \approx \frac{1}{\tau} \frac{S}{\bar{\mu}} \quad (1.16)$$

ou, equivalentemente (na forma de lei de fluência),

$$\varepsilon^p(t) = \frac{S(t)}{\bar{\mu}} - \frac{1}{\bar{\mu}} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left[-\frac{1}{\tau}(t-t')\right] \dot{S}(t') \quad (1.17)$$

Para valores elevados de  $S$ , mas ainda sob  $S < S_0$ , a relação entre  $\varepsilon^p$  e  $S$  se torna não-linear. Não há solução explícita análoga à Eq.(1.17). Entretanto, dividindo ambos os lados da Eq.(1.15) por  $\dot{\varepsilon}^p$ , obtém-se uma relação diferencial entre  $\Delta$  e  $\varepsilon^p$  que, para a constante  $S$ , pode ser integrada para fornecer:

$$\varepsilon_{final}^p \equiv \varepsilon^p(t \rightarrow \infty) = -\frac{S_0^2}{\bar{\mu}S} \ln\left(1 - \frac{S^2}{S_0^2}\right) \quad (1.18)$$

As condições que levam à Eq.(1.18) são tais que o sistema está inicialmente em um estado em que  $\varepsilon^p = \Delta = 0$ , tal que uma tensão  $S < S_0$  é imediatamente aplicada em  $t = 0$ , e que o sistema atinge seu estado final quando  $\Delta_{final} = S/\bar{\mu}$ ,  $\dot{\Delta} = 0$ .

É interessante notar que, das Eqs.(1.14) e (1.15), pode-se obter o seguinte critério para obtenção de regime de condição permanente ou taxa de deformação plástica limite:

$$\dot{\varepsilon}_c^p = \frac{S_0}{\tau \bar{\mu}} \quad (1.19)$$

Como ilustrado na Figura-1.5, a Eq.(1.18) é uma curva tensão-deformação tal que,  $\varepsilon_{final}^p$  é deformação plástica não recuperável produzida após um tempo infinito pela tensão deviatória  $S$ . No limite em que  $\bar{\mu} \rightarrow \infty$ , e  $S_0$  é mantido constante,  $\varepsilon_{final}^p$  se anula para  $S < S_0$ , mas pode assumir qualquer valor positivo para  $S = S_0$ ; assim, o modelo STZ se torna perfeitamente plástico neste limite.

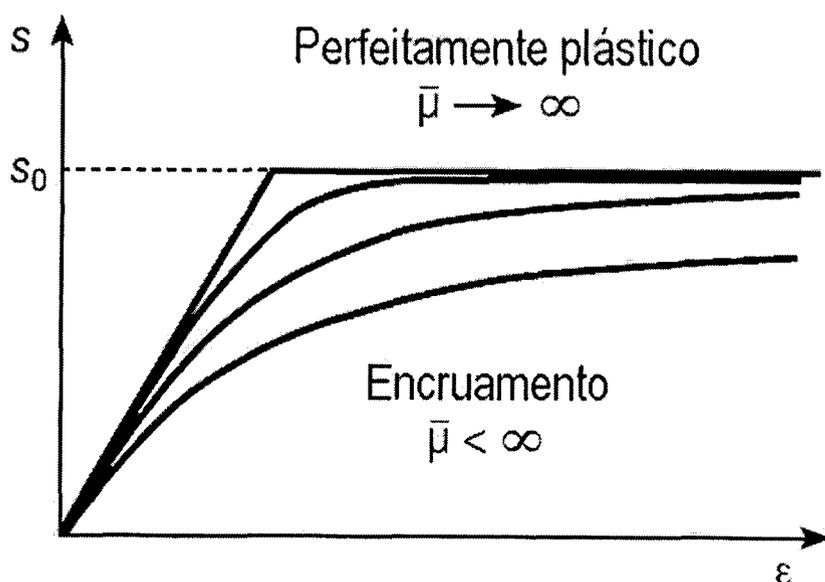


Figura-1.5: Gráfico da tensão deviatória  $S$  como função da deformação final. No limite em que  $\bar{\mu} \rightarrow \infty$ , o comportamento é elástico/perfeitamente plástico.

Para valores finitos de  $\bar{\mu}$ , o sistema apresenta encruamento.

Em resumo, mesmo esta versão altamente truncada da teoria STZ provê uma descrição compacta e fisicamente motivada da teoria da plasticidade [38]. Em apenas duas relações constitutivas, Eqs.(1.14) e (1.15), foram observados visco-elasticidade linear a pequenas tensões, encruamento por deformação a tensões elevadas, e transição dinâmica para visco-plasticidade na tensão de escoamento limite. Talvez, a vantagem mais importante da teoria STZ seja que as regiões plasticamente deformadas do material são caracterizadas não apenas por tensão e campos de deslocamento, mas também pela variável  $\Delta$ . Esta é uma característica especialmente importante da teoria STZ completa, onde a escala de tempo  $\tau$  é fortemente dependente da tensão como indicado na Eq.(1.14) e diverge quando  $S \rightarrow 0$ . Como resultado, os valores de  $\Delta$  permanecem fixos quando o sistema é descarregado – o sistema “memoriza” as deformações que ocorreram, e valores residuais de  $\Delta$  (em uma zona plástica, por exemplo) determinam como o sistema responde a subseqüentes mudanças na aplicação de tensões.

Diversos modelos têm sido desenvolvidos para o entendimento do processo de fratura em escala molecular. Modelos teóricos da fratura, as quais assumem o sólido representado como uma rede de pontos de massa, tem demonstrado estar sujeito a instabilidades como experimentalmente verificado [39]. Além deste fato, instabilidades semelhantes têm sido observadas em simulações moleculares dinâmicas de fratura em monocristais [40,41]. Recentemente simulações de fratura têm sido desenvolvidas utilizando modelos e técnicas em várias escalas as quais combinam análises de elementos finitos (FEA), dinâmica molecular (MD) e métodos da mecânica quântica para simular diferentes regiões do corpo em fratura [8]. Apesar destes importantes avanços, extenso trabalho ainda permanece a ser desenvolvido no relacionamento destes resultados a um contexto mais generalizado da mecânica de sólidos. Em particular, o desenvolvimento de rigorosos métodos de simulação e predição de falha material em sólidos não-cristalinos, ou qualquer sólido onde o complicado processo de deformação tenha atuação significante, encontram-se fora do escopo de tais métodos em sua formulação atual.

## **2- Implementação Numérica e Analógica das Equações Constitutivas STZ**

### **2.1- Implementação Numérica, UMAT**

#### **2.1.1- UMAT- Subrotina de Material Definida por Usuário**

Códigos comerciais de análise em elementos finitos, tal como ABAQUS/Standard (implícito) [42], permitem a especificação de subrotinas de material definida por usuário (UMAT). Esta é uma forma conveniente de implementação de equações constitutivas do material sem que para isto seja necessário ser desenvolvido um programa FEA completo.

O código ABAQUS calcula os incrementos de deformação a cada incremento de tempo e o repassa, como dado de entrada, à subrotina UMAT. Através dos incrementos de deformação, variáveis de estado e constantes materiais, a subrotina calcula as tensões ao final de cada iteração utilizando a forma incremental das equações constitutivas do material. No final de cada execução, a subrotina retorna ao programa principal o corrente estado de tensões e as variáveis de estado atualizadas em resposta a perturbação causada pelo incremento de deformação.

A implementação das equações constitutivas envolve a integração do estado material em um dado incremento de tempo durante o transcorrer da análise. É assumido que o comportamento material possa ser inteiramente definido por efeitos locais, de forma que cada integração espacial possa ser tratada de maneira independente. Desde que a formulação de solução implícita é a forma mais comum de integração em códigos comerciais, a implementação deve prover uma matriz de rigidez acurada e a definição da matriz Jacobiana para as equações de equilíbrio (a definição de matriz Jacobiana não é necessária para códigos baseados em formulação de solução explícita).

A Figura-2.1, apresenta um diagrama simplificado da subrotina UMAT.

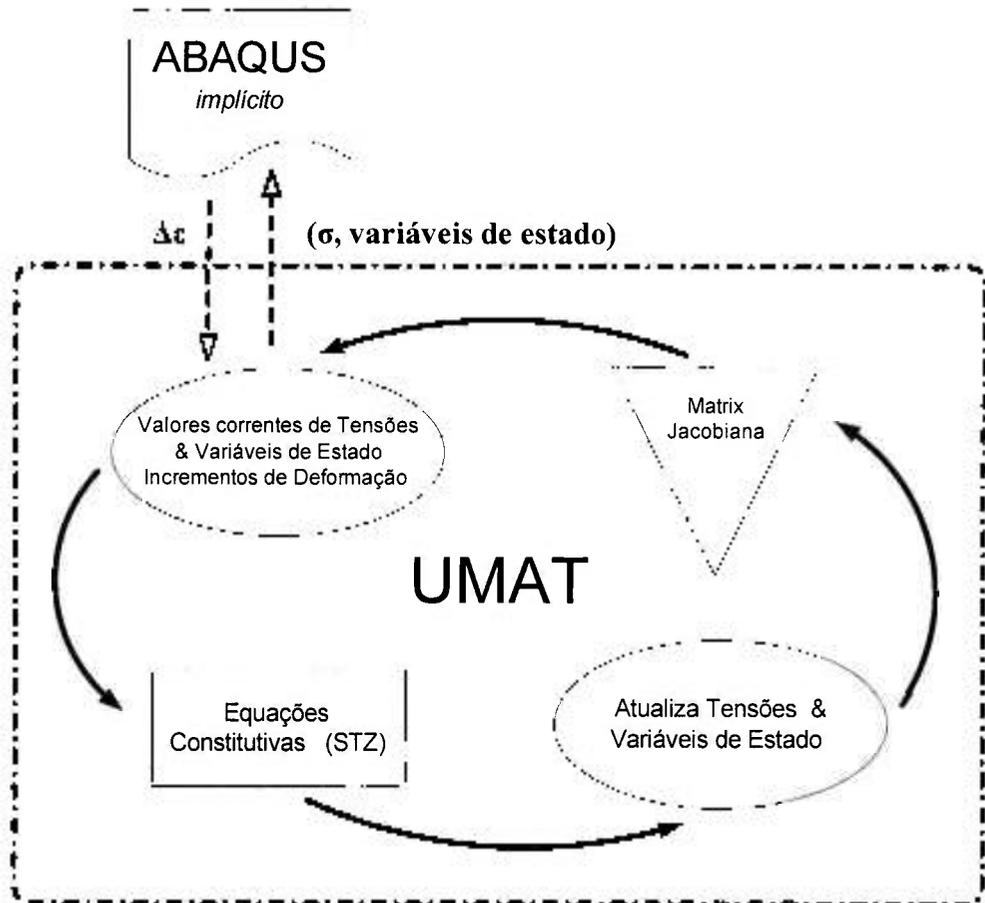


Figura-2.1: Diagrama da subrotina UMAT

### 2.1.2- Adequação das Equações STZ à Subrotina UMAT

Para adequação das equações constitutivas STZ à subrotina UMAT, esta deve ser expandida à sua formulação matricial.

Expansão à formulação matricial da 1ª equação constitutiva STZ:

A taxa de deformação total do material é a soma de suas porções de deformação elástica e plástica

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{tot} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p \quad (2.1)$$

A porção elástica é dada pela Lei de Hooke em relação à matriz de flexibilidade  $C$

$$\dot{\epsilon}_{ij}^e = C \dot{\sigma}_{ij}^e \quad (2.2)$$

A porção plástica é estabelecida pela primeira equação das relações constitutivas STZ, Eq.(1.12)

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{1}{\tau} \left( \frac{S_{ij}}{\bar{\mu}} - \Delta_{ij} \right) \quad (1.12)$$

onde

$$S_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} (Tr \sigma) \delta_{ij} \quad (2.3)$$

ou

$$\begin{aligned} S_{11} &= \sigma_{11} - \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} = +\frac{2}{3}\sigma_{11} - \frac{1}{3}\sigma_{22} - \frac{1}{3}\sigma_{33} \\ S_{22} &= \sigma_{22} - \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} = -\frac{1}{3}\sigma_{11} + \frac{2}{3}\sigma_{22} - \frac{1}{3}\sigma_{33} \\ S_{33} &= \sigma_{33} - \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} = -\frac{1}{3}\sigma_{11} - \frac{1}{3}\sigma_{22} + \frac{2}{3}\sigma_{33} \\ S_{12} &= \sigma_{12} \\ S_{23} &= \sigma_{23} \\ S_{31} &= \sigma_{31} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Assim, combinando-se as taxas de deformações elásticas e plásticas em seu formato matricial como na Eq. (2.1), tem-se:

$$\begin{bmatrix} \dot{\epsilon}_{11} \\ \dot{\epsilon}_{22} \\ \dot{\epsilon}_{33} \\ \dot{\epsilon}_{12} \\ \dot{\epsilon}_{23} \\ \dot{\epsilon}_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu}{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu}{E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\sigma}_{11} \\ \dot{\sigma}_{22} \\ \dot{\sigma}_{33} \\ \dot{\sigma}_{12} \\ \dot{\sigma}_{23} \\ \dot{\sigma}_{31} \end{bmatrix} + \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{-1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{bmatrix} + \left( \frac{-1}{\tau} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_{11} \\ \Delta_{22} \\ \Delta_{33} \\ \Delta_{12} \\ \Delta_{23} \\ \Delta_{31} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

Em resumo,

$$\underline{\dot{\epsilon}} = \underline{A}^{\dagger} \underline{\dot{\sigma}} + \underline{E}^{\dagger} \underline{\sigma} + \underline{C}^{\dagger} \underline{\Delta} \quad (2.6)$$

ou

$$\underline{\dot{\epsilon}} = \underline{A}^{\dagger} \underline{\dot{\sigma}} + \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \underline{E}^{\dagger} \underline{\sigma} + \left( \frac{-1}{\tau} \right) \underline{C}^{\dagger} \underline{\Delta} \quad (2.7)$$

Expansão à formulação matricial da 2ª equação constitutiva STZ:

Em relação à segunda equação das equações constitutivas STZ, Eq.(1.13), esta só existe para a porção plástica de deformação. Assim,

$$\dot{\Delta}_{ij} = \dot{\Delta}_{ij}^p = \dot{\varepsilon}_{kl}^p \left( \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\bar{\mu} \sigma_{kl}}{2S_0^2} \Delta_{ij} \right) \quad (1.13)$$

ou

$$\begin{aligned} \dot{\Delta}_{ij} &= \dot{\varepsilon}_{ij}^p - \frac{\bar{\mu}}{2S_0^2} (\dot{\varepsilon}_{ij}^p S_{kl}) \Delta_{ij} \\ \dot{\Delta}_{ij} &= \dot{\varepsilon}_{ij}^p - \frac{\bar{\mu}}{2S_0^2} (W^p) \Delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij}^p S_{ij} &= W^p \text{ (trabalho plástico)} \\ W^p &= \dot{\varepsilon}_{11}^p S_{11} + \dot{\varepsilon}_{22}^p S_{22} + \dot{\varepsilon}_{33}^p S_{33} + 2\dot{\varepsilon}_{12}^p S_{12} + 2\dot{\varepsilon}_{23}^p S_{23} + 2\dot{\varepsilon}_{31}^p S_{31} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Expandindo Eq.(2.8) em sua forma matricial

$$\begin{bmatrix} \dot{\Delta}_{11} \\ \dot{\Delta}_{22} \\ \dot{\Delta}_{33} \\ \dot{\Delta}_{12} \\ \dot{\Delta}_{23} \\ \dot{\Delta}_{31} \end{bmatrix} = \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{-1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{bmatrix} + \left( -1 \left( \frac{1}{\tau} + \frac{\bar{\mu} \dot{\varepsilon}_{ij}^p S_{ij}}{2S_0^2} \right) \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_{11} \\ \Delta_{22} \\ \Delta_{33} \\ \Delta_{12} \\ \Delta_{23} \\ \Delta_{31} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Em resumo,

$$\dot{\underline{\Delta}} = \underline{\underline{B}} \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{D}}(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{\Delta}}) \underline{\underline{\Delta}} \quad (2.11)$$

ou

$$\dot{\underline{\Delta}} = \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \underline{\underline{B}}^1 \underline{\underline{\sigma}} + \left( -1 \left( \frac{1}{\tau} + \frac{\bar{\mu} (W^p)}{2S_0^2} \right) \right) \underline{\underline{I}} \underline{\underline{\Delta}} \quad (2.12)$$

Combinando-se as Eqs.(2.6) e (2.11), tem-se o sistema de equações constitutivas STZ em seu formato matricial

$$\begin{aligned}\underline{\dot{\varepsilon}} &= \underline{A}^{\dagger} \underline{\dot{\sigma}} + \underline{E}^{\dagger} \underline{\sigma} + \underline{C}^{\dagger} \underline{\Delta} \\ \underline{\dot{\Delta}} &= \underline{B} \underline{\sigma} + \underline{D}(\underline{\sigma}, \underline{\Delta}) \underline{\Delta}\end{aligned}\quad (2.13)$$

Dado que o parâmetro de entrada na subrotina UMAT é a variável  $\underline{\dot{\varepsilon}}$ , deve-se inverter a primeira equação de (2.13) em relação à  $\underline{\dot{\sigma}}$ . Assim, o sistema de equações constitutivas STZ tem a seguinte forma

$$\begin{aligned}\underline{\dot{\sigma}} &= \underline{A} \underline{\dot{\varepsilon}} + \underline{E} \underline{\sigma} + \underline{C} \underline{\Delta} \\ \underline{\dot{\Delta}} &= \underline{0} \underline{\dot{\varepsilon}} + \underline{B} \underline{\sigma} + \underline{D}(\underline{\sigma}, \underline{\Delta}) \underline{\Delta}\end{aligned}\quad (2.14)$$

ou

$$\begin{pmatrix} \underline{\dot{\sigma}} \\ \underline{\dot{\Delta}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{A} \\ \underline{0} \end{pmatrix} (\underline{\dot{\varepsilon}}) + \begin{pmatrix} \underline{E} & \underline{C} \\ \underline{B} & \underline{D}(\underline{\sigma}, \underline{\Delta}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\sigma} \\ \underline{\Delta} \end{pmatrix}\quad (2.15)$$

ou

$$\begin{aligned}\underline{\dot{\sigma}} &= \underline{A} \underline{\dot{\varepsilon}} + \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \underline{E}' \underline{\sigma} + \left( \frac{-1}{\tau} \right) \underline{C} \underline{\Delta} \\ \underline{\dot{\Delta}} &= \underline{0} \underline{\dot{\varepsilon}} + \left( \frac{1}{\tau \bar{\mu}} \right) \underline{B}' \underline{\sigma} + \left( -1 \left( \frac{1}{\tau} + \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \right) \right) \underline{I} \underline{\Delta}\end{aligned}\quad (2.16)$$

As equações constitutivas STZ são apresentadas em seu formato matricial explícito, e prontas para serem implementadas na subrotina UMAT.

### 2.1.3- Solução Numérica do Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias STZ

A finalidade da subrotina UMAT é fornecer a solução do sistema diferencial ordinário de Eqs.(2.15)

$$\begin{pmatrix} \dot{\underline{\sigma}} \\ \dot{\underline{\Delta}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{A} \\ \underline{0} \end{pmatrix} (\underline{\dot{\varepsilon}}) + \begin{pmatrix} \underline{E} & \underline{C} \\ \underline{B} & \underline{D}(\underline{\sigma}, \underline{\Delta}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\sigma} \\ \underline{\Delta} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Dois métodos são utilizados para a solução do sistema diferencial ordinário (2.15): o Método de Euler Inverso e o Método de Newton. Ambos os métodos de solução são apresentados no apêndice-A [43]. Eq.(2.15) pode ser rescrita como

$$\dot{y} = A \dot{\varepsilon} + f(y) y = \Psi(y) \quad (2.17)$$

Assumindo-se que  $h$  é o intervalo de tempo entre iterações (“timestep”), é postulado pelo Método de Euler Inverso que

$$\frac{y^n - y^{n-1}}{h} = \Psi(y^n) \quad (A.6)$$

ou

$$g(y^n) = y^n - y^{n-1} - h \Psi(y^n) = 0 \quad (2.18)$$

Do Método de Newton

$$-g(y^n) = \left( \frac{\partial g}{\partial y} \right) \delta \quad (A.16)$$

Na subrotina UMAT,  $-g(y^n)$  é GEEYV.

$$\begin{aligned} \text{GEEYV} &= (-1.0) \cdot [y^n - y^{n-1} - h \Psi(y^n)] \\ \text{GEEYV} &= (-1.0) \cdot [y^n - y^{n-1} - h(A \dot{\varepsilon} + D y)] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Assim como,

$$-\mathbf{g}(y^n) = \left( \mathbf{I} - h \frac{\partial \Psi}{\partial y^n} \right) \delta \quad (2.20)$$

ou

$$\begin{aligned} -\mathbf{g}(y^n) &= \left[ \mathbf{I} - h \frac{\partial}{\partial y^n} (A \dot{\varepsilon} + f(y^n) y^n) \right] \delta \\ -\mathbf{g}(y^n) &= \left[ \mathbf{I} - h \left( f(y^n) + y^n \frac{\partial f(y^n)}{\partial y^n} \right) \right] \delta \end{aligned} \quad (2.21)$$

Na subrotina UMAT, à exceção de  $\delta$ , o segundo termo da Eq.(2.21) é DELGDELY

$$\text{DELGDELY} = \left[ \mathbf{I} - h \left( f(y^n) + y^n \frac{\partial f(y^n)}{\partial y^n} \right) \right] \quad (2.22)$$

A notar que somente o quarto quadrante de  $\mathbf{D}$  é dependente de  $(\underline{\sigma}, \underline{\Delta})$ , o qual é  $\underline{D}(\underline{\sigma}, \underline{\Delta})$ , e que todos outros quadrantes  $(\underline{E}, \underline{C}, \underline{B})$  são escalares e serão nulos na diferenciação.

Após a configuração de DELGDELY, o sistema está pronto para a solução do sistema diferencial ordinário, e as subrotinas LUDCMP e LUBKSB de “Numerical Recipes in FORTRAN 77” [44], são chamadas para resolver o sistema. LUDCMP executa uma *decomposição LU* do sistema para evitar um processo de inversão matricial (muitas vezes complexo e numericamente impreciso). Após LUDCMP, LUBKSB fornece a solução do sistema matricial de equações.

O passo final, e como requerido pelo código ABAQUS/Standard para o processamento da subrotina UMAT, é o cálculo da *Matriz Jacobiana* e a atualização de todas as variáveis de estado a serem salvas em um vetor que atua como histórico de transferência para a próxima iteração.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(y_1)}{\partial y_1} & \frac{\partial f(y_1)}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f(y_1)}{\partial y_n} \\ \frac{\partial f(y_2)}{\partial y_1} & \frac{\partial f(y_2)}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f(y_2)}{\partial y_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f(y_n)}{\partial y_1} & \frac{\partial f(y_n)}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f(y_n)}{\partial y_n} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

## 2.2- Implementação da Solução Analítica STZ ao Programa Mathematica

Para verificação dos resultados numéricos, estabilidade e implementação da subrotina UMAT considerando as equações constitutivas STZ em sua forma matricial e incremental, uma solução analítica paralela é desenvolvida utilizando-se o programa matemático, *Mathematica* [45].

Expansão da 1ª equação constitutiva STZ para implementação analítica no programa *Mathematica*:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \frac{1}{\tau} \left( \frac{S_{ij}}{\bar{\mu}} - \Delta_{ij} \right) \quad (1.12)$$

Como anteriormente,  $S_{ij}$  são as tensões deviatóricas

$$S_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} (Tr \sigma) \delta_{ij} \quad (2.3)$$

Desta forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\varepsilon}_{11} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{[(2/3)\sigma_{11} - (1/3)\sigma_{22} - (1/3)\sigma_{33}]}{\bar{\mu}} - \Delta_{11} \right) \\ \dot{\varepsilon}_{22} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{[-(1/3)\sigma_{11} + (2/3)\sigma_{22} - (1/3)\sigma_{33}]}{\bar{\mu}} - \Delta_{22} \right) \\ \dot{\varepsilon}_{33} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{[-(1/3)\sigma_{11} - (1/3)\sigma_{22} + (2/3)\sigma_{33}]}{\bar{\mu}} - \Delta_{33} \right) \\ \dot{\varepsilon}_{12} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{\sigma_{12}}{\bar{\mu}} - \Delta_{12} \right) \\ \dot{\varepsilon}_{23} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{\sigma_{23}}{\bar{\mu}} - \Delta_{23} \right) \\ \dot{\varepsilon}_{31} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{\sigma_{31}}{\bar{\mu}} - \Delta_{31} \right) \end{array} \right. \quad (2.24)$$

Expansão da 2ª equação constitutiva STZ para implementação analítica no programa *Mathematica*:

$$\dot{\Delta}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^p \left( \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\bar{\mu} S_{kl}}{2S_0^2} \Delta_{ij} \right) \quad (1.13)$$

ou

$$\dot{\Delta}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^p - \frac{\bar{\mu}}{2S_0^2} (\epsilon_{ij}^p S_{kl}) \Delta_{ij} \quad (2.8)$$

$$\dot{\Delta}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^p - \frac{\bar{\mu}}{2S_0^2} (W^p) \Delta_{ij}$$

Desta forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\Delta}_{11} = \dot{\epsilon}_{11}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{11} \\ \dot{\Delta}_{22} = \dot{\epsilon}_{22}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{22} \\ \dot{\Delta}_{33} = \dot{\epsilon}_{33}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{33} \\ \dot{\Delta}_{12} = \dot{\epsilon}_{12}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{12} \\ \dot{\Delta}_{23} = \dot{\epsilon}_{23}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{23} \\ \dot{\Delta}_{31} = \dot{\epsilon}_{31}^p - \frac{\bar{\mu}(W^p)}{2S_0^2} \Delta_{31} \end{array} \right. \quad (2.25)$$

Para a expansão das equações constitutivas, estas são implementadas de acordo com a sintaxe do programa *Mathematica* e definidas como um sistema de três relações de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem em termos de  $\Delta(t)$ ,  $\varepsilon(t)$  e  $\sigma(t)$ :

1) Taxa de  $\Delta$

$$\dot{d}_{ij} = \dot{\Delta}_{ij} \quad (2.26)$$

2) Balanço da taxa de deformação

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} &= \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p = etot \\ \dot{\varepsilon}_{ij}^e &= \dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} - \dot{\varepsilon}_{ij}^p = etot - \dot{\varepsilon}_{ij}^p \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde,  $etot$  = taxa de deformação total (dado de entrada)

3) A Lei de Hooke estabelece a porção elástica

$$\sigma_{ij} = K_{ijkl} \varepsilon_{kl} \sim \dot{\sigma}_{ij} = K_{ijkl} \dot{\varepsilon}_{kl} \quad (2.28)$$

onde  $K_{ijkl}$  é a matriz de constantes elásticas

ou

$$\underline{\sigma} = \underline{K} \underline{\varepsilon} \quad (2.29)$$

onde

$$\underline{\varepsilon} = [\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ \varepsilon_{33} \ \gamma_{12} \ \gamma_{23} \ \gamma_{31}] \quad (2.30)$$

e

$$\gamma_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji} \quad \text{para } i \neq j \quad (2.31)$$

No caso onde

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \rightarrow \gamma_{ij} = 2\varepsilon_{ij} \quad (2.32)$$

então,

$$\underline{\varepsilon} = [\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ \varepsilon_{33} \ 2\varepsilon_{12} \ 2\varepsilon_{23} \ 2\varepsilon_{31}] \quad (2.33)$$

Em condição elástica linear e isotrópica, a relação tensão-deformação é

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \varepsilon_{kk} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (2.34)$$

onde  $\lambda$  e  $\mu$  são os coeficientes de Lamé

$$\lambda = \frac{E \nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (2.35)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (2.36)$$

A matriz de constantes elásticas tem então a seguinte forma

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} (\lambda+2\mu) & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & (\lambda+2\mu) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & (\lambda+2\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

Então da Eq.(2.29),

$$\begin{bmatrix} \dot{\sigma}_{11} \\ \dot{\sigma}_{22} \\ \dot{\sigma}_{33} \\ \dot{\sigma}_{12} \\ \dot{\sigma}_{23} \\ \dot{\sigma}_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\lambda+2\mu) & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & (\lambda+2\mu) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & (\lambda+2\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_{11}^e \\ \dot{\varepsilon}_{22}^e \\ \dot{\varepsilon}_{33}^e \\ 2\dot{\varepsilon}_{12}^e \\ 2\dot{\varepsilon}_{23}^e \\ 2\dot{\varepsilon}_{31}^e \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

Combinando itens 1, 2 e 3, é definida uma função *soln* a qual considera a taxa de deformação, os valores iniciais das variáveis de estado e os parâmetros materiais para resolver o sistema de equações em relação à deformação, tensão e variáveis de estado como funções do tempo. Desta forma, obtêm-se uma solução analítica das equações STZ que pode ser comparada aos resultados numéricos para validação da subrotina UMAT.

### 3- Correlação dos Resultados Numéricos e Analíticos

#### 3.1- Correlações Numéricas e Analíticas em Cubo Simples

Considera-se o cubo com orientação e faces como indicado na Figura-3.1:

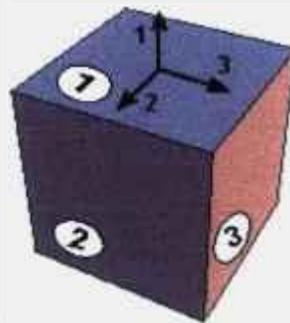


Figura-3.1: Cubo apresentando orientação local e faces (faces opostas 4,5,6 não aparentes)

Três casos podem ser observados para uma dada taxa de deformação constante  $\dot{\epsilon}_{11}^{tot}$ :

- 1) Deslocamentos de todas as faces do cubo são restritas, à exceção da face 1 que se move a uma taxa de deformação constante  $\dot{\epsilon}_{11}^{tot} = e \dot{\sigma}_{11}$  (dado de entrada) na direção 1  $\rightarrow$  estado triaxial de tensão (três tensões principais não nulas).

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{11} \neq 0 \\ \dot{\sigma}_{22} \neq 0 \\ \dot{\sigma}_{33} \neq 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \dot{\epsilon}_{11}^{tot} = e \dot{\sigma}_{11} \\ \dot{\epsilon}_{22}^{tot} = 0 \\ \dot{\epsilon}_{33}^{tot} = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

- 2) Deslocamento da face 2 do cubo é restrita, face 3 tem deslocamento livre, face 1 se move a uma taxa de deformação constante  $\dot{\epsilon}_{11}^{tot} = e \dot{\sigma}_{11}$  (dado de entrada) na direção 1  $\rightarrow$  estado biaxial de tensão (uma tensão principal nula).

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{11} \neq 0 \\ \dot{\sigma}_{22} \neq 0 \\ \dot{\sigma}_{33} = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \dot{\epsilon}_{11}^{tot} = etot_{11} \\ \dot{\epsilon}_{22}^{tot} = 0 \\ \dot{\epsilon}_{33}^{tot} = (-\nu / (1-\nu)) \dot{\epsilon}_{11}^{tot} \end{cases} \quad (3.2)$$

- 3) Faces 2 e 3 do cubo têm deslocamentos livres, face 1 se move a uma taxa de deformação constante  $\dot{\epsilon}_{11}^{tot} = etot_{11}$  (dado de entrada) na direção 1  $\rightarrow$  *estado uniaxial de tensão* (somente uma tensão principal não-nula).

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{11} \neq 0 \\ \dot{\sigma}_{22} = 0 \\ \dot{\sigma}_{33} = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \dot{\epsilon}_{11}^{tot} = etot_{11} \\ \dot{\epsilon}_{22}^{tot} = -\nu \dot{\epsilon}_{11}^{tot} \\ \dot{\epsilon}_{33}^{tot} = -\nu \dot{\epsilon}_{11}^{tot} \end{cases} \quad (3.3)$$

Para facilitar comparação e validação de resultados, foi selecionada uma combinação consistente de parâmetros  $(E, \nu, \bar{\mu}, \tau, S_0, etot_{11})$  para ambos os modelos, numérico e analítico, visando à geração de resultados próximo a condição de plasticidade ideal. Ou seja:

$$\begin{aligned} E &= 1. \text{ GPa} \\ \nu &= 0.3 \\ \bar{\mu} &= 10. \text{ GPa} \\ \tau &= 1.E - 4 \text{ s} \\ S_0 &= 0.02 \text{ MPa} \\ etot_{11} &= 1. \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

Figuras.-3.2 a 3.10, apresentam a comparação de resultados obtidos pela rotina analítica *Mathematica* em comparação aos mesmos dados de entrada, condições iniciais e de contorno, de um único elemento finito cúbico considerando a subrotina UMAT STZ.

As Figuras-3.2 a 3.4 a seguir apresentam os resultados obtidos para o caso *uniaxial de tensão*, sob condições especificadas nas Eqs.(3.3)

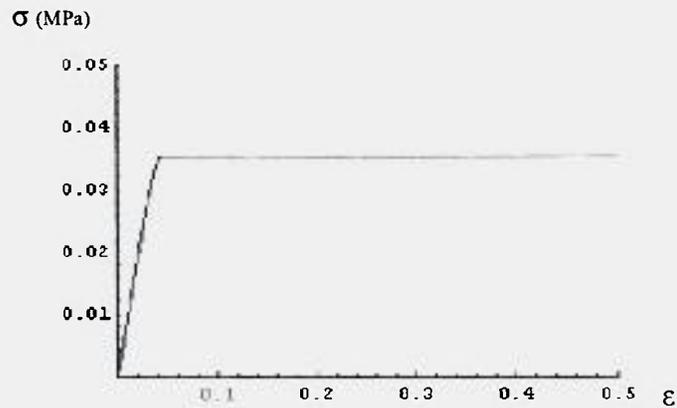


Figura-3.2: Curva tensão-deformação, rotina *Mathematica*, caso uniaxial de tensão.

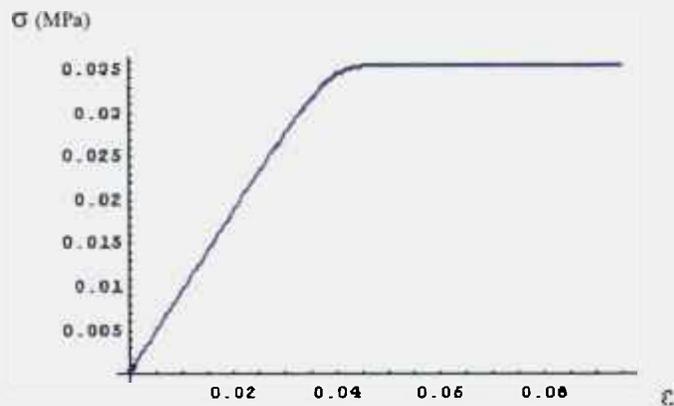


Figura-3.3: Curva tensão-deformação, subrotina UMAT, caso uniaxial de tensão.

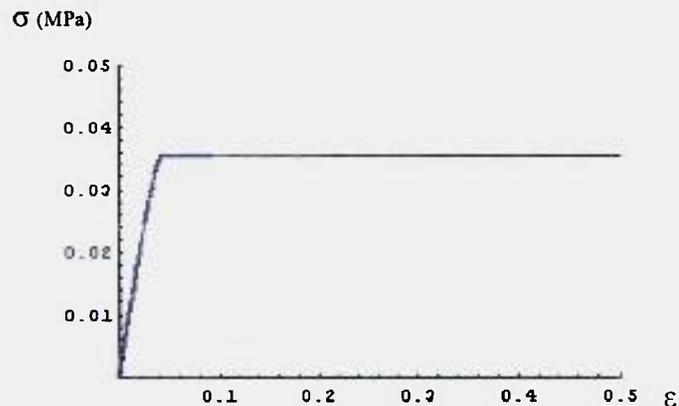


Figura-3.4: Curva tensão-deformação, comparação de resultados *Mathematica* e UMAT pela superposição das Figuras-3.2 e 3.3, caso uniaxial de tensão.

As Figuras-3.5 a 3.7 a seguir apresentam os resultados obtidos para o caso *biaxial de tensão*, sob condições especificadas nas Eqs.(3.2)

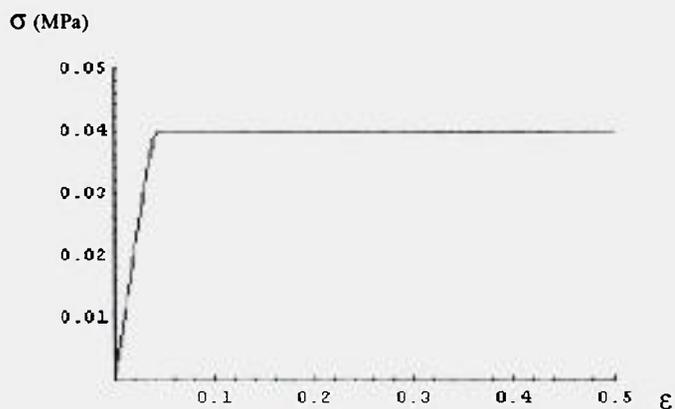


Figura-3.5: Curva tensão-deformação, rotina *Mathematica*, caso biaxial de tensão.

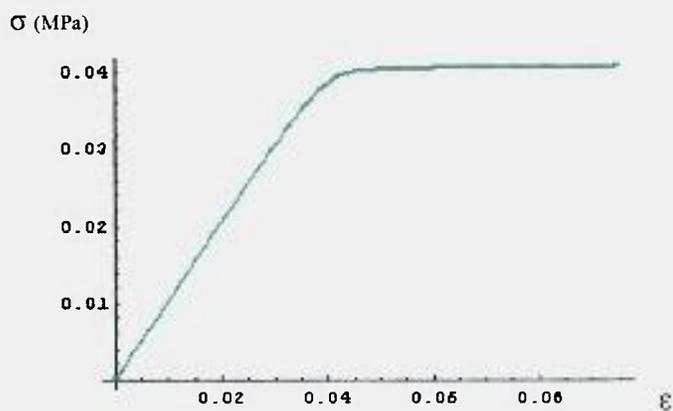


Figura-3.6: Curva tensão-deformação, subrotina *UMAT*, caso biaxial de tensão.

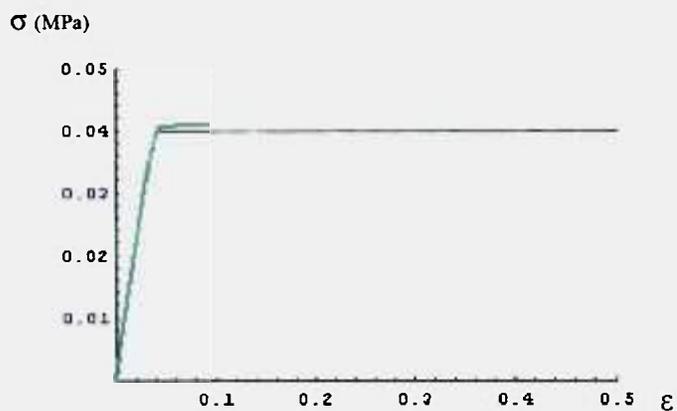


Figura-3.7: Curva tensão-deformação, comparação de resultados *Mathematica* e *UMAT* pela superposição das Figuras-3.5 e 3.6, caso biaxial de tensão.

As Figuras-3.8 a 3.10 a seguir apresentam os resultados obtidos para o caso *triaxial de tensão*, sob condições especificadas nas Eqs.(3.1)

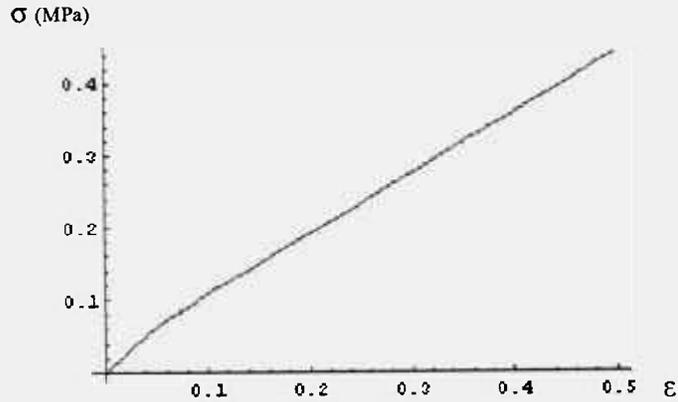


Figura-3.8: Curva tensão-deformação, rotina *Mathematica*, caso triaxial de tensão.

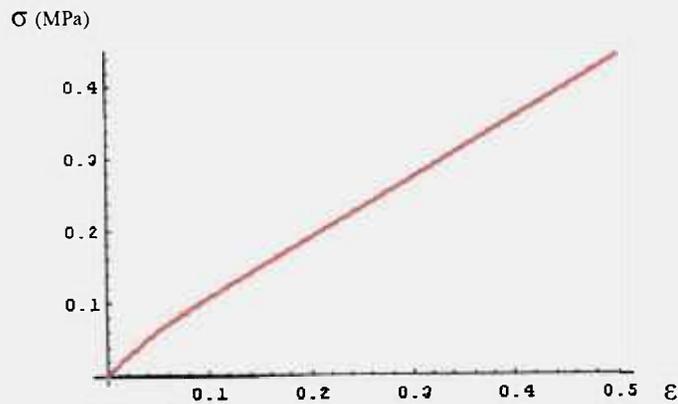


Figura-3.9: Curva tensão-deformação, subrotina UMAT, caso triaxial de tensão.

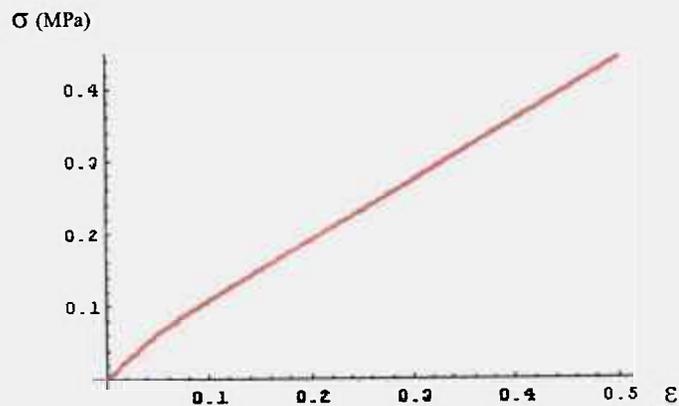


Figura-3.10: Curva tensão-deformação, comparação de resultados *Mathematica* e UMAT pela superposição das Figuras-3.8 e 3.9, caso triaxial de tensão.

Das Figuras-3.2 a 3.4, pode-se verificar a boa correlação entre os resultados obtidos pela rotina UMAT quando comparada aos resultados analíticos para o caso teste de tensão *uniaxial*. No caso teste *biaxial* de tensão, Figuras-3.5 a 3.7, um pequeno desvio pode ser observado no topo da região plástica. Este desvio tende a se reduzir com o aumento do número de iterações UMAT. No caso *triaxial* de tensão, Figuras-3.8 a 3.10, nota-se o diferente formato desta curva devido a relativamente maior variação volumétrica em comparação aos dois casos anteriores. Também neste caso, uma perfeita sobreposição de curvas é observada.

As Figuras-3.11 e 3.12 apresentam a comparação dos resultados de análises analíticas e numéricas de cubo simples para uma dada de taxa de deformação ao longo do eixo 1 (deslocamento da face 1). A face 2, e a face oposta (face 5), não se deslocam ao longo do eixo 2; e a face 3, e a face oposta (face 6) têm deslocamento livre. A esta configuração, três análises foram desenvolvidas e que são apresentadas em forma de curvas tensão-deformação: curva 1, considera o critério de escoamento de Von Mises (também conhecido como *teoria J2-flow*) via análise de elementos finitos; curva 2, considera a solução analítica STZ via programa *Mathematica*; e curva 3, considera o modelamento STZ UMAT via análise de elementos finitos. Os mesmos dados anteriores foram utilizados, com a diferença de que  $\bar{\mu}$  é considerado sob dois valores:  $\bar{\mu}=10$ . MPa e  $\bar{\mu}=1000$ . MPa. A Figura-3.11 apresenta resultados para valor de  $\bar{\mu}=10$ . MPa, enquanto que a Figura-3.12 apresenta resultados para valor de  $\bar{\mu}=1000$ . MPa.

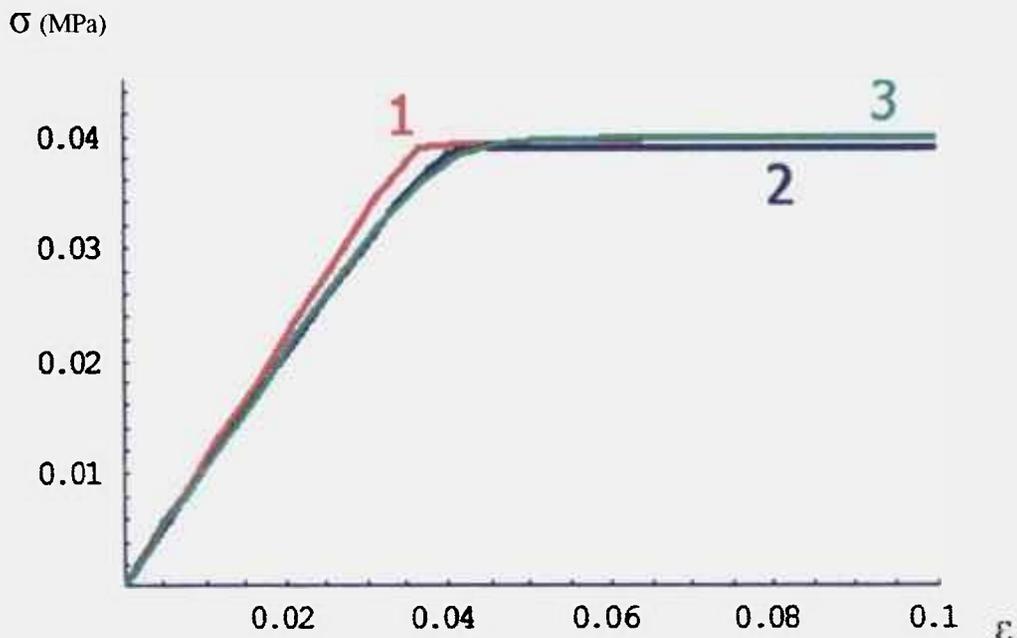


Figura-3.11: Curva tensão-deformação, comparação de resultados de análises analítica e numéricas,  $\bar{\mu}=10$ . MPa.

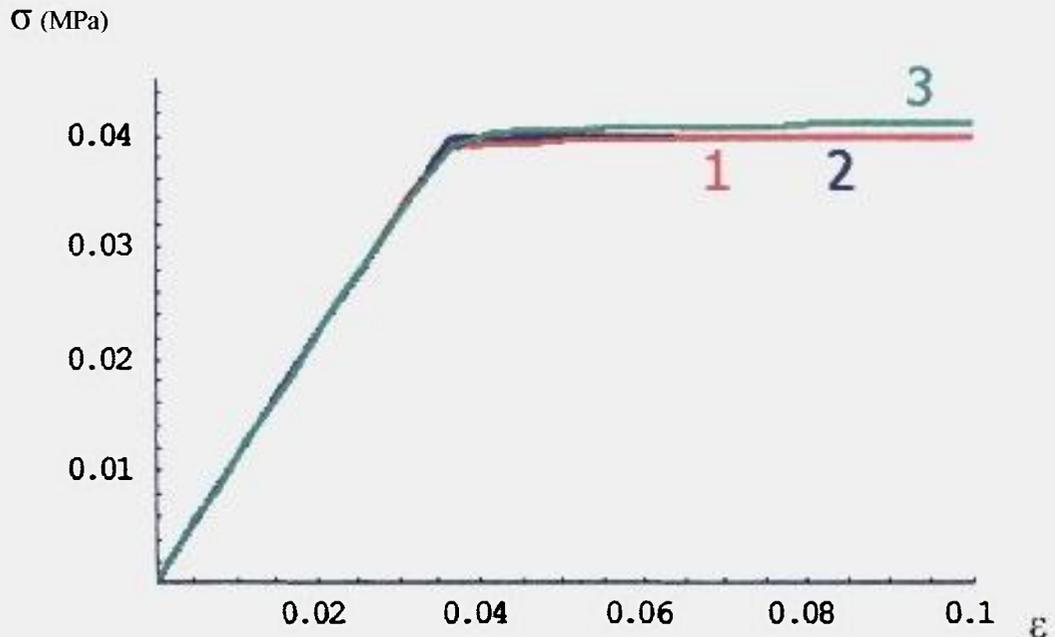


Figura-3.12: Curva tensão-deformação, comparação de resultados de análises analítica e numéricas,  $\bar{\mu} = 1000$  MPa.

Além da boa correlação entre as diferentes abordagens de análise nas Figuras-3.11 e 3.12, é interessante notar na Figura-3.11 que as análises STZ, tanto numérica quanto analítica, curvas 2 e 3, ficaram abaixo da região elástica linear da curva 1. Ou seja, mesmo à tensões abaixo da tensão limite de escoamento observado ( $\sim 0.04$  MPa), uma parcela de escoamento plástico pode ser identificado nas análises STZ. Este é um fato importante da teoria STZ, pois que, se a tensão aplicada não seja tão pequena tal que a parcela não-linear possa ser negligenciada, sempre haverá de coexistir parcelas de deformação elástica e de escoamento plástico no modelamento STZ.

A Figura-3.12 mostra a tendência ao regime perfeitamente plástico, e a aproximação ao critério de escoamento de Von Mises, para modelamento STZ considerando valores mais elevados de  $\bar{\mu}$ .

### 3.2- Correlações Numéricas de Modelos em Elementos Finitos

Para verificação da implementação numérica UMAT e observação do comportamento da teoria STZ em comparação a modelos materiais estabelecidos, foi também desenvolvido um modelo de trinca em elementos finitos considerado sob duas diferentes formulações constitutivas: o critério de escoamento de Von Mises (opção de formulação material interna do programa ABAQUS/standard) e a teoria STZ (subrotina UMAT).

Considera-se um modelo de formato quadrado, com dimensão unitária ( $L=1$ . mm), como apresentado na Figura-3.13. Neste diagrama são indicadas as condições de engastamento e carregamento do modelo em elementos finitos, onde apenas o nó da ponta de trinca é restringido em todas as direções (nó de referência). A meia porção inferior do modelo é considerada em condições de simetria, e desta forma, restrita a rotação na direção perpendicular ao plano do modelo (rotação  $y$ ). Desta feita, a intenção é simular as condições de uma meia porção de um espécime retangular de tamanho  $L \times 2L$ , com meia trinca se estendendo da lateral livre ao ponto central deste.

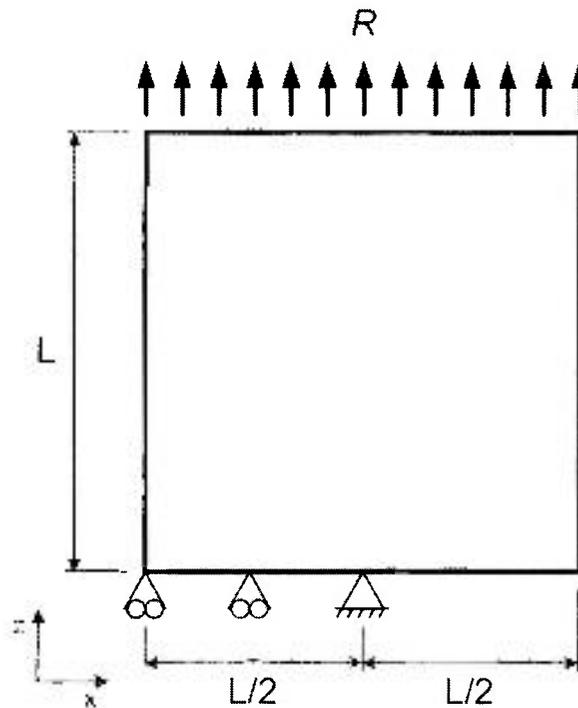


Figura-3.13: Diagrama de carregamento e engastamento do modelo de trinca em elementos finitos.

A malha de elementos finitos foi gerada com refinamento tipo “teia-de-aranha” na região da ponta de trinca (tamanho de elemento na ponta da trinca igual a 0.002 mm) como apresentado na Figura-3.14. O modelo bi-dimensional é então extrudado a uma pequena dimensão (0.01 mm) para modelamento sólido e seus lados restringidos para consideração de condição de estado plano de deformação.

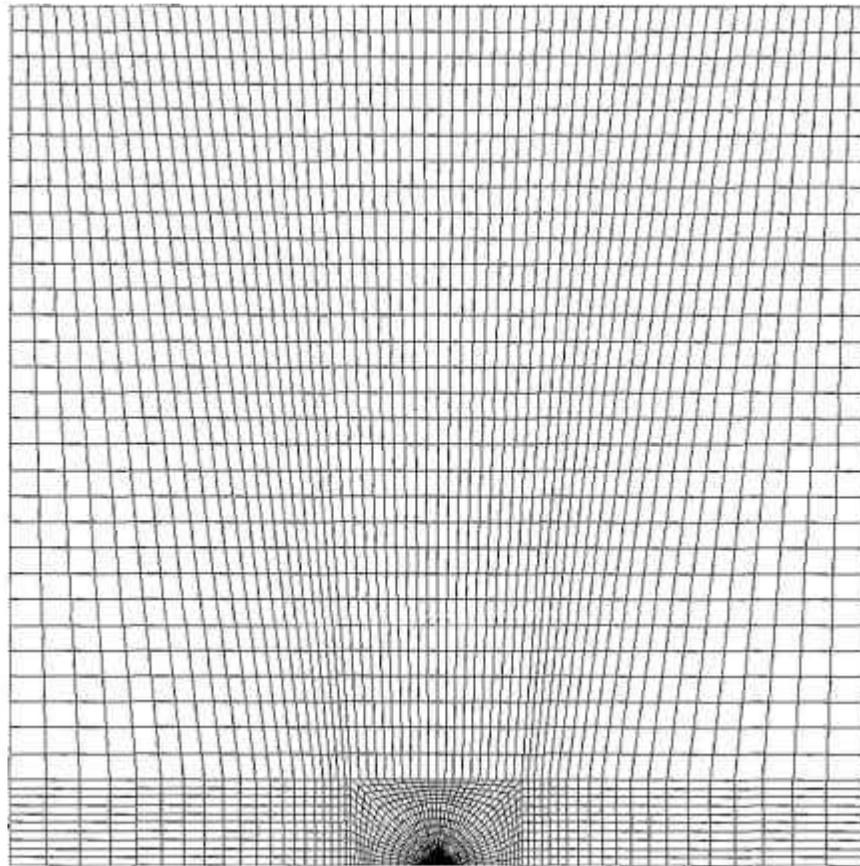


Figura-3.14: Malha do modelo de trinca em elementos finitos.

O carregamento  $R$  é considerado aplicado no topo do modelo como velocidade nodal. Desta feita, velocidade é uma maneira simples de controlar a taxa de deformação total aplicada ao sistema. A Figura-3.15 apresenta o formato deformado do modelo sob carregamento como observado em pós-processamento.

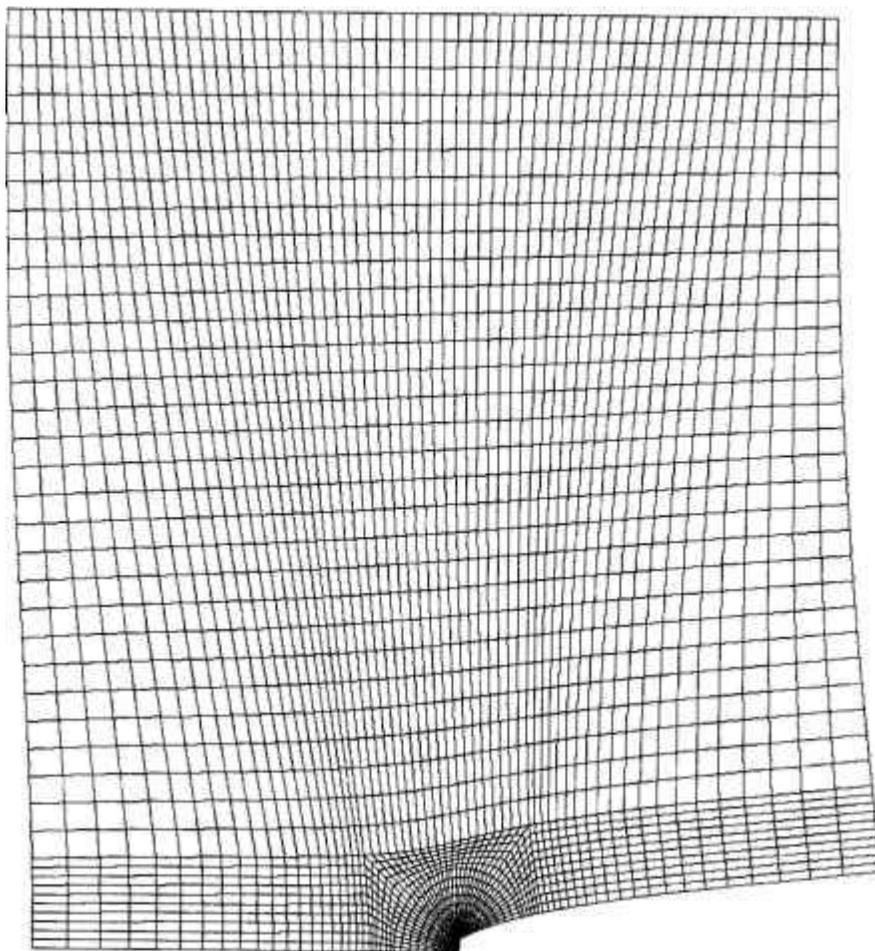


Figura-3.15: Malha do modelo de trinca em elementos finitos deformado (escala de deslocamentos 10:1).

Como na Figura-1.5, a intenção é observar os efeitos nos resultados de tensão-deformação para valores de  $\bar{\mu}$  em expoentes de 10 ( $\bar{\mu} = 10., 100., 1000.$  MPa), e com o propósito de comparação, utilizar o critério de escoamento de Von Mises e a implementação numérica da teoria STZ. Neste caso, não é esperado uma direta correlação numérica, mas uma comparação qualitativa em termos de tensões e deformações plásticas na região da ponta de trinca.

Para a correlação destas duas teorias, o módulo de elasticidade efetivo precisa ser considerado em ambos os casos. Sabe-se que  $\bar{\mu}$  têm a seguinte relação com o módulo de cisalhamento  $G$ :

$$\frac{1}{2G_{ef}} = \frac{1}{2G} + \frac{1}{\bar{\mu}} \quad (3.4)$$

No caso onde

$$G_{ef} = \frac{1}{2} \Rightarrow 1 = \frac{1}{2G} + \frac{1}{\bar{\mu}} \quad (3.5)$$

$G$  também é definido por

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.6)$$

Então,

$$\text{para } G_{ef} = \frac{1}{2} \rightarrow E_{ef} = \frac{(1+\nu)\bar{\mu}}{(\bar{\mu}-1)} \quad (3.7)$$

São considerados os valores de  $\bar{\mu} = 10., 100., 1000.$  MPa e  $\nu=0.3$ . Assim,  $E_{ef} = 1.4444, 1.3131$  e  $1.3013$  MPa. Figuras-3.16 a 3.33 apresentam a comparação, da teoria STZ ante o critério de escoamento de Von Mises, como gráficos de contornos de tensões de Von Mises e de contornos de deformação plástica para  $\bar{\mu} = 10., 100., 1000.$  MPa.

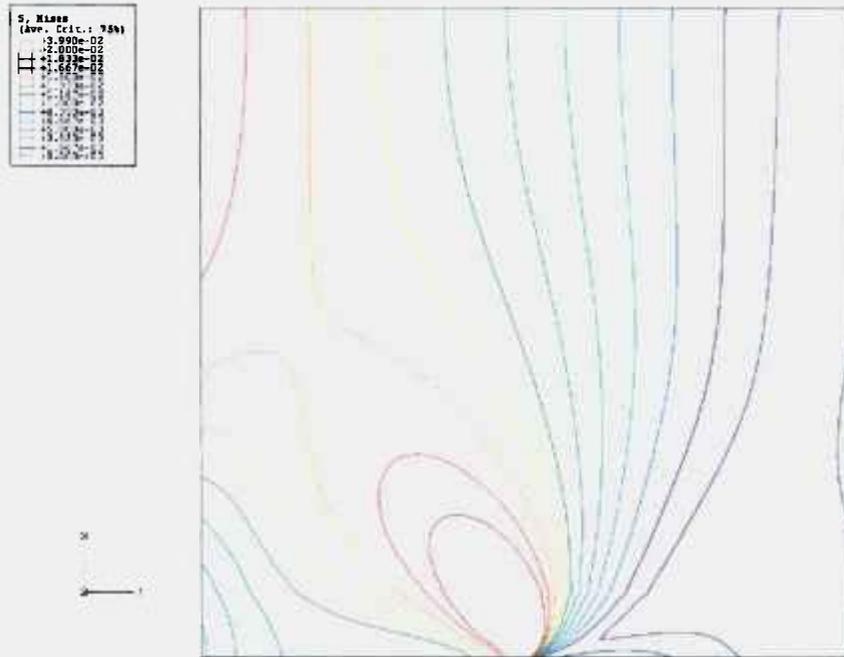


Figura-3.16: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 10$ . MPa.

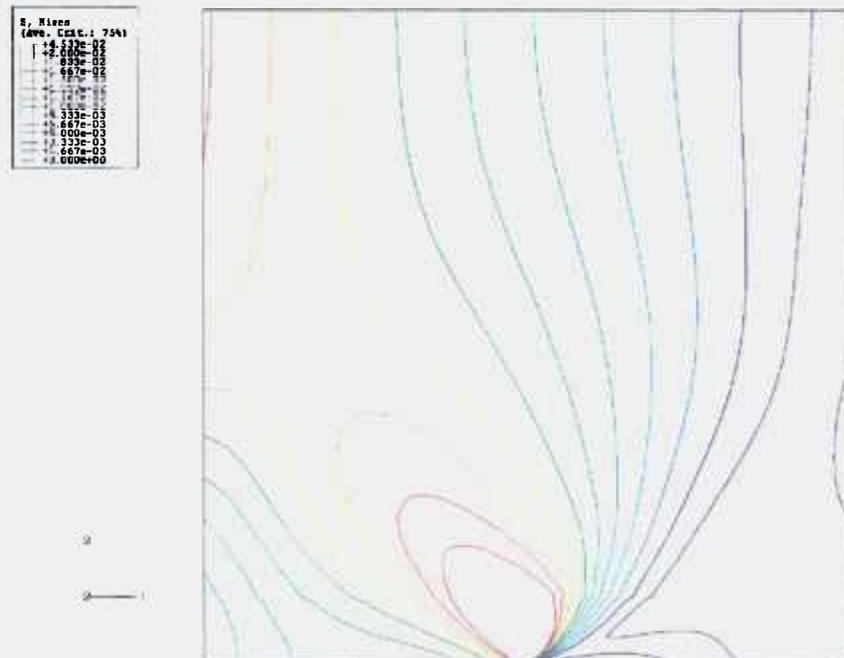


Figura-3.17: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, teoria STZ,  $\bar{\mu} = 10$ . MPa.



Figura-3.18: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 10$ . MPa.

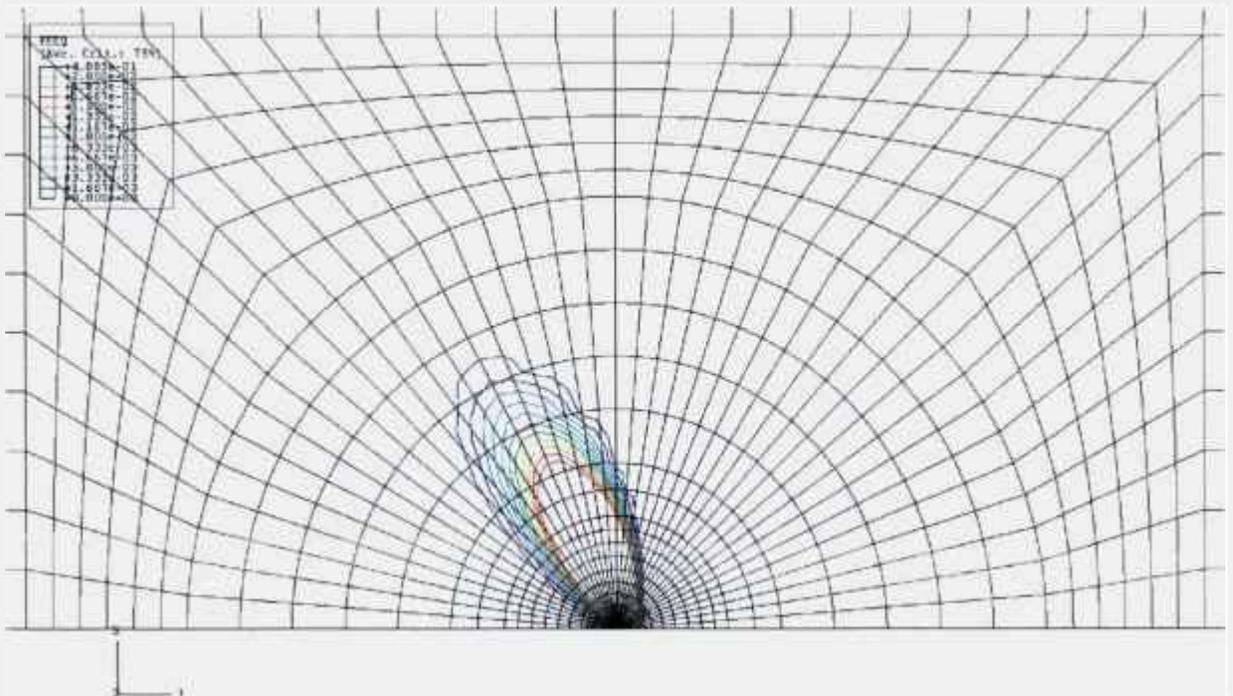


Figura-3.19: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 10$ . MPa (zoom).

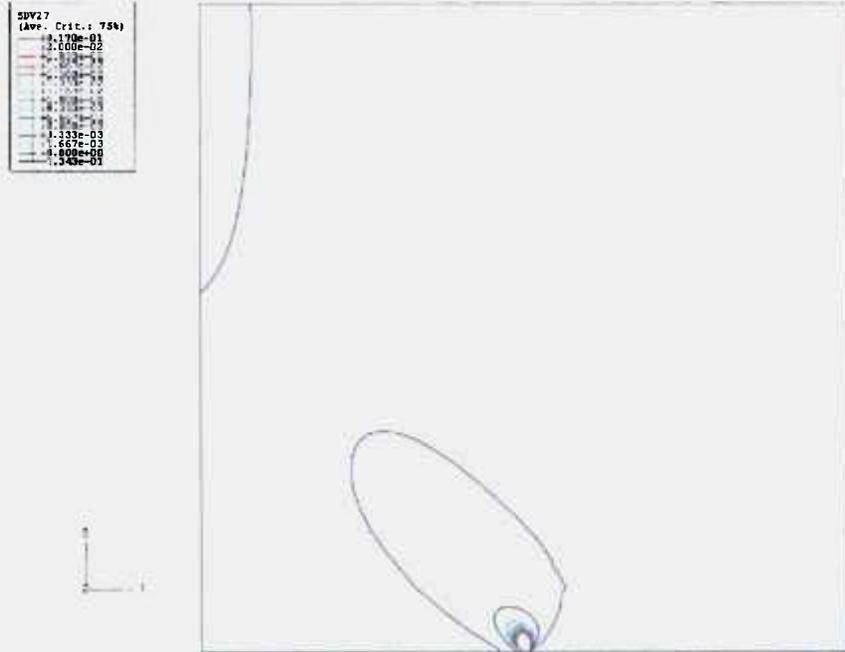


Figura-3.20: Gráfico contorno de deformação plástica, teoria STZ,  $\bar{\mu}=10$ . MPa.

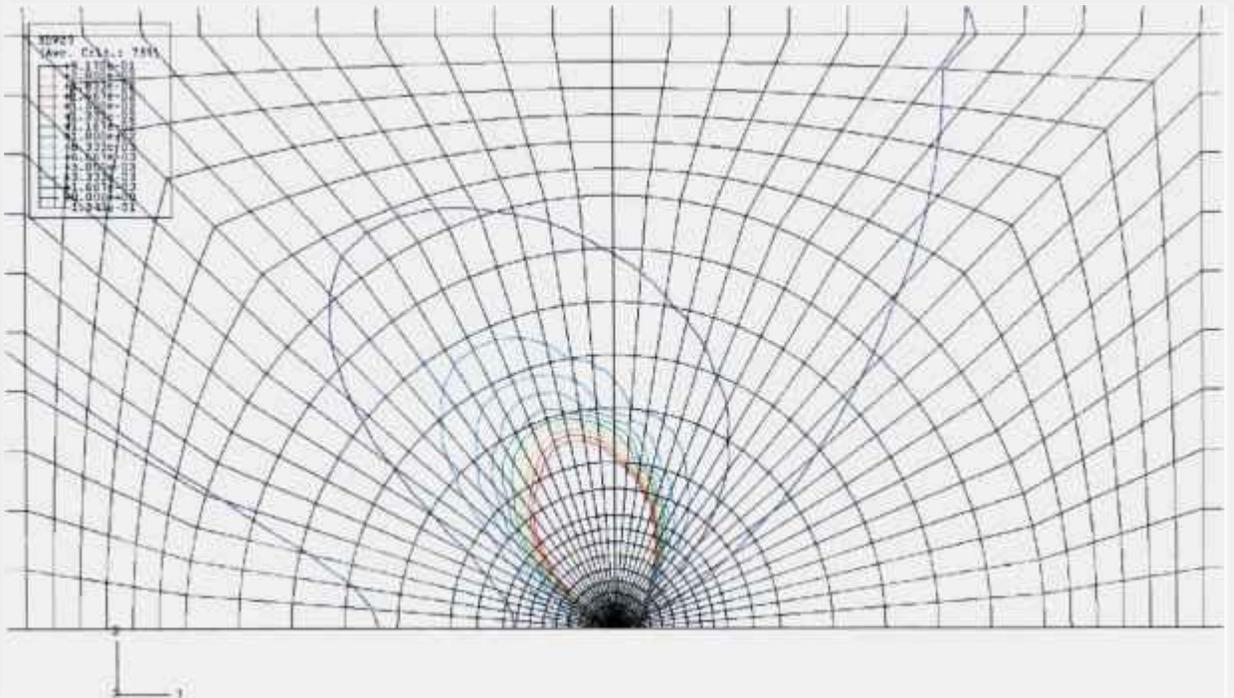


Figura-3.21: Gráfico contorno de deformação plástica, teoria STZ,  $\bar{\mu}=10$ . MPa (zoom).

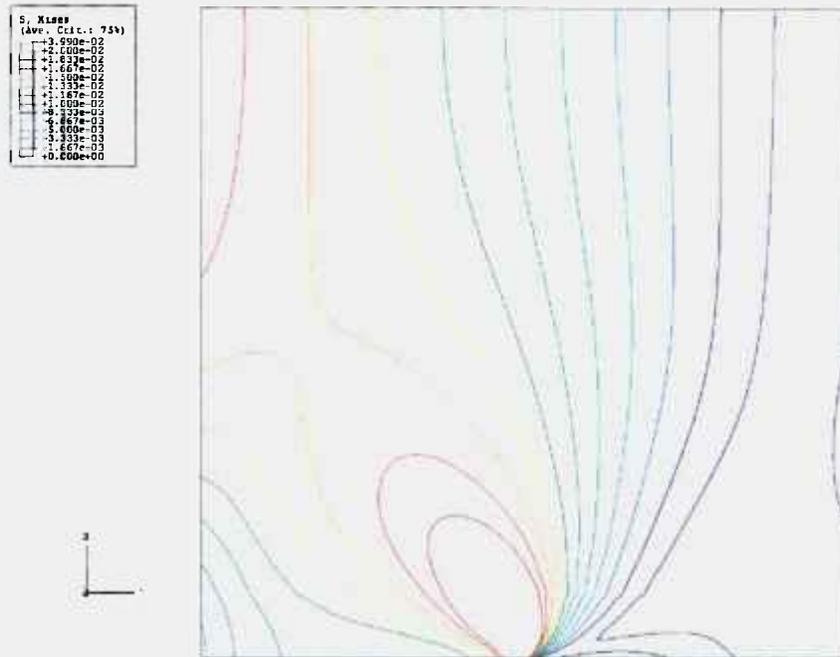


Figura-3.22: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 100$ . MPa.

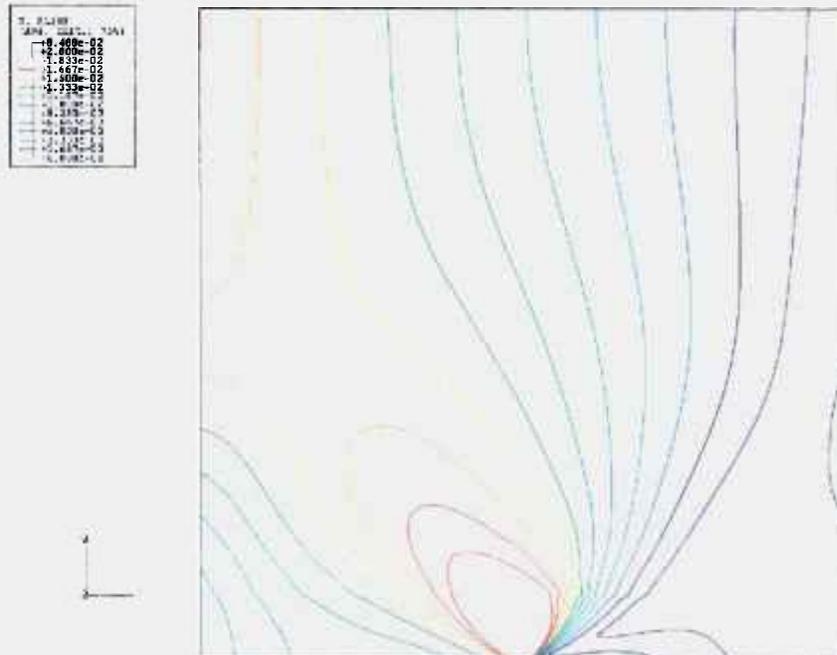


Figura-3.23: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, teoria STZ,  $\bar{\mu} = 100$ . MPa.

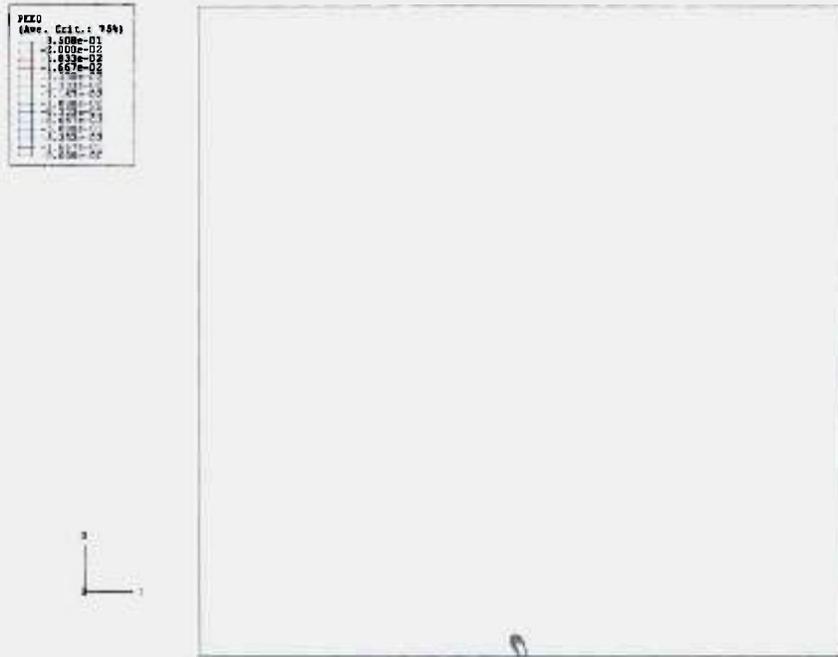


Figura-3.24: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 100$ . MPa.

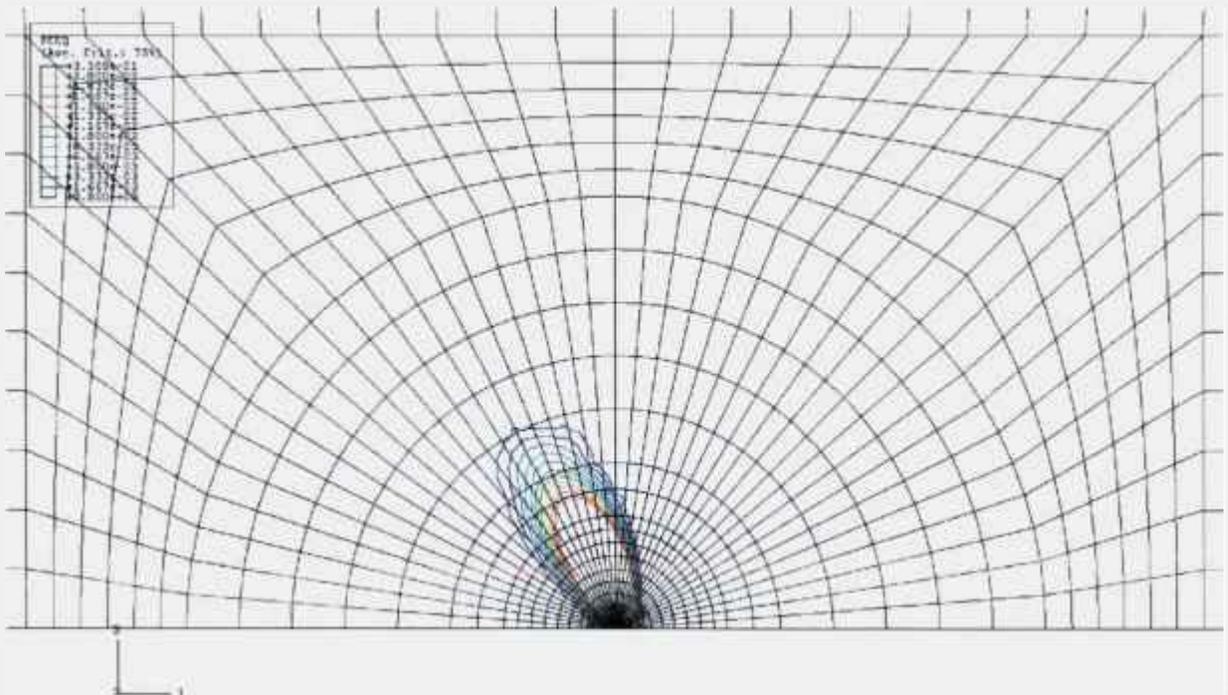


Figura-3.25: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu} = 100$ . MPa (zoom).



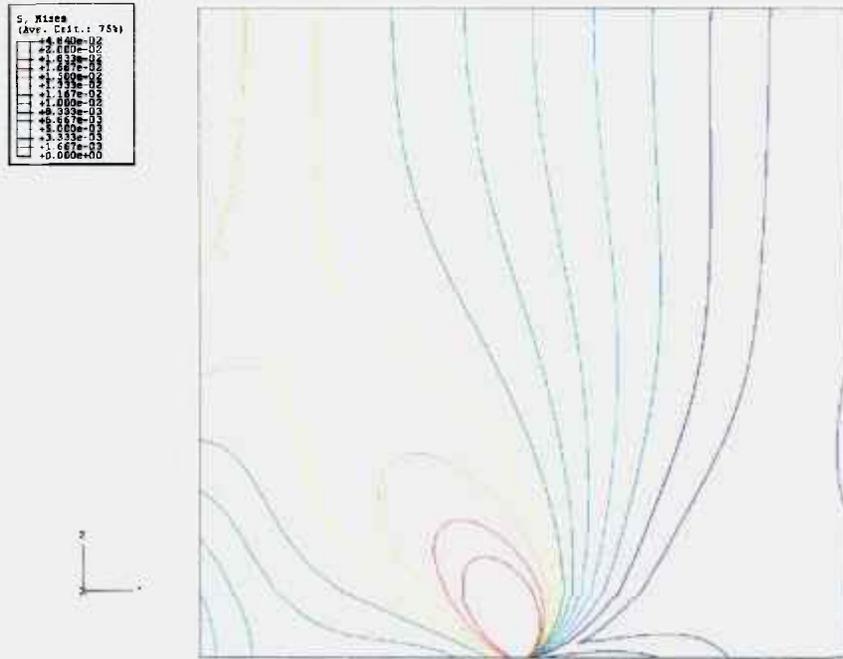


Figura-3.28: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu}=1000$ . MPa.

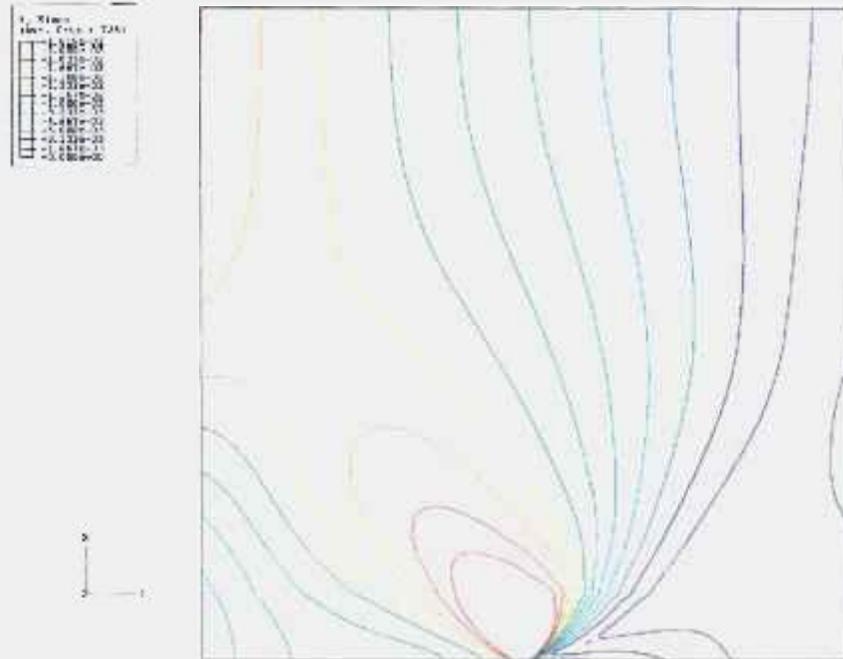


Figura-3.29: Gráfico contorno de tensão de Von Mises, teoria STZ,  $\bar{\mu}=1000$ . MPa.

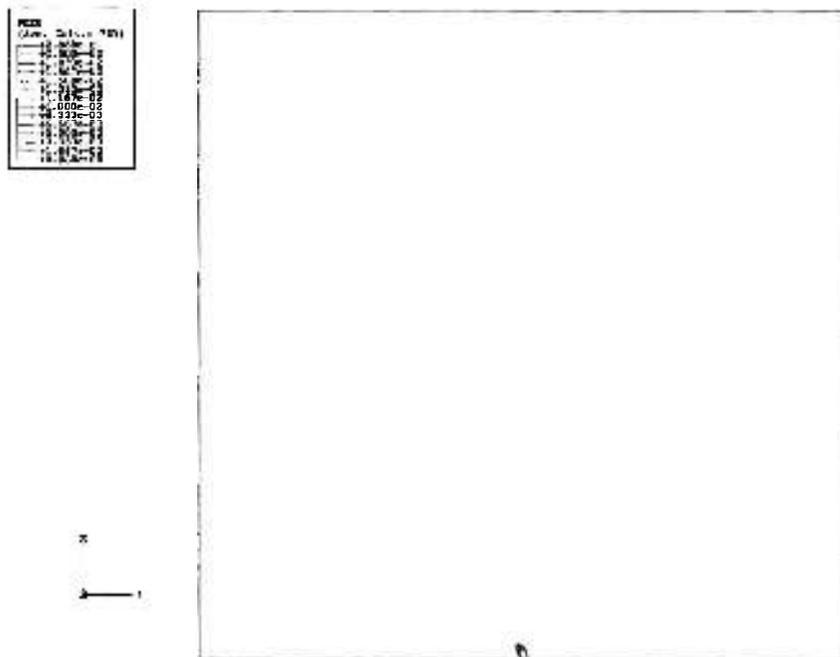


Figura-3.30: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu}=1000$ . MPa.

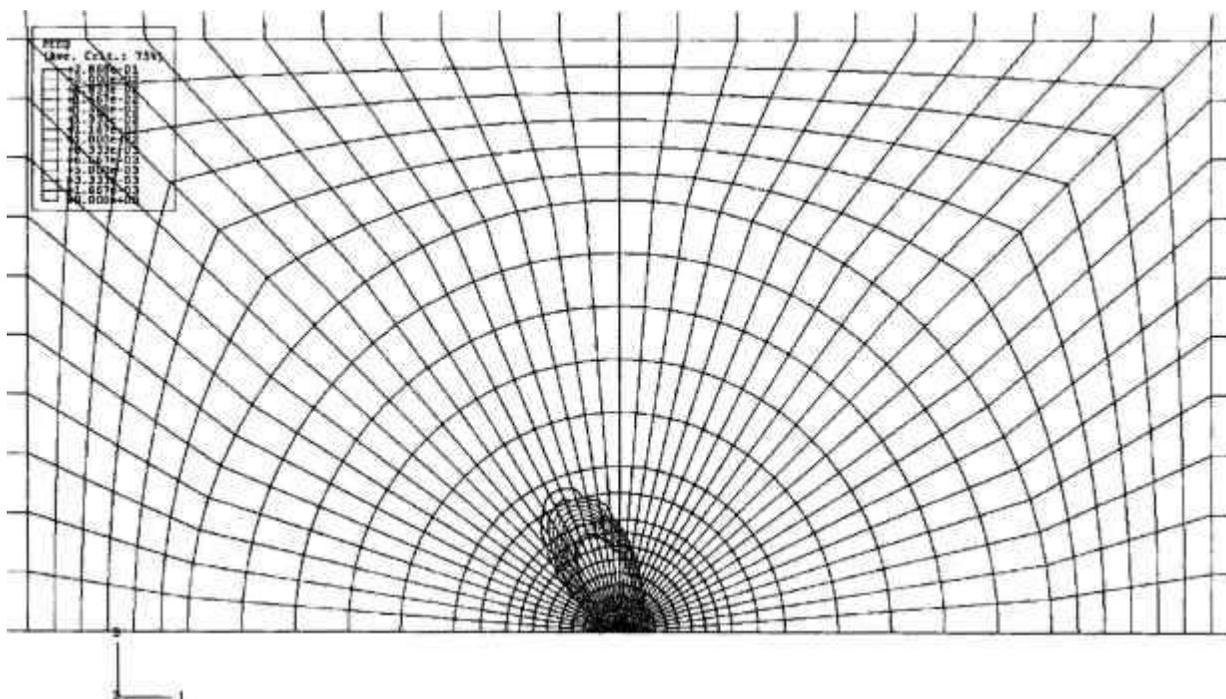


Figura-3.31: Gráfico contorno de deformação plástica, critério de escoamento de Von Mises,  $\bar{\mu}=1000$ . MPa (zoom).



Como na seção anterior, mais uma vez, é possível observar a boa correlação entre as diferentes abordagens, e uma parcela (região) de deformação plástica no modelamento STZ não observada pelo critério de escoamento de Von Mises. Este fato é mais evidente a baixos valores de  $\bar{\mu}$ , como pode se notar quando comparadas as Figs-3.18 e 3.20, e Figs-3.19 e 3.21.

#### 4.- Conclusão

O modelo STZ nos aproxima do entendimento dos fenômenos microscópicos de fratura frágil e dúctil. Isto é possível através da correlação de um processo molecular particular, a variação de STZs com parâmetros macroscópicos tais como tensão de escoamento e da taxa de deformação do material. Por exemplo, pode-se questionar o porquê um vidro-metálico  $\text{Fe}_{76}\text{P}_{16}\text{C}_4\text{A}_{13}\text{B}_1$  é dúctil a temperatura ambiente enquanto um vidro-metálico  $\text{Pd}_{77.5}\text{Si}_{16.5}\text{Cu}_6$  é frágil [46]. O modelo STZ pode direcionar tais investigações sob diferentes aspectos da dinâmica microscópica – a taxa de criação e aniquilação de STZs em uma primeira instância, ou a dependência da tensão à taxa de transição STZ. Em simulações de fratura como apresentado na Figura-1.1, onde uma mudança relativamente modesta no potencial de interação resulta em uma alteração qualitativa na resistência à fratura, pode-se concluir que a transição de fratura frágil para dúctil é devida a uma mudança da taxa de deformação do material [08]. Mais uma vez, pode ser notada a capacidade de um modelo relativamente simples de reproduzir o comportamento de materiais muito mais complexos.

Em geral, a teoria STZ não apenas provê informações acerca do estado de escoamento de um material, mas como também pode prever como grupos de moléculas possam “travar” e desta forma modificar o comportamento global de escoamento. Equações na forma das Eqs.(1.12) e (1.13) podem representar qualquer teoria de taxa-e-estado em que as variáveis macroscópicas (tensão e deformação neste caso) são suplementadas por novas variáveis dinâmicas que descrevem o estado interno do sistema. Por exemplo, as variáveis de estado  $\Lambda$  e  $\Delta$  podem descrever o deslocamento de defeitos anisotropicamente dispersos em um sólido de estrutura cristalina, tão bem quanto descreve a densidade de orientações STZ em um material amorfo.

O presente trabalho apresenta a implementação das equações constitutivas STZ para a subrotina de material definido por usuário, UMAT, permitindo que a teoria STZ seja utilizada através de um código genérico de elementos finitos. As equações constitutivas STZ foram também implementadas em sua forma analítica no programa *Mathematica* para validação dos resultados da subrotina UMAT através da correlação de resultados analíticos e numéricos.

Em grande parte desta investigação, e com propósito de normalização, uma combinação consistente de parâmetros é considerada em relação ao módulo de elasticidade igual a 1 ( $E=1$ . MPa,  $\nu=0.3$ ,  $\bar{\mu}=10./100./1000$ . MPa,  $\tau=10.E-4$  s,  $S_0=0.02$  MPa,  $etot_{11}=1$ .  $s^{-1}$ ). Apesar de a teoria STZ ser originalmente baseada em materiais de vidros metálicos, este novo método pode encontrar aplicações em uma grande variedade de materiais. De fato, a profunda importância da introdução da teoria STZ é indicar que um conceito de unificação talvez esteja em desenvolvimento para agregar diversos sistemas materiais: materiais granulares, vidros, espumas, etc. [17,47].

Como apresentado, esta implementação obteve extensa validação através da comparação com simulações analíticas da teoria STZ e simulações numéricas do critério de escoamento de Von Mises. Desta feita, esta abordagem aproxima análises convencionais do contínuo à técnicas de simulação molecular. Através destas simulações foi também possível observar uma importante característica da teoria STZ: a de que, caso a tensão aplicada não seja tão pequena tal que a parcela não-linear possa ser negligenciada, sempre haverá de coexistir parcelas de deformação elástica e de escoamento plástico no modelamento STZ.

Com o desenvolvimento numérico da subrotina UMAT e com o desenvolvimento da rotina analítica utilizada no programa *Mathematica*, é fornecido um conjunto de simulações, correlacionados e validados, para a observação e representação de fenômenos de plasticidade e visco-plasticidade não-colinares, ativados por volume livre e flutuações de forças, não observados na teoria clássica de mecânica dos materiais e de mecânica da fratura. Esta implementação provê uma importante ferramenta para futuras correlações entre o contínuo e simulações de dinâmica molecular, assim como também, provê um maior entendimento da teoria STZ à escala macroscópica.

Este trabalho de pesquisa abre novas áreas de investigação, como o teste de materiais comerciais comuns, a identificação de parâmetros relacionados e o desenvolvimento da teoria STZ em sí.

Estudos recentes têm estendido a teoria original STZ de plasticidade amorfa a incluir efeitos de rearranjos termicamente assistidos [10]. A teoria original prediz a transição dinâmica entre estados travado e de escoamento a uma dada tensão limite (tensão de escoamento). Novas implementações à teoria STZ têm sido realizadas para descrever

escoamento abaixo desta tensão através do modelamento de processos ativados por fluência térmica. Assim, as Eqs.(1.12) e (1.13) têm a forma:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{\epsilon_0 \Lambda}{\tau} (\tilde{S}_{ij} - m_{ij}) \quad (4.1)$$

$$\dot{m}_{ij} = \frac{2}{\tau} (\tilde{S}_{ij} - m_{ij}) - \tilde{\Gamma}(\tilde{S}, \Lambda, m, T) m_{ij} \quad (4.2)$$

onde

$$\tilde{S}_{ij} \sim \frac{S_{ij}}{\mu}, \text{ e } m_{ij} \sim \Delta_{ij}$$

O balanço de energia é dado por

$$\tilde{\Gamma}(\tilde{S}, \Lambda, m, T) = \frac{2(\tilde{S}_{ij} - m_{ij})(\tilde{S}_{ij} - m_{ij}) + 2\rho(T)\Lambda(1 + \tilde{m}^2)}{(1 + \Lambda)(1 - \tilde{m}^2)} \quad (4.3)$$

onde

$$\tilde{m}^2 = (1/2) m_{ij} m_{ij}$$

O desenvolvimento, modelamento e implementação de escoamento ativado por fluência térmica à teoria STZ é deixado como sugestão para trabalhos futuros.

**APÊNDICES**

## A- Métodos Computacionais para Resolução de Sistemas de Equações Diferenciais Ordinárias

Euler Direto

Considere o seguinte sistema genérico de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) [43]

$$y' = f(t, y) \quad (\text{A.1})$$

$0 \leq t \leq b$ , e dado que  $y(0) = c$

Para uma solução aproximada da Eq.(A.1), deve-se discretizar o intervalo de integração por uma malha tal que

$$0 = t^0 < t^1 < \dots < t^{n-1} < t^n = b \quad (\text{A.2})$$

onde  $h^n = t^n - t^{n-1}$  é o  $n$ -ésimo intervalo de tempo. Assim, a seguinte construção pode ser determinada

$$y^0 (= c), y^1, \dots, y^{n-1}, y^n \quad (\text{A.3})$$

onde  $y^n$  é a aproximação pretendida de  $y(t^n)$ .

No caso de um problema com valor inicial,  $y^0$  é conhecido e pode-se proceder à integração da EDO em intervalos, onde para cada intervalo  $n$  ( $1 \leq n \leq N$ ) há uma aproximação  $y^{n-1}$  em  $t^{n-1}$  e procura-se  $y^n$  em  $t^n$ .

Assumindo-se uma expansão de Taylor para o acima especificado, um método de discretização pode ser construído como

$$y(t^n) = y(t^{n-1}) + h^n y'(t^{n-1}) + \frac{1}{2} (h^n)^2 y''(t^{n-1}) + \dots \quad (\text{A.4})$$

O *Método de Euler Direto* (“*Forward Euler Method*”) pode ser então obtido pela exclusão na expansão de Taylor dos termos de segunda e maior ordem, e considerando-se  $y'$  como  $f$ , tem-se o esquema

$$y^n = y^{n-1} + h^n f(t^{n-1}, y^{n-1}) \quad (\text{A.5})$$

Este é um método simples de solução *explícita*, onde se espera que se  $h$  é suficientemente pequeno, então que  $y^n$  não esteja muito distante de  $y(t^n)$ .

### **Euler Inverso**

O *Método de Euler Inverso* (“*Backward Euler Method*”) para um sistema genérico de EDOs como da Eq.(A.1) pode ser obtido da mesma forma que no desenvolvimento do *método de Euler direto*, exceto que é centrado em  $t^n$ , ao invés de  $t^{n-1}$ . Isto prove o seguinte método de primeira ordem

$$y^n = y^{n-1} + h^n f(t^n, y^n) \quad (\text{A.6})$$

Geometricamente, ao invés de usar a tangente em  $(t^{n-1}, y^{n-1})$ , como no método de Euler direto, o método de Euler inverso utiliza a tangente no ponto futuro  $(t^n, y^n)$ , melhorando assim a estabilidade. O erro de truncamento deste método é semelhante em magnitude ao método de Euler direto. As duas maiores diferenças entre estes dois métodos simples são:

- Enquanto o método de Euler direto é *explícito*, o método Euler de inverso é *implícito*: o vetor de incógnita  $y^n$  aparece em ambos os lados da Eq.(A.6) a cada intervalo, geralmente em uma expressão não-linear. Conseqüentemente, um sistema de equações algébricas não-lineares tem de ser (aproximadamente) resolvidas a cada intervalo. Este é o ponto negativo de Euler inverso.
- A vantagem do método de Euler inverso é sua estabilidade. Aplicando-se o método de Euler inverso Eq.(A.6) a uma EDO escalar simples,  $y' = \lambda y$ , obtem-se

$$y^n = y^{n-1} + h\lambda y^n \quad (\text{A.7})$$

ou,

$$y^n = (1 - h\lambda)^{-1} y^{n-1} \quad (\text{A.8})$$

O *fator de amplificação*, isto é, o termo que multiplica  $|y^{n-1}|$  para atingir  $|y^n|$  em valor absoluto, deve satisfazer

$$\frac{1}{|1 - h\lambda|} \leq 1 \quad (\text{A.9})$$

para *todos* os valores de  $h > 0$  e  $\lambda$  satisfazendo  $Re(\lambda) \leq 0$ .

### Resolução de Equações Não-lineares

Para um método implícito como de Euler inverso, um sistema não-linear deve ser resolvido a cada intervalo de tempo. Para Euler inverso, este sistema não-linear é

$$g(y^n) = y^n - y^{n-1} - hf(t^n, y^n) = 0 \quad (\text{A.10})$$

(onde  $h = h^n$  para simplificação de notação). Há diferentes formas de resolução deste sistema não-linear. Uma destas formas é o *Método de Newton*.

### Método de Newton

Para uma equação não-linear

$$g(x) = 0 \quad (\text{A.11})$$

é definida uma seqüência de iterações como a seguir:  $x_0$  é um valor inicial estimado. Para uma iteração presente  $x^m$ , pode ser escrito que

$$0 = g(x) = g(x^m) + g'(x^m)(x - x^m) + \dots \quad (\text{A.12})$$

Aproximando-se a solução  $x$  pelo negligenciamento dos termos de ordem elevada na expansão de Taylor, define-se a próxima iteração  $x^{m+1}$  pela equação linear

$$0 = g(x^m) + g'(x^m)(x^{m+1} - x^m) \quad (\text{A.13})$$

Isto pode ser generalizado diretamente a um sistema algébrico de  $k$  equações com  $k$  incógnitas,

$$g(x) = 0 \quad (\text{A.14})$$

Todo processo permanece o mesmo, a exceção de que a primeira derivada de  $g$  é substituída pela Matriz Jacobiana  $k \times k$ ,  $\partial g / \partial x$ , para se obter a iteração

$$x^{m+1} = x^m - \left( \frac{\partial g}{\partial x}(x^m) \right)^{-1} g(x^m), \quad m = 0, 1, \dots \quad (\text{A.15})$$

Sabe-se que não é uma boa prática a inversão computacional da matriz inversa. Além disto, ao invés de se computar  $x^{m+1}$  diretamente, é vantajoso em certas ocasiões, e geralmente nunca pior, a resolução do sistema para a diferença  $\delta$  entre  $x^{m+1}$  e  $x^m$ , e então proceder à atualização. Assim,  $\delta$  é computada (para cada  $m$ ) pela resolução do sistema linear

$$\left( \frac{\partial g}{\partial x} \right) \delta = -g(x^m) \quad (\text{A.16})$$

onde a matriz Jacobiana é avaliada em  $x^m$ , e a próxima iteração de Newton é obtida por

$$x^{m+1} = x^m + \delta \quad (\text{A.17})$$

### Iteração de Newton

Variantes do método de Newton são utilizados em virtualmente todos os códigos modernos de resolução de EDO rígidas. Dado o sistema não-linear

$$\mathbf{g}(y^m) = y^m - y^{m-1} - hf(t^m, y^m) = \mathbf{0} \quad (\text{A.18})$$

O método de Newton fornece que

$$\begin{aligned} y^{n,m+1} &= y^{n,m} - \left( \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial y} \right)^{-1} \mathbf{g}(y^{n,m}) \\ y^{n,m+1} &= y^{n,m} - \left( \mathbf{I} - h \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} (y^{n,m} - y^{n-1,m} - hf(t^n, y^{n,m})), \quad m = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

A matriz  $(\mathbf{I} - h \partial f / \partial y)$  é calculada a cada presente iteração  $y^{n,m}$ . Esta matriz é denominada *matriz de iteração*, e o custo de formação e resolução do sistema linear (para  $\delta = y^{n,m+1} - y^{n,m}$ ) é freqüentemente o custo de resolução do problema. Considere a seguinte estimativa inicial

$$y_0^n = y^{n-1} \quad (\text{A.20})$$

O método de Newton é executado até que uma estimativa de erro para o término da iteração seja menor do que uma tolerância especificada pelo usuário, por exemplo,

$$|y^{n,m+1} - y^{n,m}| \leq \text{NTOL} \quad (\text{A.21})$$

A tolerância NTOL é relacionada ao erro estipulado e aceito pelo usuário. Neste caso a estimativa inicial é geralmente acurada e a maioria dos sistemas EDO com definição de valor inicial requer não mais que poucas iterações de Newton por intervalo de tempo.

### Decomposição Matricial

Considere o seguinte sistema de  $m$  equações

$$A \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{A.22})$$

onde  $A$  é real, quadrada, e não-singular,  $\mathbf{b}$  é dado, e  $\mathbf{x}$  é o vetor solução a ser encontrado. A solução é dada por

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} \quad (\text{A.23})$$

Entretanto, não é usualmente uma boa prática o cálculo de  $\mathbf{A}^{-1}$ .

O conhecido algoritmo de *eliminação de Gauss* (sem pivotamento) é equivalente à execução de uma *decomposição LU* de  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} \quad (\text{A.24})$$

Onde  $\mathbf{L}$  é uma *matriz triangular inferior* (ou seja, têm elementos somente na diagonal e abaixo desta) e  $\mathbf{U}$  é uma *matriz triangular superior* (ou seja, têm elementos somente na diagonal e acima desta).

Para um dado vetor  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{x}$  pode ser obtido através de

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{A.25})$$

A resolução de  $\mathbf{L}\mathbf{z} = \mathbf{b}$  para  $\mathbf{z}$  envolve *substituição direta*. Subseqüentemente, a resolução de  $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{z}$  completa o processo de solução utilizando-se *substituição inversa*.

Nem toda matriz não-singular tem uma decomposição  $\mathbf{LU}$ , e mesmo se esta existe, tal decomposição pode tornar o processo numérico instável. Nestas circunstâncias, o pivotamento parcial deve ser aplicado (a menos que a matriz tenha certas propriedades especiais, tal como, ser definida como simetricamente positiva). Um pivotamento parcial de linhas envolve a permutação de linhas de  $\mathbf{A}$  para melhoria da estabilidade e para prover resultados na forma da decomposição

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{L}\mathbf{U} \quad (\text{A.26})$$

onde  $\mathbf{P}$  é uma matriz de permutação (isto é, as colunas de  $\mathbf{P}$  são de  $m$  vetores unitários, em ordem permutada). Usualmente, pode-se referir a uma decomposição  $\mathbf{LU}$  assumindo-se que um pivotamento parcial seja aplicado quando necessário.

## B- Receitas Numéricas em FORTRAN 77

### Decomposição LU e Suas Aplicações

Como anteriormente, considere que uma matriz  $A$  possa ser escrita como o produto de duas matrizes [44],

$$A = LU \quad (\text{B.1})$$

onde  $L$  é uma *matriz triangular inferior* e  $U$  é uma *matriz triangular superior*. Por exemplo, para o caso de uma  $A$  4x4, a Eq.(B.1) tem a forma:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ 0 & 0 & \beta_{33} & \beta_{34} \\ 0 & 0 & 0 & \beta_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Pode-se utilizar a decomposição como na Eq.(B.1) para a resolução do sistema linear

$$A x = (LU) x = L(U x) = b \quad (\text{B.3})$$

por primeiramente calculando-se o vetor  $y$  tal que

$$L y = b \quad (\text{B.4})$$

e então solucionando-se

$$U x = y \quad (\text{B.5})$$

A vantagem em se dividir um sistema linear em dois sistemas sucessivos é de que a solução de um sistema triangular de equações é praticamente trivial. Desta forma, a Eq.(B.4) pode ser solucionada pela *substituição direta* como a seguir,

$$\begin{aligned}
 y_1 &= \frac{b_1}{\alpha_{11}} \\
 y_i &= \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j \right] \quad i = 2, 3, \dots, N
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

enquanto que Eq.(B.5) pode ser solucionada por *substituição inversa*

$$\begin{aligned}
 x_N &= \frac{y_N}{\beta_{NN}} \\
 x_i &= \frac{1}{\beta_{ii}} \left[ y_i - \sum_{j=i+1}^N \beta_{ij} x_j \right] \quad i = N-1, N-2, \dots, 1
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

### Execução da Decomposição LU

A resolução de  $L$  e  $U$  para uma dada matriz  $A$ , se procede primeiramente pela definição da matriz  $A$  por seu componente de índices  $ij$  como na Eq.(B.1) ou (B.2). Este componente é sempre uma soma se inicializando como

$$\alpha_{i1} \beta_{1j} + \dots = \alpha_{ij} \tag{B.8}$$

O número de termos desta soma depende, entretanto, em qual índice ( $i$  ou  $j$ ) têm o menor valor. Três casos são possíveis,

$$i < j: \quad \alpha_{i1} \beta_{1j} + \alpha_{i2} \beta_{2j} + \dots + \alpha_{ii} \beta_{ij} = \alpha_{ij} \tag{B.9}$$

$$i = j: \quad \alpha_{i1} \beta_{1j} + \alpha_{i2} \beta_{2j} + \dots + \alpha_{ii} \beta_{jj} = \alpha_{ij} \tag{B.10}$$

$$i > j: \quad \alpha_{i1} \beta_{1j} + \alpha_{i2} \beta_{2j} + \dots + \alpha_{ij} \beta_{jj} = \alpha_{ij} \tag{B.11}$$

Eqs.(B.9)-(B.11) totalizam  $N^2$  equações para  $N^2+N$  incógnitas  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's (a diagonal sendo representada duas vezes). Como o número de incógnitas é maior do que o número de equações, pode-se assumir  $N$  incógnitas arbitrariamente e assim tentar-se resolução para as demais. De fato, é sempre possível considerar

$$\alpha_{ii} \equiv 1 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{B.12})$$

Um procedimento surpreendente é o *algoritmo de Crout*, onde trivialmente resolve o sistema de  $N^2+N$  Eqs.(B.9)-(B.11) para todos  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's pelo arranjo da equação em certa ordem. Esta ordem é a seguinte:

- Estabelece-se  $\alpha_{ii} = 1, i = 1, \dots, N$  (Eq.(B.12))
- Para cada  $j = 1, 2, 3, \dots, N$  executa-se dois procedimentos:  
Primeiro, para  $i = 1, 2, \dots, j$ , utiliza-se Eqs.(B.9), (B.10), e (B.12) para resolução em  $\beta_{ij}$ , a qual é

$$\beta_{ij} = \alpha_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik} \beta_{kj} \quad (\text{B.13})$$

(Quando  $i = 1$  na Eq.(B.13) a soma dos termos é assumida ser nula).

Segundo, para  $i = j+1, j+2, \dots, N$  utiliza Eq.(B.11) para resolução em  $\alpha_{ij}$ , a qual é

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}} \left( \alpha_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik} \beta_{kj} \right) \quad (\text{B.14})$$

Executam-se ambos os procedimentos antes do próximo  $j$ .

Após trabalhar em algumas iterações do processo acima, observa-se que os  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's que ocorrem no lado direito das Eqs.(B.13) e (B.14) já estão determinados para o momento que estes são requisitados. Cada  $\alpha_{ij}$  é utilizado apenas uma vez e não mais. Isto significa que os  $\alpha_{ij}$  e  $\beta_{ij}$  correspondentes, podem ser armazenados em locais que  $\alpha$  costumava ocupar: a decomposição é desta forma "in place". Em resumo, o método de Crout preenche e completa a matriz combinada por  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's,

$$\begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ \alpha_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \beta_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

por colunas da esquerda para a direita, e em cada coluna de cima para baixo.

Pivotamento (isto é, a seleção de elementos favoráveis de pivotagem para a divisão em Eq.(B.14)) é absolutamente essencial para a estabilidade do método de Crout. Apenas o pivotamento parcial (intercâmbio de linhas) pode ser implementado eficientemente. No entanto, isto é suficiente para tornar o método estável. Isto significa que, incidentalmente, que não há de fato uma decomposição da matriz  $A$  em formato  $LU$ , mas ao invés de decomposição há uma permutação em linha de  $A$ .

```
SUBROUTINE ludcmp(a,n,np,indx,d)
INTEGER n,np,indx(n),NMAX
REAL d,a(np,np),TINY
PARAMETER (NMAX=500,TINY=1.0e-20)  O maior n esperado, e um número de
pequeno valor. Dada uma matriz a(1:n,1:n), com dimensão física np por
np, esta rotina substitui a matriz por sua decomposição LU através de
permutação em linha de si mesma. a e n são dados de entrada. a é dado
de saída; indx(1:n) é um vetor de saída que grava as permutações em
linha efetuadas pelo pivotamento parcial; d é definido na saída como
±1 dependendo se o número de intercâmbios é par ou impar,
respectivamente. Esta rotina é utilizada em combinação com LUBKSB para
resolução de equações lineares ou para inversão matricial.
```

LUBKSB é uma rotina de *substituição direta e substituição inversa*, através da implementação das Eqs.(B.6) e (B.7).

```
SUBROUTINE lubksb(a,n,np,indx,b)
INTEGER n,np,indx(n)
REAL a(np,np),b(n)
  Soluciona um sistema de n equações lineares  $A \cdot X = B$ . Onde a é o dado
de entrada, não como a matriz A mas como sua decomposição LU,
determinada pela rotina LUDCMP. indx é dado de entrada como um vetor
de permutação retornado por LUDCMP. b(1:n) é dado de entrada como um
vetor B do lado-direito da equação, e retorna com o vetor de solução
X. a, n, np, e indx não são modificados por esta rotina e podem ser
deixados para execuções sucessivas de diferentes vetores b. Esta
rotina considera a possibilidade de b se inicializar com vários
elementos nulos, sendo assim eficiente para uso de inversão matricial.
```

A decomposição  $LU$  em LUBKSB requer cerca de  $1/3 N^3$  execuções de loop interno (cada um com uma multiplicação e uma soma). Para a inversão de uma matriz, o número total de execuções (incluindo as substituições direta e inversa) é  $(1/3+1/6+1/2) N^3 = N^3$ .

## Inversão Matricial

As rotinas de *decomposição LU* e de substituição inversa acima apresentadas, podem ser diretamente utilizadas para a obtenção da inversa de uma matriz, coluna por coluna.

```

INTEGER np, indx(np)
REAL a(np,np), y(np,np)
...
do i=1,n
  do j=1,n
    y(i,j)=0.
  enddo
  y(i,i)=1.
enddo
call ludcmp(a,n,np,indx,d)
once
do j=1,n
  call lubksb(a,n,np,indx,y(1,j))
enddo

```

setup identity matrix

decompose the matrix just

find inverse by columns

## Solução de um Sistema Linear de Equações

Em resumo, o modo indicado para a solução de um sistema linear de equações  $A \cdot x = b$  é:

```

call ludcmp(a,n,np,indx,d)
call lubksb(a,n,np,indx,b)

```

A resposta  $x$  retorna em  $b$ , e a matriz original  $A$  é destruída.

Para resolução subsequente de um sistema de equações com a mesma matriz  $A$ , mas com um diferente lado-direito  $b$ , somente se repete

```

call lubksb(a,n,np,indx,b)

```

Obviamente, a resolução neste caso não é através da matriz  $A$ , mas através de  $a$  e  $indx$  como fornecidos por LUDCMP.

### C- Subrotina STZ UMAT

```

C
C v10APR04
C
C      3-DIM UMAT
      subroutine umat(stress, statev, ddsdde, sse, spd, scd,
1         rpl, DDSDDT, DRPLDE, DRPLDT,
2         STRAN, DSTRAN, TIME, DTIME, TEMP, DTEMP, PREDEF, DPRED, CMNAME,
3         NDI, NSHR, NTENS, NSTATV, PROPS, NPROPS, COORDS, DROT, PNEWDT,
4         CELENT, DFGRDO, DFGRD1, NOEL, NPT, LAYER, KSPT, KSTEP, KINC)
C
C      INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
C
C      CHARACTER*80 CMNAME
C
C      DIMENSION STRESS(NTENS), STATEV(NSTATV),
1         DDSDE(NTENS, NTENS), DDSDDT(NTENS), DRPLDE(NTENS),
2         STRAN(NTENS), DSTRAN(NTENS), TIME(2), PREDEF(1), DPRED(1),
3         PROPS(NPROPS), COORDS(3), DROT(3, 3), DFGRDO(3, 3), DFGRD1(3, 3)
C
C      INTEGER K1, K2, INDX(12)
      REAL*8 D(12, 12), D1(12, 12), A(12, 6), I(12, 12), Y(12), YV(12), DEV(6)
      REAL*8 GEEYV(12), DELGDELY(12, 12), INTERMED(12), EPSDOT(6)
      REAL*8 A1, A2, A3, B1, B2, B3, C1, C2, E1, E2, E3
      REAL*8 D44, SUM, TOL, NORM1, NORM, X
      REAL*8 DELTA(6), EdPLAST(6), NA
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7---
C
      TOL=1d-10
      DO K1=1, 12
          INTERMED(K1)=0.d0
      END DO
C
      SET UP I
      DO K1=1, 12
          DO K2=1, 12
              IF (K1.EQ.K2) THEN
                  I(K1, K2)=1
              ELSE
                  I(K1, K2)=0.d0
              END IF
          END DO
      END DO
C
      COMPLETED SETTING UP I
C
      SET UP THE MATRICES
      DO K1=1, 12
          DO K2=1, 12
              D(K1, K2)=0.d0
          END DO
      END DO
C
      DO K1=1, 12
          DO K2=1, 6
              A(K1, K2)=0.d0
          END DO
      END DO
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7---
      E1=-2.d0*PROPS(1)/(3.d0*PROPS(4)*PROPS(3)*(PROPS(2)+1.d0))
      E2=PROPS(1)/(3.d0*PROPS(4)*PROPS(3)*(PROPS(2)+1.d0))
      E3=-1.d0*PROPS(1)/(PROPS(3)*PROPS(4)*(PROPS(2)+1.d0))
      B1=2.d0/(3.d0*PROPS(3)*PROPS(4))
      B2=-1.d0/(3.d0*PROPS(3)*PROPS(4))
      B3=1.d0/(PROPS(3)*PROPS(4))
      C1=(PROPS(1)*(PROPS(2)-1.d0))/(PROPS(4)*(2.d0*PROPS(2)-1.d0)*
2      (PROPS(2)+1.d0))
      C2=-1.d0*(PROPS(1)*PROPS(2))/(PROPS(4)*(2.d0*PROPS(2)-1.d0)*
2      (PROPS(2)+1.d0))

```

```

C3=PROPS(1)/(PROPS(4)*(PROPS(2)+1.d0))
C   FINISHED SETTING UP FIXED PART OF D
D(1,1)=E1
D(2,2)=E1
D(3,3)=E1
D(1,2)=E2
D(1,3)=E2
D(2,1)=E2
D(2,3)=E2
D(3,1)=E2
D(3,2)=E2
D(4,4)=E3
D(5,5)=E3
D(6,6)=E3

D(1,7)=C1
D(2,8)=C1
D(3,9)=C1
D(1,8)=C2
D(1,9)=C2
D(2,7)=C2
D(2,9)=C2
D(3,7)=C2
D(3,8)=C2
D(4,10)=C3
D(5,11)=C3
D(6,12)=C3

D(7,1)=B1
D(8,2)=B1
D(9,3)=B1
D(7,2)=B2
D(7,3)=B2
D(8,1)=B2
D(8,3)=B2
D(9,1)=B2
D(9,2)=B2
D(10,4)=B3
D(11,5)=B3
D(12,6)=B3

C
C   SET UP FIXED PART OF A
A1=(PROPS(1)*(PROPS(2)-1.d0))/
2      ((PROPS(2)+1.d0)*(2.d0*PROPS(2)-1.d0))
A2=-1.d0*PROPS(1)*PROPS(2)/
2      ((PROPS(2)+1.d0)*(2.d0*PROPS(2)-1.d0))
A3=PROPS(1)/(PROPS(2)+1.d0)

C
A(1,1)=A1
A(2,2)=A1
A(3,3)=A1
A(1,2)=A2
A(1,3)=A2
A(2,1)=A2
A(2,3)=A2
A(3,1)=A2
A(3,2)=A2
A(4,4)=A3
A(5,5)=A3
A(6,6)=A3

C   FINISHED SETTING UP A
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C   TRANSFORM TO A SINGLE VECTOR
DO K1=1,6
      Y(K1)=STRESS(K1)
      Y(K1+6)=STATEV(K1)
END DO

C
DO K1=1,6

```

```

          EPSDOT(K1)=DSTRAN(K1)/DTIME
      END DO
C
C      FINISHED TRANSFORMATION
C
C      FOR THE FIRST ITERATION
      DO K1=1,12
          YV(K1)=Y(K1)
      END DO
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C      STARTING THE PROCESSING FOR STRESS AND DELTA
C      SETTING UP DEVIATORIC STRESSES
10      INTERMED(1)=(YV(1)+YV(2)+YV(3))/3
      DO K1=1,3
          DEV(K1)=YV(K1)-INTERMED(1)
          DEV(K1+3)=YV(K1+3)
      END DO
C      FINISHED SETTING UP DEVIATORIC STRESSES
C      SETTING UP D
C
      D44=0.d0
      INTERMED(1)=0
      INTERMED(2)=0
      DO K1=1,3
          INTERMED(1)=INTERMED(1)+(DEV(K1)*DEV(K1)+
2          2.d0*DEV(K1+3)*DEV(K1+3))/(PROPS(3)*PROPS(4))
          INTERMED(2)=INTERMED(2)-(DEV(K1)*YV(K1+6)+
2          2.d0*DEV(K1+3)*YV(K1+9))/PROPS(4)
      END DO
      D44=-1.d0*(1/PROPS(4)+PROPS(3)*(INTERMED(1)+INTERMED(2))
2      / (2.d0*PROPS(5)*PROPS(5)))
      DO K1=7,12
          D(K1,K1)=D44
      END DO
C      COMPLETED SETTING UP D
C
C      SET UP GEEYV
C
      DO K1=1,12
          DO K2=1,6
              INTERMED(K2)=0.d0
          END DO
          DO K2=1,12
              INTERMED(1)=INTERMED(1)+D(K1,K2)*YV(K2)
          END DO
          DO K2=1,6
              INTERMED(2)=INTERMED(2)+A(K1,K2)*EPSDOT(K2)
          END DO
          INTERMED(3)=INTERMED(1)+INTERMED(2)
          GEEYV(K1)=-1.d0*(YV(K1)-Y(K1)-DTIME*INTERMED(3))
      END DO
C      COMPLETED SETTING UP GEEYV
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C      SET UP DELGDELY
C      SET UP D1
C
      DO K1=1,12
          DO K2=1,12
              D1(K1,K2)=0.d0
          END DO
      END DO
C
      DO K1=6,12
          DO K2=1,3
              D1(K1,K2)=(2.d0*DEV(K2)/PROPS(3)-YV(K2+6))
2              /PROPS(4)
              D1(K1,K2+3)=2.d0*(2.d0*DEV(K2+3)/PROPS(3)
2              -YV(K2+9))/PROPS(4)

```

```

                D1 (K1,K2+6)=DEV(K2)/PROPS(4)
                D1 (K1,K2+9)=2.d0*DEV(K2+3)/PROPS(4)
            END DO
        END DO
C
        DO K1=6,12
            DO K2=1,12
                D1 (K1,K2)=D1 (K1,K2)*YV(K1)
            END DO
        END DO
C
        COMPLETED SETTING UP D1
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C
        DO K1=1,12
            DO K2=1,12
                DELGDELY(K1,K2)=I(K1,K2)-
2                DTIME*(D(K1,K2)+D1(K1,K2))
            END DO
        END DO
C
        COMPLETED SETTING UP DELGDELY
        CALL LUDCMP(DELGDELY,12,12,INDX,X)
        CALL LUBKSB(DELGDELY,12,12,INDX,GEEYV)
C
        LUBKSB returns the solution vector in GEEYV
C
        NORM1=0.d0
        DO K1=1,12
            YV(K1)=YV(K1)+GEEYV(K1)
            NORM1=NORM1+GEEYV(K1)*GEEYV(K1)
        END DO
C
        NORM=DSQRT(NORM1)
        IF (NORM.GE.TOL) THEN
            GO TO 10
        END IF
C
        DO K1=1,6
            STRESS(K1)=YV(K1)
            STATEV(K1)=YV(K1+6)
        END DO
C
        CREATE NEW JACOBIAN
        DO K1=1,6
            DO K2=1,6
                DDSDE(K1,K2)=A(K1,K2)
            END DO
        END DO
C
        finished new jacobian calculations
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C
        Invariant of Delta, SDV7
C
        STATEV(7)=SQRT(0.5*(
C
1         (STATEV(1)-STATEV(2))**2 +
C
2         (STATEV(2)-STATEV(3))**2 +
C
3         (STATEV(3)-STATEV(1))**2 +
C
4         6*(STATEV(4)**2+STATEV(5)**2+STATEV(6)**2)))
C
        DO K1=1,6
            DELTA(K1)=STATEV(K1)
        END DO
C
        CALL SINVD(DELTA,NA,STATEV(7),3,3)
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C
        find new Elastic Strains, SDV11-16
        STATEV(11)=(1/PROPS(1))*(STRESS(1)
C
1         -(PROPS(2)*STRESS(2))

```

```

C      2      -(PROPS(2)*STRESS(3))
C      STATEV(12)=(1/PROPS(1))*((-1)*PROPS(2)*STRESS(1)
C      1      +STRESS(2)
C      2      -(PROPS(2)*STRESS(3))
C      STATEV(13)=(1/PROPS(1))*((-1)*PROPS(2)*STRESS(1)
C      1      -(PROPS(2)*STRESS(2))
C      2      +STRESS(3)
C      STATEV(14)=(1/PROPS(1))*((1+PROPS(2))*STRESS(4))
C      STATEV(15)=(1/PROPS(1))*((1+PROPS(2))*STRESS(5))
C      STATEV(16)=(1/PROPS(1))*((1+PROPS(2))*STRESS(6))
C      STATEV(17)=SQRT(0.5*(
C      1      (STATEV(11)-STATEV(12))**2 +
C      2      (STATEV(12)-STATEV(13))**2 +
C      3      (STATEV(13)-STATEV(11))**2 +
C      4      6*(STATEV(14)**2+STATEV(15)**2+STATEV(16)**2))
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C
C      Find new Plastic Strains ([Bt][S]+[Ct][Delta])*dt, SDV(21)-(27)
C
C      EdPLAST(1)=B1*STRESS(1)+B2*STRESS(2)+B2*STRESS(3)+
C      1      (((-1)/PROPS(4))*DELTA(1))
C      EdPLAST(2)=B2*STRESS(1)+B1*STRESS(2)+B2*STRESS(3)+
C      1      (((-1)/PROPS(4))*DELTA(2))
C      EdPLAST(3)=B2*STRESS(1)+B2*STRESS(2)+B1*STRESS(3)+
C      1      (((-1)/PROPS(4))*DELTA(3))
C      EdPLAST(4)=B3*STRESS(4)+(((-1)/PROPS(4))*DELTA(4))
C      EdPLAST(5)=B3*STRESS(5)+(((-1)/PROPS(4))*DELTA(5))
C      EdPLAST(6)=B3*STRESS(6)+(((-1)/PROPS(4))*DELTA(6))
C
C
C      STATEV(21)=STATEV(21)+EdPLAST(1)*DTIME
C      STATEV(22)=STATEV(22)+EdPLAST(2)*DTIME
C      STATEV(23)=STATEV(23)+EdPLAST(3)*DTIME
C      STATEV(24)=STATEV(24)+EdPLAST(4)*DTIME
C      STATEV(25)=STATEV(25)+EdPLAST(5)*DTIME
C      STATEV(26)=STATEV(26)+EdPLAST(6)*DTIME
C
C      Invariant of Plastic strain
C
C      STATEV(27)=SQRT(0.5*(
C      1      (STATEV(21)-STATEV(22))**2 +
C      2      (STATEV(22)-STATEV(23))**2 +
C      3      (STATEV(23)-STATEV(21))**2 +
C      4      6*(STATEV(24)**2+STATEV(25)**2+STATEV(26)**2))
C
C      CALL SINV(EPLAST,NA,STATEV(27),3,3)
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C
C      RETURN
C      END
C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--

```

C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--  
C

```

SUBROUTINE LUDCMP(a,n,np,indx,d)
INTEGER n,np,indx(n),NMAX
REAL*8 d,a(np,np),TINY
PARAMETER (NMAX=500,TINY=1.0e-20)
INTEGER i,imax,j,k
REAL*8 aamax,dum,sum,vv(NMAX)
d=1.d0
do 12 i=1,n
  aamax=0.d0
  do 11 j=1,n
    if (abs(a(i,j)).gt.aamax) aamax=abs(a(i,j))
11  continue
    if (aamax.eq.0.d0) pause 'singular matrix in ludcmp'
    vv(i)=1.d0/aamax
12  continue
do 19 j=1,n
  do 14 i=1,j-1
    sum=a(i,j)
    do 13 k=1,i-1
      sum=sum-a(i,k)*a(k,j)
13  continue
    a(i,j)=sum
14  continue
  aamax=0.d0
  do 16 i=j,n
    sum=a(i,j)
    do 15 k=1,j-1
      sum=sum-a(i,k)*a(k,j)
15  continue
    a(i,j)=sum
    dum=vv(i)*abs(sum)
    if (dum.ge.aamax) then
      imax=i
      aamax=dum
    endif
16  continue
    if (j.ne.imax) then
      do 17 k=1,n
        dum=a(imax,k)
        a(imax,k)=a(j,k)
        a(j,k)=dum
17  continue
      d=-d
      vv(imax)=vv(j)
    endif
    indx(j)=imax
    if (a(j,j).eq.0.d0) a(j,j)=TINY
    if (j.ne.n) then
      dum=1.d0/a(j,j)
      do 18 i=j+1,n
        a(i,j)=a(i,j)*dum
18  continue
      endif
19  continue
return
END

```

C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--

C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--

```

SUBROUTINE LUBKSB(a,n,np,indx,b)
INTEGER n,np,indx(n)
REAL*8 a(np,np),b(n)
INTEGER i,ii,j,ll
REAL*8 sum
ii=0
do 12 i=1,n

```

```

        ll=indx(i)
        sum=b(ll)
        b(ll)=b(i)
        if (ii.ne.0)then
            do 11 j=ii,i-1
                sum=sum-a(i,j)*b(j)
11         continue
            else if (sum.ne.0.d0) then
                ii=i
            endif
            b(i)=sum
12     continue
        do 14 i=n,1,-1
            sum=b(i)
            do 13 j=i+1,n
                sum=sum-a(i,j)*b(j)
13         continue
            b(i)=sum/a(i,i)
14     continue
        return
        END

```

```

C
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--

```

### D- Rotina STZ *Mathematica*

A rotina a seguir integra numericamente no tempo a versão tri-dimensional das equações constitutivas STZ assumindo que o material é deformado a uma taxa de deformação constante. O usuário deve especificar uma taxa de deformação  $\dot{\epsilon}_{tot11}$ , os valores das variáveis de estado  $\Delta$  ( $d_0$ ) e  $\Delta(l_0)$  ( $\Lambda$  assumido =1), e os parâmetros materiais  $E$ ,  $\nu$ ,  $\bar{\mu}$ ,  $\tau$  e  $S_0$ .

```
ClearAll;
Off[General::spell11]
```

- Dados de entrada:

```
Emod=1.;
nu=0.3;
mbar=10.;
tau=10^-4;
So=0.02;
etot11=1.;
```

- Esta seção estabelece as equações diferenciais. A primeira equação é definida para relacionar a taxa de deformação plástica ( $\dot{\epsilon}$ ) como uma função da tensão ( $\sigma$ ), das variáveis de estado ( $\delta$  e  $\lambda$ ) e dos parâmetros materiais ( $\bar{m}$ ,  $\tau$ ). A segunda e terceira equações são definidas para relacionar as taxas de variação das variáveis de estado ( $\dot{\delta}$  e  $\dot{\lambda}$ ) como funções da tensão ( $\sigma$ ), das variáveis de estado ( $\delta$  e  $\lambda$ ) e das propriedades materiais ( $\bar{m}$ ,  $\tau$ ,  $S_0$ ).

```
edot11[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{11}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]=
(1/tau)*! $\lambda$ *(2/3* $\sigma_{11}$ -1/3* $\sigma_{22}$ -1/3* $\sigma_{33}$ )/ $\bar{m}$  -  $\delta_{11}$ );
edot22[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{22}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]=
(1/tau)*! $\lambda$ *(-1/3* $\sigma_{11}$ +2/3* $\sigma_{22}$ -1/3* $\sigma_{33}$ )/ $\bar{m}$  -  $\delta_{22}$ );
edot33[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{33}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]=
(1/tau)*! $\lambda$ *(-1/3* $\sigma_{11}$ -1/3* $\sigma_{22}$ +2/3* $\sigma_{33}$ )/ $\bar{m}$  -  $\delta_{33}$ );
edot12[ $\sigma_{12}$ _,  $\delta_{12}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]= (1/tau)*(! $\lambda$ * $\sigma_{12}$ / $\bar{m}$  -
 $\delta_{12}$ );
edot23[ $\sigma_{23}$ _,  $\delta_{23}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]= (1/tau)*(! $\lambda$ * $\sigma_{23}$ / $\bar{m}$  -
 $\delta_{23}$ );
edot31[ $\sigma_{31}$ _,  $\delta_{31}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]= (1/tau)*(! $\lambda$ * $\sigma_{31}$ / $\bar{m}$  -
 $\delta_{31}$ );
```

```
deltadot11[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{11}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot11[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{11}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]-
( $\bar{m}$ * $\delta_{11}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
deltadot22[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{22}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot22[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{22}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]-
( $\bar{m}$ * $\delta_{22}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
deltadot33[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{33}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot33[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{33}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]-
( $\bar{m}$ * $\delta_{33}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
deltadot12[ $\sigma_{12}$ _,  $\delta_{12}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot12[ $\sigma_{12}$ _,  $\delta_{12}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]- ( $\bar{m}$ * $\delta_{12}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
deltadot23[ $\sigma_{23}$ _,  $\delta_{23}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot23[ $\sigma_{23}$ _,  $\delta_{23}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]- ( $\bar{m}$ * $\delta_{23}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
deltadot31[ $\sigma_{31}$ _,  $\delta_{31}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _,  $s_0$ _,  $W$ _] =
edot31[ $\sigma_{31}$ _,  $\delta_{31}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]- ( $\bar{m}$ * $\delta_{31}$ /(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
```

```
lambdadot[ $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $s_0$ _,  $W$ _]= ( $\bar{m}$ *(1- $\lambda$ )/(2.0* $s_0$ ^2))* $W$ ;
```

```
W[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\sigma_{12}$ _,  $\sigma_{23}$ _,  $\sigma_{31}$ _,  $\delta_{11}$ _,
 $\delta_{22}$ _,  $\delta_{33}$ _,  $\delta_{12}$ _,  $\delta_{23}$ _,  $\delta_{31}$ _,
 $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]:=  $\sigma_{11}$ *edot11[ $\sigma_{11}$ _,  $\sigma_{22}$ _,  $\sigma_{33}$ _,  $\delta_{11}$ _,  $\lambda$ _,  $\bar{m}$ _,  $\tau$ _]
```

```
bar, tau]+sigma22*edot22[sigma11, sigma22, sigma33, delta22, lambda, mbar, tau]+sigma33*edot33[sigma11, sigma22, sigma33, delta33, lambda, mbar, tau]+2*sigma12*edot12[sigma12, delta12, lambda, mbar, tau]+2*sigma23*edot23[sigma23, delta23, lambda, mbar, tau]+2*sigma31*edot31[sigma31, delta31, lambda, mbar, tau];
```

- Esta seção define uma função *soln* considera a taxa de deformação, os valores iniciais das variáveis de estado ( $d_0$ ,  $l_0$ ), os parâmetros materiais ( $mbar$ ,  $S_0$ ) e resolve o sistema para a deformação ( $\epsilon$ ), tensão ( $\sigma$ ), e variáveis de estado ( $d$ ,  $l$ ) como um função do tempo de  $t=0$  a  $t=0.5/\text{taxa de deformação}$ .

```
soln1[etot11_, etot22_, etot33_, etot12_, etot23_, etot31_, lam1_, lam2_, eps0_, tau0_, mbar_] := NDSolve[{
```

```
m11'[t] == mdot11[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], mbar, m11[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
m22'[t] == mdot22[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], mbar, m22[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
m33'[t] == mdot33[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], mbar, m33[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
m12'[t] == mdot12[sigma12[t], mbar, m12[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
m23'[t] == mdot23[sigma23[t], mbar, m23[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
m31'[t] == mdot31[sigma31[t], mbar, m31[t], tau0, gammatilde[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], sigma12[t], sigma23[t], sigma31[t], mbar, m11[t], m22[t], m33[t], m12[t], m23[t], m31[t]]],
```

- Todas as faces são restritas; face 1 se move de acordo com  $etot_{11}$  [dado de entrada] (caso triaxial,  $etot_{22}=etot_{33}=0$ .)

```
eps11'[t] == etot11 - edot11[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], d11[t], l[t], mbar, tau],
eps22'[t] == etot22 - edot22[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], d22[t], l[t], mbar, tau],
eps33'[t] == etot33 - edot33[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], d33[t], l[t], mbar, tau],
eps12'[t] == (etot12 - edot12[sigma12[t], d12[t], l[t], mbar, tau]),
eps23'[t] == (etot23 - edot23[sigma23[t], d23[t], l[t], mbar, tau]),
eps31'[t] == (etot31 - edot31[sigma31[t], d31[t], l[t], mbar, tau]),
```

```
sigma11'[t] == ((lam1+2*lam2)*eps11'[t])+(lam1*eps22'[t])+(lam1*eps33'[t]),
sigma22'[t] == (lam1*eps11'[t])+(lam1+2*lam2)*eps22'[t]+(lam1*eps33'[t]),
sigma33'[t] == (lam1*eps11'[t])+(lam1*eps22'[t])+(lam1+2*lam2)*eps33'[t],
sigma12'[t] == lam2*(2*eps12'[t]),
sigma23'[t] == lam2*(2*eps23'[t]),
sigma31'[t] == lam2*(2*eps31'[t]),
```

- Face 2 restrita; face 3 livre; face 1 move de acordo com  $etot_{11}$  [dado de entrada] (caso biaxial,  $\epsilon_{22}=0$ ,  $\sigma_{33}=0$ .)

```
eps11'[t] == (etot11 - edot11[sigma11[t], sigma22[t], sigma33[t], d11[t], l[t], mbar, tau]),
eps22'[t] == 0,
eps33'[t] == ((-nu)/(1-nu))*eps11'[t],
eps12'[t] == 0,
eps23'[t] == 0,
eps31'[t] == 0,
sigma11'[t] == ((lam1+2*lam2)*eps11'[t])+(lam1*eps22'[t])+(lam1*eps33'[t]),
sigma22'[t] == (lam1*eps11'[t])+(lam1+2*lam2)*eps22'[t]+(lam1*eps33'[t]),
sigma33'[t] == 0,
```

```
sigma12'[t]==0,
sigma23'[t]==0,
sigma31'[t]==0,
```

- Face 2 e 3 livres; face 1 se move de acordo com  $etot_{11}$  [dado de entrada] (caso uniaxial,  $\sigma_{22}=\sigma_{33}=0$ .)

```
eps11'[t]==(etot11-
edot11[sigma11[t],sigma22[t],sigma33[t],mbar,m11[t],eps0,tau0]),
eps22'[t]==(-nu*eps11'[t]),
eps33'[t]==(-nu*eps11'[t]),
eps12'[t]==0,
eps23'[t]==0,
eps31'[t]==0,
```

```
sigma11'[t]==((lam1+2*lam2)*eps11'[t])+(lam1*eps22'[t])+(lam1*eps33'[t]),
sigma22'[t]==0,
sigma33'[t]==0,
sigma12'[t]==0,
sigma23'[t]==0,
sigma31'[t]==0,
```

```
d11[0]==0,d22[0]==0,d33[0]==0,d12[0]==0,d23[0]==0,d31[0]==0,l[0]==10,eps11[0]==0,
eps22[0]==0,eps33[0]==0,eps12[0]==0,eps23[0]==0,eps31[0]==0,sigma11[0]==0,sigma2
2[0]==0,sigma33[0]==0,sigma12[0]==0,sigma23[0]==0,sigma31[0]==0},{d11[t],d22[t]
,d33[t],d12[t],d23[t],d31[t],l[t],eps11[t],eps22[t],eps33[t],eps12[t],eps23[
t],eps31[t],sigma11[t],sigma22[t],sigma33[t],sigma12[t],sigma23[t],sigma31[t
]}, {t,0,0.5/etot11}}
```

- Esta seção define um programa que considera a taxa de deformação ( $etot_{11}$ ,  $etot_{22}$ ,  $etot_{33}$ ,  $etot_{12}$ ,  $etot_{23}$ ,  $etot_{31}$ ) e os parâmetros materiais ( $E_{mod}$ ,  $\nu$ ,  $mbar$ ,  $\tau$ ,  $S_0$ ) e encontra soluções para os valores iniciais de  $\Delta$  ( $d_0=0$ ) e  $\Lambda$  ( $l_0=10$ ). Plota então as curvas de tensão-deformação.

```
sn1=soln1[etot11,0,0,0,0,0,((Emod*nu)/((1+nu)*(1-2*nu))),
(Emod/(2*(1+nu))),eps0,tau0,mbar];
```

- O comando seguinte plota uma curva tensão x taxa de deformação (a curva tensão-deformação é idêntica quando  $etot_{11} = 1$ ).

```
pl1sr=Plot[sigma11[t]/.sn1,{t,0,5}];
```

- Para obtenção da curva tensão-deformação (quando  $etot \neq 1$ ),  $erate$  deve ser multiplicada pelo tempo.

```
Off[ParametricPlot::ppcom]
pl1ss=ParametricPlot[{t*etot11,sigma11[t]}/.sn1,{t,0,5.},PlotStyle->{Thickne
ss[0.01],RGBColor[0,0,1]}];
```

## Referências

---

- [01] K. Ravi-Chandar, W.G. Knauss, "*An experiment investigation into dynamic fracture: II. Microstructural aspects; III. On steady-state crack propagation and crack branching*", Int. J. of Fracture, 26, p.65 (1984).
- [02] J. Fineberg, S.P. Gross, M. Marder, H.L. Swinney, "*Instability in dynamic fracture*", Phys. Rev. Lett., 67, p.457 (1991).
- [03] J. Fineberg, S.P. Gross, M. Marder, H.L. Swinney, "*Instability in the propagation of fast cracks*", Phys. Rev. B, 45, p.5146 (1992).
- [04] E. Sharon, S.P. Gross, J. Fineberg, "*Local crack branching as a mechanism for instability in dynamic fracture*", Phys. Rev. Lett., 74, p.5096 (1995).
- [05] E. Sharon, J. Fineberg, "*Microbranching instability and the dynamic fracture of brittle materials*", Phys. rev. B, 54, p.7128 (1996).
- [06] E. Sharon, J. Fineberg, "*Confirming the continuum theory of dynamic brittle fracture for fast cracks*", Nature, 397, p.333 (1999).
- [07] M.L. Falk, J.S. Langer, "*Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids*", Phys. Rev. E, 57, p.7192 (1998).
- [08] M.L. Falk, "*Molecular-dynamics study of ductile and brittle fracture in model noncrystalline solids*", Phys. Rev. B, 60, p.7062 (1999).
- [09] M.L. Falk, "*Deformation and fracture in amorphous solids*", dissertation submitted to University of California / Santa Barbara, <http://esag.harvard.edu/falk/research/papers/> (1998).
- [10] M.L. Falk, "*Thermal effects in the shear-transformation-zone theory of amorphous plasticity: Comparisons to metallic glass data*", Phys. Rev. E, 70, id.011507 (2004).

- 
- [11] J.S. Langer, "*Microstructural shear localization in plastic deformation of amorphous solids*", Phys. Rev. E, 64, id.011504 (2001).
- [12] J.S. Langer, "*Dynamics of shear-transformation zones in amorphous plasticity: Formulation in terms of an effective disorder temperature*", eprint arXiv:cond-mat/0405330 (2004).
- [13] E. Hart, "*A phenomenological theory for plastic deformation of polycrystalline metals*", Acta Metall, 18, p.599 (1970).
- [14] J.R. Rice, *Constitutive Equations in Plasticity*, edited by A. Argon, MIT Press, p.23 (1975).
- [15] J.S. Langer, L. Pechenik, "*Dynamics of shear-transformation zones in amorphous plasticity: Energetic constraints in a minimal theory*", Phys. Rev. E, 68, id.061507 (2003).
- [16] L. Pechenik, "*Dynamics of shear-transformation zones in amorphous plasticity: Non-linear theory at low temperatures*", submitted to Phys. Rev. E (in press).
- [17] A. Lemaitre, "*The origin of a repose angle: Kinetics of rearrangement for granular materials*", Phys. Rev. Lett., 89, id.064303 (2002).
- [18] A. Lemaitre, "*Boundary lubrication with a glassy interface*", Phys. Rev. E, 69, id.061611 (2004).
- [19] N.P. Bailey, J. Schiotz, K.W. Jacobsen, "*Atomistic simulations of Mg-Cu metallic glasses: mechanical properties*", Materials Science and Engineering A, 387-389, p.996 (2004).
- [20] J. Lubliner, *Plasticity Theory*, Macmillan (1990).
- [21] R. Hill, *The Mathematical Theory of Plasticity*, Clarendon Press (1960).
- [22] J.R. Rice, R. Thompson, "*Ductile versus brittle behaviour of crystals*", Philos. Mag., 29, p.73 (1974).

- 
- [23] J.R. Rice, "*Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the Peierls concept*", J. Mech. Phys. Solids, 40, p.239 (1992).
- [24] S.J. Zhou, A.E. Carlson, R. Thompson, "*Crack blunting effects on dislocation emission from cracks*", Phys. Rev. Lett., 72, p.852 (1994).
- [25] D. Srolovitz, V. Vitek, T. Egami, "*An atomistic study of deformation of amorphous metals*", Acta Metall, 31, p.335 (1983).
- [26] S. Kobayashi, K. Maeda, S. Takeuchi, "*Computer simulation of deformation of amorphous Cu 57 Zr 43*", Acta Metall, 28, p.1641 (1980).
- [27] K. Maeda, S. Takeuchi, "*Atomistic process of plastic deformation in a model amorphous metal*", Philos. Mag., 44, p.643 (1981).
- [28] D. Deng, A. Argon, S. Yip, "*A molecular dynamics model of a melting and glass transition in a two-dimensional material*", Philos. Trans. R. Soc. London, Ser: A, 329, p.549 (1989).
- [29] F. Spaepen, "*A microscopic mechanism for steady state in homogeneous flow in metallic glasses*", Acta Metall, 25, p.407 (1997).
- [30] A. Argon, "*Plastic deformation in metallic glasses*", Acta Metall, 27, p.47 (1979).
- [31] A. Argon, H. Kuo, "*HY plastic flow in a disordered bubble raft (an analog of a metallic glass)*", Mater. Sci, Eng., 39, p.101 (1979).
- [32] F. Spaepen, A. Taub, Physics of Defects, Proc. of the 1981 Leas Houches Summer School, Session XXXV, edited by R. Balian, M.Kleman, J.-P. Poirier, North-Holland, Amsterdam, p.101 (1979).
- [33] A. Argon, L. Shi, "*Development of visco-plastic deformation in metallic glasses*", Acta Metall, 31, p.499 (1983).

- 
- [34] M. Cohen, D. Turnbull, "*Molecular transport in liquids and glasses*", J. Chem. Phys., 31, p.1164 (1959).
- [35] D. Turnbull, M. Cohen, "*Free-volume of chemical physics*", J. Chem. Phys., 34, p.120 (1961).
- [36] D. Turnbull, M. Cohen, "*On the free-volume model of the liquid-glass transition*", J. Chem. Phys., 52, p.3038 (1970).
- [37] J.S. Langer, A.E. Lobkovsky, "*Dynamic ductile to brittle transition in a one-dimensional model of viscoplasticity*", Phys. Rev. E, 58, p.1568 (1998).
- [38] J.S. Langer, A.E. Lobkovsky, "*Rate-and-state theory of plastic deformation near a circular hole*", Phys. Rev. E, 60, p.6978 (1999).
- [39] M. Marder, S. Gross, "*Origin of crack-tip instabilities*", J. Mech. Phys. Solids, 43, p.1 (1995).
- [40] A. Omeltchenko, J. Yu, R.K. Kalia, P. Vashishta, "*Crack front propagation and fracture in a graphite sheet: A molecular-dynamics study on parallel computers*", Phys. Rev. Lett., 78, p.2148 (1997).
- [41] F.F. Abraham, J.Q. Broughton, N. Bernstein, E. Kaxiras, "*Spanning the length scales in dynamic simulation*", Comput. Phys., 12, p.539 (1998).
- [42] ABAQUS Analysis User's Manual v-6.4, ABAQUS Inc. (2004).
- [43] U.M. Archer, L.R. Petzold, *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, SIAM- Society for Industrial and Applied Mathematics, ISBN 0-89871-412-5, p.37 (1998).
- [44] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77*, 2<sup>nd</sup> edition, Cambridge University Press, ISBN 0-521-43064-X (1992).

- 
- [45] Wolfram, S., *Mathematica Book* 4<sup>th</sup> ed, Cambridge University Press, ISBN 0-521-64314-7 (1999).
- [46] C.A. Pampillo, “*Flow and fracture in amorphous alloys*”, J. Mater. Sci., 10, p.1194 (1975).
- [47] C.S. O’Hern, S.A. Langer, A.J. Liu, S.R. Nagel, “*Force distributions near jamming and glass transitions*”, Phys. Rev. Lett., 86, 111 (2001).