

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA E DE
MATERIAIS

SANDMARA LANHI

**OTIMIZAÇÃO DE MATERIAIS PERIÓDICOS TRELIÇADOS VIA
MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO NIAH E METAMODELO DE
KRIGING**

DISSERTAÇÃO

CURITIBA

2018

SANDMARA LANHI

**OTIMIZAÇÃO DE MATERIAIS PERIÓDICOS TRELIÇADOS VIA
MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO NIAH E METAMODELO DE
KRIGING**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais na Universidade Tecnológica Federal do Paraná como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia – Área de concentração: Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Marco Antônio Luersen.
Coorientador: Prof. Dr. Pablo A. Muñoz-Rojas.

CURITIBA

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

L287o
2018 Lanhi, Sandmara
Otimização de materiais periódicos treliçados via método de homogeneização NIAH e metamodelo de Kriging / Sandmara Lanhi.-- 2018.
102 f.: il. color.; 30 cm.

Texto em Português com resumo em Inglês.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Curitiba, 2018.
Bibliografia: f. 94-98.

1. Inovações tecnológicas. 2. Análise elástica (Engenharia). 3. Otimização matemática. 4. Engenharia mecânica -- Dissertações. I. Luersen, Marco Antônio, orient. II. Muñoz-Rojas, Pablo A., co-orient. III. Universidade Tecnológica Federal do Paraná -- Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais. III. Título.

CDD: 23. ed. -- 620.1

TERMO DE APROVAÇÃO DE DISSERTAÇÃO Nº 318

A Dissertação de Mestrado intitulada: **Otimização de Materiais Periódicos Treliçados via Método de Homogeneização NIAH e Metamodelo de Kriging**, defendida em sessão pública pela Candidata **Sandmara Lanhi**, no dia 26 de fevereiro de 2018, foi julgada para a obtenção do título de Mestre em Engenharia, área de concentração: Mecânica dos Sólidos, e aprovada em sua forma final, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais – PPGEM.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Marco Antônio Luersen - Presidente - UTFPR

Prof. Dr. Jucélio Tomás Pereira - UFPR

Prof. Dr. Hibeth Parente Azikiri de Deus- UTFPR

A via original deste documento encontra-se arquivada na Secretaria do Programa, contendo a assinatura da Coordenação após a entrega da versão corrigida do trabalho.

Curitiba, ____ de _____ de 20__.

Carimbo e assinatura do Coordenador do Programa

Aos meus pais e irmão, por todo amor e apoio, pois tudo o que sou devo a vocês.

Ao meu amigo e companheiro Eder, pela paciência e incentivo diário.

À minha irmã do coração Luane, por todo amparo e carinho.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus, minha maior fonte de motivação para conquistar todos os meus sonhos.

Agradeço aos meus pais e irmão, pelo amor, por acreditarem, investirem e torcerem por mim incondicionalmente. O apoio e cuidado de vocês foram fundamentais para que eu chegasse até aqui e alcançasse todos os meus sonhos.

Agradeço a minha amiga Luane, pela qual tenho imenso carinho, e que mesmo distante geograficamente se mantém presente em minha vida compartilhando alegrias, realizações e dores diárias.

Meus agradecimentos ao meu amigo e companheiro Eder, por me apoiar e incentivar nas horas em que pensei em desistir, pela paciência nos momentos difíceis, pelas palavras de motivação, carinho e amor quando mais precisei.

Aos demais amigos e familiares, agradeço por toda paciência e compreensão nos momentos que não estive presente, e por todo o incentivo e conforto nos momentos difíceis.

Meus agradecimentos aos colegas do laboratório LAMES, pela ajuda e troca de conhecimentos durante estes dois anos.

Agradeço aos professores Marco Antonio Luersen e Pablo A. Muñoz-Rojas, pela orientação e ensinamentos repassados, os quais foram fundamentais para meu crescimento profissional e pessoal, ao longo do mestrado e para vida.

“É muito melhor lançar-se em busca de conquistas grandiosas, mesmo expondo-se ao fracasso, do que alinhar-se como os pobres de espírito, que nem gozam muito nem sofrem muito, porque vivem numa penumbra cinzenta, onde não conhecem nem vitória, nem derrota.” - Theodore Roosevelt

RESUMO

LANHI, Sandmara. OTIMIZAÇÃO DE MATERIAIS PERIÓDICOS TRELIÇADOS VIA MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO NIAH E METAMODELO DE KRIGING. 102 f. Dissertação – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2018.

A evolução tecnológica requer cada vez mais o desenvolvimento de novos materiais de engenharia que atendam a condições multifuncionais. Devido a isso, um tipo de material que tem chamado a atenção de pesquisadores são os materiais constituídos de células treliçadas. Estes são materiais celulares formados por barras, compondo treliças e estrutura com padrão periódico. Devido a tal periodicidade, em muitos casos estes materiais apresentam melhores propriedades físicas quando comparados com aqueles de estrutura aleatória de igual densidade relativa. Porém, devido à heterogeneidade de sua estrutura (material sólido e vazios) na microescala (escala da célula), a obtenção das propriedades macroscópicas do material não é direta. Uma maneira de obter tais propriedades é utilizar o método da homogeneização assintótica (AH). Este método tem fundamentação matemática baseada na teoria da perturbação e as propriedades efetivas de materiais periódicos são obtidas através da resolução de equações diferenciais parciais definidas para a célula unitária. No entanto, pode demandar o desenvolvimento de um programa computacional específico de acordo com o elemento finito utilizado na discretização da célula. Em consequência disso, alguns pesquisadores desenvolveram a nova implementação da homogeneização assintótica (NIAH). A NIAH utiliza softwares comerciais de elementos finitos como “caixas pretas” para os cálculos de deslocamentos, forças, temperaturas e fluxos de calor. O emprego de um software comercial permite que qualquer tipo de elemento ou técnica nele disponível seja utilizado na modelagem da célula unitária. Além disso, permite a interação com técnicas de otimização baseadas em metamodelos. Assim, este trabalho tem como objetivo a utilização da NIAH para obtenção das propriedades efetivas elásticas e de condutividade térmica de materiais periódicos treliçados. Ademais, busca-se otimizar duas células unitárias iniciais a fim de obter melhores respostas mecânicas e/ou térmicas, mantendo-se a densidade relativa constante. No entanto, há duas dificuldades: o não acesso ao código fonte do programa comercial para cálculo da sensibilidade e o número relativamente grande de variáveis de projeto. Para contornar essas dificuldades, utiliza-se uma técnica baseada em metamodelos, denominada Kriging, juntamente com um algoritmo de programação quadrática sequencial (SQP) utilizado como otimizador local, associado a uma estratégia de preenchimento para refinar o modelo. As áreas das seções transversais das barras da célula unitária são tomadas como variáveis de projeto, tendo-se como objetivo a maximização do módulo de cisalhamento, a maximização da condutividade térmica na direção x , a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x e a minimização do coeficiente de Poisson. Com isso, obteve-se um conjunto de geometrias ótimas, as quais várias são validadas com resultados encontrados na literatura. Em problemas de minimização do coeficiente de Poisson, obteve-se materiais com estruturas típicas auxéticas. A utilização da NIAH permitiu obter as propriedades de forma rápida e acurada quando comparada com a AH. A técnica de otimização utilizada, baseada em metamodelagem, conseguiu encontrar boas soluções. Entretanto, na etapa de construção do metamodelo de Kriging houve um pouco de dificuldade devido ao grande número de variáveis de projeto e ao critério de preenchimento que se mostrou computacionalmente pouco eficiente.

Palavras-chave: Material Periódico Treliçado. Homogeneização. NIAH. Otimização. Kriging.

ABSTRACT

LANHI, Sandmara. OPTIMIZATION OF PERIODIC TRUSS MATERIALS BY NIAH HOMOGENIZATION METHOD AND KRIGING METAMODEL. 102 f. MSc Dissertation – Posgraduate Program in Mechanical and Materials Engineering, Federal University of Technology – Paraná. Curitiba, 2018.

The rapid technological evolution requires, more and more, the development of new engineering materials that meet multifunctional conditions. Because of this, one type of material that has attracted the attention of researchers are the so-called periodic truss materials. These are cellular materials composed by bars, forming trusses and structure with a periodic pattern. Due to such periodicity, in many cases, these materials have better physical properties when compared to materials of random structure of equal relative density. However, due to the heterogeneity of its structure (solid material and voids) in the microscale (cell scale), obtaining the macroscopic properties of the material is not straightforward. A way to obtain these properties is to use the asymptotic homogenization (AH) method. This method has a mathematical foundation based on the perturbation theory and the effective properties of periodic materials are determined through the resolution of partial differential equations defined for the unit cell. However, it may require the development of a specific computational program according to the finite element used in the discretization of the cell. As a result, some researchers have developed the new implementation of asymptotic homogenization (NIAH). NIAH uses commercial finite element software such as “black boxes” for calculations of displacements, forces, temperatures and heat flows. The use of commercial software allows any type of available element or technique to be used in the modeling of the unit cell. In addition, it allows the interaction between optimization techniques based on metamodels. Thus, this work aims to use the NIAH to obtain the elastic and thermal conductivity properties of periodic truss materials. Moreover, it is sought to optimize two initial unit cells in order to obtain better mechanical and thermal responses, keeping the relative density constant. However, there are two difficulties: the non access to the source code of the commercial program for calculating the sensitivity and the relatively large number of design variables. To overcome these difficulties, it is employed a technique based on metamodels, called Kriging, in combination with a sequential quadratic programming algorithm (SQP) used as a local optimizer, associated to an infill strategy to refine the model. The areas of the transversal sections of the bars of the unit cell are taken as design variables aiming the maximization of the shear modulus, the maximization of the thermal conductivity in the x direction, the maximization of the shear modulus combined with the thermal conductivity in the x direction and the minimization of the Poisson coefficient. With this, we obtained a set of optimal geometries and several of them are validated with results found in the literature. In problems of minimization of the Poisson coefficient were obtained with materials with typical auxetic structures. The use of NIAH allowed to obtain the properties quickly and accurate when compared to AH. The optimization technique used, based on metamodeling, was able to find good solutions. However, it faced some difficulties in the construction phase of the Kriging metamodel due to the large number of design variables and the computationally low efficiency of the infill criterion.

Keywords: Periodic Truss Material. Homogenization. NIAH. Optimization. Kriging.

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras romanas

b	Forças de corpo
<i>B</i>	Módulo volumétrico
B	Matriz deformação-deslocamento
C	Matriz de rigidez térmica homogeneizada no sistema de referência global
<i>D</i>	Domínio de projeto
D	Matriz constitutiva elástica (na forma compacta) unidimensional no sistema de referência global
E_{ijkl}^H	Componente <i>ijkl</i> do tensor constitutivo elástico homogeneizado
E_{ijkl}	Componente <i>ijkl</i> do tensor constitutivo elástico do material base da célula unitária
E	Tensor constitutivo elástico
\mathbf{E}^H	Tensor constitutivo elástico homogeneizado
<i>f</i>	Função
$\hat{f}(\mathbf{x})$	Preditor de Kriging
f	Vetor de respostas de uma função
\mathbf{f}^{kl}	Vetor de forças de reações nodais referentes à aplicação dos deslocamentos nodais prescritos
$\mathbf{f}^{*(kl)}$	Vetor de forças de reações nodais referentes à aplicação dos deslocamentos nodais característicos
\mathcal{F}	Propriedade física de um material periódico
$g_j(\mathbf{x})$	Restrições de desigualdade
<i>G</i>	Módulo de cisalhamento
$h_i(\mathbf{x})$	Restrições de igualdade
I	Tensor identidade de quarta ordem
Kt_{ij}^H	Componente <i>ij</i> da matriz constitutiva térmica homogeneizada
Kt_{ij}	Componente <i>ij</i> da matriz constitutiva térmica
K	Matriz de rigidez homogeneizada no sistema de referência global
Kt	Condutividade térmica
\mathbf{Kt}^H	Matriz constitutiva térmica homogeneizada
<i>m</i>	Número de restrições de desigualdade

n	Número de variáveis de projeto
\mathbb{N}	Conjunto dos números naturais
p	Número de restrições de igualdade
p_j	Parâmetro responsável pela suavidade do metamodelo de Kriging
\mathbf{P}	Matriz dos casos de carga no sistema de referência global
q	Número de amostras de um projeto de experimentos
\mathbf{q}^j	Vetor de fluxo de calor nodal referente à aplicação das temperaturas nodais prescritas
\mathbf{q}^{*j}	Vetor de fluxo de calor nodal referente à aplicação das temperaturas nodais características
\mathbf{Q}	Matriz dos casos de carga térmica no sistema de referência global
\mathbb{R}	Conjunto dos números reais
\mathbf{R}	Temperaturas características da célula unitária
$\mathbf{R}^{0(i)}$	Vetor de temperaturas nodais prescritas
$\tilde{\mathbf{R}}^{*(i)}$	Vetor de temperaturas nodais características
\hat{s}^2	Erro da previsão de Kriging
\mathbf{t}	Forças de superfície
T	Campo de temperaturas
T_0	Campo de temperatura representada na macroescala
T_1	Campo de temperatura representada na microescala
\mathbf{T}_{xy}^{2D}	Matriz de transformação para os casos bidimensionais rotacionados no plano xy
\mathbf{T}_{xy}^{3D}	Matriz de transformação para os casos tridimensionais rotacionados no plano xy
u_i^*	Campo de deslocamentos periódicos
u_i	Campo de deslocamentos para uma estrutura periódica
\mathbf{u}	Campo de deslocamentos
\mathbf{u}_0	Deslocamentos representado na macroescala
\mathbf{u}_1	Deslocamento representado na microescala
v_i	Multiplicador de Lagrange das restrições de igualdade $h_i(\mathbf{x}) = 0$
\mathbf{v}	Vetor dos multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade $h_i(\mathbf{x}) = 0$.
V_Ω	Conjunto de deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis
\mathbf{x}	Variáveis de projeto
\mathbf{x}	Representação da escala macroscópica (teoria da Homogeneização Assintótica)

\mathbf{x}^*	Ponto de ótimo
\mathbf{X}	Conjunto de amostras de um projeto de experimentos
\mathbf{y}	Representação da escala microscópica (teoria da Homogeneização Assintótica)
Y	Período da célula unitária
\mathbf{Y}	Vetor de dimensões da célula unitária
$ \mathbf{Y} $	Volume da célula unitária
$\mathbf{Z}(\mathbf{x}^{(q)})$	Vetor de processos estocásticos para cada q ponto da amostra
$\nabla_{\mathbf{y}}(\cdot)$	Gradiente de (\cdot) em relação a \mathbf{y}
$\nabla \mathbf{T}^{0(j)}$	Gradiente térmico unitário
$\partial_x(\cdot)$	Derivada parcial de (\cdot) em relação a x
$\partial_y(\cdot)$	Derivada parcial de (\cdot) em relação a y

Letras gregas

Γ	Fronteiras do domínio Ω
Δx_j^k	Constantes para cada k par de nós paralelos de uma estrutura periódica
$\delta \mathbf{T}$	Campo virtual de temperaturas
$\delta \mathbf{u}$	Deslocamentos virtuais
ε	Dimensão característica de heterogeneidade
ε_{ij}^0	Tensor de deformação global da estrutura periódica
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tensor deformação infinitesimal
$\boldsymbol{\varepsilon}^{0(kl)}$	Campos de deformações unitários
θ_j	Parâmetro de correlação do metamodelo de Kriging
$\hat{\mu}$	Estimativa da média do metamodelo de Kriging
ν	Coefficiente de Poisson
$\hat{\sigma}^2$	Estimativa da variância
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensões
Φ	i -ésima coluna da matriz de correlação
$\boldsymbol{\chi}$	Deslocamentos característicos da célula unitária
$\boldsymbol{\chi}^{0(kl)}$	Vetor de deslocamentos nodais prescritos
$\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{kl}$	Vetor de deslocamentos nodais característicos
Ψ	Matriz de correlações
ω_j	Multiplicador de Lagrange das restrições de igualdade $g_j(\mathbf{x}) \leq 0$

- ω Vetor dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade
 $g_j(\mathbf{x}) \leq 0$
- Ω Domínio do problema
- Ω^e Domínio elementar do problema

LISTA DE SIGLAS

AH	Homogeneização Assintótica – <i>Asymptotic Homogenization</i>
BFGS	Método de <i>Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno</i>
DACE	Projeto e Análise de Experimentos Computacionais – <i>Design and Analysis of Computer Experiments</i>
DOE	Projeto de Experimentos – <i>Design of Experiments</i>
KKT	Karush-Kuhn-Tucker – Condições de otimalidade de KKT
LHS	Amostra de Hipercubo Latino – <i>Latin Hypercube Sample</i>
MCCT	Materiais Constituídos de Células Treliçadas
NIAH	Nova Implementação do Método da Homogeneização Assintótica – <i>Novel Implementation of Asymptotic Homogenization Method</i>
PTMs	Materiais Periódicos Treliçados – <i>Periodic Truss Materials</i>
RVE	Elemento de Volume Representativo – <i>Representative Volume Element</i>
SQP	Programação Quadrática Sequencial – <i>Sequential Quadratic Programming</i>

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Material treliçado tridimensional produzido em liga de alumínio Ti-6Al-4V com 10% de densidade relativa.	21
Figura 2.1 - Função representativa da variação de propriedades em um material heterogêneo.	26
Figura 2.2 - Material periódico e célula unitária correspondente.	26
Figura 2.3 - Fluxograma do método NIAH na obtenção do tensor constitutivo elástico.	34
Figura 2.4 - Fluxograma do método NIAH na obtenção do tensor constitutivo térmico.	36
Figura 2.5 - Exemplo de aplicação de condições de contorno periódicas.	40
Figura 3.1 - Rotação do plano xy a um ângulo α	47
Figura 3.2 - Diagrama polar da componente E_{1111} rotacionada e normalizada pelo valor máximo da componente.	48
Figura 4.1 - Fluxograma do processo de otimização baseado em metamodelos.	51
Figura 4.2 - Exemplo de uma amostra fatorial completa tridimensional com [3 4 5] pontos nas direções x_1 , x_2 e x_3 , respectivamente; (a) Representação tridimensional, (b) gráfico por pares.	52
Figura 4.3 - Cubo latino aleatório com 15 pontos experimentais em três dimensões. (a) Representação em três dimensões, (b) representação em gráfico por pares.	53
Figura 4.4 - Influência do parâmetro p na função de correlação.	57
Figura 4.5 - Influência do parâmetro θ na função de correlação.	58
Figura 4.6 - Utilização de diferentes funções de correlação para o metamodelo de Kriging: (a) Gaussiana; (b) exponencial; (c) linear; (d) spline.	60
Figura 4.7 - (a) Função de Branin-Hoo; (b) Predição de Kriging da função de Branin-Hoo baseada em 25 pontos amostrais.	61
Figura 4.8 - Fluxograma do processo de otimização.	67
Figura 5.1 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial I.	75
Figura 5.2 - Célula obtida por Guth (2012) referente à maximização da condutividade térmica na direção x	77
Figura 5.3 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização da condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.	77
Figura 5.4 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.	78

Figura 5.5 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I.	81
Figura 5.6 - Material deformado correspondente a célula inicial I.	82
Figura 5.7 - Exemplos de estruturas auxéticas.	82
Figura 5.8 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).	83
Figura 5.9 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente Poisson para a célula inicial I (mapa de deslocamento na direção vertical).	84
Figura 5.10 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial II.	86
Figura 5.11 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1).	88
Figura 5.12 - Material deformado correspondente à célula inicial II.	88
Figura 5.13 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1) indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).	89
Figura 5.14 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula II - resultado 1 (mapa de deslocamento na direção vertical).	89
Figura 5.15 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2).	90
Figura 5.16 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2) indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).	92
Figura 5.17 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula II - resultado 2 (mapa de deslocamento na direção vertical).	92

LISTA DE QUADROS

Quadro 5.1 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula inicial I.....	69
Quadro 5.2 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula de máximo coeficiente de Poisson.	70
Quadro 5.3 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula de máximo módulo volumétrico.....	71
Quadro 5.4 – Resultados da homogeneização via NIAH para a célula inicial II.	72
Quadro 5.5 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial I.....	74
Quadro 5.6 - Resultados referentes à maximização da condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.....	76
Quadro 5.7 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.....	79
Quadro 5.8 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I.....	80
Quadro 5.9 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial II.	85
Quadro 5.10 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1).	87
Quadro 5.11 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2).	91

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	20
1.1 CONTEXTO	20
1.2 OBJETIVO E JUSTIFICATIVA	23
1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	24
2 MATERIAIS PERIÓDICOS	25
2.1 GENERALIDADES SOBRE MATERIAIS PERIÓDICOS	25
2.2 HOMOGENEIZAÇÃO	26
2.2.1 Homogeneização das propriedades elásticas	27
2.2.2 Homogeneização das propriedades de condutividade térmica	30
2.3 NOVA IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DA HOMOGENEIZAÇÃO ASSINTÓTICA (NIAH)	32
2.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS	38
3 RELAÇÕES CONSTITUTIVAS	41
3.1 PARÂMETROS CONSTITUTIVOS.....	41
3.1.1 Módulo de elasticidade ou módulo de Young (E)	43
3.1.2 Coeficiente de Poisson (ν)	44
3.1.3 Módulo de cisalhamento (G)	45
3.1.4 Módulo volumétrico (B)	45
3.2 CONDUTIVIDADE TÉRMICA (k)	45
3.3 DIAGRAMAS POLARES DAS COMPONENTES TENSORIAIS	46
4 OTIMIZAÇÃO	49
4.1 DEFINIÇÃO DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO	49
4.2 OTIMIZAÇÃO BASEADA EM METAMODELOS	50
4.2.1 Projeto de experimentos	51
4.2.1.1 Hipercubos latinos aleatórios	53
4.2.1.2 Hipercubos latinos ótimos	54
4.3 CONSTRUÇÃO DO METAMODELO DE KRIGING.....	55

4.4	PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL	61
4.4.1	Critério de preenchimento	64
4.4.2	Detalhamento das funções objetivo	64
4.5	PROCEDIMENTO DE OTIMIZAÇÃO UTILIZANDO NIAH.....	65
5	RESULTADOS.....	68
5.1	RESULTADOS DA APLICAÇÃO DA NIAH (SEM OTIMIZAÇÃO)	68
5.2	RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO	73
5.2.1	Resultados célula inicial I.....	73
5.2.1.1	Maximização do módulo de cisalhamento	73
5.2.1.2	Maximização da condutividade térmica na direção x	75
5.2.1.3	Maximização do módulo de cisalhamento e da condutividade térmica na direção x	78
5.2.1.4	Minimização do coeficiente de Poisson	79
5.2.2	Resultados célula inicial II.....	84
5.2.2.1	Maximização do módulo de cisalhamento	84
5.2.2.2	Minimização do coeficiente de Poisson	86
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	93
6.1	CONCLUSÕES GERAIS	93
6.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	94
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95
	APÊNDICE A – EQUIVALÊNCIA ENTRE A MATRIZ DE RIGIDEZ DE SOFTWARE COMERCIAL DE ELEMENTOS FINITOS E AQUELA APRESENTADA NO DESENVOLVIMENTO TEÓRICO.....	100

1. INTRODUÇÃO

1.1 CONTEXTO

A crescente evolução tecnológica requer, cada vez mais, o desenvolvimento de novos materiais de engenharia que atendam a aplicações multifuncionais. Devido a este avanço tecnológico, os materiais celulares têm chamado a atenção dos pesquisadores, pois combinam boas propriedades mecânicas, térmicas e acústicas com baixo peso. Em consequência disso, esses materiais possuem aplicações na biomedicina, engenharia aeroespacial, automobilística, militar, entre outros setores.

Os materiais celulares se caracterizam por apresentarem uma estrutura composta por redes de suportes sólidos ou placas interligados, formando as arestas e as faces de suas células. Esses materiais chegam a ter 20% ou menos do seu peso ocupado por material sólido (GIBSON e ASHBY, 1997). São constituídos por poros que estão distribuídos ao longo de sua matriz sólida, que pode ser polimérica, cerâmica ou metálica e são classificados em relação ao tamanho de suas células, variabilidade do tamanho das células (aleatórias ou periódicas), tipo de poros (abertos ou fechados) e densidade relativa da estrutura (WADLEY, 2002). Possuem baixo peso e alta resistência, e apresentam ótimo desempenho em aplicações como isolamento térmico, amortecimento de choque e vibração, e absorção acústica (SCHAEDLER *et al.*, 2011). Como exemplos de materiais celulares têm-se as espumas metálicas, estruturas tipo *honeycomb* (favos de mel), painéis sanduíche, entre outros (GIBSON e ASHBY, 1997).

Dentre os materiais celulares, uma classe que tem se destacado é aquela dos *periodic truss materials* (PTMs), ou, em português, materiais constituídos de células treliçadas (MCCT). Esses materiais são compostos por barras que só transmitem forças longitudinais (SIGMUND, 1994) e sua estrutura é formada por um padrão periódico de sua célula unitária, como pode ser visto na Figura 1.1. Em consequência de sua periodicidade, esses materiais exibem baixa dispersão de suas propriedades físicas, quando comparados com as espumas metálicas. Estas, por sua vez apresentam maior heterogeneidades em sua estrutura (GUTH, LUERSEN e MUÑOZ-ROJAS, 2015). Devido a isso, os materiais celulares periódicos normalmente exibem propriedades mecânicas superiores aos demais materiais de estrutura aleatória com igual densidade relativa (NIU e YAN, 2016).

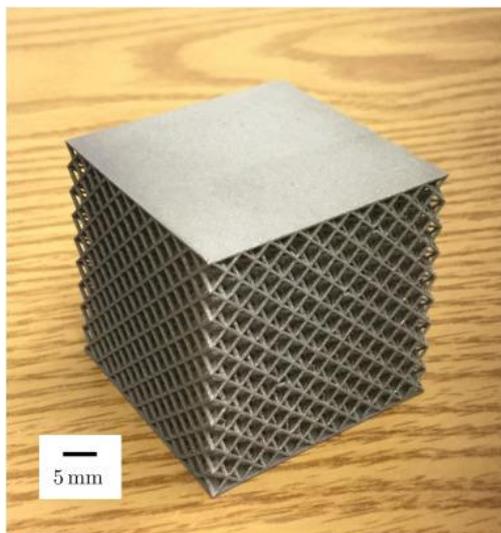


Figura 1.1 - Material treliçado tridimensional produzido em liga de alumínio Ti-6Al-4V com 10% de densidade relativa.
Fonte: Messner (2016).

Devido à grande quantidade de poros e heterogeneidades presente em sua estrutura, a obtenção das propriedades efetivas desses materiais se torna complexa. Em consequência disso, diversos métodos têm sido desenvolvidos para esse fim. Segundo Cheng, Cai e Xu (2013), os métodos numéricos mais utilizados na obtenção das propriedades de materiais compósitos com estruturas complexas são o elemento de volume representativo (RVE, do inglês *representative volume element*) e a homogeneização assintótica (AH, do inglês *asymptotic homogenization*).

O método RVE destaca um elemento de volume para representar toda a estrutura, aplica condições de contorno específicas, que podem ser de deslocamento unitário (Dirichlet) ou de força (Neumann) e encontra as propriedades efetivas fazendo com que sua energia de deformação seja equivalente ao material homogêneo (CHENG, CAI e XU, 2013). O RVE é largamente utilizado devido à sua concepção e simplicidade mecânica. Contudo, esse método não possui rigorosa fundamentação matemática e fornece apenas uma estimativa aproximada das propriedades efetivas. Devido a isso, não deve ser utilizado quando se deseja alta precisão das propriedades efetivas (ZHANG, SHANG e LIU, 2017).

O método AH, ao contrário do método RVE, possui rigorosa fundamentação matemática baseada na teoria da perturbação e obtém as propriedades efetivas dos materiais periódicos através da resolução de equações diferenciais parciais definidas para uma célula unitária. Esse método pode dar uma solução exata para a macroestrutura, se esta for suficientemente grande e composta por um número infinito de células unitárias (ZHANG, SHANG e LIU, 2017). O método AH tem sido utilizado com sucesso na predição das propriedades elásticas efetivas de materiais periódicos bidimensionais e tridimensionais,

analítica e numericamente. No entanto, a obtenção das propriedades efetivas pelo método da AH demanda muito tempo computacional, principalmente devido à falta de ferramentas de softwares genéricos ligados ao método e à sua formulação por elementos finitos. Em consequência disso, recentemente Cheng, Cai e Xu (2013) desenvolveram uma nova implementação para o método da homogeneização assintótica, denominado NIAH (do inglês *novel implementation of asymptotic homogenization*). Esse método tem como base matemática o método tradicional e utiliza softwares comerciais de elementos finitos como “caixas pretas” (“*black-box*”) em auxílio nos cálculos dos vetores de forças, deslocamentos, fluxos de calor e temperaturas. Nesse método, todo o cálculo por elementos finitos é realizado através do software, permitindo a utilização de todos os tipos de elementos e técnicas disponíveis para discretização da célula unitária. Esta nova implementação, portanto, consegue resolver uma variedade de problemas com células unitárias complexas e reduzir significativamente a sua escala.

A utilização de softwares comerciais torna o processo de obtenção das propriedades efetivas muito mais ágil e eficiente. Porém, não permite o acesso de forma direta ao código fonte do software comercial para o cálculo da sensibilidade. Apesar disso, permite a integração com diferentes técnicas de otimização, como por exemplo as técnicas baseadas em metamodelos. Essa integração da NIAH com processos de otimização é importante, visto que os materiais periódicos treliçados são projetados para aplicações específicas. No entanto, esses materiais apresentam estruturas bastante complexas e, devido a isso, o processo de otimização se torna custoso e demorado. Assim, a utilização de técnicas baseadas em metamodelos visa reduzir o tempo computacional gasto na otimização.

Os metamodelos (também chamados de modelos substitutos ou superfícies de resposta) têm como objetivo fazer aproximações de um modelo de alta fidelidade, a fim de aliviar a carga computacional durante os cálculos e suavizar possíveis ruídos da função objetivo e das restrições. Assim, uma vez que o modelo substituto tenha sido construído, o modelo de alta fidelidade é esquecido e a busca subsequente é feita apenas no modelo substituto (AHMED e QUIN, 2009). Exemplos de classes típicas de metamodelos são: regressões polinomiais, *splines*, redes neurais artificiais e Kriging (ROUSTANT, GINSBOURGER e DEVILLE, 2012).

Um dos metamodelos mais utilizados e que tem sido utilizado em diferentes tipos de problemas é Kriging. Este é basicamente um processo de interpolação espacial, no qual o modelo interpola as respostas em exatamente todos os pontos experimentais ou pontos iniciais (obtidos por um projeto de experimentos ou DOE, do inglês *design of experiments*) e prevê as respostas para novos pontos (AHMED e QUIN, 2009). Ou seja, assumindo uma função

desconhecida $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, Kriging prevê os valores desconhecidos de $f(\mathbf{x})$ para um ponto $\mathbf{x} \in D$ através de observações conhecidas \mathbf{f} em um conjunto de experimentos conhecidos $\mathbf{X} = \{x^{(1)}, \dots, x^{(q)}\}^T$ ($q \in \mathbb{N}$) (ROUSTANT, GINSBOURGER e DEVILLE, 2012). Assim, devido à complexidade dos materiais periódicos treliçados e ao grande número de variáveis presentes em problemas desse tipo, propõe-se a utilização de uma técnica de otimização baseada em metamodelos. O objetivo de usar metamodelos em casos como este é tornar o processo mais eficiente e diminuir o tempo computacional das análises.

1.2 OBJETIVO E JUSTIFICATIVA

Esse trabalho tem como objetivos a aplicação da nova implementação da homogeneização assintótica (NIAH) para a obtenção das propriedades elásticas e térmicas efetivas de materiais treliçados e a utilização de uma técnica de otimização baseada em metamodelos, denominada Kriging, a fim de obter células com configurações ótimas que atendam a condições de cargas específicas.

As funções objetivo analisadas são referentes às respostas mecânica, térmica e termomecânica, visando a maximização do módulo de cisalhamento, a maximização da condutividade térmica na direção x , a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x e a minimização do coeficiente de Poisson. Para isso, as áreas das seções transversais dos elementos das células são tomadas como variáveis de projeto.

A utilização da NIAH se justifica pela fácil implementação do método e por permitir a utilização de diferentes tipos de elementos disponíveis em softwares comerciais de elementos finitos, na obtenção das propriedades efetivas homogeneizadas de materiais treliçados. Já com a utilização do metamodelo de Kriging, procura-se aumentar a eficiência do processo de otimização e diminuir o tempo computacional. A utilização de métodos ligados a softwares comerciais de elementos finitos permite facilmente a integração com diferentes estratégias de otimização, como é o caso das técnicas baseadas em metamodelos.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Este texto está dividido em seis capítulos. No primeiro tem-se a introdução, onde busca-se apresentar um breve panorama do contexto do trabalho. No capítulo 2, apresentam-se a definição de materiais periódicos, bem como o método da homogeneização assintótica e a nova implementação do método da homogeneização assintótica (NIAH). No capítulo 3, apresentam-se os parâmetros constitutivos e o método gráfico para verificação da isotropia das propriedades dos materiais. No capítulo 4, apresentam-se a definição de um problema de otimização, a técnica de otimização baseada em metamodelos, bem como as técnicas essenciais para a geração da amostra e construção do metamodelo de Kriging, o algoritmo de otimização e o detalhamento das funções objetivo utilizadas no trabalho. No capítulo 5, apresentam-se os resultados obtidos utilizando-se a NIAH na obtenção das propriedades homogeneizadas e através da otimização de duas células iniciais. E, por fim, no capítulo 6, são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2 MATERIAIS PERIÓDICOS

2.1 GENERALIDADES SOBRE MATERIAIS PERIÓDICOS

Os materiais periódicos são descritos a partir da repetição de sua célula base, a qual possui dimensões muito menores que a dimensão de domínio global. A obtenção das propriedades efetivas desses materiais pode ser realizada a partir da análise de apenas uma de suas células unitárias (HASSANI e HINTON, 1998).

Dessa forma, um meio heterogêneo é dito periódico se as funções que descrevem qualquer quantidade física ou geométrica desse meio obedecem a relação

$$\mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{N}\mathbf{Y}) = \mathcal{F}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

onde \mathcal{F} é a propriedade física, que pode ser representada na forma de função escalar, vetorial ou tensorial, $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]^T$ é o vetor posição para um ponto qualquer, \mathbf{N} é uma matriz diagonal 3x3 de números inteiros arbitrários, representada por

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} n_1 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 \\ 0 & 0 & n_3 \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

onde n_1 , n_2 e n_3 são responsáveis pela translação da função analisada nas direções principais, e $\mathbf{Y} = [Y_1, Y_2, Y_3]^T$ é um vetor de valores constantes que determina o período da estrutura, isto é, as dimensões da célula base.

Na teoria da homogeneização, considera-se que o período \mathbf{Y} , quando comparado com as dimensões de domínio global, é muito pequeno. Dessa forma, funções características de materiais altamente heterogêneos irão variar muito rapidamente dentro de uma vizinhança muito pequena de um ponto \mathbf{x} , conforme ilustrado na Figura 2.1. Assim, deve-se considerar duas escalas diferentes de dependência para todas as quantidades: uma em escala de nível macroscópico ou global, representada por \mathbf{x} que indica variações lentas, e outra em nível microscópico ou local, representada por \mathbf{y} , a qual indica oscilações rápidas (HASSANI e HINTON, 1998). Na Figura 2.2 podem-se observar as escalas de dependência do material. A proporção entre as duas escalas é dada pelo parâmetro ε , conhecido como dimensão característica da heterogeneidade e definido pela equação

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}. \quad (2.3)$$

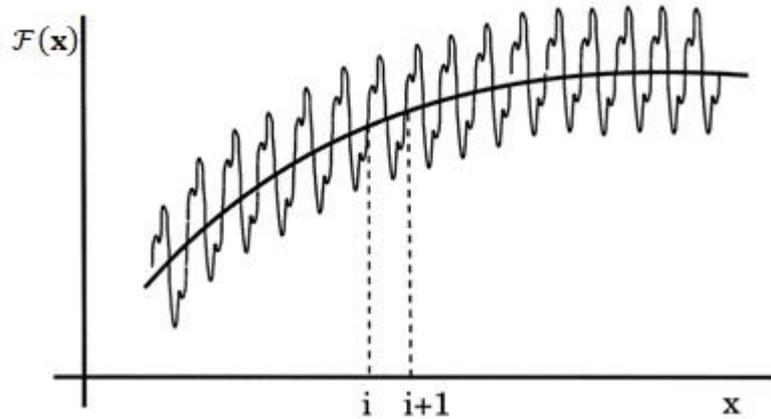


Figura 2.1 - Função representativa da variação de propriedades em um material heterogêneo. Fonte: Hassani e Hinton (1998).

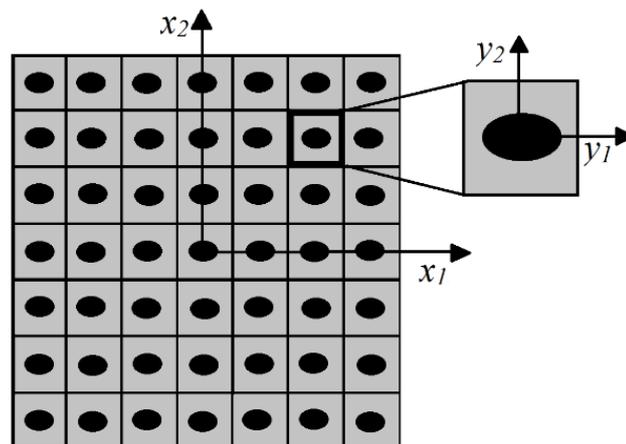


Figura 2.2 - Material periódico e célula unitária correspondente.

A variação do tensor constitutivo elástico na escala microscópica dificulta a análise precisa para esses materiais (GUTH, 2012). Apesar disso, as propriedades em escala macroscópica do material podem ser determinadas de forma aproximada utilizando o método de homogeneização. Esse método ignora a microestrutura na avaliação global, simplificando consideravelmente a análise (SIGMUND, 1994).

2.2 HOMOGENEIZAÇÃO

Por meio da teoria da elasticidade linear, as propriedades equivalentes de materiais com microestrutura periódica podem ser obtidas através da utilização do método da homogeneização por meio de expansão assintótica. Esse método fundamenta-se no fato de que

o tamanho de uma célula unitária, a qual se repete inúmeras vezes ao longo do domínio global, é muito menor que o tamanho representativo da estrutura global (NEVES, RODRIGUES e GUEDES, 2000).

Segundo Hollister e Kikushi (1994), o método da homogeneização é baseado em três pressupostos. O primeiro presume que o deslocamento (ou temperatura) possa ser escrito sob a forma de expansão assintótica. O segundo supõe que o material possa ser dividido em duas escalas, micro e macroescala, e que estas possam estar relacionadas através do parâmetro ε , conforme a Equação (2.3). O terceiro pressuposto é que os deslocamentos (ou temperaturas) nos limites da célula unitária sejam periódicos, ou seja, que tenham os mesmos valores em faces opostas da célula.

Assim, o método da homogeneização permite que a partir da avaliação do comportamento microscópico, ao nível da célula unitária através da expansão assintótica em duas ou mais escalas, seja obtido o comportamento macroscópico. Isso é realizado com o objetivo de reduzir drasticamente o esforço computacional, visto que a análise é realizada com apenas uma célula unitária e não com o domínio total. Sob o olhar matemático, a homogeneização assintótica se baseia em uma teoria de limites utilizada para substituir equações diferenciais com coeficientes rapidamente oscilantes, sob o pressuposto de periodicidade usando a expansão assintótica, por equações diferenciais com coeficientes constantes ou quase constantes (HASSANI e HINTON, 1998).

Desta forma, nesta seção é apresentada uma breve descrição das equações governantes e dos tensores homogeneizados para materiais periódicos. Maiores informações a respeito do equacionamento do método podem ser encontradas em Guth (2012), Muñoz-Rojas *et al.* (2010), Hassani e Hinton (1998), Hassani e Hinton (1999) e Guedes e Kikuchi (1989).

2.2.1 Homogeneização das propriedades elásticas

Partindo do pressuposto de que o campo de deslocamentos \mathbf{u} possa ser escrito sob a forma de expansão assintótica do material não homogêneo, tem-se

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{u}_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (2.4)$$

onde \mathbf{u}_1 são campos de deslocamentos periódicos em relação à coordenada \mathbf{y} , o que significa que eles produzem valores idênticos em lados opostos da célula unitária, e os subscritos 0 e 1

referem-se à macro e micro escalas, respectivamente. Considerando que não há trações nas fronteiras internas das células, o princípio dos trabalhos virtuais pode ser escrito como

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \in V_{\Omega}, \quad (2.5)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ representa o tensor de tensões, $\boldsymbol{\varepsilon}$ o tensor de deformações, \mathbf{b} as forças de corpo, \mathbf{t} as forças de superfície que agem nas fronteiras Γ do domínio Ω , $\delta \mathbf{u}$ o deslocamento virtual sofrido pela estrutura e V_{Ω} o conjunto de deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis.

A partir da Equação (2.5) e do desenvolvimento encontrado nas referências citadas, é possível obter a expressão que representa a escala macroscópica da célula,

$$\int_{\Omega} \partial_x \delta \mathbf{u}_0 : \mathbf{E}^H : \partial_x \mathbf{u}_0 d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u}_0 d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u}_0 d\Gamma = 0, \quad (2.6)$$

onde o operador ∂_x é

$$\partial_x = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(\cdot)_k}{\partial x_l} + \frac{\partial(\cdot)_l}{\partial x_k} \right) \quad (2.7)$$

e \mathbf{E}^H é o tensor constitutivo elástico homogeneizado, definido por

$$\mathbf{E}^H = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_Y \mathbf{E} : (\mathbf{I} - \partial_y \boldsymbol{\chi}) dY, \quad (2.8)$$

sendo \mathbf{I} o tensor identidade de quarta ordem, onde cada coluna representa a aplicação de um campo de deformação unitária, $\boldsymbol{\chi}$ é um tensor de segunda ordem que representa os deslocamentos da célula unitária, Y o período da célula e $|\mathbf{Y}|$ o volume total da célula (ou área para células em 2D).

Além de ser apresentado conforme a Equação (2.8), cada componente do tensor constitutivo elástico pode ser encontrada por

$$E_{ijkl}^H(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_Y \left(E_{ijkl} - E_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY, \quad (2.9)$$

onde os índices kl representam a direção de aplicação da carga e o termo χ_p^{kl} é uma função que é a solução da equação para o problema da célula unitária

$$\int_Y \partial_y \delta \mathbf{u}_1 : \mathbf{E} : \partial_y \boldsymbol{\chi} dY = \int_Y \partial_y \delta \mathbf{u}_1 : \mathbf{E} : \mathbf{I} dY. \quad (2.10)$$

Contudo, como é necessária apenas a derivada de $\boldsymbol{\chi}$ para resolver as equações até aqui apresentadas. Vale ressaltar que no limite, quando a dimensão característica da homogeneização ε , tende a zero, os problemas em micro e macro escalas estão desvinculados. Assim, a solução pode ser determinada após a obtenção de $\boldsymbol{\chi}$ através da Equação (2.10), do tensor elástico constitutivo homogeneizado, pela Equação (2.8) e, por fim, pela construção da equação macroscópica, dada pela Equação (2.6).

Utilizando o método dos elementos finitos obtém-se $\boldsymbol{\chi}$, de forma que

$$\mathbf{K} \boldsymbol{\chi} = \mathbf{P}, \quad (2.11)$$

onde \mathbf{K} é a matriz de rigidez homogeneizada global, determinada por

$$\mathbf{K} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY^e \quad (2.12)$$

e \mathbf{P} é uma matriz que abrange os casos de carga global resultantes do desenvolvimento da homogeneização

$$\mathbf{P} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} dY^e. \quad (2.13)$$

Cada coluna da matriz \mathbf{P} é um vetor de forças referente à deformação unitária que foi imposta em uma dada direção sobre a célula. O termo \mathbf{D} é a matriz constitutiva do elemento utilizado no sistema global de coordenadas, equivalente a matriz \mathbf{E} da Equação (2.8) conforme é mostrado no APÊNDICE A, e \mathbf{B} é a matriz composta pelas derivadas das funções de interpolação que descrevem o campo de deslocamentos do elemento no sistema global de coordenadas. A Equação (2.12) e a Equação (2.13) estão representadas sob a forma matricial em notação compacta, conforme também foi utilizada pelos autores Yan *et al.* (2006).

O sistema linear da Equação (2.11) é um problema de valor de contorno que deve ser resolvido a partir de uma discretização apropriada no domínio da célula unitária. Para isso, é necessária a definição de condições de contorno essenciais e, como no procedimento da homogeneização os problemas devem respeitar as considerações de periodicidade, é introduzida uma restrição cinemática na célula unitária. Essa restrição de periodicidade exige que o campo de deslocamentos tenha os mesmos valores em faces opostas da célula unitária. Assim, considerando condições de contorno periódicas na fronteira, assume-se que a célula a ser analisada está longe do limite do domínio, onde os efeitos locais, como as heterogeneidades de tensão local, efeitos de tamanho e borda, não ocorrem (ARABNEJAD e PASINI, 2013).

2.2.2 Homogeneização das propriedades de condutividade térmica

Da mesma forma que estão expostas as equações para as propriedades mecânicas, nesta subseção é apresentada uma síntese do desenvolvimento das equações homogeneizadas para problemas com aplicações em transferência de calor (condução térmica). No entanto, uma abordagem energética é utilizada ao invés do princípio dos trabalhos virtuais.

Assim, define-se a condutividade térmica \mathbf{Kt} como periódica na célula, a qual pode ser representada por

$$\mathbf{Kt}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{Kt}(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{Y}). \quad (2.14)$$

Tomando o campo de temperaturas, T , na célula e expandindo-o assintoticamente, tem-se

$$T = T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = T_0(\mathbf{x}) + \varepsilon T_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (2.15)$$

onde T_1 é periódica na dimensão \mathbf{Y} da célula.

Seguindo a mesma lógica utilizada para determinar o tensor constitutivo elástico, a condutividade térmica homogeneizada pode ser encontrada como apresentado em Guth (2012) e Muñoz-Rojas *et al.* (2010) na forma

$$\mathbf{Kt}^H = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_{\mathbf{Y}} \mathbf{Kt}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot [\mathbf{I} - \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y})]^T d\mathbf{Y}, \quad (2.16)$$

onde $\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ são as temperaturas características da célula unitária, já $\nabla_{\mathbf{y}}$ é definido por

$$(\nabla_{\mathbf{y}})_i(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial y_i}. \quad (2.17)$$

Além disso, cada termo do tensor condutividade térmica pode ser encontrado por

$$Kt_{ij}^H = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_{\mathbf{Y}} \left(Kt_{ij} - Kt_{ip} \frac{\partial R^j}{\partial y_p} \right) dY, \quad (2.18)$$

sendo que $\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ pode ser obtido por meio de

$$\frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_{\mathbf{Y}} [\mathbf{I} - \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y})]^T \cdot \mathbf{Kt}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \delta \mathbf{T}_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = 0. \quad (2.19)$$

No sentido de obter as temperaturas características da célula unitária, $\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, é necessário resolver a Equação (2.19). Para isso, utiliza-se o método dos elementos finitos, onde tem-se um sistema semelhante ao descrito na Equação (2.11),

$$\mathbf{C}\mathbf{R} = \mathbf{Q}, \quad (2.20)$$

onde \mathbf{C} é a matriz de rigidez homogeneizada no sistema global e \mathbf{Q} é a matriz que abrange os casos de carga térmica global que decorrem do desenvolvimento da homogeneização. Cada coluna da matriz \mathbf{Q} está relacionada a um vetor de gradiente térmico imposto em determinada direção da célula unitária.

Os termos \mathbf{C} e \mathbf{Q} são

$$\mathbf{C} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{Kt} \mathbf{B} dY^e \quad (2.21)$$

e

$$\mathbf{Q} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{Kt} dY^e, \quad (2.22)$$

onde \mathbf{K} é a matriz constitutiva térmica do elemento utilizado no sistema global de coordenadas. A Equação (2.21) e a Equação (2.22) também estão representadas sob a forma matricial em notação compacta, conforme foi utilizada pelos autores Yan *et al.* (2006).

Semelhante à forma que se alcançou os deslocamentos da célula unitária, $\boldsymbol{\chi}$, as condições de contorno periódicas devem ser aplicadas nas fronteiras da célula, ou seja, em lados opostos da célula as temperaturas devem ser iguais, a fim de encontrar a solução para a Equação (2.20) encontrando as temperaturas características \mathbf{R} .

2.3 NOVA IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DA HOMOGENEIZAÇÃO ASSINTÓTICA (NIAH)

A fundamentação matemática da nova implementação do método de homogeneização assintótica (NIAH), proposta por Cheng, Cai e Xu (2013), é baseada no método tradicional, AH. Porém, podem ser empregados softwares comerciais de elementos finitos, o que possibilita a utilização de qualquer tipo de elemento ou técnica disponível nessas ferramentas para a modelagem da célula unitária e obtenção das propriedades efetivas do material.

Iniciando a realização dessa implementação, reescreve-se a Equação (2.13) e a matriz de rigidez, Equação (2.12), em função dos campos de deformações unitários.

$$\mathbf{f}^{kl} = \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{E} \boldsymbol{\varepsilon}^{0(kl)} dY, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{K} = \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} dY, \quad (2.24)$$

onde \mathbf{f}^{kl} é o vetor de forças globais, \mathbf{E} é a matriz de rigidez constitutiva e $\boldsymbol{\varepsilon}$ corresponde a três (2D) ou seis (3D) campos de deformações unitários. Para obter o vetor de forças da Equação (2.23) e a matriz de rigidez da Equação (2.24) é necessário a aplicação dos campos de deformação, conforme descritos abaixo, sob condições de contorno periódicas. Para problemas em duas dimensões (2D) esses campos de deformações para o elemento de barra são escritos como

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{12} \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{0(11)} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{0(22)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{0(12)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}. \quad (2.25)$$

Agora, considerando que $\boldsymbol{\chi}^{0(kl)}$ é um vetor de deslocamentos nodais correspondentes aos campos de deformações unitárias $\boldsymbol{\varepsilon}^{0(kl)}$, reescreve-se a Equação (2.23) em função dos deslocamentos nodais e tem-se

$$\begin{aligned}\mathbf{f}^{kl} &= \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} \boldsymbol{\chi}^{0(kl)} dY \\ \mathbf{f}^{kl} &= \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} dY \cdot \boldsymbol{\chi}^{0(kl)} \\ \mathbf{f}^{kl} &= \mathbf{K} \boldsymbol{\chi}^{0(kl)}.\end{aligned}\quad (2.26)$$

Essa alteração expressa que o vetor de forças pode ser determinado pela multiplicação entre a matriz de rigidez e o campo de deslocamentos $\boldsymbol{\chi}^{0(kl)}$ decorrente da deformação homogênea $\boldsymbol{\varepsilon}^{0(kl)}$. No software comercial, aplica-se os deslocamentos nodais $\boldsymbol{\chi}^{0(kl)}$ em cada nó, realiza-se a análise estática e obtém-se o vetor de forças \mathbf{f}^{kl} diretamente através do software.

No caso bidimensional, os campos de deslocamentos correspondentes aos campos de deformações da Equação (2.25) para elemento de barra são

$$\boldsymbol{\chi}_{\text{nó}} = \begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\chi}_{\text{nó}}^{0(11)} = \begin{Bmatrix} x \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\chi}_{\text{nó}}^{0(22)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ y \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\chi}_{\text{nó}}^{0(12)} = \begin{Bmatrix} 0.5y \\ 0.5x \end{Bmatrix}, \quad (2.27)$$

onde x e y , representam as coordenadas nodais. Como outra alternativa o campo $\boldsymbol{\chi}_{\text{nó}}^{0(12)}$ pode ser reescrito como

$$\boldsymbol{\chi}_{\text{nó}}^{0(12)} = \begin{Bmatrix} y \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (2.28)$$

Nota-se que, a primeira etapa para realização do procedimento da NIAH compreende a construção do modelo da célula unitária por elementos finitos, a aplicação dos campos de deslocamentos unitários $\boldsymbol{\chi}^{0(kl)}$ (denominados deslocamentos prescritos) em cada nó da célula e a realização da análise estática pelo software para obter as forças de reações nodais \mathbf{f}^{kl} .

Posteriormente, na segunda etapa, as reações nodais \mathbf{f}^{kl} são aplicadas em seus respectivos nós com as condições de contorno periódicas e realiza-se a análise estática novamente. Como resultado dessa análise, são obtidos os campos de deslocamentos característicos $\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{kl}$. As condições de contorno periódicas, são aplicadas como restrições nos deslocamentos diretamente no software comercial de elementos finitos, conforme é descrito na Seção 2.4. E por fim, na terceira etapa, aplicam-se em cada nó os deslocamentos característicos

$\tilde{\chi}^{kl}$, realiza-se novamente a análise estática e obtêm-se as forças nodais $\mathbf{f}^{*(kl)}$ correspondentes a aplicação dos deslocamentos característicos.

Dessa forma, com os valores dos deslocamentos e das forças nodais, o tensor elástico homogeneizado pode ser obtido a partir de

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} (\chi^{0(ij)} - \tilde{\chi}^{ij})^T (\mathbf{f}^{kl} - \mathbf{f}^{*(kl)}). \quad (2.29)$$

A Figura 2.3 apresenta o fluxograma desse procedimento, o qual também pode ser realizado a fim de se obter o tensor de condutividade térmica homogeneizada. Contudo, são aplicados campos de temperaturas e fluxos de calor para realizar a análise.

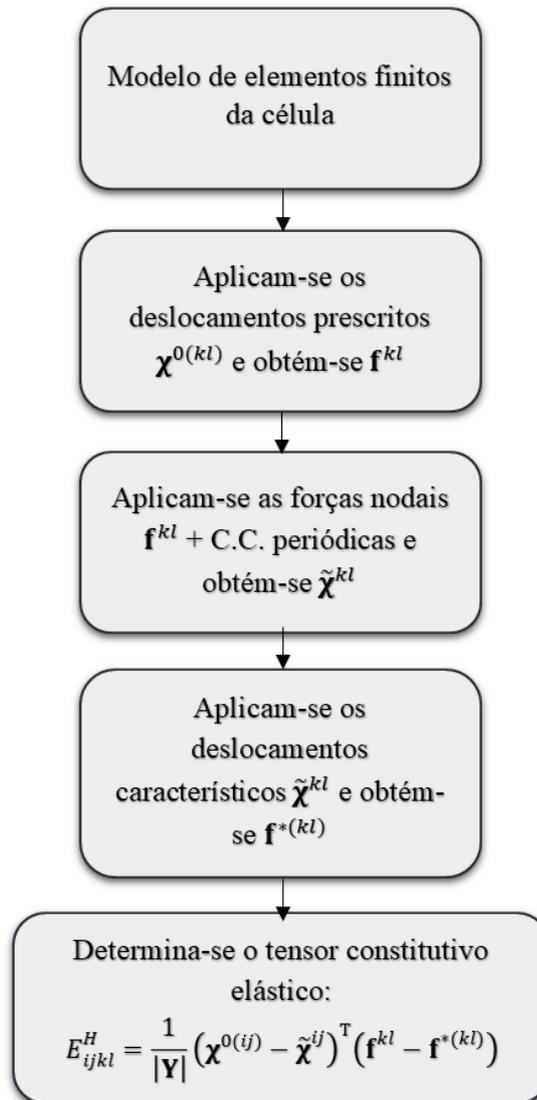


Figura 2.3 - Fluxograma do método NIAH na obtenção do tensor constitutivo elástico.

Reescrevendo a Equação (2.22) referente aos casos de cargas globais térmicas para o método da NIAH, tem-se

$$\mathbf{q}^j = \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{Kt} \nabla \mathbf{T}^{0(j)} dY, \quad (2.30)$$

onde \mathbf{q}^j é o vetor de cargas térmicas globais, \mathbf{Kt} é a condutividade térmica e $\nabla \mathbf{T}^{0(j)}$ é o gradiente térmico unitário. Para o caso bidimensional, os gradientes térmicos para o elemento de barra são escritos como

$$\nabla \mathbf{T}^{0(j)} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{Bmatrix}, \quad \nabla \mathbf{T}^{0(1)} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \nabla \mathbf{T}^{0(2)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}. \quad (2.31)$$

Posteriormente, considerando que $\mathbf{R}^{0(j)}$ representa os campos de temperatura correspondentes aos gradientes térmicos unitários e o substituindo-o na Equação (2.30), tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^j &= \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{Kt} \mathbf{B} \mathbf{R}^{0(j)} dY \\ &= \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{Kt} \mathbf{B} dY \mathbf{R}^{0(j)} \\ \mathbf{q}^j &= \mathbf{Q} \mathbf{R}^{0(j)}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde os campos de temperaturas prescritas para o caso bidimensional são

$$\mathbf{R}^{0(1)} = \begin{Bmatrix} x \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{R}^{0(2)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ y \end{Bmatrix}, \quad (2.33)$$

sendo x e y as coordenadas nodais de cada nó da célula.

Semelhante ao procedimento realizado para encontrar o tensor elástico homogeneizado pela nova implementação, faz-se para determinar o tensor térmico. No entanto, aplicam-se os campos de temperatura $\mathbf{R}^{0(j)}$, realiza-se análise térmica e obtém-se o fluxo de calor \mathbf{q}^j correspondente diretamente a partir dos resultados de saída do software.

Assim, o processo para a implementação da NIAH para a análise térmica se dá inicialmente pela aplicação dos campos de temperatura nodais $\mathbf{R}^{0(j)}$ para se obter os fluxos de calor \mathbf{q}^j correspondentes. Posteriormente, aplica-se o fluxo de calor \mathbf{q}^j obtido, em cada nó,

juntamente com as condições de contorno periódicas e obtêm-se as temperaturas características $\tilde{\mathbf{R}}^{*(j)}$ como resultado de saída do software. Como última etapa, aplicam-se as temperaturas características $\tilde{\mathbf{R}}^{*(j)}$ em cada nó da célula e se obtém o fluxo de calor correspondente \mathbf{q}^{*j} .

Dessa forma, com os valores das temperaturas e dos fluxos de calor, a condutividade térmica homogeneizada é determinada por

$$Kt_{ij}^H = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} (\mathbf{R}^{0(i)} - \tilde{\mathbf{R}}^{*(i)})^T (\mathbf{q}^j - \mathbf{q}^{*j}), \quad (2.34)$$

onde $\mathbf{R}^{0(i)}$ e $\tilde{\mathbf{R}}^{*(i)}$ são as temperaturas prescritas e características, respectivamente, e \mathbf{q}^j e \mathbf{q}^{*j} são os fluxos de calor correspondentes às temperaturas. A Figura 2.4, ilustra o procedimento para obtenção do tensor térmico.

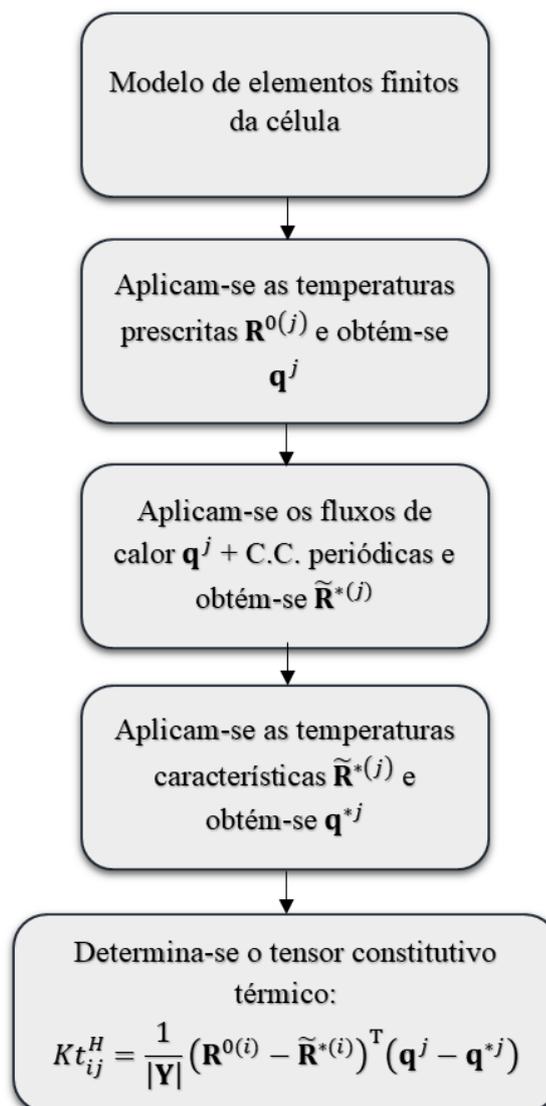


Figura 2.4 - Fluxograma do método NIAH na obtenção do tensor constitutivo térmico.

No método AH, para se obter o vetor de forças, Equação (2.13) e o vetor de cargas térmicas, Equação (2.18) é preciso realizar a integração das equações para cada elemento. Isso indica que todos os detalhes das matrizes relacionadas aos elementos, como matriz constitutiva e matriz deslocamento-deformação, devem ser conhecidos. Assim, diferentes tipos de elementos (elemento sólido, elemento de barra, elemento de viga e elemento de casca) levarão a matrizes diferentes e, conseqüentemente, à construção de códigos diferentes.

A dificuldade encontrada na implementação numérica do método AH por elementos finitos tem levado somente a utilização de elementos sólidos 2D e 3D. Isso se dá ao fato, de que a utilização de outros tipos de elementos aumentarão a dificuldade no trabalho de derivação das equações. Porém, mesmo utilizando apenas esses dois tipos de elementos na discretização de células unitárias com microestruturas complexas, haverá um número muito grande de elementos, e a resolução dessas equações pode ser demorada (CHENG, CAI e XU, 2013).

Nesta nova metodologia, os vetores de forças, deslocamentos, temperaturas e fluxos de calor, podem ser obtidos diretamente através dos resultados de saída do software comercial de elementos finitos. Além disso, qualquer técnica ou elemento disponível no software possa ser utilizado para modelar e discretizar a célula unitária.

A NIAH tem sido utilizada na obtenção de propriedades elásticas e térmicas de materiais periódicos em diversos trabalhos, como exemplos são citados: o trabalho de Cheng, Cai e Xu (2013), no qual foi desenvolvida a nova metodologia, e foi utilizada para obter as propriedades elásticas de uma célula quadrada com furo central retangular, material periódico treliçado octaédrico e material treliçado com núcleo octaédrico oco. No trabalho de Cai, Xu e Cheng (2014), desenvolveu-se a NIAH para aplicações em placas e estruturas de casca e foi utilizada na obtenção das propriedades de uma estrutura *honeycomb* com núcleo periódico típico hexagonal e em painel sanduíche com núcleo periódico treliçado.

No estudo realizado por Wang *et al.* (2015), o método também foi utilizado para determinar as propriedades efetivas de placas rígidas hierárquicas e de seus reforços. Nos trabalhos de Yi *et al.* (2015) e Yi, Cheng e Xu (2016) os autores estenderam o método a estruturas de vigas com periodicidade ao longo do eixo. Já no trabalho de Xu, Cheng e Yi (2016), foi aplicada em estruturas de vigas de Timoshenko para avaliação da rigidez ao cisalhamento. No trabalho de Zhang, Shang e Liu (2017), o método foi desenvolvido para prever os coeficientes efetivos de expansão térmica para materiais compósitos periódicos reforçados com fibra. Além destes trabalhos, a NIAH foi utilizada para prever as propriedades elásticas de nanocompósitos de PVC no trabalho de Zhao *et al.* (2016). No trabalho de Cheng e Xu (2016), foi utilizada na obtenção das propriedades para estruturas de placas periódicas.

Nos trabalhos de Wang *et al.* (2017a), Wang *et al.* (2016), Hao *et al.* (2016a) e Hao *et al.* (2016b) foi utilizada para obter as propriedades elásticas efetivas de estruturas de cascas rígidas (ou “*shell*”) e no trabalho de Wang *et al.* (2017b) NIAH foi utilizada para encontrar as propriedades dos reforços de estruturas de cascas rígidas.

2.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS

Condições de contorno periódicas podem ser utilizadas para simular grandes sistemas, simplesmente pela modelagem de um elemento de volume representativo. São frequentemente aplicadas na modelagem de materiais para eliminar a presença de superfícies e evitar grande quantidade de células (no caso de materiais celulares). Assim, quando aplicadas em uma célula (por exemplo), as condições de contorno periódicas conseguem representar um sistema de estrutura infinita com padrão periódico, dado pela repetição da célula ao longo da estrutura (Wu *et al.*, 2014).

Dessa forma, uma vez que o conjunto de células unitárias repetidas representa um corpo físico contínuo, duas quantidades devem ser cumpridas nos nós das fronteiras das células unitárias vizinhas. A primeira condição é que os deslocamentos devem ser contínuos, ou seja, as células unitárias adjacentes não podem ser separadas ou transpassar nos limites umas das outras, após a deformação. A segunda condição implica que a distribuição de tensão nos nós das fronteiras paralelas opostas de uma célula unitária devem ser as mesmas. Sendo assim, a célula que respeita essas duas condições pode ser dita como um corpo fisicamente contínuo (LUTHER, 2005).

Considerando uma estrutura periódica constituída por um conjunto de células unitárias repetidas, o campo de deslocamentos dessa estrutura periódica pode ser representado como

$$u_i(x_1, x_2, x_3) = \varepsilon_{ij}^0 x_j + u_i^*(x_1, x_2, x_3), \quad (2.35)$$

onde ε_{ij}^0 é o tensor deformação global da estrutura periódica, x_j é um campo de coordenadas e u_i^* é a parte periódica das componentes de deslocamento, geralmente desconhecida e dependente dos casos de cargas globais aplicadas.

A Equação (2.35) atende o primeiro requisito para que o material seja considerado contínuo. No entanto, não pode ser aplicado diretamente nos nós dos limites da célula, visto que a parte periódica da equação $u_i^*(x_1, x_2, x_3)$ é geralmente desconhecida. Dessa forma, para qualquer célula unitária, os campos de deslocamentos devem sempre aparecer em pares

paralelos (LUTHER, 2005). Assim, os deslocamentos para um par de nós encontrados nos limites paralelos e opostos da célula pode ser escrito como

$$u_i^{k+} = \varepsilon_{ij}^0 x_j^{k+} + u_i^* \quad (2.36)$$

e

$$u_i^{k-} = \varepsilon_{ij}^0 x_j^{k-} + u_i^*, \quad (2.37)$$

onde os índices k^+ e k^- identificam o k -ésimo par de nós dos limites paralelos de uma célula. Vale ressaltar que $u_i^*(x_1, x_2, x_3)$ é o mesmo valor para os dois lados opostos da célula (devido a periodicidade), então a diferença entre as duas Equações (2.36) e (2.37) é

$$u_i^{k+} - u_i^{k-} = \varepsilon_{ij}^0 (x_j^{k+} - x_j^{k-}) = \varepsilon_{ij}^0 \Delta x_j^k. \quad (2.38)$$

O parâmetro Δx_j^k é constante para cada par de nós, o que torna todo o lado direito da Equação (2.38) constante. Assim, as equações apresentadas podem ser facilmente aplicadas na análise de elementos finitos como equações de restrição de deslocamentos nodais (LUTHER, 2005).

Como os deslocamentos nas direções x e y em lados opostos devem ser iguais, o termo Δx_j^k é igual a zero, e assim a Equação (2.38) fica

$$u_i^{k+} - u_i^{k-} = 0. \quad (2.39)$$

No entanto, tais condições de deslocamentos não garantem a segunda condição. Dessa forma, para se garantir a continuidade dos campos de tensões, é necessário a aplicação das condições

$$\sigma_n^{k+} - \sigma_n^{k-} = 0 \quad (2.40)$$

e

$$\sigma_t^{k+} - \sigma_t^{k-} = 0 \quad (2.41)$$

onde σ_n e σ_t são as tensões normal e de cisalhamento para o k par de nós paralelos opostos nos limites da célula unitária. Porém, analisando o problema através da utilização do método de elementos finitos baseado em deslocamentos, a aplicação de apenas a Equação (2.38) pode garantir a unicidade da solução e satisfazer automaticamente a segunda condição (LUTHER, 2005).

Utilizando softwares comerciais, as condições de contorno periódicas podem ser aplicadas como restrições dentro do próprio software. De modo a exemplificar a aplicação dessas em um software de elementos finitos, toma-se a célula unitária representativa da Figura 2.5 e os nós 1, 2 e 4 como nós de referência. A partir dos nós de referência, os demais podem ser restritos. O nó 5 é independente, pois não é um nó localizado no limite da célula. Os nós 3, 7 e 9 devem ter a mesma propriedade que o nó 1, ou seja devem estar restritos ao nó 1. O nó 6 deve ter a mesma propriedade que o nó 4 e o nó 8 deve ter propriedade igual ao nó 2. Quando afirma-se, por exemplo, que o nó 6 deve ter a mesma propriedade de deslocamento que o nó 4, exige-se que as componentes do deslocamento do nó 6, u_6 e v_6 devem ser iguais ao nó 4, u_4 e v_4 .

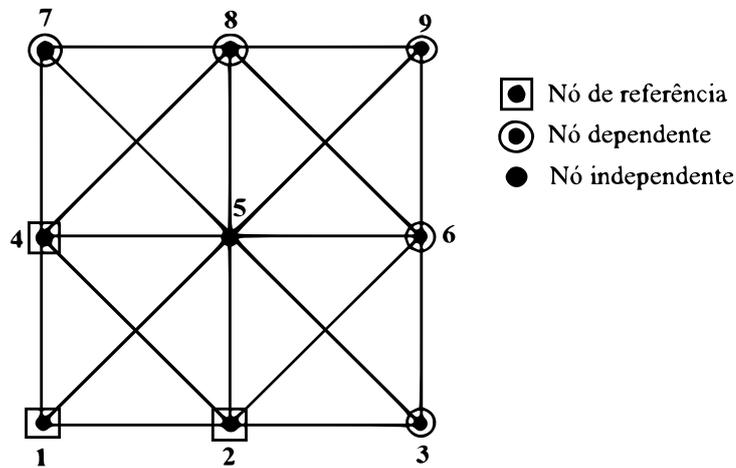


Figura 2.5 - Exemplo de aplicação de condições de contorno periódicas.

3 RELAÇÕES CONSTITUTIVAS

3.1 PARÂMETROS CONSTITUTIVOS

Os parâmetros constitutivos dependem das propriedades do material em questão. Uma propriedade fundamental para alguns materiais é a isotropia, a qual relaciona os diferentes módulos elásticos encontrados em diferentes orientações do material. Por exemplo, materiais como minerais cristalinos, madeira e compósitos reforçados com fibras apresentam diferentes módulos elásticos em diferentes direções. Esses são ditos anisotrópicos. No entanto, vale ressaltar que para materiais anisotrópicos, podem existir direções particulares nas quais as propriedades são iguais. Essas direções indicam as simetrias desses materiais. Porém, para vários outros materiais, a orientação da microestrutura cristalina e dos grãos é aleatória. Dessa forma, as propriedades elásticas macroscópicas são essencialmente as mesmas em todas as direções. E para esses materiais com simetrias completas em todas as direções dá-se o nome de materiais isotrópicos (SADD, 2009).

Assim, para o caso tridimensional, o tensor elástico para materiais isotrópicos é dado por

$$\mathbf{E}^{(3D)} = \begin{bmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ E_{2211} & E_{2222} & E_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ E_{3311} & E_{3322} & E_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{3131} \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

onde os termos $E_{1111} = E_{2222} = E_{3333}$, $E_{1122} = E_{1133} = E_{2233}$ e $E_{1212} = E_{2323} = E_{3131}$. Além disso, os termos $E_{1122} = E_{2211}$, $E_{1133} = E_{3311}$, $E_{2233} = E_{3322}$, ou seja o tensor elástico é simétrico. E para o caso bidimensional o tensor é igual a

$$\mathbf{E}^{(2D)} = \begin{bmatrix} E_{1111} & E_{1122} & 0 \\ E_{2211} & E_{2222} & 0 \\ 0 & 0 & E_{1212} \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

onde os termos $E_{1111} = E_{2222}$ e $E_{1122} = E_{2211}$.

A definição do tensor elástico para materiais isotrópicos leva a definição de cinco constantes λ , G , E , ν e B , que são a constante de Lamé, o módulo de cisalhamento, o módulo

elástico, o coeficiente de Poisson e o módulo volumétrico¹, respectivamente. Apesar das cinco constantes serem relacionadas entre si, deve-se lembrar que apenas duas são necessárias para caracterizar o material. E se apenas duas são dadas, as outras três podem ser determinadas (SADD, 2009). Desta forma, cada componente do tensor elástico pode ser reescrito em função destas constantes, como por exemplo a Equação (3.3) é escrita em função do coeficiente de Poisson e do módulo elástico do material, através da relação tensão-deformação de um material linear elástico

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{Bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ & & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \frac{1-2\nu}{2} & 0 & 0 \\ & \text{sim} & & & \frac{1-2\nu}{2} & 0 \\ & & & & & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \end{Bmatrix}. \quad (3.3)$$

Já para o caso bidimensional sujeito ao estado plano de tensões, tem-se

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \frac{E}{(1-\nu^2)} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \gamma_{12} \end{Bmatrix}. \quad (3.4)$$

Pode-se representar também os parâmetros constitutivos em função dos componentes do tensor elástico, conforme apresentados pela relação tensão-deformação. Para o caso de materiais isotrópicos tridimensionais:

- Módulo de cisalhamento:

$$G = E_{1212}. \quad (3.5)$$

- Módulo Volumétrico:

$$B^{3D} = \frac{E_{1111} + 2E_{1122}}{3}. \quad (3.6)$$

¹ Normalmente o módulo volumétrico é representado pela letra K , mas para evitar ambiguidade com o tensor térmico utiliza-se, neste trabalho, a letra B .

- Coeficiente de Poisson:

$$\nu^{3D} = \frac{E_{1122}}{E_{1111} + E_{1122}}. \quad (3.7)$$

Para o caso de materiais isotrópicos bidimensionais:

- Módulo de cisalhamento:

$$G = E_{1212}. \quad (3.8)$$

- Módulo Volumétrico:

$$B^{2D} = \frac{E_{1111} + E_{1122}}{2}. \quad (3.9)$$

- Coeficiente de Poisson:

$$\nu^{2D} = \frac{E_{1122}}{E_{1111}}. \quad (3.10)$$

A seguir é apresentado a definição de cada parâmetro constitutivo.

3.1.1 Módulo de elasticidade ou módulo de Young (E)

A aplicação de uma tensão (σ) em uma determinada direção resulta numa deformação unitária (ε) nessa mesma direção e o parâmetro que indica a relação entre essas duas grandezas é o módulo de elasticidade ou módulo de Young, E (GUTH, 2012).

Um corpo submetido a tração uniaxial na direção 1 a relação linear entre a tensão e a deformação é dada por

$$\sigma_{11} = E \varepsilon_{11}. \quad (3.11)$$

A aplicação de uma tensão normal positiva (tração), sempre resultará em um alongamento (deformação positiva) e o módulo de elasticidade sempre será positivo.

3.1.2 Coeficiente de Poisson (ν)

O coeficiente de Poisson, ν , é definido como a relação entre a deformação transversal e a deformação axial, resultantes da aplicação de uma carga uniaxial em um corpo. Por exemplo, se uma tensão é aplicada na direção 1, para um material isotrópico, o coeficiente de Poisson é determinado por

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} = -\frac{\varepsilon_{33}}{\varepsilon_{11}}. \quad (3.12)$$

O sinal negativo foi inserido na relação para compensar o fato de que as deformações transversal e axial têm sinais opostos. Para materiais comuns, o coeficiente de Poisson possui valores positivos, pois a deformação axial em um corpo submetido a carga axial será positiva e a deformação transversal será negativa (porque a largura do corpo diminui). Ou como no caso da aplicação de carga de compressão, tem-se a situação oposta, onde o corpo tende a diminuir de tamanho (deformação axial negativa) e a ficar mais largo (deformação transversal positiva) (GERE, 2001).

Segundo Jasiuk, Chen e Thorpe (1992), os limites do coeficiente de Poisson são

$$-1 < \nu < 1 \quad (3.13)$$

e

$$-1 < \nu < 1/2, \quad (3.14)$$

para os casos bi e tridimensional, respectivamente.

Em casos onde o coeficiente de Poisson é negativo, o material se expande em todas as direções quando tracionado em apenas uma, aumentando seu volume (EVANS, 1991). Estes são denominados materiais auxéticos e, quando comparados com os materiais tradicionais, apresentam algumas características superiores, como por exemplo alta resistência a indentação, maior resistência a fratura e melhores propriedades de absorção de vibração (GRIMA e GATT, 2010).

3.1.3 Módulo de cisalhamento (G)

O módulo de elasticidade transversal ou módulo de cisalhamento, G , é definido como a tensão transversal necessária para causar uma deformação angular unitária (GUTH, 2012). É obtida pela Lei de Hooke para tensões e deformações em cisalhamento, dada pela equação

$$\sigma_{12} = G\gamma_{12}. \quad (3.15)$$

O módulo de cisalhamento de qualquer material é menor que a metade, contudo, maior que um terço do módulo de elasticidade E do material em questão (BEER *et al.*, 2011).

3.1.4 Módulo volumétrico (B)

O módulo volumétrico ou rigidez volumétrica, representa a proporção de pressão (ou tensão hidrostática, σ_H) necessária para causar a dilatação volumétrica do material (ε_v), essa relação é dada por

$$B = \frac{\sigma_H}{\varepsilon_v}. \quad (3.16)$$

3.2 CONDUTIVIDADE TÉRMICA (k)

O fluxo de calor em materiais sólidos está associado com as diferenças de temperatura dentro do material. Esse processo é conduzido pela Lei de Fourier da condução de calor, que é a relação o vetor de fluxo de calor q e o gradiente de temperatura ∇T (SADD, 2009). Esta teoria formula a seguinte relação

$$q_i = -k_{ij} \nabla T_{,j}, \quad (3.17)$$

onde k_{ij} é o tensor condutividade térmica do material. Lembrando que o tensor é simétrico, ou seja, $k_{ij} = k_{ji}$ e, para o caso isotrópico, $k_{ij} = k\delta_{ij}$, onde o δ_{ij} é o tensor delta de Kronecker e assim tem-se

$$q_i = -k \nabla T_{,i}. \quad (3.18)$$

Dessa forma, o tensor condutividade térmica na forma matricial, para o caso tridimensional é

$$\mathbf{Kt}^{3D} = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

onde

$$k^{3D} = Kt_{11} = Kt_{22} = Kt_{33}. \quad (3.20)$$

Para o caso bidimensional

$$\mathbf{Kt}^{2D} = \begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

onde

$$k^{2D} = Kt_{11} = Kt_{22}. \quad (3.22)$$

3.3 DIAGRAMAS POLARES DAS COMPONENTES TENSORIAIS

A representação das componentes dos tensores elástico e térmico por diagramas polares visa demonstrar o comportamento de cada propriedade em diferentes orientações, visto que apenas pela representação matricial esse comportamento não é evidente.

Assim, a partir de um tensor elástico \mathbf{E} dado em um sistema de referência (x, y, z) , pode-se reescrever este mesmo tensor em outro sistema de referência, agora representado por \mathbf{E}' , através da relação

$$\mathbf{E}' = \mathbf{T}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{T}^{-1}, \quad (3.23)$$

onde \mathbf{T} é a matriz de transformação dada por

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & n_1^2 & l_1 m_1 & m_1 n_1 & n_1 l_1 \\ l_2^2 & m_2^2 & n_2^2 & l_2 m_2 & m_2 n_2 & n_2 l_2 \\ l_3^2 & m_3^2 & n_3^2 & l_3 m_3 & m_3 n_3 & n_3 l_3 \\ 2l_1 l_2 & 2m_1 m_2 & 2n_1 n_2 & l_1 m_2 + l_2 m_1 & m_1 n_2 + m_2 n_1 & n_1 l_2 + n_2 l_1 \\ 2l_2 l_3 & 2m_2 m_3 & 2n_2 n_3 & l_2 m_3 + l_3 m_2 & m_2 n_3 + m_3 n_2 & n_2 l_3 + n_3 l_1 \\ 2l_3 l_1 & 2m_3 m_1 & 2n_3 n_1 & l_3 m_1 + l_1 m_3 & m_3 n_1 + m_1 n_3 & n_3 l_1 + n_1 l_3 \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

sendo l_i , m_i e n_i são os cossenos diretores entre os eixos (x', y', z') e (x, y, z) definidos por Saad (2009) como

$$\begin{bmatrix} l_1 & m_1 & n_1 \\ l_2 & m_2 & n_2 \\ l_3 & m_3 & n_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha_{x'x}) & \cos(\alpha_{x'y}) & \cos(\alpha_{x'z}) \\ \cos(\alpha_{y'x}) & \cos(\alpha_{y'y}) & \cos(\alpha_{y'z}) \\ \cos(\alpha_{z'x}) & \cos(\alpha_{z'y}) & \cos(\alpha_{z'z}) \end{bmatrix}, \quad (3.25)$$

onde $\alpha_{x'x}$ é o ângulo entre os eixo x' e x .

Para o caso de rotação dos eixos x e y a um ângulo α (Figura 3.1). A matriz de cossenos diretores é dada por

$$\begin{bmatrix} l_1 & m_1 & n_1 \\ l_2 & m_2 & n_2 \\ l_3 & m_3 & n_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

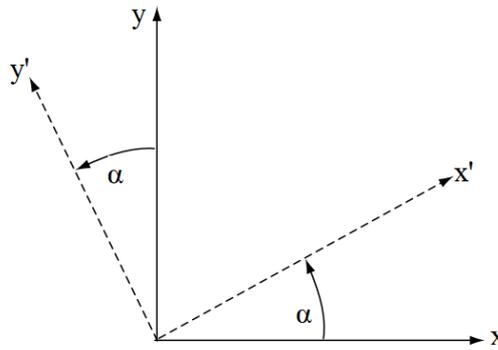


Figura 3.1 - Rotação do plano xy a um ângulo α .

Desta forma, para o caso de rotação do plano xy as matrizes de transformação \mathbf{T} para os casos tridimensional e bidimensional são (GUTH, 2012)

$$\mathbf{T}_{xy}^{3D} = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & 0 & l_1 m_1 & 0 & 0 \\ l_2^2 & m_2^2 & 0 & l_2 m_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2l_1 l_2 & 2m_1 m_2 & 0 & l_1 m_2 + l_2 m_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_2 n_3 & n_3 l_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_1 n_3 & n_3 l_1 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

e

$$\mathbf{T}_{xy}^{2D} = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & l_1 m_1 \\ l_2^2 & m_2^2 & l_2 m_2 \\ 2l_1 l_2 & 2m_1 m_2 & l_1 m_2 + l_2 m_1 \end{bmatrix}, \quad (3.28)$$

respectivamente.

Assim, pode-se obter as componentes rotacionadas em ângulos de 0 a 360°. A Figura 3.2 mostra o diagrama polar da componente E_{1111} rotacionada e normalizada pela componente

máxima de E_{1111} . Para materiais isotrópicos, o diagrama polar apresenta uma circunferência com raio unitário (representada pela linha azul na Figura 3.2), qual é associado ao valor máximo da componente. Desvios no comportamento circunferencial do diagrama polar, representam o grau e a direção do comportamento anisotrópico do material (TROMANS, 2011).

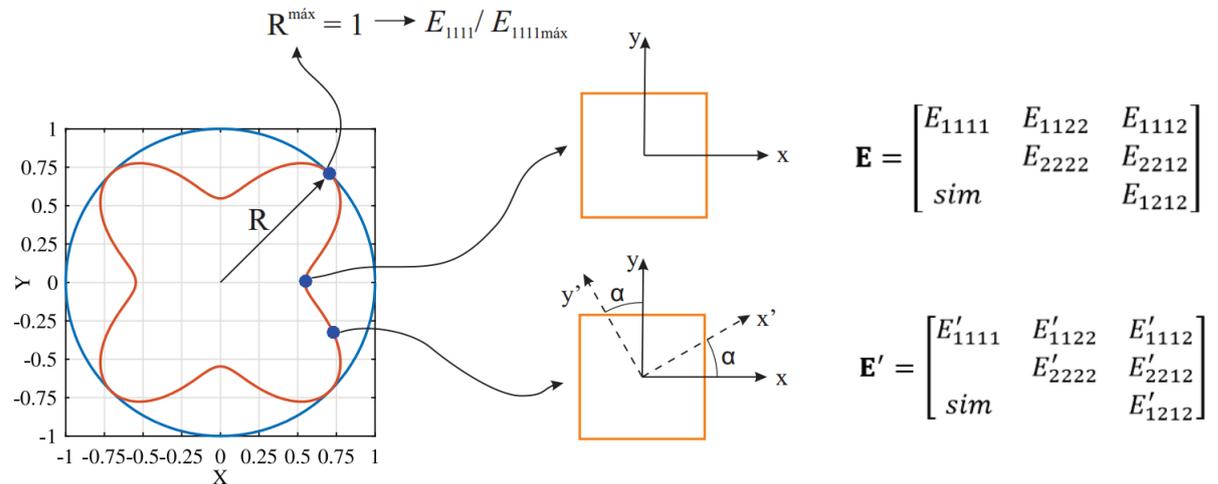


Figura 3.2 - Diagrama polar da componente E_{1111} rotacionada e normalizada pelo valor máximo da componente.

4 OTIMIZAÇÃO

4.1 DEFINIÇÃO DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

Segundo Arora (2012), um problema de otimização pode ser escrito em forma de um problema de minimização de uma função objetivo $f(\mathbf{x})$, onde busca-se encontrar um vetor de variáveis de projeto \mathbf{x} , sujeito a restrições de igualdade $h_j(\mathbf{x}) = 0$ e a restrições de desigualdade $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$. Matematicamente, um problema de otimização pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{tal que: } \quad & h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad (j = 1 \text{ a } p) \\ & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad (i = 1 \text{ a } m). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Nota-se que a representação da Equação (4.1) é para tratar apenas problemas de minimização, sendo que isso não é uma restrição e que o problema de maximização de uma função $F(\mathbf{x})$ é equivalente a minimizar uma função transformada $f(\mathbf{x}) = -F(\mathbf{x})$.

A região factível S pode ser definida como

$$S = \{\mathbf{x} \mid h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1 \text{ a } p; g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1 \text{ a } m\}, \quad (4.2)$$

na qual a função $f(\mathbf{x})$ de n variáveis terá um ponto de *mínimo global* em \mathbf{x}^* se

$$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}), \quad (4.3)$$

para todo \mathbf{x} na região factível S , e se essa desigualdade se manter para todo \mathbf{x} diferente de \mathbf{x}^* .

Entretanto, se a relação (4.3) for satisfeita somente para uma pequena vizinhança N de \mathbf{x}^* pertencente ao espaço factível S , definida como

$$N = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in S \text{ com } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta\}, \quad (4.4)$$

para qualquer $\delta > 0$, então \mathbf{x}^* será um ponto de *mínimo local*.

4.2 OTIMIZAÇÃO BASEADA EM METAMODELOS

Metamodelos são conhecidos também como superfícies de respostas, modelos auxiliares, modelos substitutos, entre outros, e são uma alternativa barata para análises custosas reduzindo consideravelmente o tempo computacional. A ideia básica do metamodelo, é construir uma função aproximada do modelo de alta fidelidade, que deve dar uma resposta muito próxima ou até mesmo exata, como aquela que o modelo de alta fidelidade daria. Exemplos de metamodelos podem ser superfície de respostas, modelo de Kriging, funções de base radiais, redes neurais, *splines*, regressões polinomiais, entre outros (RAMU e PRABHU, 2013).

Os metamodelos podem indicar tendências ou padrões ótimos presentes nos dados da amostra e avança diretamente para respostas conclusivas ao invés de se mover passo a passo ao longo de alguma trajetória. Fornecem uma aproximação rápida do modelo computacional, permitindo que seja utilizado para identificar variáveis importantes e visualizar as relações de entrada-saída. Em outras palavras, o modelo possibilita, além da estimativa do ponto ótimo, o desenvolvimento da intuição e compreensão do que está acontecendo no modelo (JONES, SCHONLAU e WELCH, 1998).

Dessa forma, devido à dificuldade, grande número de variáveis e demora no tempo computacional nos processos de otimização, alguns problemas de engenharia requerem a construção de um modelo (metamodelo) de baixo custo \hat{f} para avaliar e reproduzir a resposta de uma função objetivo desconhecida f . Assim, é dito que $f(\mathbf{x})$ é uma função contínua que representa custo, métrica ou performance de um processo (ou produto) definida por um vetor de variáveis $\mathbf{x} \in D \subset R^n$, onde D se refere ao espaço de projeto. Além disso, a única visão que pode-se ter de f é através de observações discretas ou de pontos experimentais $\{\mathbf{x}^{(i)} \rightarrow f^{(i)} = f(\mathbf{x}^{(i)}) | i = 1, \dots, q\}$. A partir da geração da amostra, a ideia é usá-la para construir uma função de aproximação \hat{f} de baixo custo que faça previsões para qualquer ponto de projeto $\mathbf{x} \in D$ (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008). De forma geral, a técnica de otimização baseada em metamodelos pode ser resumida e representada pela Figura 4.1.

Utilizou-se neste trabalho, para a geração das amostras, o hipercubo latino ótimo. No processo de otimização utiliza-se o metamodelo de Kriging, para diminuir o tempo computacional, e como otimizador é utilizado o algoritmo de programação quadrática sequencial (SQP, do inglês *sequential quadratic programming*). Este último é ainda associado à estratégia de preenchimento da amostra para atualizar iterativamente o modelo e aumentar a

eficiência do algoritmo na busca pelo ótimo global. As técnicas mencionadas são apresentadas na sequência.

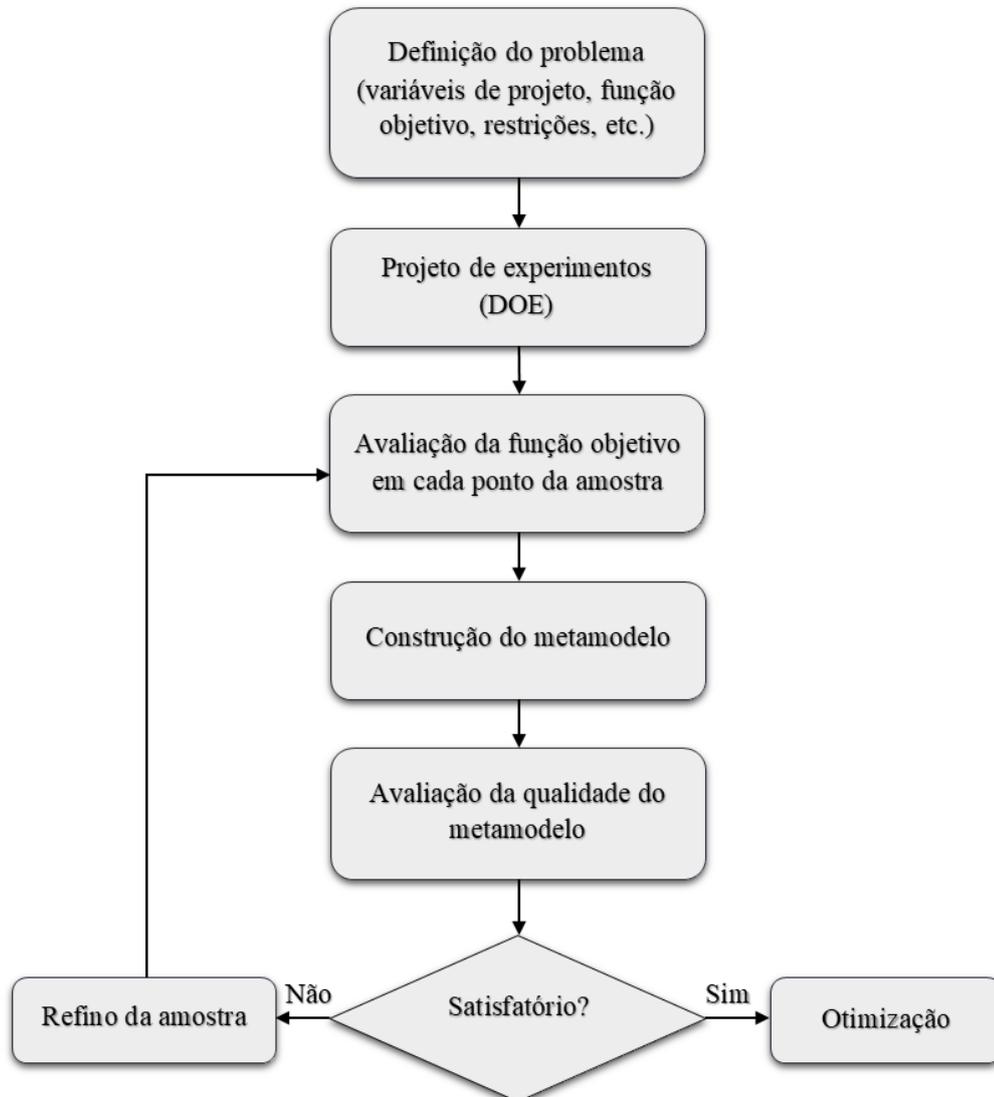


Figura 4.1 - Fluxograma do processo de otimização baseado em metamodelos.

4.2.1 Projeto de experimentos

A teoria que abrange a geração do plano de amostras para que se obtenha a melhor informação possível utilizando um tamanho limitado de amostras é chamada de projeto de experimentos ou DOE (do inglês *design of experiments*) (RYBERG, BÄCKRYD e NILSSON, 2012). Segundo Forrester, Sóbester e Keane (2008), os metamodelos são mais precisos na vizinhança dos pontos conhecidos em que a função objetivo é avaliada. Dessa forma, para que se obtenha um modelo preciso, os pontos amostrados devem estar distribuídos o mais uniformemente possível, preenchendo todo o espaço de projeto. Assim, pode-se dizer que um

projeto de experimentos que atenda a essa característica “preenche” o espaço de projeto (*space-filling*).

Diferentes projetos de experimentos atendem os critérios para a construção de metamodelos, entre eles podem ser citados: fatorial completo, as sequências quase-aleatórias de *Halton*, *Sobol* e *Torus*, e hipercubos latinos (PASSOS, 2016). Contudo, a forma mais direta de se obter um plano de amostras uniformes, segundo Forrester, Sóbester e Keane (2008), é através de uma malha retangular de pontos, qual é denominada de amostra fatorial completa (do inglês *full factorial*). A malha é obtida dividindo a variável de projeto em um número de l_i compartimentos de tamanhos iguais e gerando subamostras aleatórias dentro desses compartimentos. Ou seja, a amostra completa é uma malha de pontos experimentais de q^n , onde q é o número de níveis em uma dimensão e n é o número de variáveis de projeto, também chamados de fatores, onde os mais comuns são 2^n e 3^n .

A Figura 4.2 representa uma amostra fatorial completa, a qual produz um plano de amostras tridimensional. É possível ver que a amostra irá satisfazer o critério de uniformidade, no entanto esta técnica apresenta duas falhas. A primeira falha é que a amostra é definida apenas para projetos de certos tamanhos, como por exemplo aqueles que podem ser escritos como produtos dos números de níveis para cada dimensão, ou seja $q = l_1 * l_2 * \dots * l_n$. Isso mostra que o tamanho da amostra por fatorial completa aumenta exponencialmente com o número de variáveis de projeto, levando a um número incontável de amostras. A segunda falha, é que quando projetado nos eixos das variáveis de projeto, os pontos irão se sobrepor e isso pode prejudicar a predição do metamodelo (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008).

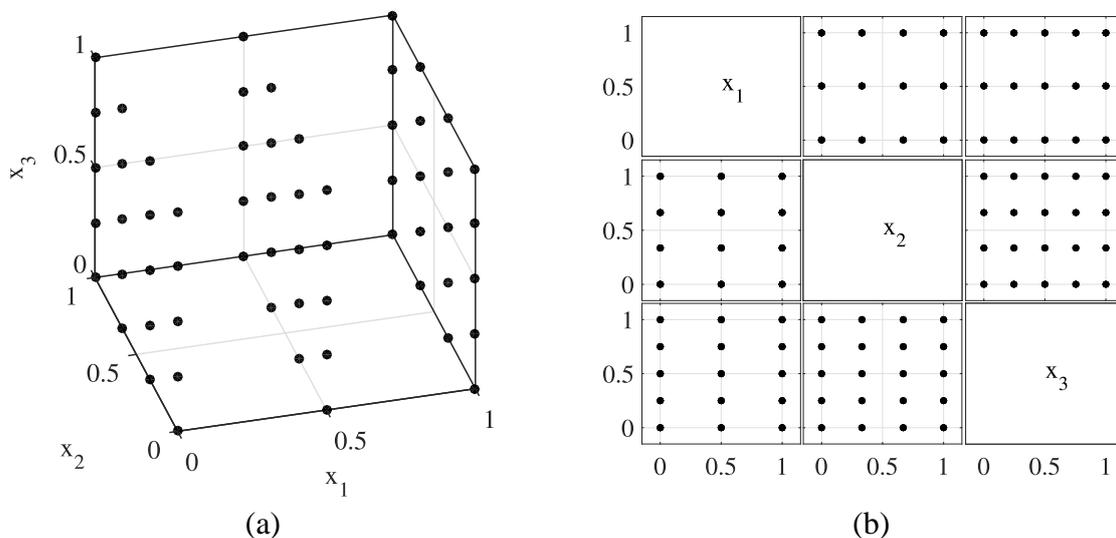


Figura 4.2 - Exemplo de uma amostra fatorial completa tridimensional com [3 4 5] pontos nas direções x_1 , x_2 e x_3 , respectivamente; (a) Representação tridimensional, (b) gráfico por pares.

4.2.1.1 Hipercubos latinos aleatórios

Um projeto experimental com q pontos e n dimensões é escrito como em uma matriz $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}^{(1)} \quad \mathbf{x}^{(2)} \quad \dots \quad \mathbf{x}^{(q)}\}^T$ de dimensão $q \times n$, onde cada coluna representa uma variável e cada linha $\mathbf{x}^{(i)} = \{x_1^{(i)} \quad x_2^{(i)} \quad \dots \quad x_q^{(i)}\}$ representa um ponto da amostra. Uma amostra do hipercubo latino (LHS, do inglês *latin hypercube sampling*) é gerada de tal maneira que cada uma das n dimensões seja dividida em q níveis iguais e que exista somente um ponto (ou amostra) em cada nível, ou seja visa gerar pontos cujas projeções sejam ortogonais. Os locais dos pontos são determinados através de um procedimento aleatório (VIANA, 2015). Um exemplo de cubo latino com 15 pontos amostrais e em três dimensões pode ser visto na Figura 4.3.

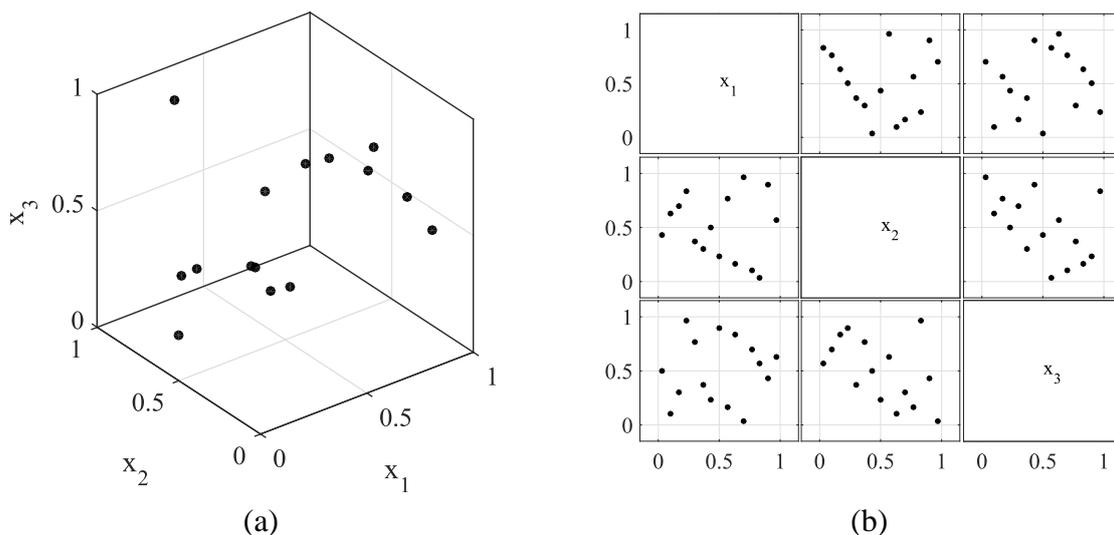


Figura 4.3 - Cubo latino aleatório com 15 pontos experimentais em três dimensões. (a) Representação em três dimensões, (b) representação em gráfico por pares.

Outra característica que aumentou a popularidade do hipercubo latino é sua flexibilidade. Por exemplo, se algumas dimensões forem excluídas, o projeto final ainda será um projeto de hipercubo latino (talvez um projeto subótimo, mas será um hipercubo latino). Isso se dá ao fato, de que as amostras de hipercubo latino não são colapsáveis. Desta forma, caso não haja orçamento suficiente para gerar outro conjunto de amostras, adequadas à um domínio menor, os dados existentes podem ser reutilizados sem redução do número de pontos amostrados. Em outros projetos de experimentos, como por exemplos fatoriais ou projetos de compósitos centrais (do inglês *central composite designs*), quando suas dimensões são eliminadas, os pontos colapsam um em outro (VIANA, 2013).

O hipercubo latino também sofre com a “maldição da dimensionalidade”. Enquanto a uniformidade é mantida e preservada em cada dimensão, as propriedades de preenchimento de espaço podem ser duvidosas. Conforme o número de variáveis aumenta torna-se mais difícil de preencher o espaço de projeto. Quando a otimização leva os pontos a regiões mais distantes do espaço de projeto, a amostra tende a criar espaços vazios no centro do espaço de projeto. Essa característica não é só observada em amostras de hipercubos latinos, mas pode ser algo que é típico para altas dimensões (VIANA, 2013).

Quando o hipercubo latino é usado, garante-se a ortogonalidade das amostras, contudo não há garantia de que os pontos estarão uniformemente distribuídos ao longo do espaço de projeto. Por exemplo, todos os pontos podem estar dispostos na diagonal principal do espaço de projetos, isso fará com que o critério de estratificação multidimensional seja satisfeito, no entanto, o espaço de projetos não será preenchido uniformemente. Para contornar isso, deve-se definir um critério de uniformidade que possa distinguir a qualidade das amostras (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008).

4.2.1.2 Hipercubos latinos ótimos

Segundo Forrester, Sóbester e Keane (2008), uma das medidas mais utilizadas para analisar a uniformidade de um plano de amostras é a métrica introduzida por Johnson, Moore e Ylvisaker (1990) e posteriormente melhorada por Morris e Mitchell (1995). A definição de *maxmin* pode ser feita tomando d_1, d_2, \dots, d_m como sendo a lista dos únicos valores para as distâncias entre todos os pares de pontos possíveis de uma amostra \mathbf{X} (organizados de forma crescente) e chamando J_1, J_2, \dots, J_m , a quantidade de pares separados pela distância d_j . A qualidade da distribuição de \mathbf{X} , ordenada da melhor para a pior, é definida por amostras que maximizam o valor de d_1 , dentro dessas, aquelas que minimizam o valor de J_1 , dentro dessas, aquelas que maximizam o valor de d_2 , dentro dessas, as que minimizam o valor de J_2 , e assim por diante (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008). A distância d_j pode ser definida por

$$d_j(\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(2)}) = \left(\sum_{j=1}^k |x_j^{(1)} - x_j^{(2)}|^p \right)^{1/p}, \quad (4.5)$$

onde p assume valores iguais a 1, caracterizando a denominada norma retangular, ou 2, relativa à norma euclidiana. Não há indícios de qual seja a melhor ou mais adequada para a avaliação do plano de amostras. Contudo, aconselha-se o uso da norma retangular a fim de diminuir o

custo computacional, principalmente quando grandes planos de amostras são avaliados (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008).

Para tornar o processo de otimização do DOE mais eficiente, Morris e Mitchell (1995) criaram um critério para combinar os parâmetros d_j e J_j , definido por

$$\phi_q(\mathbf{X}) = \left(\sum_{j=1}^m J_j d_j^{-q} \right)^{1/q}. \quad (4.6)$$

Morris e Mitchell (1995) recomendam minimizar ϕ_q para $q=1, 2, 5, 10, 20, 50$ e 100 , e então escolher a melhor amostra de acordo com a métrica *maxmin*. Contudo, como o espaço de projetos gerado por hipercubos latinos é grande, não é usual tentar encontrar uma amostra que seja ótimo global (FORRESTER, SÓBESTER e KEANE, 2008).

4.3 CONSTRUÇÃO DO METAMODELO DE KRIGING

Kriging é um caso especial de metamodelo de base radial, baseado em um processo Gaussiano. É flexível e depende de um conjunto de parâmetros que controlam as propriedades do modelo, como a suavidade da superfície de respostas, capacidade de diferenciação e de especificar a influência de cada dimensão de entrada (MARTIN e SIMPSON, 2005).

A teoria aqui apresentada sobre Kriging baseia-se nos trabalhos de Jones, Shonlau e Welch (1998), Jones (2001) e Forrester, Sóbester e Keane (2008). Parte-se do pressuposto que uma função desconhecida e determinística $f(\mathbf{x})$ de n variáveis é avaliada em um conjunto de q pontos de um plano de amostras $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}^{(1)} \quad \mathbf{x}^{(2)} \quad \dots \quad \mathbf{x}^{(q)}\}^T$, tenha como respostas observadas $\mathbf{f} = \{f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(q)}\}^T$. Para essa função, deseja-se encontrar uma expressão para um valor previsto em um novo ponto \mathbf{x} . No entanto, antes de amostrar os pontos, não se sabe o valor da função neste ponto. Para isso, as respostas observadas em um ponto \mathbf{x} são modeladas como um processo estocástico, normalmente distribuído com média μ e variância σ^2 . De maneira intuitiva, isso significa que a função tem um valor típico de μ e pode variar em um intervalo de $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$. O vetor referente a esse processo estocástico, é dado por

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} Z(\mathbf{x}^{(1)}) \\ \vdots \\ Z(\mathbf{x}^{(q)}) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

onde o vetor aleatório tem média igual a $\mathbf{1}\mu$ ($\mathbf{1}$ é um vetor coluna de $q \times 1$ de números uns) e cada variável aleatória é correlacionada entre si e com as demais pela expressão da função de base

$$\text{cor}[Z(\mathbf{x}^{(i)}), Z(\mathbf{x}^{(l)})] = \exp\left(-\sum_{j=1}^q \theta_j |x_j^{(i)} - x_j^{(l)}|^{p_j}\right). \quad (4.8)$$

Desta forma, a matriz de correlações de tamanho $q \times q$, de todos os dados observados é dada por

$$\mathbf{\Psi} = \begin{pmatrix} \text{cor}[Z(\mathbf{x}^{(1)}), Z(\mathbf{x}^{(1)})] & \cdots & \text{cor}[Z(\mathbf{x}^{(1)}), Z(\mathbf{x}^{(q)})] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cor}[Z(\mathbf{x}^{(q)}), Z(\mathbf{x}^{(1)})] & \cdots & \text{cor}[Z(\mathbf{x}^{(q)}), Z(\mathbf{x}^{(q)})] \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

e a matriz de covariância por

$$\text{cov}(\mathbf{Z}, \mathbf{Z}) = \sigma^2 \mathbf{\Psi}. \quad (4.10)$$

Assume-se que a matriz de correlações reflete a expectativa de que a função se comportará de determinada maneira, mantendo-se suave e contínua. Essas correlações dependem da distância absoluta entre os pontos da amostra $|x_j^{(i)} - x_j^{(l)}|$ e dos parâmetros θ_j e p_j .

É intuitivo que na medida que dois pontos se aproximam mostram ter uma correlação muito próxima e a distância $x_j^{(i)} - x_j \rightarrow 0$ e $\exp(-|x_j - x_j^{(i)}|^{p_j}) \rightarrow 1$. No caso contrário, onde os pontos movem-se a direções opostas, $x_j^{(i)} - x_j \rightarrow \infty$ e $\exp(-|x_j - x_j^{(i)}|^{p_j}) \rightarrow 0$, ou seja, os pontos não têm correlação. Na Figura 4.4, três correlações diferentes são mostradas para valores de p_j iguais a 0.2, 1 e 2. Esse parâmetro é responsável pela suavidade da correlação e para $p_j = 2$ na Equação (4.8), tem-se a função de correlação Gaussiana. Essa correlação é suave e apresenta suaves gradientes de $x_j^{(i)} - x_j = 0$. Reduzindo p_j para valores próximos a um, aumenta-se a razão na qual a correlação começa a cair quando $|x_j^{(i)} - x_j^{(l)}|$ aumenta. Para valores muito baixos de p_j , afirma-se que não há correlação entre dois pontos e que há uma descontinuidade entre $Z(\mathbf{x}_j^{(i)})$ e $Z(\mathbf{x}_j)$.

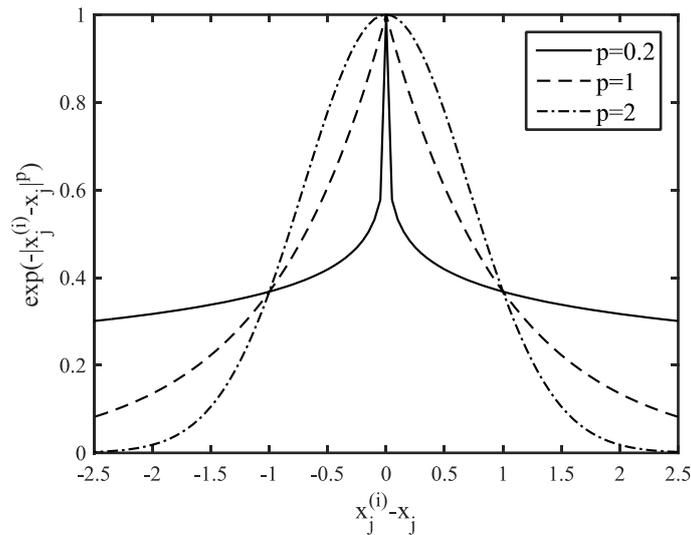


Figura 4.4 - Influência do parâmetro p na função de correlação.

O parâmetro θ_j da Equação (4.8) pode ser expresso como a medida da importância ou quão ativa é a variável x_j . Para interpretar isso, é dito que a variável x_j é ativa se para pequenos valores de $|x_j^{(i)} - x_j^{(l)}|$ podem levar a grandes diferenças nas funções em $\mathbf{x}^{(i)}$ e $\mathbf{x}^{(j)}$. Olhando a Figura 4.5 e a Equação (4.8) pode-se perceber que para grandes valores de θ_j , pequenos valores de $|x_j^{(i)} - x_j^{(l)}|$ se transformarão em grandes “distâncias” e, assim, baixa correlação. E para baixos valores de θ_j , todos os pontos terão alta correlação, com $Z(\mathbf{x}_j)$ sendo semelhante por toda a amostra. Desta forma, a “atividade” do parâmetro θ_j é útil para problemas com grandes números de variáveis onde consegue-se determinar quais variáveis são mais importantes e talvez eliminá-las das etapas de buscas futuras.

Os parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ e \mathbf{p} são desconhecidos, para os quais as componentes da matriz de correlações é dependente. Para determiná-los, maximiza-se a estimativa da verossimilhança (*maximum likelihood estimation* - MLE), isto é,

$$\max_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}} \left(-\frac{[q \ln(\hat{\sigma}^2) + \ln|\boldsymbol{\Psi}|]}{2} \right), \quad (4.11)$$

e, assim, obtêm-se as estimativas de máxima verossimilhança para μ e σ^2 , dadas por

$$\hat{\mu} = \frac{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \mathbf{f}}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Psi}^{-1} \mathbf{1}}, \quad (4.12)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{f} - \mathbf{1}\mu)^T \Psi^{-1} (\mathbf{f} - \mathbf{1}\mu)}{q}. \quad (4.13)$$

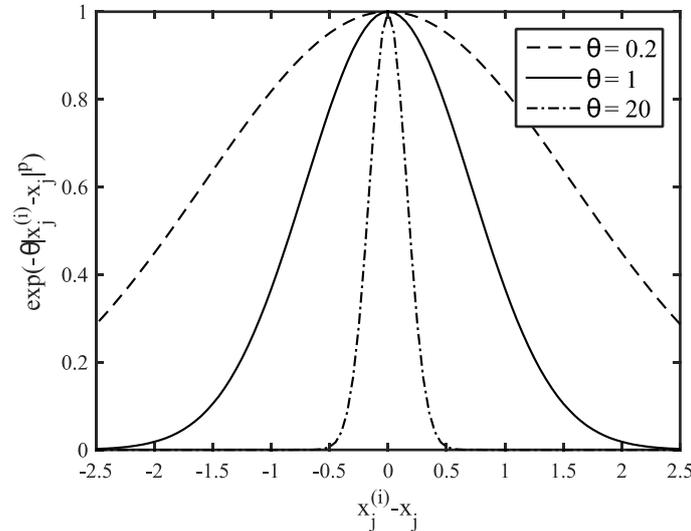


Figura 4.5 - Influência do parâmetro θ na função de correlação.

Até aqui foi proposto que os parâmetros de correlação são determinados pela estimativa da máxima verossimilhança dos dados observados \mathbf{f} . No entanto, na prática, os parâmetros \mathbf{p} são assumidos como constantes e variam-se os parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ para valores que melhor se ajustem ao modelo. Isso se justifica devido ao fato que para diferentes valores de $\boldsymbol{\theta}$ há grande diferença nas funções de correlações obtidas, conforme ilustrado na Figura 4.5. Assim, para obter $\boldsymbol{\theta}$ resolve-se a Equação (4.11) utilizando métodos de pesquisa global como algoritmos genéticos ou recozimento simulado. Para o parâmetro \mathbf{p} , normalmente, assume-se o valor 2 pois, como pode ser visto na Figura 4.4, este proporciona maior suavidade.

Agora, para obter uma nova predição \hat{f} em um ponto \mathbf{x} , \hat{f} deve ter consistência com os dados observados anteriormente e com os parâmetros de correlação encontrados. Assim, escolhe-se uma previsão que maximize a estimativa da verossimilhança da amostra e da previsão, atendendo aos parâmetros de correlação. Através do desenvolvimento feito em Jones (2001) e Forrester, Sóbester e Keane (2008), tem-se que a predição para as respostas \mathbf{y} em um ponto \mathbf{x} não amostrado é

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \hat{\mu} + \boldsymbol{\Phi}^T \Psi^{-1} (\mathbf{f} - \mathbf{1}\hat{\mu}) \quad (4.14)$$

onde $\boldsymbol{\Phi}$ é o vetor de correlações entre os dados observados e a nova previsão. O modelo é gerado de forma que a previsão interpola todos os dados. Se for feita uma previsão em um ponto

$\mathbf{x}^{(i)}$, Φ é a i -ésima coluna de Ψ , e isso significa que $\Phi\Psi^{-1}$ é o i -ésimo vetor unitário, portanto $\hat{f}(\mathbf{x}) = \hat{\mu} + f^{(i)} - \hat{\mu} = f^{(i)}$. Kriging apresenta a melhor predição linear e não tendenciosa da saída ainda não observada, gerando a predição sob a forma de uma combinação de um modelo global com ruído aleatório (CUI *et al.*, 2016).

Por fim, o erro de uma previsão para um processo estocástico é dado por

$$\hat{s}^2(\mathbf{x}) = \hat{\sigma}^2 \left[1 - \Phi^T \Psi^{-1} \Phi + \frac{(1 - \mathbf{1}^T \Psi^{-1} \Phi)}{\mathbf{1}^T \Psi^{-1} \mathbf{1}} \right]. \quad (4.15)$$

O cálculo do erro da previsão é uma das maiores vantagens de modelos Gaussianos como Kriging. A Equação (4.15) tem propriedade intuitiva de que $s^2(\mathbf{x})$ é zero para qualquer ponto que já tenha sido amostrado, sendo isso evidente, já que não há incerteza nos pontos já conhecidos. Além disso, o erro pode ser usado para posicionar pontos de preenchimento do modelo, onde as incertezas nas previsões do modelo são mais altas. Outra característica interessante de Kriging é a possibilidade de determinar facilmente a variância que existe na aproximação para um dado ponto estimado. Essa característica permite que o modelo seja refinado caso a incerteza seja maior do que o desejado (KROETZ, 2015).

Outra vantagem do metamodelo de Kriging é a possibilidade de utilização de diferentes funções de correlação, além da função Gaussiana. No pacote DACE (do inglês *Design and Analysis of Computer Experiments*), desenvolvido inicialmente por Lophaven, Nielsen e Sondergaard (2002), por exemplo, estão disponíveis as funções Gaussiana, cúbica, exponencial, linear, esférica e *spline*. Na Figura 4.6, são apresentadas as aproximações do modelo de Kriging para diferentes funções de correlação, utilizando cinco pontos de amostra. A função utilizada para aproximação é

$$f(x) = (6x - 2)^2 \sin(12x - 4), \quad (4.16)$$

avaliada no intervalo de $[0; 1]$ e em um DOE de $\mathbf{X} = \{0; 0.25; 0.5; 0.75; 1\}$.

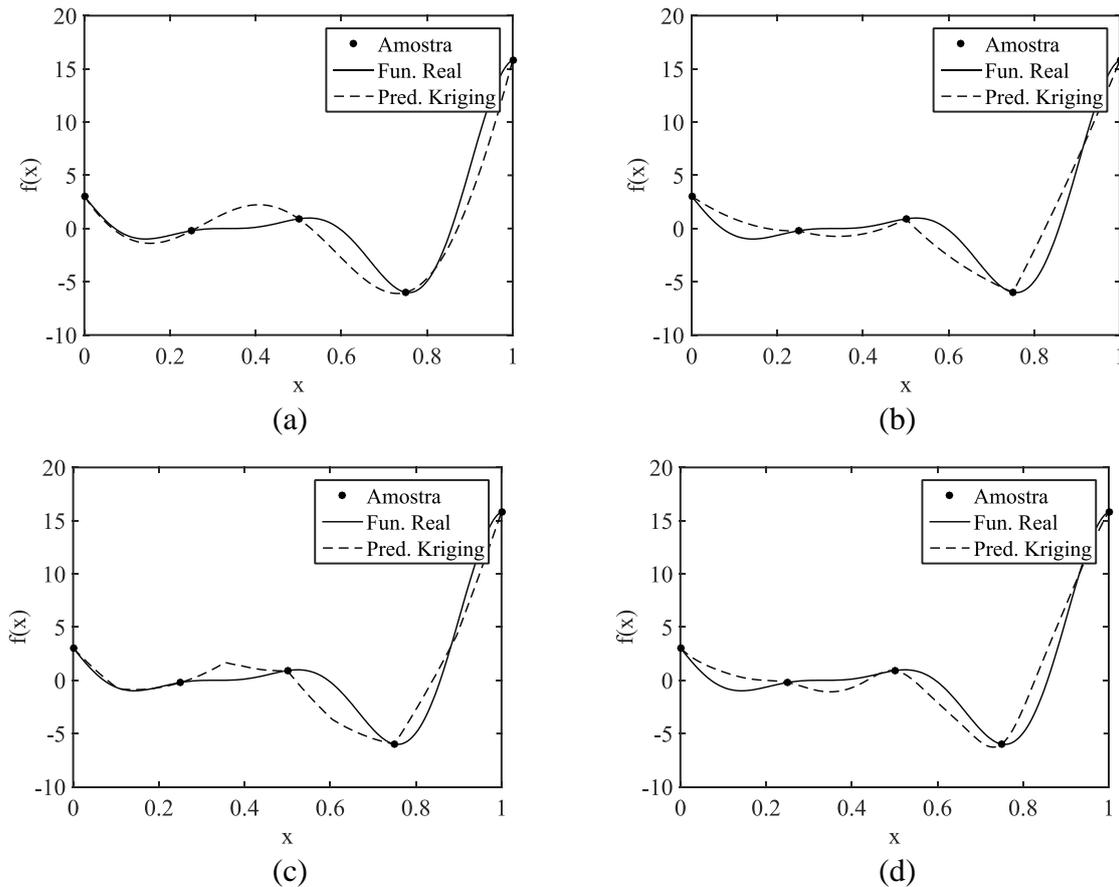


Figura 4.6 - Utilização de diferentes funções de correlação para o metamodelo de Kriging: (a) Gaussiana; (b) exponencial; (c) linear; (d) spline.

Para observar a precisão do metamodelo de Kriging, realizou-se a predição da função de Branin-Hoo. Esta função possui duas variáveis e três ótimos globais posicionados em $\mathbf{x}_{min 1} = \{0.962; 0.165\}$, $\mathbf{x}_{min 2} = \{0.124; 0.818\}$ e $\mathbf{x}_{min 3} = \{0.543; 0.152\}$, que resultam em uma função objetivo de $f_{min} = 0.397887$. Esta foi redimensionada do espaço real $\bar{\mathbf{x}} \in [-5; 10]$ e $[0; 15]$ para o espaço $\bar{\mathbf{x}} \in [0; 1]^2$.

$$f(\mathbf{x}) = \left(\bar{x}_2 - \frac{5}{4\pi^2} \bar{x}_1^2 + \frac{5}{\pi} \bar{x}_1 - 6 \right)^2 + 10 \left(1 - \frac{1}{8\pi} \right) \cos(\bar{x}_1) + 10, \quad (4.17)$$

onde $\bar{x}_1 = 15x_1 - 5$ e $\bar{x}_2 = 15x_2$.

A Figura 4.7 (a) apresenta a função real e a Figura 4.7 (b) o modelo predito da função. A predição foi realizada utilizando 25 pontos de amostra. Com isso, pode-se observar que a predição de Kriging é, de fato, uma representação muito próxima da função de Branin verdadeira.

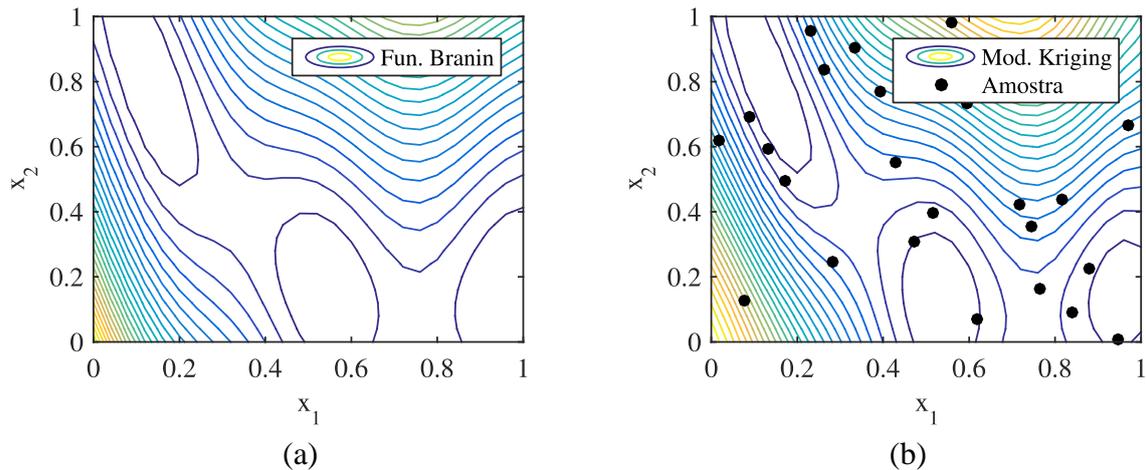


Figura 4.7 - (a) Função de Branin-Hoo; (b) Predição de Kriging da função de Branin-Hoo baseada em 25 pontos amostrais.

A metodologia do metamodelo de Kriging é baseada na modelagem da função objetivo e das restrições como processos estocástico. Essa abordagem tem como ideia básica adaptar um processo estocástico aos dados, e desta forma, ajustar o modelo para representar como a função tipicamente se comporta. Esse tipo de metodologia é especialmente boa na modelagem de funções não lineares e multimodais que geralmente ocorrem na engenharia, o que justifica a utilização do metamodelo de Kriging neste trabalho.

4.4 PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL

A programação quadrática sequencial (SQP, do inglês *sequential quadratic programming*), é um dos métodos mais eficazes na otimização não linear, gerando etapas através da resolução de subproblemas quadráticos. Esta abordagem de programação quadrática pode ser utilizada na busca pelo ótimo em pequenos e grandes problemas, mostrando sua força, principalmente na resolução de problemas com restrições não lineares (NOCEDAL e WRIGHT, 2006).

A ideia básica do SQP é modelar um problema de programação não linear por uma solução aproximada \mathbf{x}^k , através de um subproblema de programação quadrática. Na sequência, usar a solução para este subproblema para construir uma aproximação melhor \mathbf{x}^{k+1} . Esse processo de iterações cria uma sequência de aproximações, que deseja-se que converjam para uma solução \mathbf{x}^* (BOGGS e TOLLE, 1995).

Há várias maneiras de apresentar o problema de programação quadrática que deve ser resolvido a cada iteração no processo de otimização, e neste caso é utilizado o problema de

otimização com apenas restrições de igualdade (de forma a simplificar a apresentação) (ARORA, 2012)

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } f(\mathbf{x}) \\ &\text{sujeito a: } h_i(\mathbf{x}) = 0; \quad i = 1, \dots, p. \end{aligned} \quad (4.18)$$

A função Lagrangeana para o problema de otimização da Equação (4.18) é dada por

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p v_i h_i(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{v} \cdot \mathbf{h}(\mathbf{x}), \quad (4.19)$$

onde v_i é o multiplicador de Lagrange para a i -ésima restrição de igualdade $h_i(\mathbf{x}) = 0$. Vale ressaltar que não existe nenhuma restrição para que v_i seja positivo ou negativo.

As condições de necessárias de otimalidade (KKT, Karush-Kuhn-Tucker) são

$$\nabla L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = 0, \quad \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p v_i \nabla h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad (4.20)$$

$$h_i(\mathbf{x}) = 0; \quad i = 1, \dots, p. \quad (4.21)$$

A Equação (4.20) representa n equações porque há n variáveis de projeto e mais p equações referentes a restrição de igualdade. Assim, as Equações (4.20) e (4.21) fornecem um sistema de $n + p$ equações, com $n + p$ incógnitas. Estas equações não são lineares e podem ser resolvidas pelo método de Newton-Raphson.

Reescrevendo o sistema de Equações (4.20) e (4.21) e simplificando-o conforme Arora (2012) tem-se

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 L & \mathbf{N} \\ \mathbf{N}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{(k)} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{v}^{(k+1)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f \\ \mathbf{h} \end{bmatrix}^{(k)}, \quad (4.22)$$

onde o subscrito k representa que as quantidades estão sendo calculadas na iteração k . $\nabla^2 L$ é a matriz Hessiana da função Lagrangeana de dimensão $n \times n$, \mathbf{N} é uma matriz $n \times p$ cuja i -ésima coluna é o gradiente da restrição de igualdade $h_i(\mathbf{x})$ e $\Delta \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$.

A solução da Equação (4.22) fornece a mudança no projeto $\Delta \mathbf{x}^{(k)}$ e um novo valor para o multiplicador de Lagrange $\mathbf{v}^{(k+1)}$. O processo iterativo de Newton-Raphson é utilizado

para resolver as condições necessárias do KKT e é continuado até que um critério de parada seja satisfeito.

A Equação (4.22) é também a solução de um problema quadrático, definido como

$$\begin{aligned} &\text{minimizar: } \nabla f^T \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^T \nabla^2 L \Delta \mathbf{x} \\ &\text{sujeito a: } h_i + \mathbf{n}^{(i)T} \Delta \mathbf{x} = 0; \quad i = 1, \dots, p, \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde $\mathbf{n}^{(i)}$ é o gradiente da função h_i .

A função Lagrangeana para o problema quadrático da Equação (4.23) é

$$\bar{L} = \nabla f^T \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^T \nabla^2 L \Delta \mathbf{x} + \sum_{i=1}^p v_i (h_i + \mathbf{n}^{(i)T} \Delta \mathbf{x}). \quad (4.24)$$

As condições necessárias de otimalidade KKT, tratando $\Delta \mathbf{x}$ como variável desconhecida, fornecem

$$\nabla \bar{L} = \mathbf{0}; \quad \nabla f + \nabla^2 L \Delta \mathbf{x} + \mathbf{N} \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (4.25)$$

$$h_i + \mathbf{n}^{(i)T} \Delta \mathbf{x} = 0; \quad i = 1, \dots, p. \quad (4.26)$$

Se forem combinadas e colocadas na forma matricial, as Equações (4.25) e (4.26) resultarão na Equação (4.22). Assim, o problema de minimizar $f(\mathbf{x})$ sujeito a $h_i(\mathbf{x}) = 0$ pode ser resolvido iterativamente resolvendo o subproblema quadrático da Equação (4.25) (ARORA, 2012).

A solução para $\Delta \mathbf{x}$ do subproblema quadrático é tratada como uma direção de busca e o tamanho do passo é determinado minimizando uma função de descida apropriada para obter um algoritmo convergente. Além disso, na prática a matriz Hessiana não é calculada, são utilizadas formas aproximadas, como por exemplo a forma aproximada obtida pelo método BFGS (ARORA, 2012).

Quando são adicionadas restrições de desigualdade ao problema original, o problema de programação quadrática torna-se

$$\begin{aligned} &\text{minimizar: } \bar{f} = \mathbf{c}^T \mathbf{d} + 0.5 \mathbf{d}^T \mathbf{H} \mathbf{d} \\ &\text{sujeito a: } \mathbf{n}^{(i)T} \mathbf{d} = e_i; \quad i = 1, \dots, p, \\ &\quad \quad \quad \mathbf{a}^{(j)T} \mathbf{d} \leq b_j; \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (4.27)$$

onde \mathbf{c} é o gradiente da função objetivo f , \mathbf{H} é a matriz Hessiana da função Lagrangeana (ou a sua aproximação), \mathbf{d} é a direção de busca, $\mathbf{a}^{(j)}$ é o gradiente da função g_j , e_i é a i -ésima função de igualdade h_i negativa e b_j é a j -ésima função de desigualdade g_j negativa. Assim, a função Lagrangeana do problema fica

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \omega_j g_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p v_i h_i(\mathbf{x}), \quad (4.28)$$

onde ω_j é o multiplicador de Lagrange para a j -ésima restrição de desigualdade $g_j(\mathbf{x}) \leq 0$.

4.4.1 Critério de preenchimento

Sabe-se que os metamodelos são aproximações de uma função verdadeira, a qual se deseja representar. Assim, em um processo de minimização, é sensato refinar o modelo em regiões de possíveis pontos de mínimo, de maneira a aumentar sua precisão.

Assim, neste trabalho, os pontos de preenchimento são obtidos minimizando o metamodelo. Ou seja, após construir o metamodelo a partir das amostras iniciais, utiliza-se o algoritmo SPQ para realizar a busca pelo ponto de ótimo. Encontrado o ponto de ótimo, esse é então adicionado aos demais pontos da amostra. Posteriormente, avalia-se a função objetivo para o ponto de ótimo e atualiza-se o metamodelo. Isso é feito iterativamente até que o critério de parada seja atingido, que nesse caso é o número de avaliações da função objetivo.

4.4.2 Detalhamento das funções objetivo

As funções objetivo a serem utilizadas para otimização são o módulo de cisalhamento, a condutividade térmica, o coeficiente de Poisson e o módulo de cisalhamento combinado com a condutividade, todas em forma normalizada.

Sabendo que as funções objetivos podem ser representadas pelas componentes dos tensores térmico e elástico, tem-se

- Módulo de cisalhamento G_{12} (a ser maximizado):

$$F_1(\mathbf{x}) = \frac{E_{1212}(\mathbf{x})}{E_{1212}^0}. \quad (4.29)$$

- Condutividade térmica na direção x (a ser maximizada):

$$F_2(\mathbf{x}) = \frac{Kt_{11}(\mathbf{x})}{Kt_{11}^0}. \quad (4.30)$$

- Coeficiente de Poisson ν_{12} (a ser minimizado):

$$F_3(\mathbf{x}) = \frac{E_{1122}(\mathbf{x})}{E_{1111}(\mathbf{x})} \cdot \frac{E_{1111}^0}{E_{1122}^0}. \quad (4.31)$$

- Módulo de cisalhamento G_{12} e condutividade térmica na direção x (a ser maximizado):

$$F_4(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \frac{E_{1212}(\mathbf{x})}{E_{1212}^0} + \frac{1}{2} \frac{Kt_{11}(\mathbf{x})}{Kt_{11}^0}. \quad (4.32)$$

Na definição das funções objetivo acima, $(\cdot)^0$ representa o valor da propriedade da célula inicial, utilizado para normalização.

4.5 PROCEDIMENTO DE OTIMIZAÇÃO UTILIZANDO NIAH

Anteriormente mencionou-se que as áreas das seções transversais de cada elemento das células unitárias seriam tomadas como variáveis de projeto. Assim, em um processo de otimização que envolve a utilização de metamodelos, tendo definidas as variáveis de projeto e as funções objetivos, pode-se gerar um conjunto de amostras para representar as variáveis de projeto. Essas são geradas aleatoriamente utilizando o hipercubo latino ótimo. Para isso, utilizou-se a função `lhsdesign` do MATLAB. Esta função permite obter um hipercubo latino ótimo baseado no critério de otimização escolhido pelo usuário, qual pode ser *maximin* ou *correlation*. O critério de *maximin* é o critério desenvolvido por Morris e Mitchell (1995), e o segundo critério é responsável por minimizar a correlação. Assim, o DOE é gerado iterativamente até que se obtenha a melhor amostra de hipercubo latino ótimo conforme o critério e o número de iterações escolhido pelo usuário.

Na sequência, a função objetivo é avaliada em cada ponto da amostra e para cada cálculo da função objetivo é preciso modelar a célula por elementos finitos para obter a propriedade em questão através da NIAH, e isso também é realizado no MATLAB. A célula é modelada por elementos finitos pelo software comercial ABAQUS utilizando elementos de

barra bidimensionais (2D) a fim de comparar os resultados obtidos neste trabalho com os resultados obtidos por Guth (2012).

Após a geração do conjunto de amostras e avaliar a função objetivo de cada amostra, pode-se realizar a construção do metamodelo de Kriging. Para construir o metamodelo é utilizado o pacote DACE, desenvolvido por Lophaven, Nielsen e Sondergaard (2002), o qual apresenta três funções de regressão (regressão polinomiais de ordem zero, um e dois) e sete funções de correlação, dentre elas a Gaussiana, a qual é utilizada neste trabalho.

Construído o modelo, realiza-se a busca pelo ponto de ótimo utilizando o algoritmo de programação quadrática sequencial (SQP). Isso é feito buscando-se diretamente no metamodelo, seja através da maximização ou minimização do problema. Encontrado o ponto de ótimo, este é adicionado aos demais pontos da amostra, depois disso a função objetivo é avaliada neste ponto e as propriedades são obtidas pela NIAH. Por fim, o modelo é atualizado e isso é feito iterativamente até que o critério de parada tenha sido satisfeito.

O esquema de todo o processo para a otimização das células é apresentado no fluxograma apresentado na Figura 4.8.

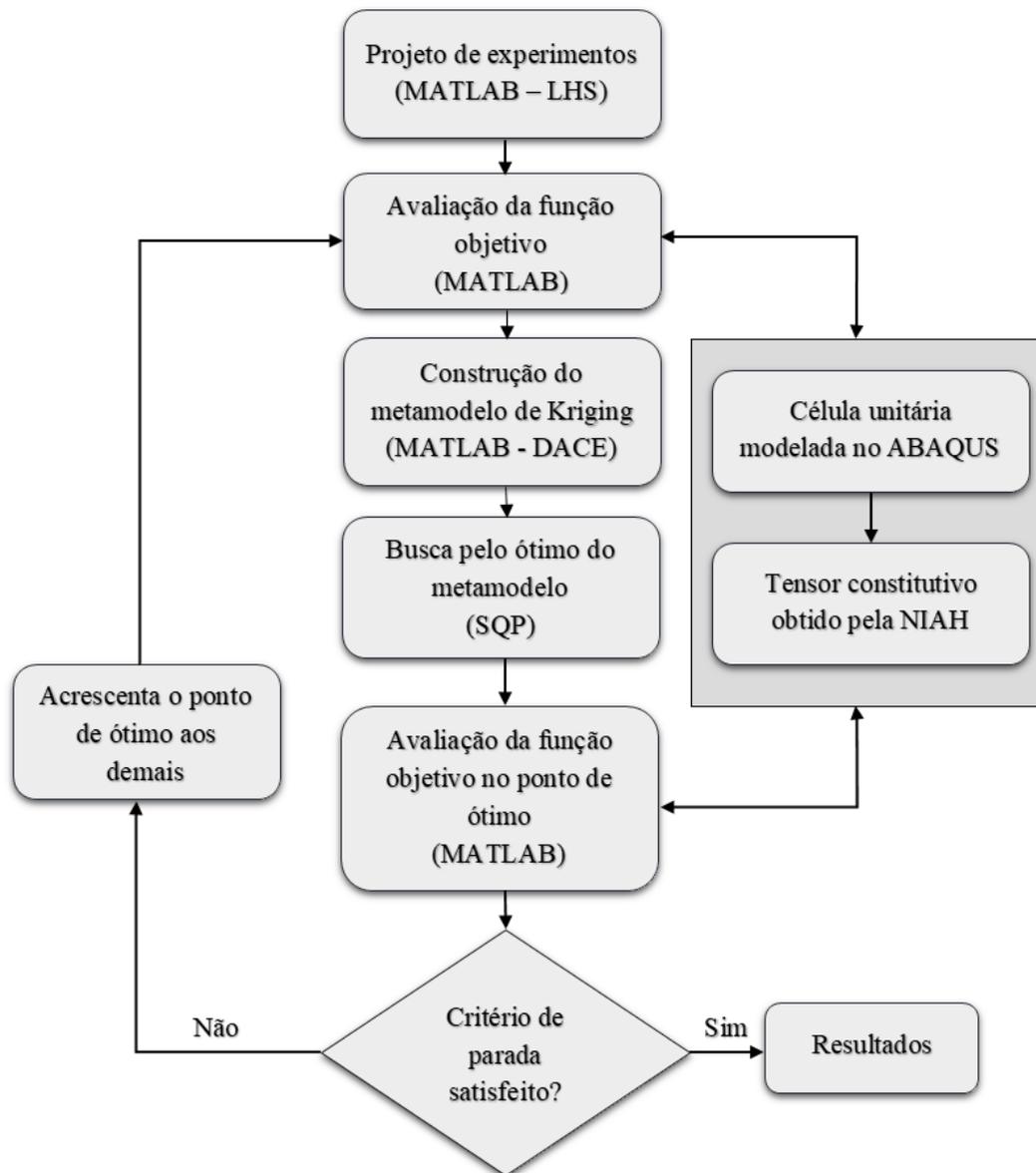


Figura 4.8 - Fluxograma do processo de otimização.

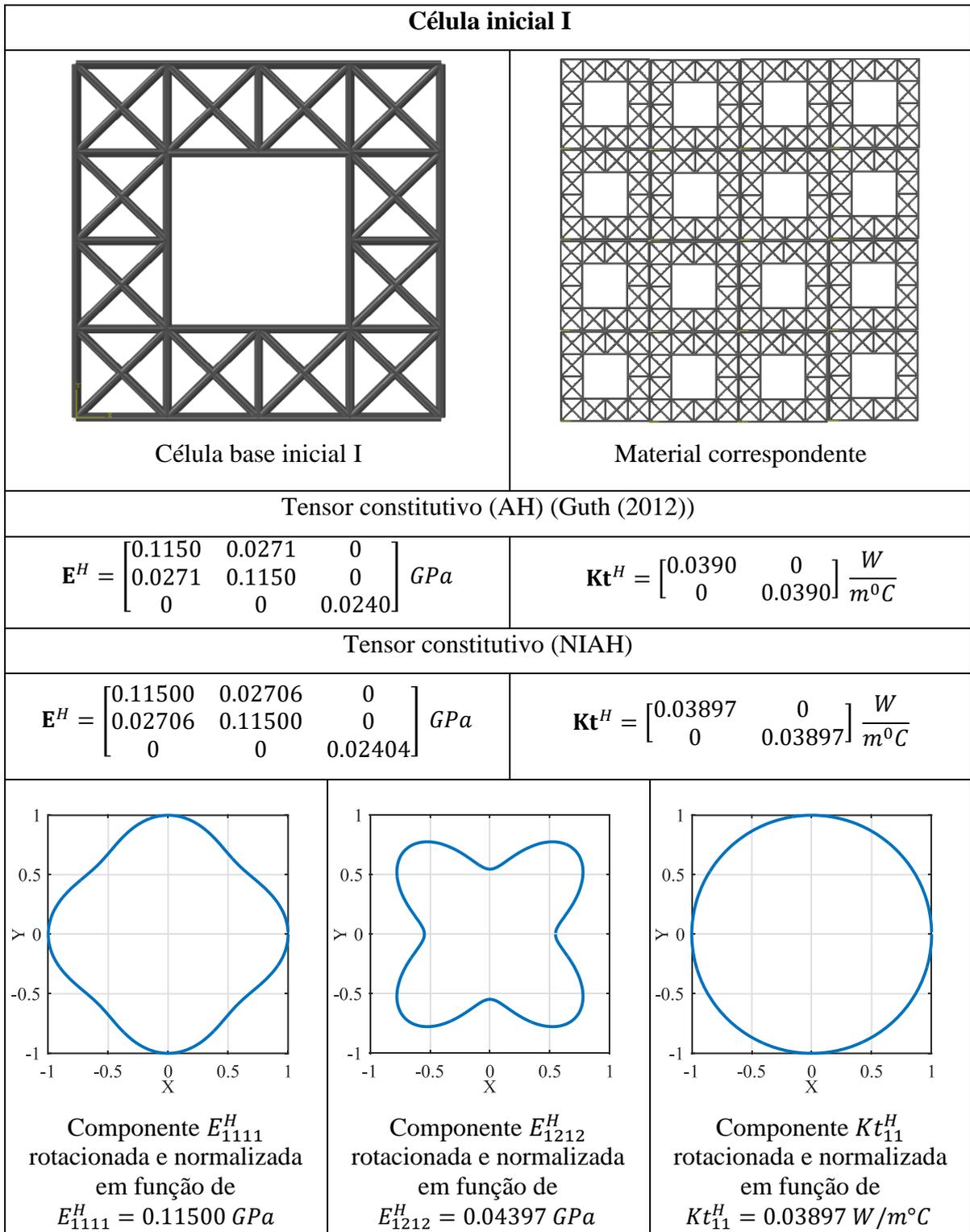
5 RESULTADOS

Os resultados referentes à utilização da NIAH para a obtenção das propriedades efetivas de quatro células unitárias e os resultados referentes ao processo de otimização são apresentados neste capítulo. As otimizações realizadas são a maximização do módulo de cisalhamento, a maximização da condutividade térmica na direção x, a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x e a minimização do coeficiente de Poisson

5.1 RESULTADOS DA APLICAÇÃO DA NIAH (SEM OTIMIZAÇÃO)

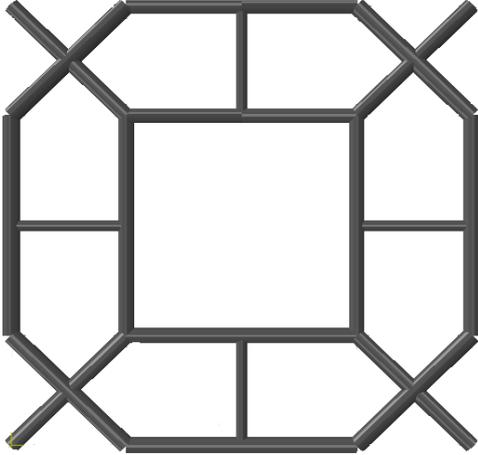
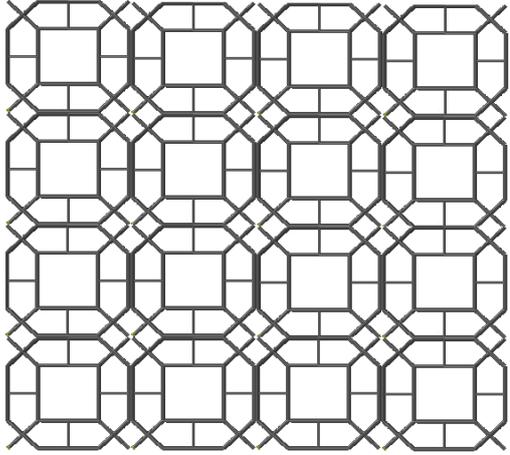
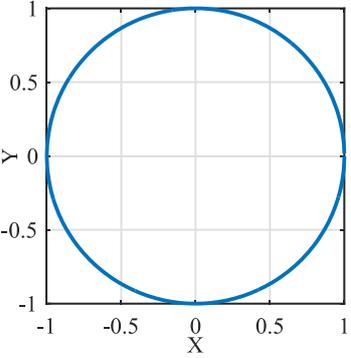
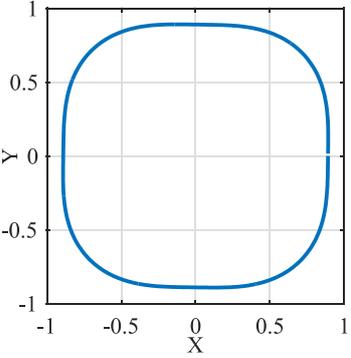
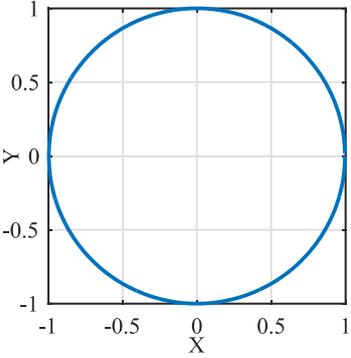
As propriedades efetivas obtidas através da NIAH, para quatro células unitárias, são apresentadas nesta seção. Para isso, algumas células foram escolhidas a partir do trabalho de Guth (2012), como por exemplo, a célula inicial e as células otimizadas para máximo módulo volumétrico e para máximo coeficiente de Poisson, as quais também foram utilizadas por Rossari e Muñoz-Rojas (2014) para a implementação da NIAH. Com estas, compara-se as propriedades efetivas obtidas pela NIAH e pela AH. Outra célula foi retirada do trabalho de Muñoz-Rojas *et al.* (2011) para cálculo das propriedades efetivas. As células iniciais retiradas do trabalho de Guth (2012) e de Muñoz-Rojas *et al.* (2011) são aqui denominadas de célula inicial I e célula inicial II, respectivamente.

A célula inicial I é formada por elementos de barra modelados em 2D, em que a área da seção transversal, módulo de elasticidade e condutividade térmica do material de base, são $A = 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2$, $E = 210 \text{ GPa}$ e $k = 50 \text{ W/m } ^\circ\text{C}$, respectivamente. Cada lado da célula tem 0.1 m de comprimento e densidade relativa de 49%. A configuração da célula inicial é apresentada no Quadro 5.1, juntamente com o material correspondente, os tensores elástico e térmico, obtidos pela AH e NIAH, e os diagramas polares das componentes normalizadas E_{1111}^H , E_{1212}^H e Kt_{11}^H . As componentes são normalizadas e rotacionadas (entre 0 e 360°) em função de sua máxima componente.



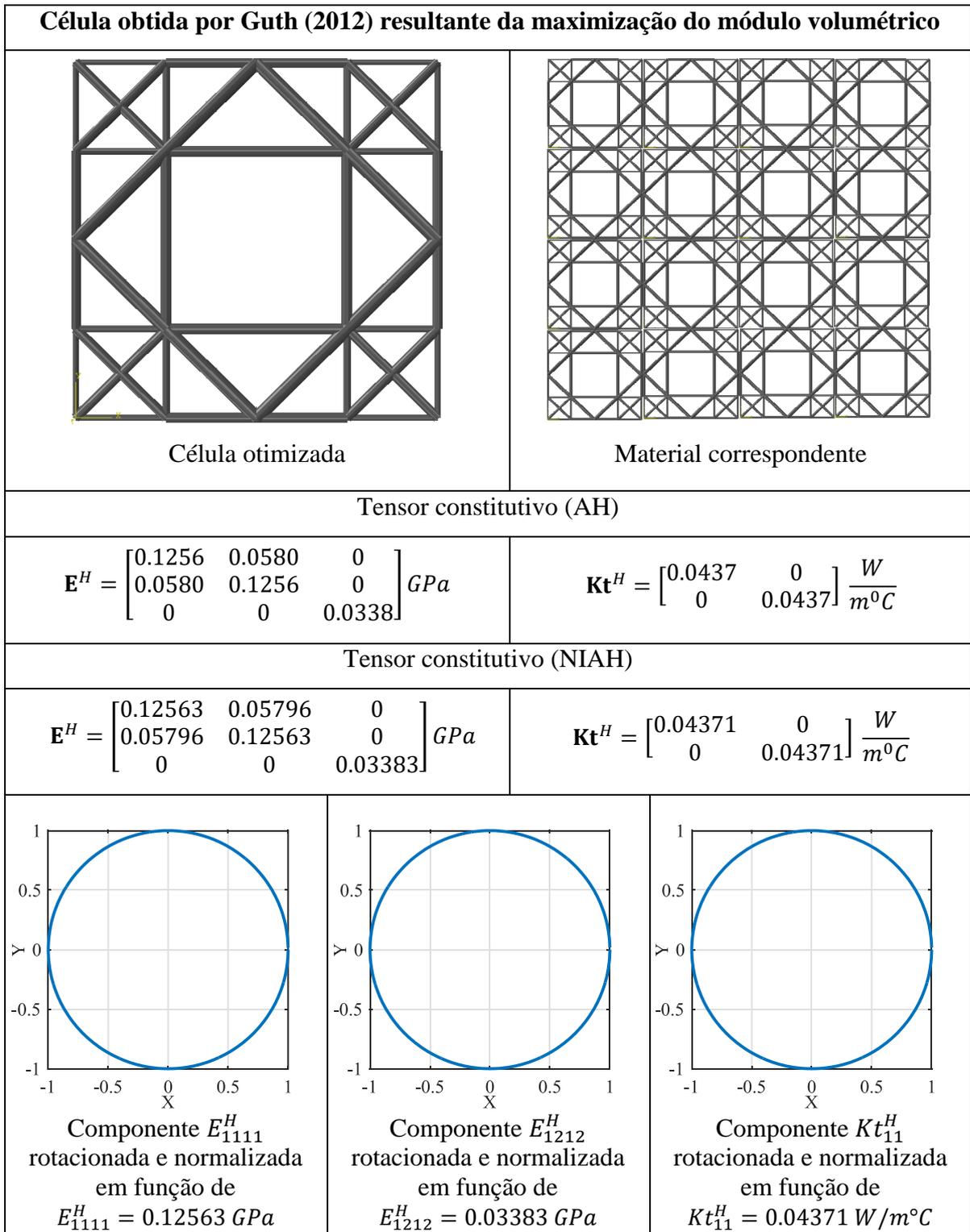
Quadro 5.1 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula inicial I.

Outra célula para a qual foram obtidas as propriedades elásticas e térmicas pela NIAH é a célula resultante da otimização para maximização do coeficiente de Poisson, obtida por Guth (2012). A comparação entre os resultados obtidos via NIAH e via AH é apresentado no Quadro 5.2.

Célula obtida por Guth (2012) resultante da maximização do coeficiente de Poisson		
		
Célula otimizada		
Material correspondente		
Tensor constitutivo (AH)		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.0739 & 0.0739 & 0 \\ 0.0739 & 0.0739 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.0372 & 0 \\ 0 & 0.0373 \end{bmatrix} \frac{W}{m^{\circ}C}$	
Tensor constitutivo (NIAH)		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.07390 & 0.07388 & 0 \\ 0.07388 & 0.07390 & 0 \\ 0 & 0 & 0.00001 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.03718 & 0 \\ 0 & 0.03735 \end{bmatrix} \frac{W}{m^{\circ}C}$	
		
Componente E_{1111}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1111}^H = 0.07390 GPa$	Componente E_{1212}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1212}^H = 0.00001 GPa$	Componente Kt_{11}^H rotacionada e normalizada em função de $Kt_{11}^H = 0.03735 W/m^{\circ}C$

Quadro 5.2 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula de máximo coeficiente de Poisson.

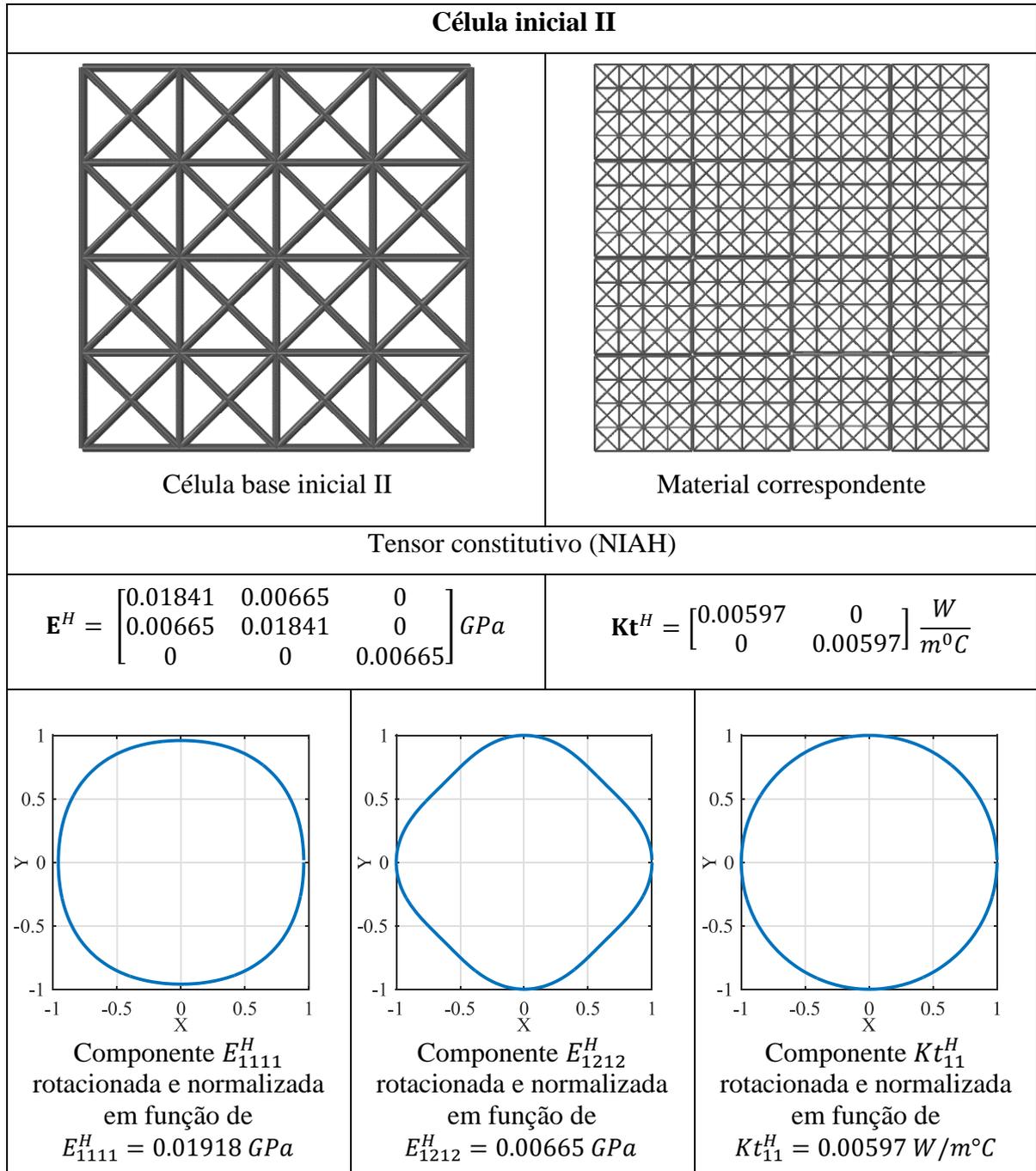
A terceira célula utilizada na comparação das propriedades é aquela encontrada por Guth (2012) para a maximização do módulo volumétrico, a qual está representada no Quadro 5.3.



Quadro 5.3 - Resultados da homogeneização via NIAH e AH para a célula de máximo módulo volumétrico.

Por fim, a última célula foi retirada de Muñoz-Rojas *et al.* (2011). No presente trabalho, esta célula é denominada de célula inicial II, sendo também formada por elementos de barra 2D, os quais possuem área inicial, módulo de elasticidade e condutividade térmica do material base iguais a $A = 1.12 \times 10^{-6} m^2$, $E = 210 GPa$ e $k = 50 W/m^{\circ}C$, respectivamente. Cada

lado da célula tem 0.1 m, e possui densidade relativa 20%, qual é mantida constante durante o processo de otimização. Suas propriedades efetivas e diagramas polares são apresentados no Quadro 5.4.



Quadro 5.4 – Resultados da homogeneização via NIAH para a célula inicial II.

Observou-se que os resultados obtidos através da utilização da NIAH, quando truncados na quarta casa decimal, coincidem com os resultados obtidos por Guth (2012). Isto mostra que a nova metodologia realmente é precisa e os códigos desenvolvidos para cálculo dos tensores são válidos.

O tempo computacional gasto para o cálculo do tensor elástico foi de 82 segundos e 56 segundos para cálculo do tensor térmico. A análise total, referente à aplicação de um campo de deslocamentos ou temperaturas, gasta em média 27 segundos. Ou seja, esse tempo é referente à aplicação de um campo de deslocamento prescrito, realização da análise estática ou térmica, obtenção das forças de reação (ou fluxo de calor), aplicação destas forças (mais condição de contorno periódica), realização da segunda análise estática para obtenção dos deslocamentos característicos e, por fim, aplicação desses deslocamentos e obtenção das forças de reação. Para obter esses resultados o computador usado dispõe de um processador Intel® Core i5-4440 CPU de 3.10 GHz e memória RAM de 32 GB.

5.2 RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO

Os dois modelos de células iniciais foram utilizados no processo de otimização. A célula inicial retirada do trabalho de Guth (2012), apresentada no Quadro 5.1, e a célula utilizada no trabalho de Muñoz-Rojas *et al.* (2011), apresentada no Quadro 5.4. Para ambas, as áreas das seções transversais são tomadas como variáveis de projeto e durante o processo de otimização a restrição de volume é imposta. Os limites das áreas são fixos em 1×10^{-9} e $1 \times 10^{-2} m^2$ e depois quando obtidas as células otimizadas, as áreas que obtiveram o valor mínimo são excluídas, a fim de representação apenas.

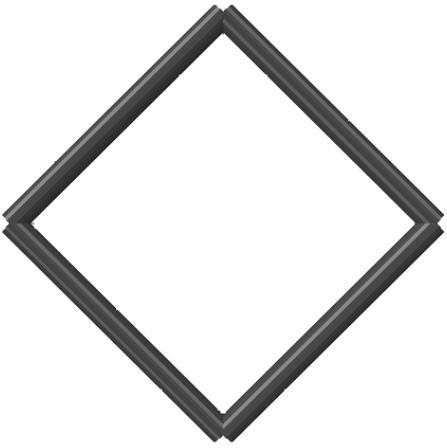
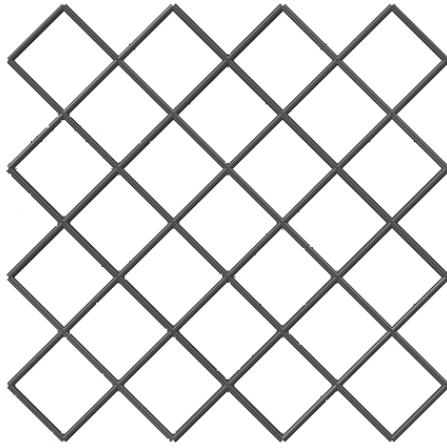
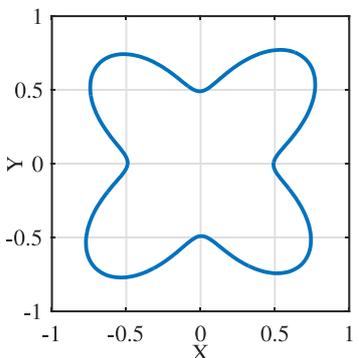
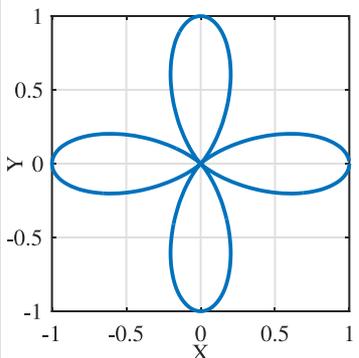
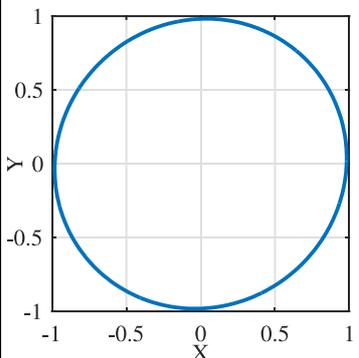
5.2.1 Resultados célula inicial I

5.2.1.1 Maximização do módulo de cisalhamento

A componente E_{1212}^H do tensor elástico é otimizada neste problema. No processo de otimização, foi utilizado um DOE de 300 amostras para gerar o modelo inicial e mais 220 pontos de preenchimento. Os resultados para este problema são apresentados no Quadro 5.5.

Os resultados obtidos através da NIAH são comparados com os resultados obtidos por Guth (2012), visto que a célula obtida neste trabalho é semelhante a célula obtida pelo autor citado. No entanto, as componentes E_{1122}^H , E_{2212}^H , E_{1211}^H e E_{1222}^H do tensor elástico não são nulas, isso ocorre porque a célula obtida não é simétrica e cada elemento seu apresenta área diferente dos demais. Assim quando calculado o tensor estas componentes não zeram. A justificativa para as áreas serem diferentes é devido ao método de otimização utilizado, visto que o processo

de otimização baseado em metamodelos se constrói a partir de um DOE qual é gerado aleatoriamente. Assim, é previsível que não se obtenha células totalmente simétricas, como as células obtidas por Guth (2012).

Maximização do módulo de cisalhamento		
		
Célula otimizada	Material correspondente	
Tensor constitutivo (AH) (Guth(2012))		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.0918 & 0.0918 & 0 \\ 0.0918 & 0.0918 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0918 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.0437 & 0 \\ 0 & 0.0437 \end{bmatrix} \frac{W}{m^0C}$	
Tensor constitutivo (NIAH)		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.09178 & 0.09179 & 0.00175 \\ 0.09179 & 0.09178 & 0.00175 \\ 0.00175 & 0.00175 & 0.09179 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.04371 & 0.00083 \\ 0.00083 & 0.04371 \end{bmatrix} \frac{W}{m^0C}$	
		
Componente E_{1111}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1111}^H = 0.18708 GPa$	Componente E_{1212}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1212}^H = 0.09179 GPa$	Componente Kt_{11}^H rotacionada e normalizada em função de $Kt_{11}^H = 0.04371 W/m^0C$

Quadro 5.5 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial I.

O ganho em relação à função objetivo foi de 3.8 vezes, resultando em um módulo de cisalhamento de 91.8 MPa. Através dos diagramas polares, percebe-se que o material tem máxima rigidez normal a 45° e máxima rigidez ao cisalhamento nas direções paralelas aos eixos x e y . Observa-se, ainda, que o material obtido para esta célula, apresenta isotropia térmica.

A curva de convergência para função objetivo em questão é apresentada na Figura 5.1. Nesta figura, observa-se que com aproximadamente 100 pontos de preenchimento já foi encontrado o máximo da função e que, a partir disso, esta manteve-se constante.

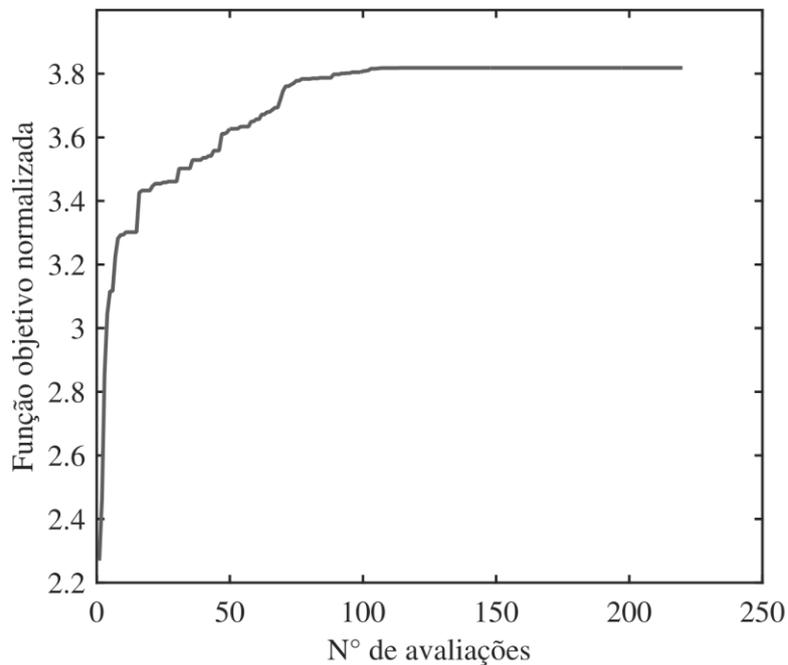


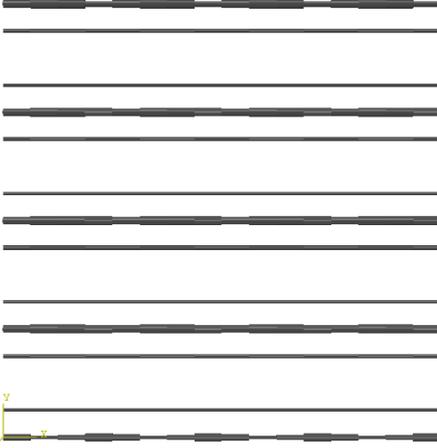
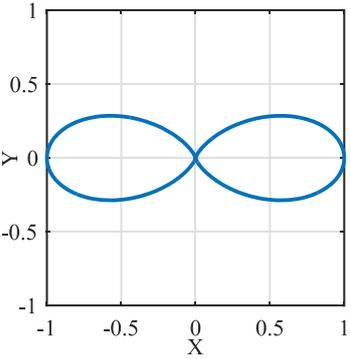
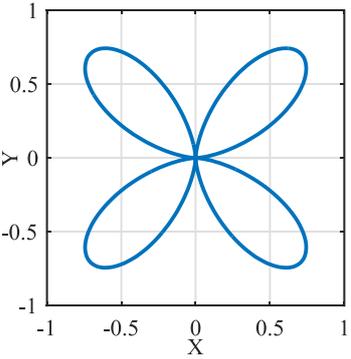
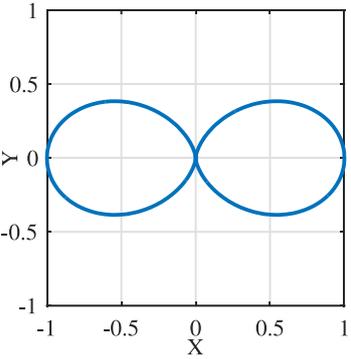
Figura 5.1 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial I.

5.2.1.2 Maximização da condutividade térmica na direção x

A componente Kt_{11}^H do tensor térmico homogeneizado é maximizada neste problema. Para isso, utilizou-se um DOE inicial de 300 amostras e 450 pontos de preenchimento. A célula encontrada é apresentada no Quadro 5.6.

Esse resultado é importante para validar os demais resultados, visto que é evidente que os elementos devem estar alinhados na direção x , pois quando configurados desta forma apresentam maior condutividade térmica e rigidez nesta direção. Guth (2012) também obteve esta configuração de célula e máxima condutividade de $0.08742 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. Porém, a célula obtida por ele apresenta maior uniformidade no valor das áreas dos elementos. Isso pode ser observado

comparando-se a célula obtida neste trabalho com aquela da Figura 5.2, obtida por Guth (2012). Novamente a diferença nas áreas se justifica pelo método de otimização utilizado.

Maximização da condutividade térmica na direção x		
 <p>Célula otimizada</p>	 <p>Material correspondente</p>	
Tensor constitutivo (AH) (Guth(2012))		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.3672 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.0874 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \frac{W}{m^{\circ}C}$	
Tensor constitutivo (NIAH)		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.36716 & 0 & 0 \\ 0 & 0.00001 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.08742 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \frac{W}{m^{\circ}C}$	
 <p>Componente E_{1111}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1111}^H = 0.36716 GPa$</p>	 <p>Componente E_{1212}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1212}^H = 0.09179 GPa$</p>	 <p>Componente Kt_{11}^H rotacionada e normalizada em função de $Kt_{11}^H = 0.08742 W/m^{\circ}C$</p>

Quadro 5.6 - Resultados referentes à maximização da condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.



Figura 5.2 - Célula obtida por Guth (2012) referente à maximização da condutividade térmica na direção x.

O material obtido possui máxima rigidez ao cisalhamento em um ângulo de 45° e apresentou ganho na função objetivo de 2.2 vezes, em relação ao cisalhamento da célula unitária inicial. Pelo processo de otimização a obtenção da máxima condutividade térmica se deu em aproximadamente 300 pontos de preenchimento e isso pode ser observado pela curva de convergência na Figura 5.3.

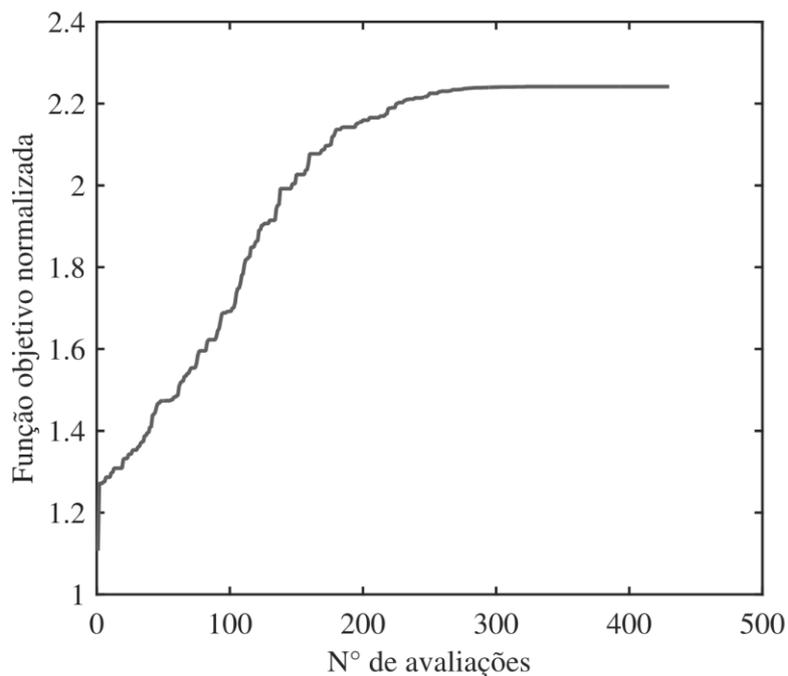


Figura 5.3 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização da condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.

5.2.1.3 Maximização do módulo de cisalhamento e da condutividade térmica na direção x

A maximização da soma das componentes E_{1212}^H e Kt_{11}^H foi avaliada nesta seção, conforme função objetivo da Equação (4.32). No processo de otimização utilizou-se um DOE de 300 amostras mais 500 pontos de preenchimento. A configuração da célula obtida é a mesma que foi encontrada para o problema de maximização do módulo de cisalhamento (ver Quadro 5.7) e a mesma célula encontrada pelo autor Guth (2012). O aumento da função objetivo foi de 2.15 vezes, conforme curva de convergência da Figura 5.4.

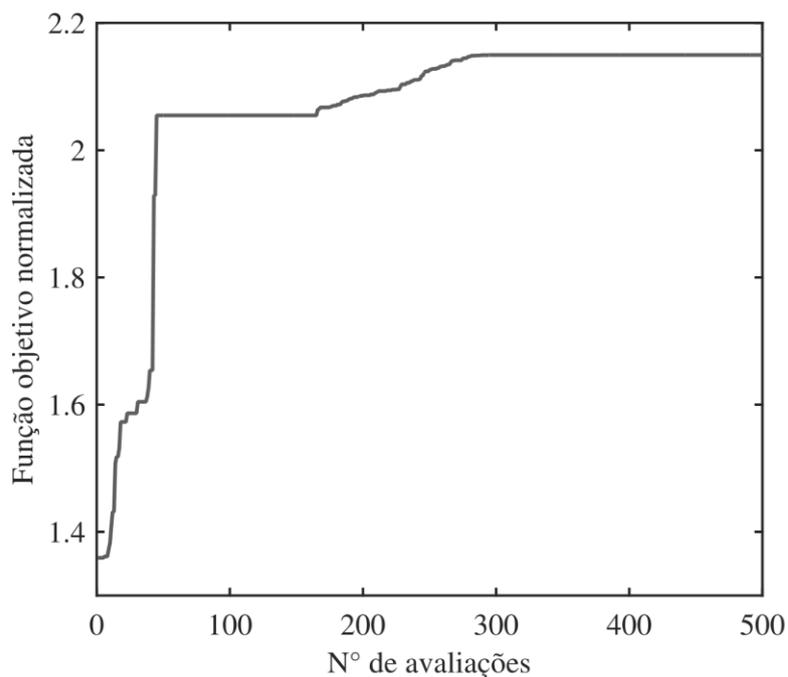
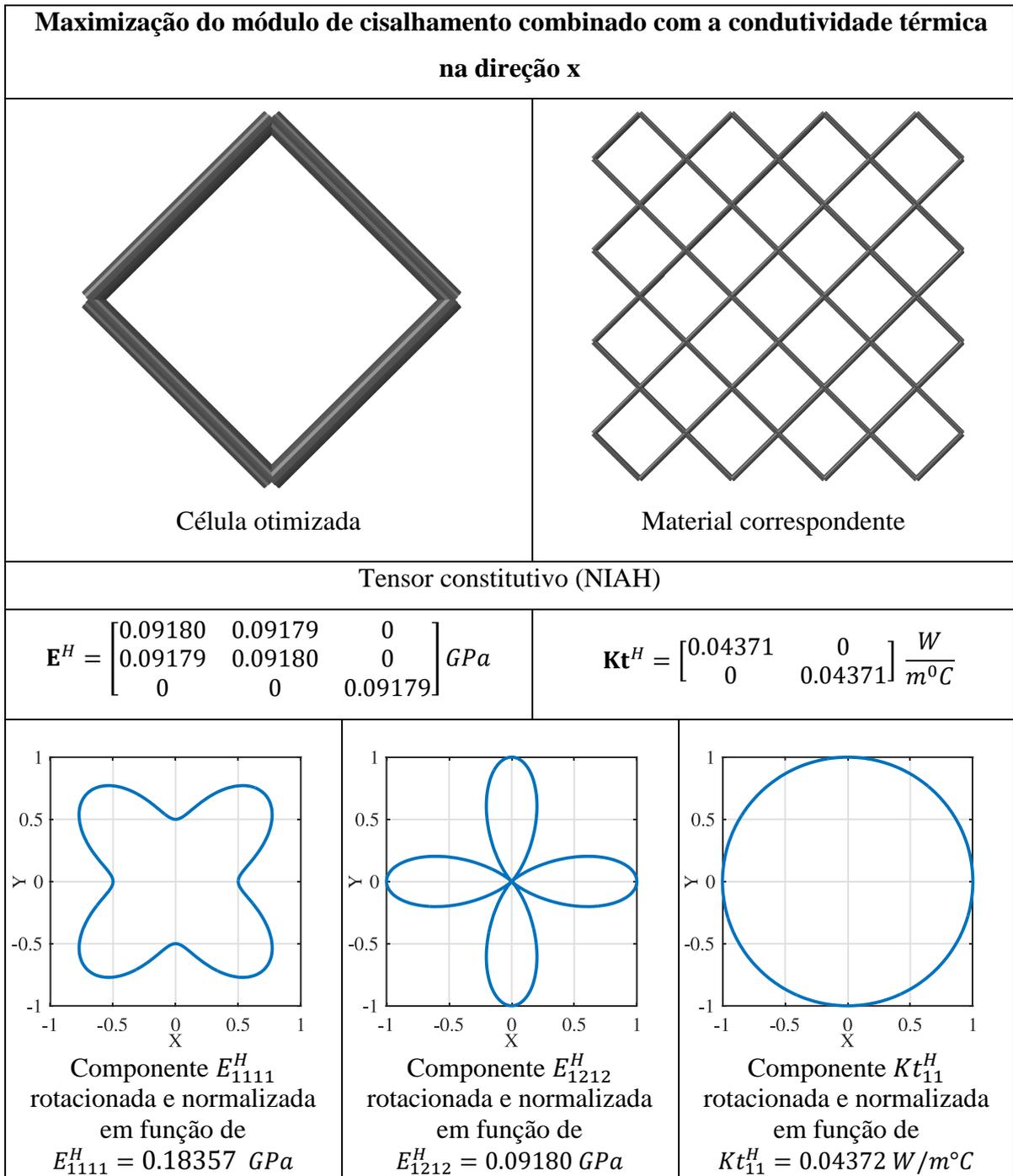


Figura 5.4 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.

Novamente o material apresenta máxima rigidez normal a 45° , máxima rigidez ao cisalhamento nas direções paralelas aos eixos x e y e apresenta comportamento isotrópico em relação à condutividade térmica.

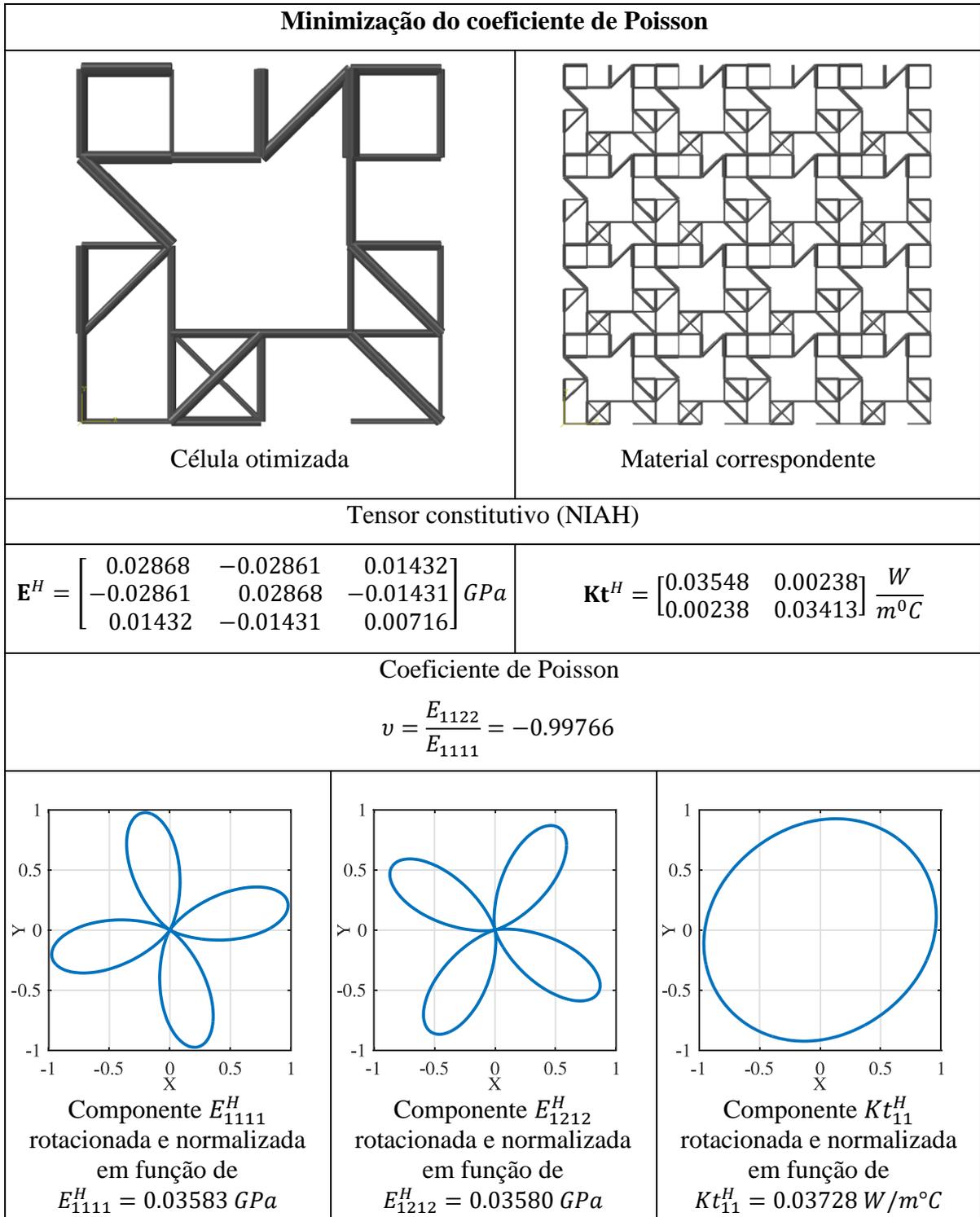


Quadro 5.7 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento combinado com a condutividade térmica na direção x para a célula inicial I.

5.2.1.4 Minimização do coeficiente de Poisson

Neste caso, utilizou-se um DOE de 300 amostras e mais 420 pontos de preenchimento. Obteve-se uma célula com configuração notavelmente mais complexa que as demais células otimizadas (ver Quadro 5.8), apresentando um coeficiente de Poisson de -0.99766, o que representa um ganho de 4.24 vezes em relação a célula inicial I. O autor Guth (2012) também

obteve geometrias mais complexas para este mesmo problema. Além disso, obteve dois resultados e em ambos obteve um coeficiente de Poisson de -0.99.



Quadro 5.8 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I.

Conforme os diagramas polares do Quadro 5.8, a célula obtida possui máxima rigidez normal a 30° , ao cisalhamento a 60° e condutividade térmica na direção x a 40° .

O gráfico de convergência da função objetivo é apresentado na Figura 5.5, no qual é possível observar uma região de provável mínimo local, para o qual o ganho é de 3.6 vezes e um coeficiente de Poisson de -0.8475. Para esse valor de coeficiente de Poisson a configuração da célula é similar àquela do Quadro 5.8, porém as áreas dos elementos são diferentes. Casos onde o orçamento computacional é menor, é possível encontrar materiais com coeficientes de Poisson negativos quase ótimos.

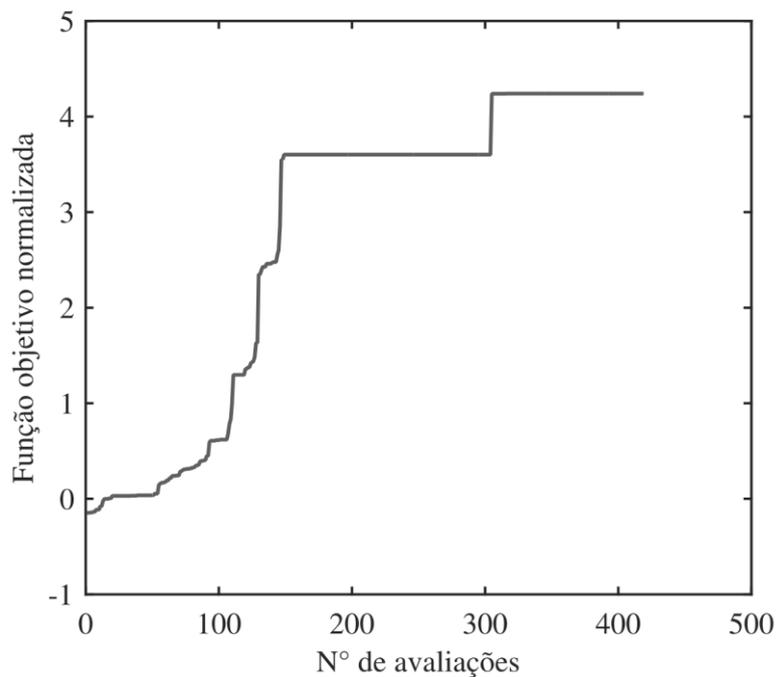


Figura 5.5 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I.

Um material que apresente coeficiente de Poisson positivo, quando submetido a um carregamento axial trativo, apresenta uma deformação transversal negativa. Ou seja, a largura do seu corpo diminui na direção transversal e se alonga na direção axial. O material correspondente à célula inicial I, apresenta esse comportamento, pois possui coeficiente de Poisson de 0.236. A Figura 5.6 apresenta o comportamento para este material quando submetido a uma carga axial na direção horizontal, em um modelo com 64 células (oito células em cada direção).

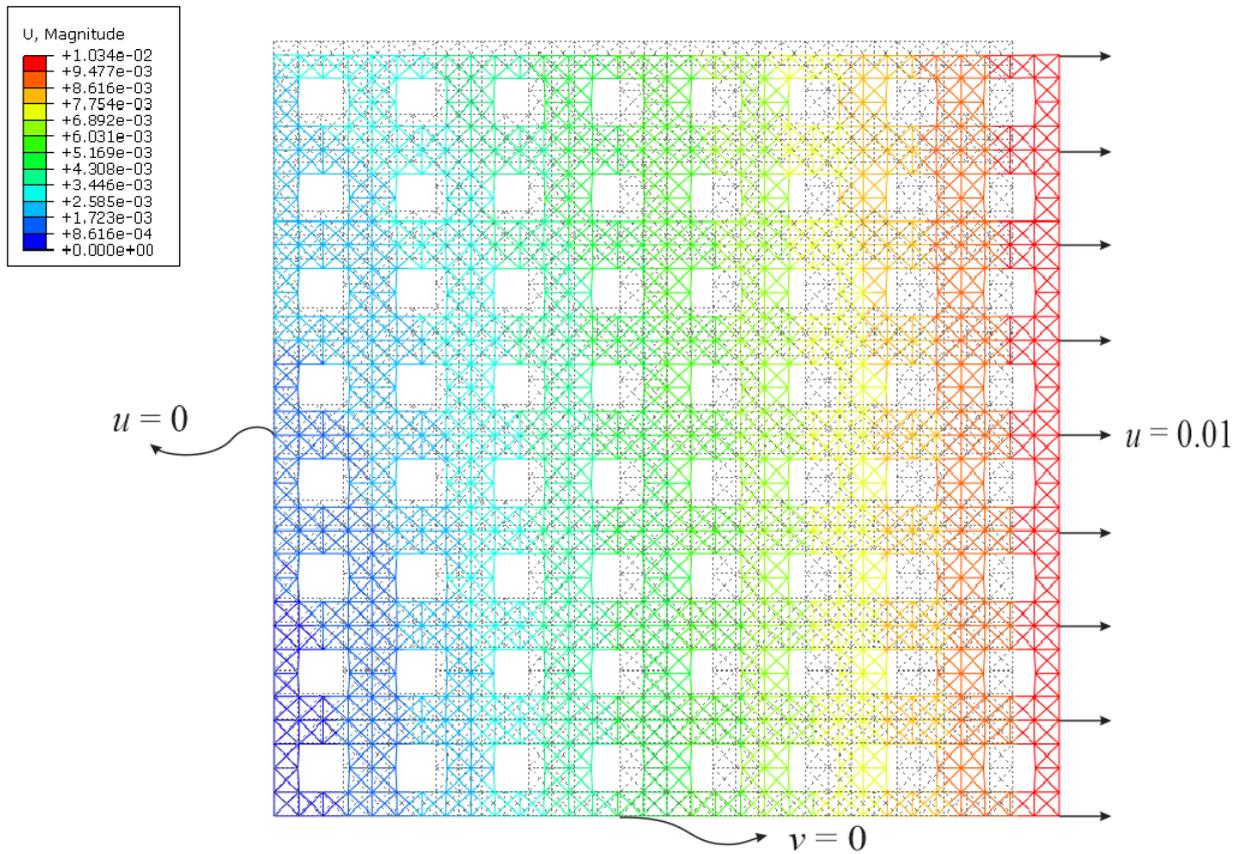


Figura 5.6 - Material deformado correspondente a célula inicial I.

Materiais com coeficiente de Poisson negativo são denominados materiais auxéticos. Esses se expandem em todas as direções quando tracionados em apenas uma direção. Algumas estruturas celulares típicas auxéticas podem ser vistas na Figura 5.7. Para a célula encontrada no Quadro 5.8 pode-se identificar a formação de uma estrutura celular auxética, uma espécie de “estrela”, a qual é representada em vermelho na Figura 5.8 e é similar à Figura 5.7(d).

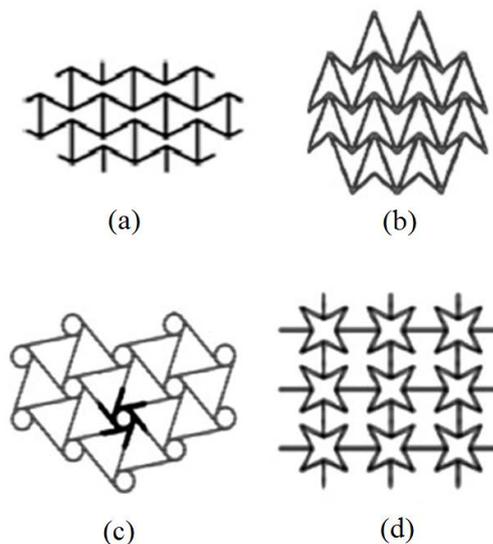


Figura 5.7 - Exemplos de estruturas auxéticas.
Fonte: Adaptado de Prawoto (2012).

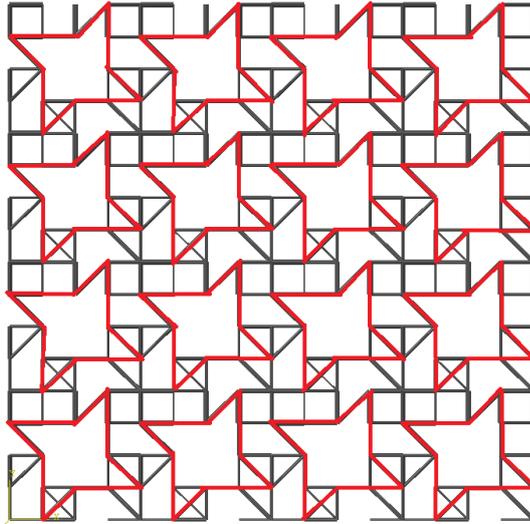


Figura 5.8 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial I indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).

Ao aplicar um carregamento trativo horizontal nesse material tem-se o efeito de expansão na direção transversal, como pode ser comprovado pela simulação do material correspondente no modelo com 64 células (Figura 5.9). Entretanto, observa-se que a expansão é oblíqua em relação à solicitação, pois a “estrela” está em posição inclinada em relação àquela da Figura 5.7(d). Analisando-se a célula inicial, verifica-se que sua configuração não permite encontrar uma estrutura tipo estrela orientada exatamente conforme àquela da Figura 5.7(d), visto que as posições dos nós não são variáveis de projeto. Já o deslocamento superior não uniforme no modelo da Figura 5.9 é, provavelmente, devido ao “efeito de borda”, pois foi utilizado um número finito de células.

Na análise da deformação dos materiais correspondentes, tanto da célula inicial I quanto da célula otimizada, os nós da extremidade esquerda foram restritos na direção x , os nós da extremidade inferior foram restritos na direção y e aplicou-se um deslocamento de $0.01 m$ nos nós da extremidade direita. As linhas pontilhadas na cor cinza representam o material em seu estado sem deformação. Para todos os casos o fator de escala para a representação do campo de deslocamentos foi igual a 5.

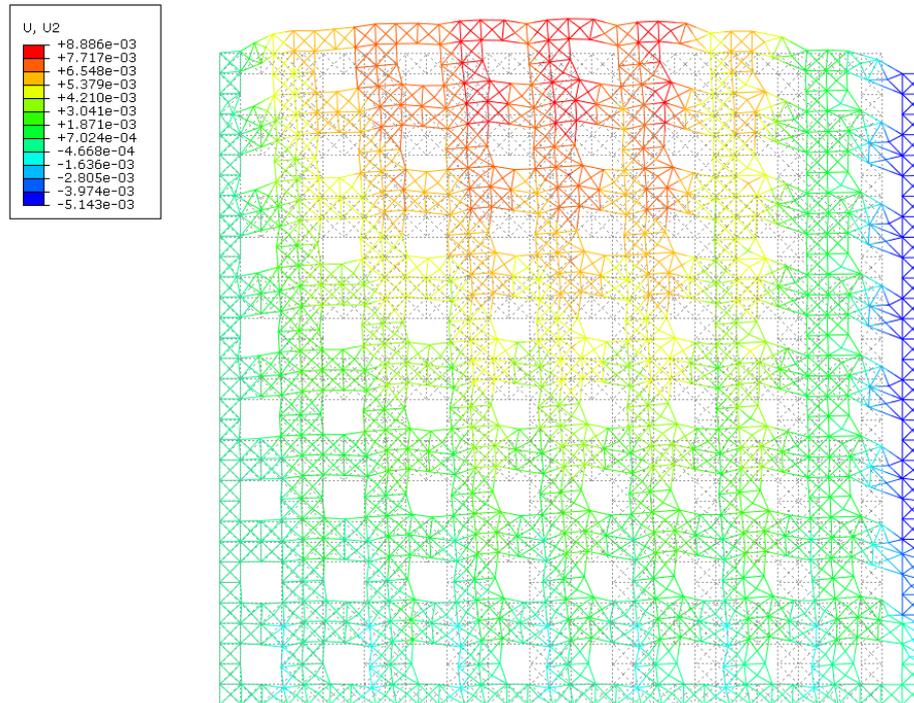


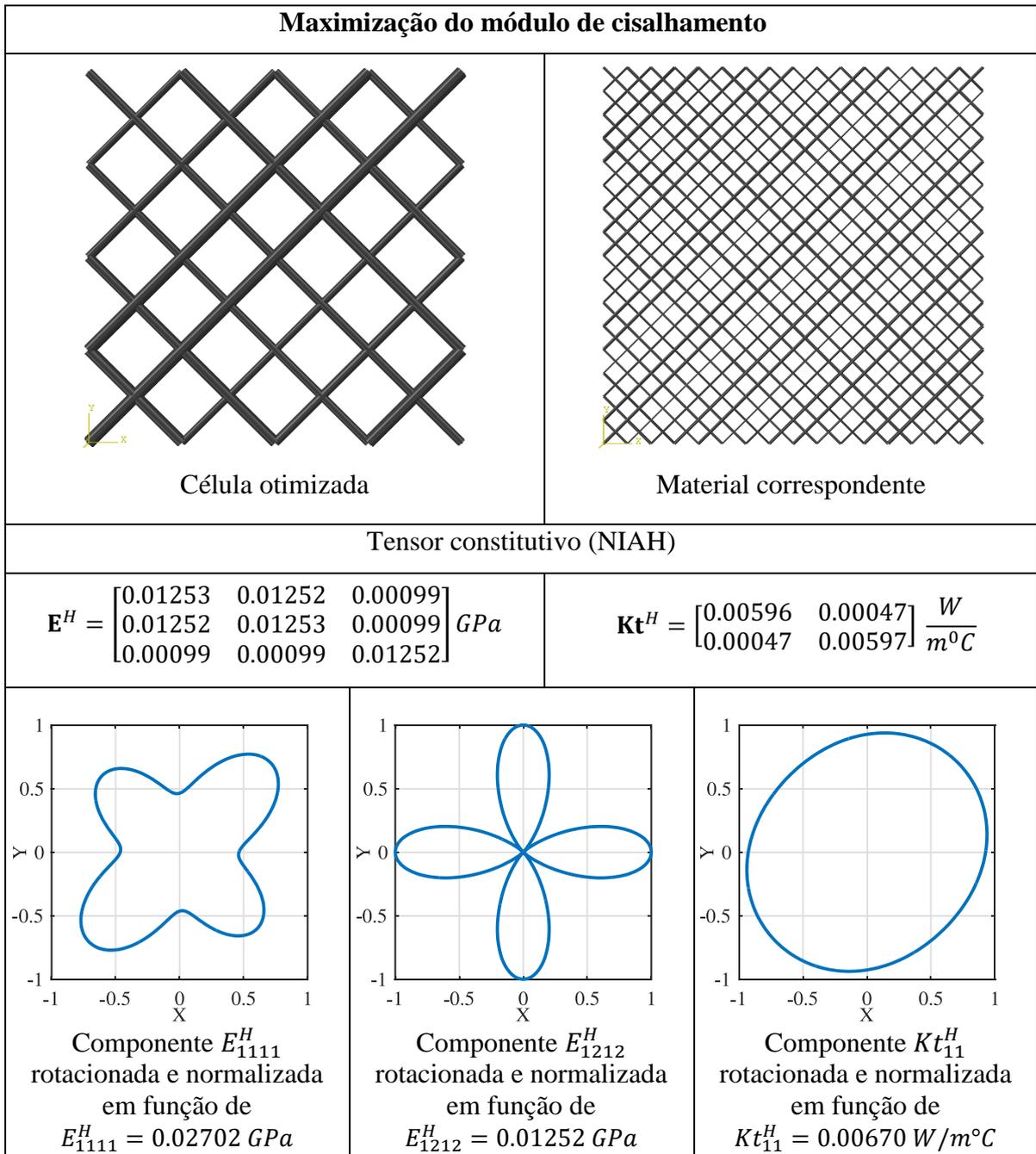
Figura 5.9 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente Poisson para a célula inicial I (mapa de deslocamento na direção vertical).

5.2.2 Resultados célula inicial II

5.2.2.1 Maximização do módulo de cisalhamento

Neste problema, a componente E_{1212}^H do tensor elástico foi novamente maximizada e como resultado da otimização tem-se a célula apresentada no Quadro 5.9. No processo de otimização utilizou-se um DOE inicial de 300 amostras e mais 750 pontos de preenchimento.

A célula obtida é similar àquela encontrada para a maximização do módulo de cisalhamento da célula inicial I, no entanto, devido à diferença nos valores das áreas dos elementos (devido a assimetria da célula) a rigidez normal e a condutividade térmica na direção x foram perdidas em algumas direções do material. A curva de convergência para a função objetivo em questão é apresentada na Figura 5.10, e o ganho em relação à célula inicial foi de 1.88 vezes.



Quadro 5.9 - Resultados referentes a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial II.

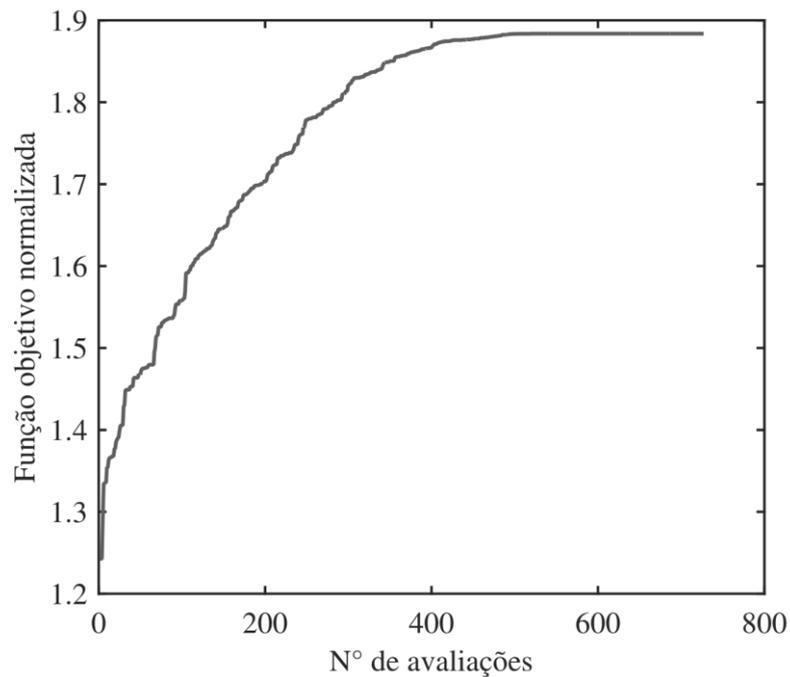


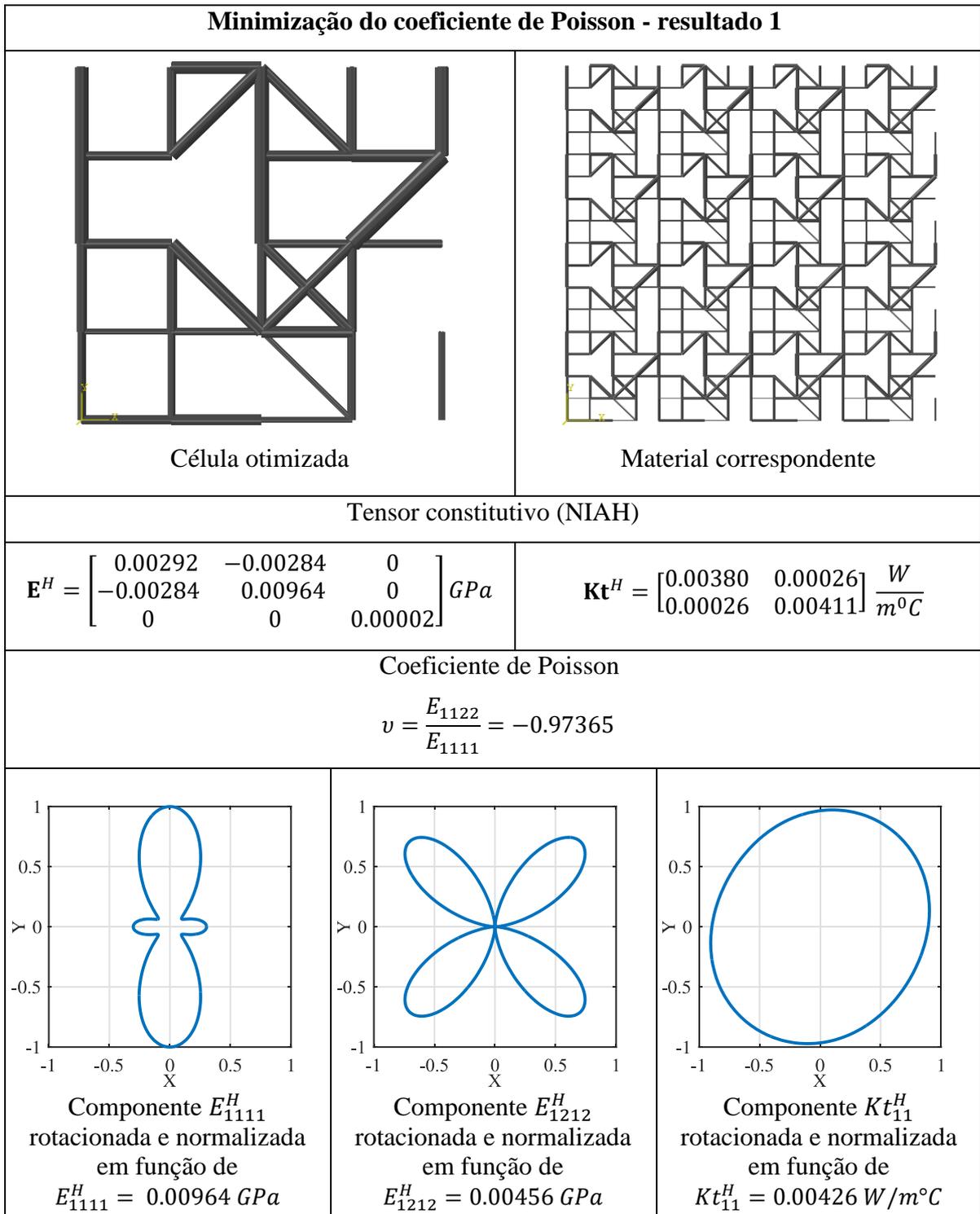
Figura 5.10 - Curva de convergência da função objetivo para a maximização do módulo de cisalhamento para a célula inicial II.

5.2.2.2 Minimização do coeficiente de Poisson

Dois resultados foram encontrados na minimização do coeficiente de Poisson da célula inicial II. O primeiro resultado está apresentado no Quadro 5.10, para o qual o valor ótimo obtido foi de -0.97365 , através de um DOE inicial de 300 amostras e 500 pontos de preenchimento.

O material obtido apresenta máxima rigidez normal na direção y , ao cisalhamento a 45° e máxima condutividade térmica na direção x a 60° . O aumento na função objetivo foi de 2.7 vezes. A convergência da função objetivo pode ser observada na Figura 5.11 e o mínimo foi encontrado com 300 iterações e que a partir disso manteve-se constante.

O coeficiente de Poisson da célula inicial II é 0.36 , ou seja, esse material quando submetido a uma carga axial tem uma deformação transversal negativa. Esse comportamento pode ser visto na Figura 5.12, onde as linhas pontilhadas na cor cinza representam o material em seu estado sem carregamento. A análise foi feita em um modelo com 64 células (oito células em cada direção), tomando as mesmas condições de contorno e carregamento utilizado para a análise da célula I e da célula otimizada, na Seção 5.2.1.4.



Quadro 5.10 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1).

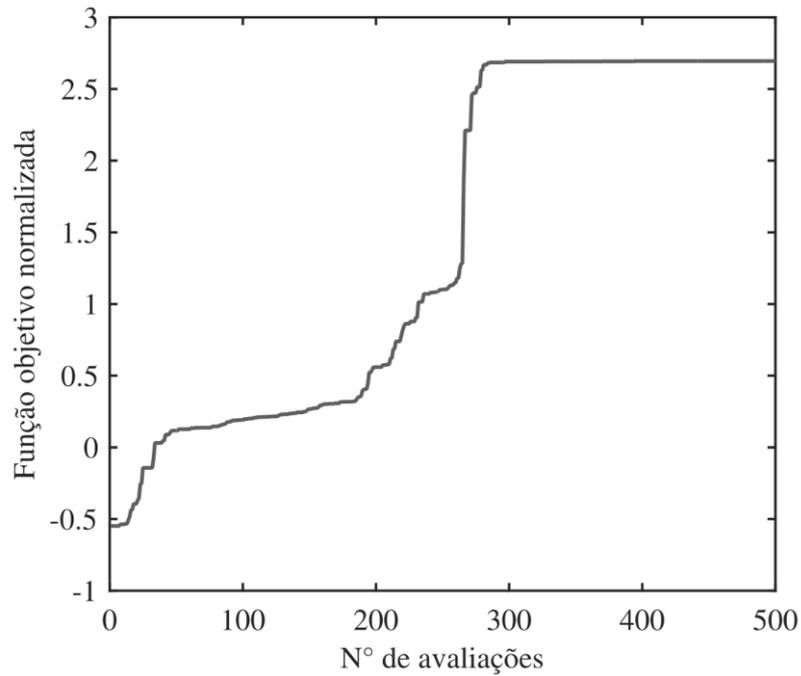


Figura 5.11 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1).

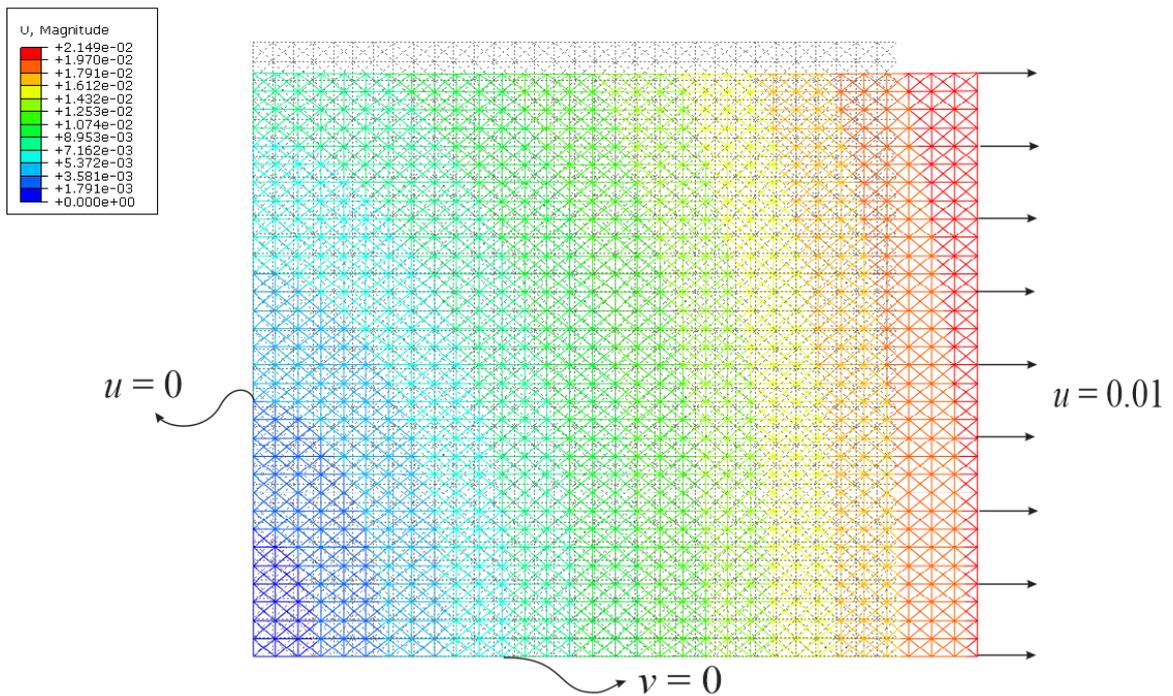


Figura 5.12 - Material deformado correspondente à célula inicial II.

A célula encontrada (Quadro 5.10) apresenta estrutura típica auxética, semelhante a um hexágono. Esta está destacada em vermelho na Figura 5.13 e pode ser comparada com a Figura 5.7(a). Neste caso, quando aplica-se uma carga trativa na direção x, o mesmo expande-se perpendicularmente, como pode ser visto no resultado da simulação do material

correspondente, apresentado na Figura 5.14. Pode-se observar uma expansão quase uniforme na direção vertical do material. Ou seja, o efeito da expansão é perpendicular à aplicação da carga.

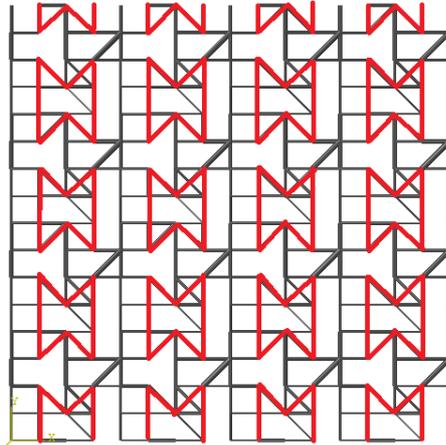


Figura 5.13 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 1) indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).

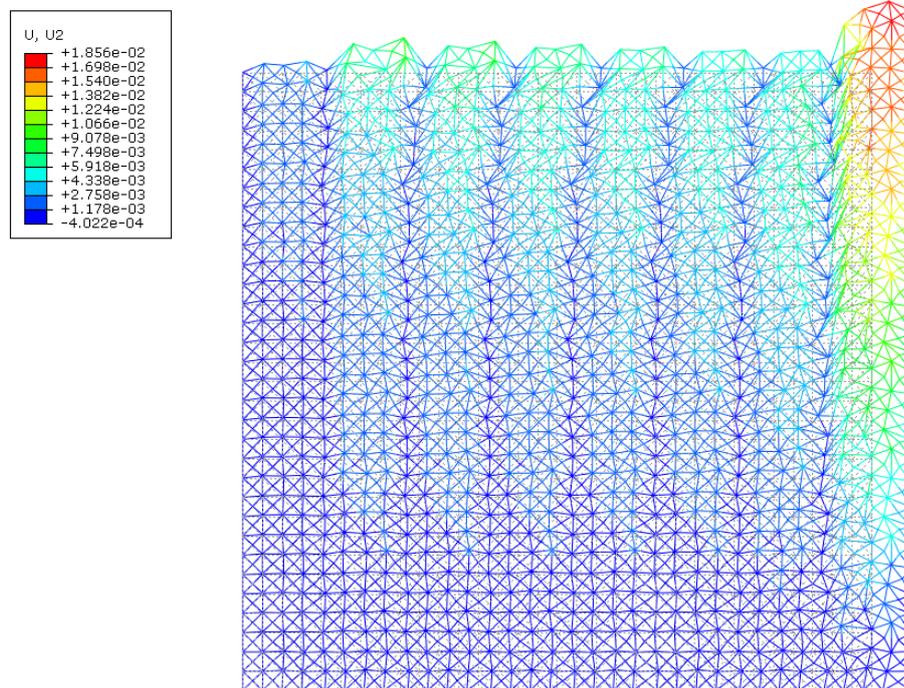


Figura 5.14 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula II - resultado 1 (mapa de deslocamento na direção vertical).

O segundo resultado encontrado para este problema está apresentado no Quadro 5.11, para o qual encontrou-se um coeficiente de Poisson de -0.97720 utilizando-se um DOE de 350 amostras e mais 600 pontos de preenchimento.

A melhora da função objetivo para este problema também foi de 2.7 vezes, sendo que a curva de convergência pode ser vista na Figura 5.15. O material correspondente a essa célula unitária apresenta máxima rigidez normal a 80° , rigidez ao cisalhamento a 30° e máxima condutividade térmica a 60° .

Para a célula do Quadro 5.11 pode-se identificar, em vermelho, na Figura 5.16, também uma espécie de “estrela”, característica de estrutura auxética. Neste caso, ao analisar-se o material quando sujeito à uma solicitação trativa na direção horizontal, a expansão é inclinada. Esse comportamento pode ser observado pela simulação do material correspondente, cujo resultado está representado na Figura 5.17 em modelo com 64 células. Como no caso da célula inicial 1, isso é devido à estrutura tipo estrela estar em posição inclinada em relação àquela da Figura 5.7(d).

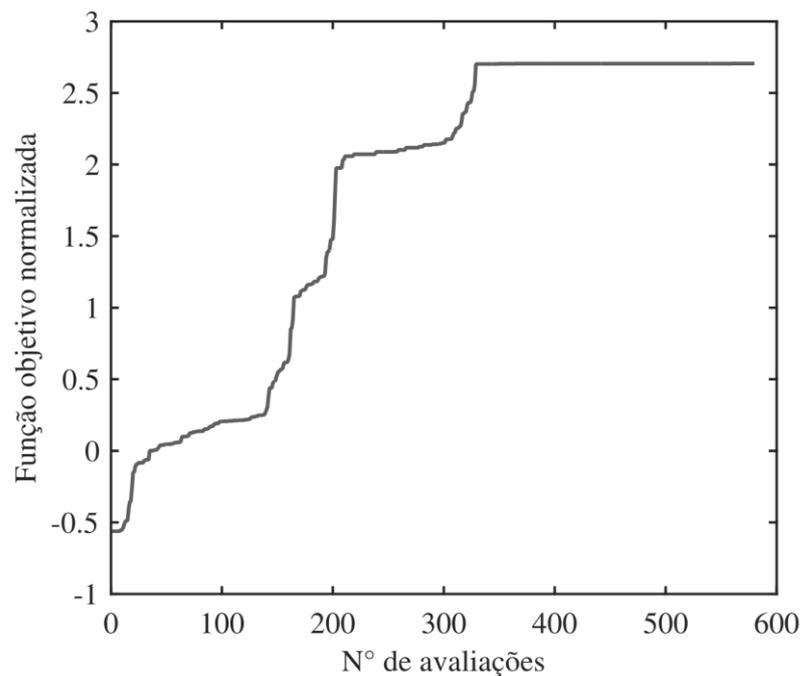
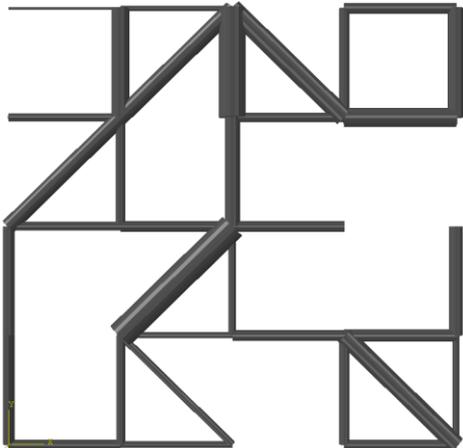
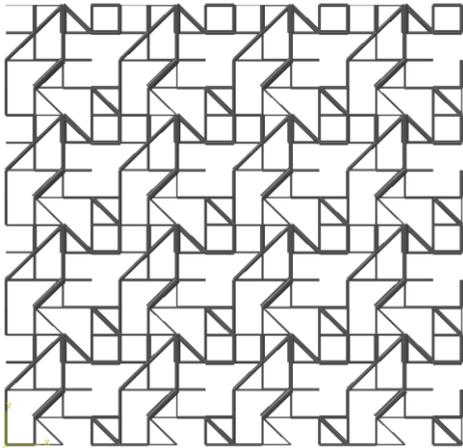
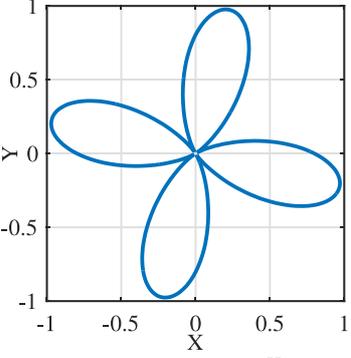
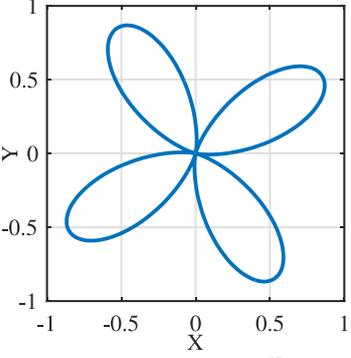
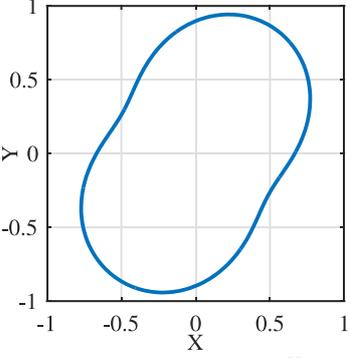


Figura 5.15 - Curva de convergência da função objetivo para a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2).

Minimização do coeficiente de Poisson- resultado 2		
 <p>Célula otimizada</p>	 <p>Material correspondente</p>	
Tensor constitutivo (NIAH)		
$\mathbf{E}^H = \begin{bmatrix} 0.00269 & -0.00263 & -0.00132 \\ -0.00263 & 0.00271 & 0.00132 \\ -0.00132 & 0.00133 & 0.00068 \end{bmatrix} GPa$	$\mathbf{Kt}^H = \begin{bmatrix} 0.00263 & 0.00073 \\ 0.00073 & 0.00354 \end{bmatrix} \frac{W}{m^{\circ}C}$	
Coeficiente de Poisson		
$\nu = \frac{E_{1122}^H}{E_{1111}^H} = -0.97720$		
 <p>Componente E_{1111}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1111}^H = 0.00337 GPa$</p>	 <p>Componente E_{1212}^H rotacionada e normalizada em função de $E_{1212}^H = 0.00333 GPa$</p>	 <p>Componente Kt_{11}^H rotacionada e normalizada em função de $Kt_{11}^H = 0.00395 W/m^{\circ}C$</p>

Quadro 5.11 - Resultados referentes a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2).

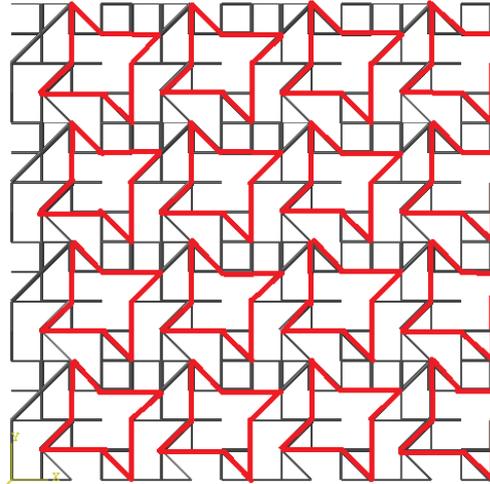


Figura 5.16 - Célula otimizada referente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula inicial II (resultado 2) indicando a formação típica de uma estrutura celular auxética (em vermelho).

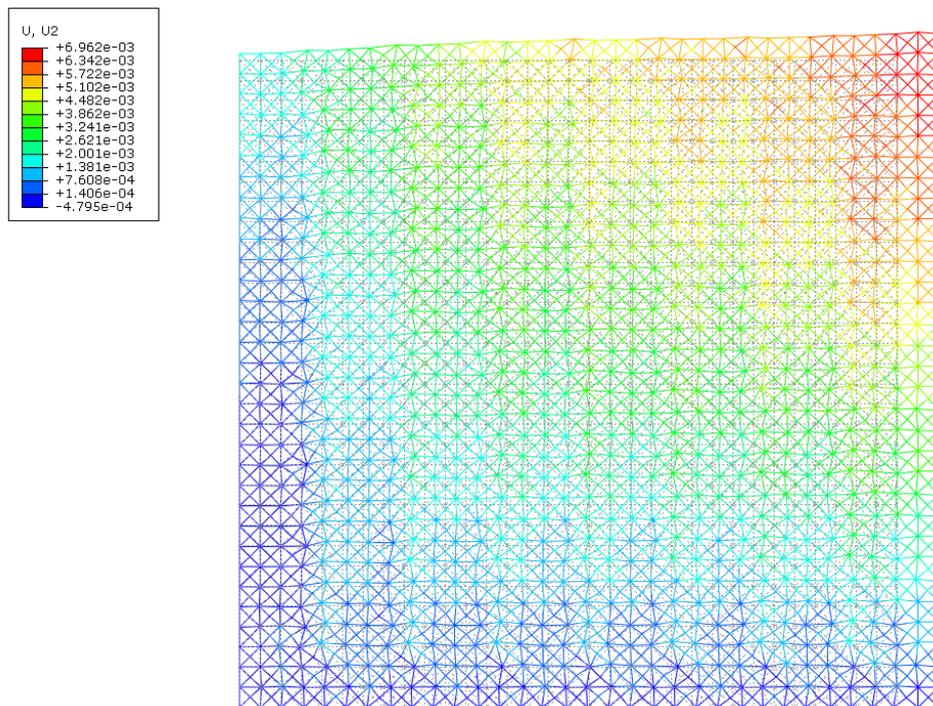


Figura 5.17 - Material deformado correspondente a minimização do coeficiente de Poisson para a célula II - resultado 2 (mapa de deslocamento na direção vertical).

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

6.1 CONCLUSÕES GERAIS

Este trabalho teve como objetivo a utilização da nova implementação da homogeneização assintótica (NIAH) na obtenção das propriedades efetivas de materiais treliçados, em combinação com uma técnica baseada em metamodelos (Kriging) para a otimização desses materiais. No processo de otimização, foi utilizado o algoritmo de programação quadrática sequencial (SQP) como otimizador local, associado a um critério de preenchimento para, iterativamente, refinar o modelo de Kriging. Assim, a partir dos resultados obtidos e apresentados nos capítulos anteriores, as seguintes conclusões podem ser destacadas:

- Para um mesmo problema, as propriedades obtidas pela NIAH foram comparadas com propriedades obtidas pela técnica convencional da homogeneização assintótica (AH), o que comprovou a equivalência dos métodos. A utilização da NIAH permitiu que as propriedades fossem obtidas de forma rápida, pois softwares de elementos finitos podem ser utilizados como caixas pretas nos cálculos de deslocamentos, temperaturas, fluxos de calor e forças. Além disso, o método permite que qualquer tipo de elemento disponível no software comercial seja utilizado, sem qualquer implementação adicional. Ao contrário da AH, na NIAH não é necessário implementar algoritmos específicos para cada tipo de problema.
- Na etapa de construção do modelo de Kriging das células analisadas, observou-se um pouco de dificuldade para gerar o modelo, devido ao grande número de variáveis (60 e 72 variáveis), o que levou à adição de muitos pontos de preenchimento. Isso indica que o critério de preenchimento utilizado não é muito eficiente. Porém, mesmo com dificuldades para se ajustar aos dados, ainda assim foi possível encontrar resultados que estão presentes na literatura e resultados onde a célula obtida fosse quase simétrica, como foi o caso da célula otimizada para máximo módulo de cisalhamento e simétrica para o caso da maximização do módulo de cisalhamento e condutividade térmica na direção x , ambos os resultados foram obtidos para a célula inicial I.
- Um conjunto de geometrias ótimas foi apresentado e várias delas foram validadas com os resultados encontrados no trabalho de Guth (2012). Mesmo sem aplicação de restrição de isotropia, encontrou-se materiais isotrópicos para a propriedade térmica,

como foi o caso da maximização do módulo de cisalhamento e condutividade térmica na direção x . Além disso, para outros casos obtiveram-se materiais quase isotrópicos.

- No problema de minimização do coeficiente de Poisson, conseguiu-se obter valores próximos de -1 . Na otimização da célula inicial I obteve-se -0.99 com tensor térmico quase isotrópico e para a célula inicial II ficou em torno de -0.97 e em um dos resultados da célula II também se obteve um tensor térmico quase isotrópico.
- Para todos os problemas de minimização do coeficiente de Poisson, o material correspondente à célula encontrada foi submetido a uma carga axial horizontal trativa, a fim de verificar o comportamento do material. E para ambos os casos o material se comportou como o esperado, ou seja, se expandiu na direção transversal.

6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para trabalhos futuros, como continuidade do presente trabalho, sugerem-se os seguintes tópicos:

- Implementar e modelar estruturas com elemento de viga, o que, para alguns casos, poderia representar de forma mais realista o comportamento desses materiais, visto que com elemento de barra não existe transmissão de momento nas rótulas.
- Utilizar a NIAH com outros tipos de elementos disponíveis no software comercial de elementos finitos para discretizar os elementos da célula base.
- Como o metamodelo de Kriging apresentou alguma dificuldade em problemas com alto número de variáveis (60 e 72), utilizá-lo aliado a alguma técnica que seja mais adequada para problemas de alta dimensão. Da bibliografia, pode-se citar duas possíveis técnicas para tratar esse problema: (i) aquela apresenta por Ulaganathan *et al.* (2016), na qual os autores representam o modelo de alta dimensão (HDMR, do inglês *high dimensional model representation*) com o auxílio do gradiente de Kriging melhorado (GEK-HDMR, onde GEK vem do inglês *Gradient Enhanced Kriging*) para explorar as vantagens do gradiente em modelar problemas de alta dimensão e (ii) a técnica proposta por Bouhlel *et al.* (2018), na qual foram desenvolvidos dois métodos que combinam o metamodelo de Kriging com a técnica de mínimos quadrados parciais.
- Aliar o metamodelo a um critério de preenchimento mais eficiente.
 - Incluir restrições de isotropia, visando maior aplicação para o material otimizado encontrado.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABAQUS. **Dassault Systèmes Simulia Corporation, Abaqus 6.14 Manual**. Providence. RI, USA, 2014.
- AHMED, M. Y. M.; QUIN, N. Comparison of response surface and kriging surrogates in aerodynamics design optimization of hypersonic spiked blunt bodies. **In: 13 International Conference on Aerospace Sciences & Aviation Technology, ASAT-13**, Cairo, Egito, v. 1, n. 1, p. 1-17, 2009.
- ARABNEJAD, S.; PASINI, D. Mechanical properties of lattice materials via asymptotic homogenization and comparison with alternative homogenization methods. **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 77, n. 1, p. 249-262, 2013.
- ARORA, J. S. **Introduction to optimum design**. 3. ed. San Diego, United States of America: Elsevier, 2012.
- BEER, F. P.; JOHNSTON JUNIOR, E. R.; DEWOLF, J. T.; MAZUREK, D. F. **Mecânica dos materiais**. 5. ed. [S.l.]: AMGH Editora, v. 1, 2011.
- BOGGS, P. T.; TOLLE, J. W. Sequential quadratic programming. **Acta Numerica**, v. 4, n. 1, p. 1-51, 1995.
- BOUHLEL, M. A.; BARTOLI, N., REGIS, R. G.; OTSMANE, A.; MORLIER, J. Efficient global optimization for high-dimensional constrained problems by using the Kriging models combined with the partial least squares method. **Engineering Optimization**, v. 1, n. 1, p. 1-16, 2018.
- CAI, Y.; XU, L.; CHENG, G. Novel numerical implementation of asymptotic homogenization method for periodic plate structures. **International Journal of Solids and Structures**, v. 51, n. 1, p. 284–292, 2014.
- CHENG, G.; XU, L. Two-scale topology design optimization of stiffened or porous plate subject to out-of-plane buckling constraint. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 54, n. 5, p. 1283–1296, 2016.
- CHENG, G.-D.; CAI, Y.-W.; XU, L. Novel implementation of homogenization method to predict effective properties of periodic materials. **Acta Mechanica Sinica**, v. 29, n. 4, p. 550–556, 2013.
- COOK, R. D.; MALKUS, D. S.; PLESHA, M. E.; WITT, R. J.; Coordinate transformation and selected analysis options. In: _____ **Concepts and applications of finite element analysis**. 4. ed. [S.l.]: Wiley, 2002. p. 271-299.
- CUI, C.; MENGQI, H.; WEIR, J. D.; WU, T. A recommendation system for meta-modeling: A meta-learning based approach. **Expert Systems With Applications**, v. 46, n. 1, p. 33-44, 2016.
- EVANS, K. E. Auxetic polymers: a new range of materials.. **Endeavour**, v. 15, n. 4, p. 170-174, 1991.
- FORRESTER, A. I. J.; SÓBESTER, A.; KEANE, A. J. **Engineering design via surrogate modelling - A practical guide**. 1. ed. Pondicherry, India: John Wiley & Sons, 2008.
- GERE, J. M. **Mecânica dos materiais**. 5. ed. [S.l.]: Pioneira Thomson Learning, v. 1, 2001.
- GIBSON, L. J.; ASHBY, M. F. **Cellular solids - structure and properties**. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997. 502 p.

GRIMA, J. N.; GATT, R. Perforated sheets exhibiting negative Poisson's ratios. **Advanced Engineering Materials**, v. 12, n. 6, p. 460-464, 2010.

GUEDES, J. M.; KIKUCHI, N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 83, n. 2, p. 143-198, 1989.

GUTH, D. C. **Otimização de materiais contínuos de células treliçadas com restrições de isotropia para aplicações termomecânicas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) - Universidade do Estado de Santa Catarina. Joinville, Santa Catarina, p. 156. 2012.

GUTH, D. C.; LUERSEN, M. A.; MUÑOZ-ROJAS, P. A. Optimization of three-dimensional truss-like periodic materials considering isotropy constraints. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 52, n. 5, p. 889–901, 2015.

HAO, P.; WANG, B.; TIAN, K.; LI, G.; DU, K.; NIU, F. Efficient optimization of cylindrical stiffened shells with reinforced cutouts by curvilinear stiffeners. **American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA)**, v. 54, n. 4, p. 1350-1363, 2016a.

HAO, P.; WANG, B.; TIAN, K.; LI, G.; DU, K.; LUAN, Y. Integrated optimization of hybrid-stiffness stiffened shells based on sub-panel elements. **Thin-Walled Structures**, v. 103, n. 1, p. 171-182, 2016b.

HASSANI, B.; HINTON, E. A review of homogenization and topology optimization I—homogenization theory for media with periodic structure. **Computers & Structures**, v. 69, n. 6, p. 707–717, 1998.

HASSANI, B.; HINTON, E. **Homogenization and Structural Topology Optimization - Theory, Practice and Software**. 1. ed. [S.l.]: Springer, v. 1, 1999. 148 p.

HOLLISTER, S. J.; KIKUCHI, N. Homogenization theory and digital imaging: A basis for studying the mechanics and design principles of bone tissue. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 43, n. 7, p. 586–596, 1994.

JASIUK, I.; CHEN, J.; THORPE, M. F. Elastic properties of two-dimensional composites containing polygonal holes. **Processing, Fabrication, and Manufacturing of Composite Materials**, v. 35, n. 1, 1992.

JOHNSON, M. E.; MOORE, L. M.; YLVIKAKER, D. Minimax and maximin distance designs. **Journal of Statistical Planning and Inference**, v. 26, n. 2, p. 131-148, 1990.

JONES, D. R. A Taxonomy of global optimization methods based on response surfaces. **Journal of Global Optimization**, v. 21, n. 4, p. 345–383, 2001.

JONES, D. R.; SCHONLAU, M.; WELCH, W. J. Efficient global optimization of expensive black-box functions. **Journal of Global Optimization**, v. 13, n. 4, p. 455–492, 1998.

KROETZ, H. M. **Meta-modelagem em confiabilidade estrutural**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, p. 109. 2015.

LOPHAVEN, S. N.; NIELSEN, H. B.; SONDERGAARD, J. **Aspects of the MATLAB Toolbox DACE**. Informatics and Mathematical Modelling. Dinamarca, p. 44. 2002.

LUTHER, D. T. **Homogenization of damaged concrete meso-structures using representative volume elements – implementation and application to slang**. Tese de Doutorado - Bauhaus Universität Weimar Germany. [S.l.], p. 91. 2005.

- MARTIN, J. D.; SIMPSON, T. W. Use of Kriging models to approximate deterministic computer models. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, v. 43, n. 4, p. 853-863, 2005.
- MATLAB 2015a, **The MathWorks**, Inc., Natick, Massachusetts, United States, 2015.
- MESSNER, M. C. Optimal lattice-structured materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 96, n. 1, p. 162-183, 2016.
- MORRIS, M. D.; MITCHELL, T. J. Exploratory designs for computational experiments. **Journal of Statistical Planning and Inference**, v. 43, n. 3, p. 381-402, 1995.
- MUÑOZ-ROJAS, P. A.; CARNIEL, T. A.; SILVA, E. C. N.; ÖCHSNER, A. Optimization of a unit periodic cell in lattice block materials aimed at thermo-mechanical applications. **Advanced Structured Materials**, v. 2, n. 1, p. 301-345, 2010.
- MUÑOZ-ROJAS, P. A.; LUERSEN, M. A.; CARNIEL, T. A.; BERTOTI, E. Design of multifunctional truss-like periodic materials using a global-local optimization method. **Defect and Diffusion Forum**, v. 312-315, n. 1, p. 1073-1078, 2011.
- NEVES, M. M.; RODRIGUES, H.; GUEDES, J. M. Optimal design of periodic linear elastic microstructures. **Computers & Structures**, v. 76, n. 1-3, p. 421-429, Junho 2000.
- NIU, B.; YAN, J. A new micromechanical approach of micropolar continuum modeling for 2-D periodic cellular material. **Acta Mechanica Sinica**, v. 32, n. 3, p. 456-468, 2016.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. **Numerical optimization**. 2. ed. New York: Springer New York, 2006.
- PASSOS, A. G. dos. **Otimização global eficiente aplicada a projetos de laminados de rigidez variável**. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, Paraná, p. 103. 2016.
- PRAWOTO, Y. Seeing auxetic materials from the mechanics point of view: A structural review on the negative Poisson's ratio. **Computational Materials Science**, v. 58, n. 1, p. 140-153, 2012.
- RAMU, M.; PRABHU, R. V. Metamodel based analysis and its applications: A review. **Acta Technica Corvinensis - Bulletin of Engineering**, v. 6, n. 2, p. 25-34, 2013.
- ROSSARI, L. B.; MUÑOZ-ROJAS, P. A. Um método geral para homogeneização das propriedades efetivas de materiais periódicos empregando programas fechados de simulação numérica. **24 Seminário de Iniciação Científica (SIC) - Universidade do Estado de Santa Catarina**, Florianópolis - SC, v. 1, n. 24, p. 1-10, 2014.
- ROUSTANT, O.; GINSBOURGER, D.; DEVILLE, Y. DiceKriging, DiceOptim: Two R packages for the analysis of computer experiments by Kriging-based metamodeling and optimization. **Journal of Statistical Software**, v. 51, n. 1, p. 55, 2012.
- RYBERG, A.-B.; BÄCKRYD, R. D.; NILSSON, L. **Metamodel-Based Multidisciplinary Design Optimization for Automotive Applications**. Linköping University. Linköping, p. 132. 2012.
- SADD, M. H. **Elasticity: Theory, applications and numerics**. 2. ed. [S.l.]: Academic Press, v. 1, 2009.
- SCHAEDLER, T. A.; JACOBSEN, A. J.; TORRENTS, A.; SORENSEN, A. E.; LIAN, J.; GREER, J. R.; VALDEVIT, L.; CARTER, W. B. Ultralight metallic microlattices. **Science**, v. 334, n. 6058, p. 962-965, 2011.

- SIGMUND, O. **Design of Material Structures Using Topology Optimization**. Tese - Technical University of Denmark. Lyngby, Denmark., p. 109. 1994. Tese de Doutorado.
- TROMANS, D. Elastic anisotropy of HCP metal crystals and polycrystals. **International Journal of Research and Reviews in Applied Sciences**, v. 6, p. 462-483, 2011.
- ULAGANATHAN, S.; COUCKUYT, I.; DHAENE, T.; DEGROOTE, J.; LAERMANS, E.; High dimensional Kriging metamodelling utilising gradient information. **Applied Mathematical Modelling**, v. 40, n. 9-10, p. 5256-5270, 2016.
- VIANA, F. A. C. Things you wanted to know about the latin hypercube design and were afraid to ask. **In: 10th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization**, p. 1-9, 2013.
- VIANA, F. A. C. A Tutorial on latin hypercube design of experiments. **Wiley Online Library**, v. 32, n. 5, p. 1975–1985, 2015.
- WADLEY, H. N. G. Cellular metals manufacturing. **Advanced Engineering Materials**, v. 4, n. 10, p. 726-733, 2002.
- WANG, B.; TIAN, K.; HAO, P.; CAI, Y.; LI, Y.; SUN, Y. Hybrid analysis and optimization of hierarchical stiffened plates based on asymptotic homogenization method. **Composite Structures**, v. 132, n. 1, p. 136-147, 2015.
- WANG, B.; TIAN, K.; HAO, P.; ZHENG, Y.; MA, Y.; WANG, J. Numerical-based smeared stiffener method for global buckling analysis of grid-stiffened composite cylindrical shells. **Composite Structures**, v. 152, n. 1, p. 807-815, 2016.
- WANG, B.; TIAN, K.; ZHOU, C.; HAO, P.; ZHENG, Y.; MA, Y.; WANG, J. Grid-pattern optimization framework of novel hierarchical stiffened shells allowing for imperfection sensitivity. **Aerospace Science and Technology**, v. 62, n. 1, p. 114-121, 2017b.
- WANG, B.; TIAN, K.; ZHAO, H.; HAO, P.; ZHU, T.; ZHANG, K.; MA, Y. Multilevel optimization framework for hierarchical stiffened shells accelerated by adaptive equivalent Strategy. **Applied Composite Materials**, v. 24, n. 3, p. 575–592, 2017a.
- WU, W.; OWINO, J.; AL-OSTAZ, A.; CAI, L. Applying periodic boundary conditions in finite element analysis. **In: SIMULIA Community Conference**, Providence, p. 707-719, 2014.
- XU, L.; CHENG, G.; YI, S. A new method of shear stiffness prediction of periodic Timoshenko beams. **Mechanics of Advanced Materials and Structures**, v. 23, n. 6, p. 1-52, 2016.
- YAN, J.; CHENG, G.; LIU, S.; LIU, L. Comparison of prediction on effective elastic property and shape optimization of truss material with periodic microstructure. **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 48, n. 4, p. 400–413, 2006.
- YI, S.; XU, L.; CHENG, G.; CAI, Y. FEM formulation of homogenization method for effective properties of periodic heterogeneous beam and size effect of basic cell in thickness direction. **Computers & Structures**, v. 156, n. 1, p. 1–11, 2015.
- YI, S.; CHENG, G.; XU, L. Stiffness design of heterogeneous periodic beam by topology optimization with integration of commercial software. **Computers & Structures**, v. 172, n. 1, p. 71-80, 2016.
- ZHANG, Y.; SHANG, S.; LIU, S. A novel implementation algorithm of asymptotic homogenization for predicting the effective coefficient of thermal expansion of periodic composite materials. **Acta Mechanica Sinica**, v. 33, n. 2, p. 368-381, 2017.

ZHAO, J.; LI, H.; CHENG, G.; CAI, Y. On predicting the effective elastic properties of polymer nanocomposites by novel numerical implementation of asymptotic homogenization method. **Composite Structures**, v. 135, n. 1, p. 297-305, 2016.

APÊNDICE A – EQUIVALÊNCIA ENTRE A MATRIZ DE RIGIDEZ DE SOFTWARE COMERCIAL DE ELEMENTOS FINITOS E AQUELA APRESENTADA NO DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

Este apêndice destina-se a mostrar a equivalência das equações da matriz de rigidez apresentadas no desenvolvimento teórico (Capítulo 2) e aquelas do software comercial de elementos finitos.

Para isso, inicia-se o procedimento a partir da equação da matriz de rigidez global homogeneizada \mathbf{K} e da matriz de carga global \mathbf{P} , dadas por

$$\mathbf{K} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY^e \quad (\text{A.1})$$

e

$$\mathbf{P} = \sum_e \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} dY^e, \quad (\text{A.2})$$

onde \mathbf{B} é uma matriz composta pelas derivadas das funções de interpolação que descrevem o campo de deslocamentos e \mathbf{D} é a matriz constitutiva do elemento de barra, ambas no sistema de coordenadas globais.

A matriz \mathbf{B} possui a seguinte forma

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial X} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial X} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Y} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Z} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Z} \\ \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Y} & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial X} & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Y} & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial X} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Z} & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Y} & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Z} & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Y} \\ \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial Z} & 0 & \frac{\partial N_1(\xi)}{\partial X} & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial Z} & 0 & \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial X} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

na qual N_1 e N_2 são funções de interpolação lineares, dependentes da coordenada local ξ , definido no intervalo $-1 \leq \xi \leq 1$.

A matriz \mathbf{D} é determinada através da transformação da matriz constitutiva \mathbf{D}' representada no sistema de referência local. Esta é determinada através da relação constitutiva elástica do elemento de barra

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}'\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (\text{A.4})$$

na qual $\boldsymbol{\sigma}$ é o vetor de tensões e $\boldsymbol{\varepsilon}$ o vetor de deformações. Na forma matricial, \mathbf{D}' é dada por

$$\mathbf{D}' = \begin{bmatrix} E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Dessa forma, para determinar a matriz \mathbf{D} no sistema de referência global, utiliza-se a matriz de transformação, conforme a relação

$$\mathbf{D} = \mathbf{T}_\varepsilon^T \mathbf{D}' \mathbf{T}_\varepsilon, \quad (\text{A.6})$$

onde \mathbf{T}_ε é a matriz de transformação, definida em Cook *et al.* (2002) e dada por

$$\mathbf{T}_\varepsilon = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & n_1^2 & l_1 m_1 & m_1 n_1 & n_1 l_1 \\ l_2^2 & m_2^2 & n_2^2 & l_2 m_2 & m_2 n_2 & n_2 l_2 \\ l_3^2 & m_3^2 & n_3^2 & l_3 m_3 & m_3 n_3 & n_3 l_3 \\ 2l_1 l_2 & 2m_1 m_2 & 2n_1 n_2 & l_1 m_2 + l_2 m_1 & m_1 n_2 + m_2 n_1 & n_1 l_2 + n_2 l_1 \\ 2l_2 l_3 & 2m_2 m_3 & 2n_2 n_3 & l_2 m_3 + l_3 m_2 & m_2 n_3 + m_3 n_2 & n_2 l_3 + n_3 l_2 \\ 2l_3 l_1 & 2m_3 m_1 & 2n_3 n_1 & l_3 m_1 + l_1 m_3 & m_3 n_1 + m_1 n_3 & n_3 l_1 + n_1 l_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

E ainda, o vetor de deformações presente na Equação (A.4) pode ser determinado pela relação entre a matriz das derivadas das funções de interpolação com o vetor dos deslocamentos nodais, \mathbf{u} , representado nas coordenadas globais como

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \mathbf{u}. \quad (\text{A.8})$$

Assim, tem-se as equações para o desenvolvimento teórico para um elemento de barra. Contudo, como neste trabalho é utilizado software de elementos finitos, é necessário definir a

equação de rigidez do material em função dos termos processados pelo software e apresentar a equivalência das propriedades para cada forma de cálculo.

Com esse intuito, utiliza-se o princípio dos trabalhos virtuais aplicado à equação da matriz de rigidez, conforme

$$\delta \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} = \delta \mathbf{u}^T \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY^e \mathbf{u}. \quad (\text{A.9})$$

Rearranjando a Equação (A.9) em função do vetor de deformações (conforme a Equação (A.8)), tem-se a equação no sistema global, de modo que

$$\delta \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} = \int_{\Omega^e} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon} dY^e. \quad (\text{A.10})$$

Para representar a Equação (A.10) no sistema de coordenadas locais, é necessário transformar o campo de deformações $\boldsymbol{\varepsilon}$ e a matriz constitutiva \mathbf{D} para o sistema de coordenadas locais. Assim, a equação de transformação da matriz \mathbf{D} é a Equação (A.6) e para o campo de deformações a equação de transformação é

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{T}_\varepsilon^{-T} \boldsymbol{\varepsilon}', \quad (\text{A.11})$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}'$ é o vetor de deformações no sistema de coordenadas locais.

Dessa forma, substituindo as Equações (A.6) e (A.11) na Equação (A.10) para o sistema de coordenadas locais, tem-se

$$\delta \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} = \int_{\Omega^e} \delta \boldsymbol{\varepsilon}'^T \mathbf{T}_\varepsilon^{-T} \mathbf{T}_\varepsilon \mathbf{D}' \mathbf{T}_\varepsilon \mathbf{T}_\varepsilon^{-T} \boldsymbol{\varepsilon}' dY^e. \quad (\text{A.12})$$

Rearranjando a equação anterior e utilizando a relação dada pela Equação (A.8) e adotando o subíndice L , para referenciar o sistema local, tem-se

$$\delta \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} = \int_{\Omega^e} \delta \mathbf{u}_L^T \mathbf{B}_L^T \mathbf{D}' \mathbf{B}_L dY^e \mathbf{u}_L. \quad (\text{A.13})$$

Agora, como a matriz de transformação de coordenadas para os deslocamentos é dada por

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta & \sin \theta \end{bmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

onde θ é o ângulo de orientação do elemento de barra, consegue-se determinar o campo de deslocamentos no sistema global pela equação

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{T} \mathbf{u}. \quad (\text{A.15})$$

Dessa forma, substituindo o campo de deslocamentos obtido na Equação (A.13)

$$\delta \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} = \delta \mathbf{u}^T \mathbf{T}^T \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_L^T \mathbf{D}' \mathbf{B}_L dY^e \mathbf{T} \mathbf{u}, \quad (\text{A.16})$$

e ajustando os termos, tem-se a equação da rigidez para a formulação de elementos finitos de software comercial

$$\mathbf{K} = \mathbf{T}^T \int_{\Omega^e} \mathbf{B}_L^T \mathbf{D}' \mathbf{B}_L dY^e \mathbf{T}, \quad (\text{A.17})$$

onde \mathbf{D}' é definido pela Equação (A.5), E é o módulo de elasticidade do elemento de barra aplicado na direção do eixo da barra e \mathbf{B}_L é uma matriz linha definida por

$$\mathbf{B}_L = \left[\frac{\partial N_1(\xi)}{\partial X} \quad \frac{\partial N_2(\xi)}{\partial X} \right]. \quad (\text{A.18})$$

Desta maneira, mostra-se a equivalência da matriz de rigidez para as duas formas de cálculo: pelo desenvolvimento teórico e pela utilização de software comercial de elementos finitos.