

SOBRE ESTRATÉGIAS DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE CONTATO

Autor: Dorival Piedade Neto

*Dissertação de Mestrado apresentada à
Escola de Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo como parte dos
requisitos para a obtenção do título de
Mestre em Engenharia de Estruturas.*

Orientador: Prof. Titular Dr. Sérgio Persival Baroncini Proença

São Carlos

2009

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

P613s Piedade Neto, Dorival
Sobre estratégias de resolução numérica de problemas
de contato / Dorival Piedade Neto ; orientador Sérgio
Persival Baroncini Proença. -- São Carlos, 2009.

Dissertação (Mestrado-Programa de Pós-Graduação e Área
de Concentração em Engenharia de Estruturas) -- Escola de
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo,
2009.

1. Problemas de contato. 2. Método dos elementos
finitos. 3. Métodos de otimização. 4. Elementos de
contato. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

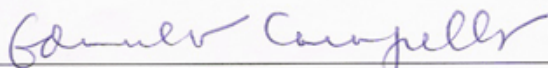
Candidato: Engenheiro DORIVAL PIEDADE NETO

Tese defendida e julgada em 28/05/2009 perante a Comissão Julgadora:



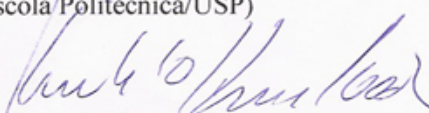
Prof. Titular **SERGIO PERSIVAL BARONCINI PROENÇA (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

APROVADO



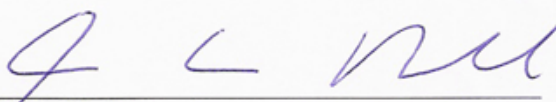
Prof. Dr. **EDUARDO DE MORAIS BARRETO CAMPELLO**
(Escola Politécnica/USP)

APROVADO




Prof. Associado **HUMBERTO BREVES CODA**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

APROVADO



Prof. Associado **MARCIO ANTONIO RAMALHO**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Civil (Engenharia de Estruturas)



Prof. Associado **GERALDO ROBERTO MARTINS DA COSTA**
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

Dedicatória

A meus pais,
por serem minha referência,
e a meus avós (*in memoriam*),
por terem sido a referência deles.

Agradecimentos

A Deus, que mesmo por caminhos tortuosos atinge sempre objetivos certos.

Aos meus pais, por terem sempre colocado meu estudo como objetivo prioritário, acima de qualquer obstáculo.

À minha irmã, pelo exemplo de coragem e perseverança que sempre busco seguir.

À Flávia, pelo apoio e incentivo, mesmo antes do início do trabalho.

À Universidade de São Paulo e à Escola de Engenharia de São Carlos pela sólida formação, e por ter propiciado ambiente satisfatório para encontrar este caminho que sigo.

Ao meu orientador, Professor Sérgio Proença, por toda a atenção e dedicação empregadas ao longo do trabalho, tendo sido mais que um excelente orientador.

Aos membros da banca examinadora, cuja avaliação e sugestões contribuíram muito para o resultado final deste trabalho.

Aos demais professores do Departamento de Engenharia de Estruturas pela constante contribuição em minha formação e no desenvolvimento da pesquisa. Em especial, ao Professor André Beck, cuja ajuda com a programação orientada a objetos foi fundamental no desenvolvimento do programa.

Retornar à vida acadêmica após cinco anos é uma opção raramente seguida, e que apenas foi possível graças a algumas pessoas, a quem serei sempre grato:

Ao Professor Antonio Alves Dias, que ainda na graduação iniciou-me na investigação científica, tendo sido um ótimo orientador e amigo.

À Sra. Cecília Assis, que assim como a Professora Larissa Driemeier da Escola Politécnica da USP, foram as principais responsáveis por meu ingresso na Pós-Graduação. A elas, não tenho palavras para demonstrar minha gratidão.

Aos Engenheiros André Martins e Marcelo Grosso, pelo ‘empurrão’ de volta à USP.

Aos amigos e colegas de graduação Tiago Silva e Cilmar Baságua, pioneiros da minha turma a ingressar no SET, pelo exemplo de dedicação acadêmica e inspiração para fazer a Pós-Graduação.

Já na condição de mestrando, diversas outras pessoas foram fundamentais, cabendo igual agradecimento:

A todos os funcionários do SET, sempre prontos a ajudar, em especial ao amigo Rodrigo Paccola, por sua constante ajuda com a programação.

A todos alunos da Pós, cuja convivência por muitas vezes permitiu extrapolar as fronteiras do coleguismo, avançando nos campos da amizade. Apesar de inicialmente não querer citar nomes para evitar injustiças, seria mais injusto não lembrar os amigos de ‘república’ Jesus Daniel, Rodrigo Santos e Manoel Denis, e o amigo Aref Kzam, que por vezes deixou de desenvolver seu trabalho por algumas horas para me auxiliar na matemática necessária para o meu trabalho.

Finalmente, mas não com menor importância, à CNPq, pela bolsa concedida.

“A filosofia é escrita neste grandíssimo livro que está continuamente aberto diante de nossos olhos (eu digo, o Universo), mas que não se pode entender se primeiro não se aprende a entender a língua e conhecer os caracteres em que está escrito. Ele está escrito em língua matemática e os caracteres são triângulos, círculos e outras figuras geométricas, sem os quais é humanamente impossível entender alguma coisa; sem eles é como girar em vão por um obscuro labirinto.”

Galileo Galilei

Índice

1 - Introdução.....	1
1.1. Justificativa.....	1
1.2. Objetivos.....	2
1.3. Estrutura da Dissertação	3
2 - Uma introdução à Mecânica do Contato	5
2.1. Sobre o problema de contato	7
2.2. Uma categoria simples de problemas de contato.....	14
2.3. Considerações finais	23
3 - Abordagem numérica dos problemas de contato.....	25
3.1. Modelação de estruturas por meio do Método dos Elementos Finitos.....	25
3.1.1. Elementos unidimensionais (elementos de barra).....	26
3.1.2. Elementos bidimensionais planos (elementos de chapa)	30
3.2. Estratégias numéricas para detecção de contato.....	38
3.2.1. Detecção da distância entre ponto e superfície de contato	38
3.2.2. Condição de impenetrabilidade na estratégia dos conjuntos ativos	42
3.3. Elementos de contato.....	44
3.3.1. Elementos de contato do tipo ‘ <i>nó-segmento</i> ’	45
3.3.2. Elementos de contato ‘ <i>mortar</i> ’	48
3.4. Comentários gerais sobre o programa computacional desenvolvido	53
4 - Exemplos Numéricos	57
4.1. Viga em balanço com restrições pontuais de deslocamentos por meio de vínculos unilaterais	58
4.2. Problema de Contato de Hertz.....	65

4.3. Viga em balanço sujeita a ação de vínculos unilaterais (modelagem com elementos bidimensionais)	74
4.4. Viga com apoios inclinados	84
4.5. Arco com deslizamentos sobre anteparo curvo.....	90
5 - Conclusões	99
5.1. Considerações finais	99
5.2. Conclusões	102
5.3. Proposta para trabalhos futuros.....	104
Referências Bibliográficas.....	107
Bibliografia adicional consultada.....	111
Apêndice A - Estratégias de otimização	115
A.1. Formulação matemática de um problema de otimização.....	116
A.2. Otimização Irrestrita	121
A.2.1. Método do gradiente	121
A.2.2. Método dos Gradientes Conjugados	123
A.2.3. Método de Newton.....	127
A.2.4. Métodos do tipo Quase-Newton	128
A.3. Busca Unidimensional	132
A.4. Otimização Restrita.....	138
A.4.1. Estratégia dos Multiplicadores de Lagrange.....	140
A.4.2. Estratégia da Penalização.....	141
A.4.3. A Estratégia dos Conjuntos Ativos	142
A.5. Exemplos.....	145

Lista de Símbolos

- S - representação de um sólido no modelo físico
- Γ - contorno de um sólido, podendo ser subdividido em Γ_t (contorno de Neumann), Γ_u (contorno de Dirichlet) e Γ_c (contorno onde ocorre o contato)
- Ω - domínio de um sólido
- Π - Energia Potencial Total de um sólido, podendo ser subdividida em uma parcela interna Π_i , externa Π_e e relativa ao contato Π_c
- \mathbf{t}_c - vetor que representa a força de contato, podendo ser decomposto em uma componente normal \mathbf{t}_{cn} e outra tangencial \mathbf{t}_{ct}
- $\hat{\mathbf{e}}_n$ - vetor unitário normal à superfície de um sólido
- $\hat{\mathbf{e}}_t$ - vetor unitário tangente à superfície de um sólido
- g - função intervalo de distância, medida entre pontos da superfície de contato
- \bar{g} - distância inicial entre dois pontos de contato
- λ_L - multiplicador de Lagrange
- λ_P - termo de penalização
- L - comprimento de uma barra prismática
- A - área da seção transversal de uma barra prismática
- I - momento de inércia da seção de uma barra prismática
- E - módulo de elasticidade de uma barra prismática
- q_a - força distribuída na direção axial de uma barra
- q_t - força distribuída na direção transversal de uma barra
- σ_x e σ_y - componentes de tensão normal nas direções x e y , respectivamente
- τ_{xy} - tensão cisalhante no plano xy
- ε_x e ε_y - deformação específica linear nas direções x e y , respectivamente
- γ_{xy} - medida de deformação angular no plano xy
- \mathbf{x} - símbolo que representa a grandeza vetorial que indica a posição inicial de um ponto do sólido, dado pelas componentes x e y , respectivamente na direção horizontal e transversal
- \mathbf{x}_u - símbolo que representa a grandeza vetorial que indica a posição atual de um ponto do sólido, dado pelas componentes x_u e y_v , respectivamente na direção horizontal e transversal

\mathbf{u} - símbolo que representa a grandeza vetorial que indica o deslocamento de um ponto do sólido, dado pelas componentes u e v , respectivamente na direção horizontal e transversal

φ_i e ψ_i - funções de forma

ν - coeficiente de Poisson

δ - símbolo que indica a variação de um funcional Π ou das funções que o compõe

ξ , η , ζ e ξ_l - variáveis adimensionais utilizadas nos elementos de referência

α - escalar que multiplica o vetor deslocamento para que não ocorra penetração

$\underline{\underline{B}}$ - matriz que relaciona os campos de deformação aos deslocamentos nodais de um elemento bidimensional

$\underline{\underline{D}}$ - matriz constitutiva, que relaciona os campos de tensões e de deformações de um elemento bidimensional

w_{GL} - pesos para integração numérica pela quadratura de Gauss-Legendre

w_H - pesos para integração numérica da tabela de Hammer (domínios triangulares)

J - jacobiano de uma transformação

$\underline{\underline{Q}}$ - matriz que agrupa funções de forma para obtenção do vetor de forças nodais equivalentes em elemento bidimensionais

q_n - vetor que agrupa os valores das forças distribuídas nos nós de um lado do elemento bidimensional

\mathbf{P} , \mathbf{M} e \mathbf{N} - pontos utilizados para calcular a distância entre dois pontos de contato

$\underline{\underline{K}}$ - matriz de rigidez de um elemento (ou da estrutura, a depender do contexto)

$\underline{\underline{F}}$ - vetor de forças nodais equivalente de um elemento (ou da estrutura, a depender do contexto)

$\underline{\underline{u}}$ - vetor dos deslocamentos nodais (incógnitas do sistema)

$\underline{\underline{K}}_c$ - matriz que impõe restrições devidas ao contato ao sistema

$\underline{\underline{F}}_c$ - vetor que impõe restrições devidas ao contato ao sistema

Observação: esta lista não contempla o Apêndice A, cujos símbolos utilizados têm seu significado indicado no decorrer de seu desenvolvimento.

Lista de Abreviaturas

BFGS – Método do tipo Quase Newton atribuído a Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno

CNPq – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

DFP – Método do tipo quase Newton atribuído a Davidson, Fletcher na Powell

EESC – Escola de Engenharia de São Carlos

EPD – Estado Plano de Deformações

EPT – Estado Plano de Tensões

ISOT3 – Elemento Isoparamétrico Triangular com 3 nós

ISOQ4 – Elemento Isoparamétrico Quadrilateral com 4 nós

ISOT6 – Elemento Isoparamétrico Triangular com 6 nós

ISOQ8 – Elemento Isoparamétrico Quadrilateral com 8 nós

MEF – Método dos Elementos Finitos

MGC – Método dos Gradientes Conjugados

PTV – Princípio dos Trabalhos Virtuais

PVC – Problema do Valor de Contorno

SET – Departamento de Engenharia de Estruturas de EESC

USP – Universidade de São Paulo

Resumo

PIEDADE NETO, D. (2009). *Sobre estratégias de resolução numérica de problemas de contato*. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

Os problemas de contato representam uma classe de problemas da Mecânica dos Sólidos para a qual a não-linearidade é introduzida pela alteração das condições de contorno, as quais só podem ser determinadas no decorrer do processo de resolução. O presente trabalho trata dos problemas de contato abordando aspectos de sua formulação e implementação numérica. Apresentam-se, em particular, as formulações de dois diferentes tipos de elemento de contato revendo-se, mais detalhadamente, o tratamento numérico das restrições decorrentes de contato. Algumas estratégias para resolução computacional desta classe de problemas, consistindo em técnicas de otimização, foram implementadas num programa computacional de elementos finitos e avaliadas comparativamente por meio de exemplos numéricos com diferentes graus de complexidade.

Palavras-chave: problemas de contato, método dos elementos finitos, métodos de otimização, elementos de contato

Abstract

PIEDADE NETO, D. (2009). *On numerical solution strategies of contact problems*.
Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo,
São Carlos, 2009.

Contact problems represent a class of Solid Mechanics problems for which the nonlinear behavior is caused by the change of the boundary conditions during the solution process. The present work treats contact problems observing aspects of its formulation and numerical implementation. Specifically, the formulation for two different contact elements is presented, analyzing, in details, the numerical formulation that results from the contact. Some strategies for the computational solution of this class of problems, given by optimization techniques, were implemented in a finite element computational program and were compared and evaluated by numerical examples with different levels of complexity.

Keywords: contact problem, finite element method, optimization methods, contact elements

1 - Introdução

A presente dissertação é resultado de um trabalho de mestrado desenvolvido junto ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Engenharia de Estruturas (SET) da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC) da Universidade de São Paulo (USP), com apoio financeiro da CNPq. O tema se insere na linha de pesquisa de Métodos Numéricos, com enfoque na análise não-linear de estruturas.

1.1. Justificativa

Os problemas de contato representam uma classe de problemas da Mecânica dos Sólidos para a qual corpos distintos passam a interagir quando partes que os compõe tendem a ocupar simultaneamente a mesma posição do espaço. Como consequência natural da impenetrabilidade de um sólido sobre outro, surgem forças de ação e reação entre os sólidos, as quais causam alteração das condições de contorno. Geralmente essas alterações só podem ser determinadas no decorrer do processo de resolução, e dessa forma, o fenômeno possui comportamento não-linear.

Esta classe de problemas não-lineares é geralmente apresentada como a de maior dificuldade de resolução, (BELYSTCHKO; LIU; MORAN, 2003)¹:

“Problemas de Contato/Impacto estão entre os problemas não-lineares de maior dificuldade, uma vez que sua resposta não é suave. As velocidades normais à superfície de

¹ Tradução livre realizada pelo autor da presente dissertação.

contato são descontínuas no tempo quando o impacto ocorre. Para os modelos de atrito de Coulomb as velocidades tangenciais ao longo da superfície também são descontínuas quando se observa o limite de escorregamento (*'stick-slip behavior'*). Essas características do Contato/Impacto introduzem dificuldades significativas para a integração no tempo das equações discretizadas e deterioram o desempenho do Método de Newton. A escolha apropriada de algoritmos e métodos numéricos é essencial para o sucesso dos mesmos, e técnicas de regularização são muito úteis para a obtenção de procedimentos de resolução robustos.”

Apesar de o comentário anterior se referir a condições de atrito e impacto, as limitações relativas ao desempenho dos procedimentos de resolução apresentam-se mesmo em regimes quase-estáticos de contato sem atrito. Assim sendo, o tema ainda necessita do aprimoramento das estratégias de resolução, justificando a sua escolha para a elaboração da presente pesquisa.

1.2. Objetivos

Em princípio o trabalho procurou dar continuidade ao estudo iniciado por (RIGO, 1999), o qual avaliou a utilização de estratégias de otimização para a resolução de problemas de estruturas prismáticas sujeitas à ação de vínculos unilaterais pontuais. As restrições foram introduzidas por meio da definição de intervalos de valores factíveis para algumas das variáveis de deslocamento, por esta razão, denominadas variáveis canalizadas.

Tal estratégia foi retomada estendendo-a para simular o contato em estruturas modeladas por meio de elementos bidimensionais, visando avaliar comparativamente os diversos métodos de otimização e de restrições de variáveis na resolução aplicados a essa classe de problema.

Sendo essa uma abordagem prioritariamente restrita aos problemas onde a região de contato é conhecida, a seqüência natural do trabalho foi o desenvolvimento de elementos de contato, que possibilitam a resolução de problemas de complexidade mais elevada. Nessa segunda abordagem, foram formulados dois diferentes tipos de elementos de contato, e seu desempenho avaliado quando associados a diferentes estratégias de restrição de variáveis.

1.3. Estrutura da Dissertação

O texto subdivide-se em cinco capítulos, entre os quais se inclui o presente, além de um apêndice, que apresenta uma revisão bibliográfica da teoria matemática que fundamenta as estratégias de otimização implementadas.

No Capítulo 2 apresentam-se as bases teóricas dos problemas de contato, partindo do modelo físico e desenvolvendo o modelo matemático que representa o mesmo. Ainda, com a finalidade de ilustrar a aplicação da teoria, apresenta-se um exemplo simples de problema de contato, discutindo-se a partir dele as possibilidades de formulação geral.

No terceiro capítulo tratam-se aspectos específicos da abordagem numérica do problema, iniciando-se pela apresentação dos elementos finitos utilizados no programa computacional elaborado na pesquisa para fins de discretização espacial dos sólidos. Também são apresentadas as técnicas de detecção de contato e imposição de restrições ao sistema que representa o problema de equilíbrio, além das formulações dos dois diferentes tipos de elementos de contato empregados.

No Capítulo 4 apresentam-se exemplos numéricos processados por meio do programa computacional elaborado, avaliando o desempenho tanto dos métodos de otimização adotados quanto dos elementos de contato.

No quinto e último capítulo reúnem-se as considerações finais e conclusões. Apresentam-se, ainda, alguns temas identificados ao longo da pesquisa como de interesse para futuros estudos.

No Apêndice A apresenta-se uma revisão dos métodos de otimização utilizados, contemplando sua formulação e aplicação mediante um exemplo numérico simples.

2 - Uma introdução à Mecânica do Contato

A resenha histórica sobre a Mecânica do Contato descrita a seguir resume a apresentação mais extensa contida em (KIKUCHI; ODEN, 1988).

Os problemas de atrito foram estudados séculos antes dos problemas de contato. De fato, já no Século XV *Leonardo da Vinci* estudou o tema, o qual foi corretamente descrito por *Amontons* em 1699 e estendido para o caso dinâmico por *Coulomb* em 1781. Em todos esses casos, o atrito sempre foi abordado entre sólidos considerados indeformáveis.

Quanto aos problemas de contato, estes só passaram a ser abordados após o começo do desenvolvimento da Mecânica dos Sólidos, a partir do Século XIX. O primeiro a tentar tratar o assunto foi *Poisson* em 1833 no trabalho '*Traité de Mécanique*', porém segundo (KIKUCHI; ODEN, 1988), erros no seu trabalho causaram falhas mesmo na obtenção da respostas de problemas simples de corpos em colisão. Outros trabalhos também foram apresentados por *Saint-Venant*, em 1867 ('*Sur le choc longitudinal de deux barres élastiques*'), e *Voight*, em 1862, entretanto também com sucesso limitado.

O primeiro trabalho que efetivamente conseguiu descrever adequadamente o fenômeno é atribuído a *Heinrich Hertz*, e foi apresentado à Sociedade de Física de Berlim em 1881, sendo denominado '*Über die Berührung fester Elastischer Körper*'. Tal artigo é tido como o marco inicial da Mecânica do Contato, sendo os problemas por ele abordados referidos hoje como 'Problemas de Contato de Hertz'.

Após esse trabalho, desenvolvimentos no assunto só foram retomados no início do Século XX (JOHNSON, 2003). Como novas contribuições nesse século (KIKUCHI; ODEN, 1988) citam o problema geral de equilíbrio de um sólido elástico em contato sem atrito com um anteparo rígido, formulado por *Signorini* em 1933, em um trabalho denominado '*Sopra*

akune questioni di elastostatica'. Ainda o mesmo autor apresentou em 1959 uma teoria mais completa sobre o assunto no trabalho '*Questioni de elasticita nonlinearizzata e semi linearizzata*'.

Os primeiros livros específicos sobre o tema surgiram após a metade do Século XX, sendo citado por (JOHNSON, 2003) o livro de *L. A. Galin*, de 1953, com título em inglês '*Contact Problems in Theory of Elasticity*', um resumo do trabalho do russo *Muskhelishvili*, e o livro '*Contact Problems in the Classical Theory of Elasticity*', de *Gladwell*, publicado em 1980. Neles ainda o tema é tratado sobre a ótica da Teoria da Elasticidade linear.

Problemas mais gerais, considerando demais efeitos foram desenvolvidos apenas após o desenvolvimento da Teoria da Plasticidade. Nesse contexto de problemas mais genéricos e, por consequência, mais complexos, a abordagem numérica, principalmente por meio do Método dos Elementos Finitos, deu abertura a uma grande evolução do tema, abrindo caminho para a Mecânica do Contato Computacional. Diversos nomes podem ser citados como autores de artigos sobre o assunto (BATHE, 1996). Aqui, se destacam alguns que escreveram livros sobre o tema, como (KIKUCHI; ODEN, 1988), (LAURSEN, 2002) e (WRIGGERS, 2006). Além disso, o tema também é tratado em livros análise não-linear por meio de elementos finitos, como em (ZIENKIEWICKZ; TAYLOR, 2000) e (BELYTSCHKO; LIU; MORAN, 2003).

Para iniciar aqui a abordagem do tema, serão retomadas a seguir as hipóteses e teorias da Mecânica dos Sólidos, com destaque para as que se fazem necessárias para estabelecer um modelo teórico do fenômeno do contato entre dois sólidos distintos. Apresentadas as formas de tratar as restrições, as mesmas serão então aplicadas a um problema simples, com a finalidade de discutir as estratégias utilizadas para a resolução dos problemas dessa natureza.

2.1. Sobre o problema de contato

Tome-se um sólido S de domínio Ω e superfície de contorno Γ , esquematizado na Figura 2.1, para o qual se pretende desenvolver um modelo matemático que represente seu comportamento físico quando o mesmo é submetido à ação de forças e deslocamentos impostos.

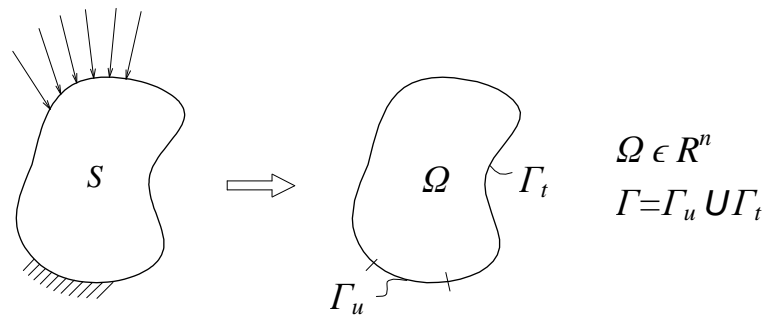


Figura 2.1 - Modelos físico e matemático de um sólido

Para fins de análise do comportamento em escala macroscópica o sólido é idealizado como um meio contínuo inserido no espaço euclidiano tridimensional. Nesse sentido, os pontos do sólido são aqui referenciados como pontos materiais.

O sólido S pode estar sujeito à ação de forças de campo b que atuam em seu domínio ou a forças de superfície f que se aplicam na parte Γ_t de seu contorno (contorno de Neumann). Sobre a parte complementar do contorno (Γ_u) impõe-se restrições sobre os deslocamentos, chamadas de condições de Dirichlet. Dada a importância dessas condições para a definição das características particulares de cada problema, os mesmos são chamados Problema do Valor de Contorno (PVC).

A resolução do PVC é obtida com a determinação, em todo o domínio do problema, dos campos de deslocamento, tensão e deformação em correspondência à sua configuração de

equilíbrio. Para tanto, deve-se observar restrições de equilíbrio local de forças, compatibilidade entre deformações e deslocamentos, e relação constitutiva, envolvendo os campos de tensão e deformação; tais condições se exprimem mediante um conjunto de equações diferenciais.

Quando o problema passa a tratar dois sólidos distintos, como os indicados na Figura 2.2, as mesmas relações devem ser observadas para ambos, sendo que novas condições surgem como consequência da interação entre eles.

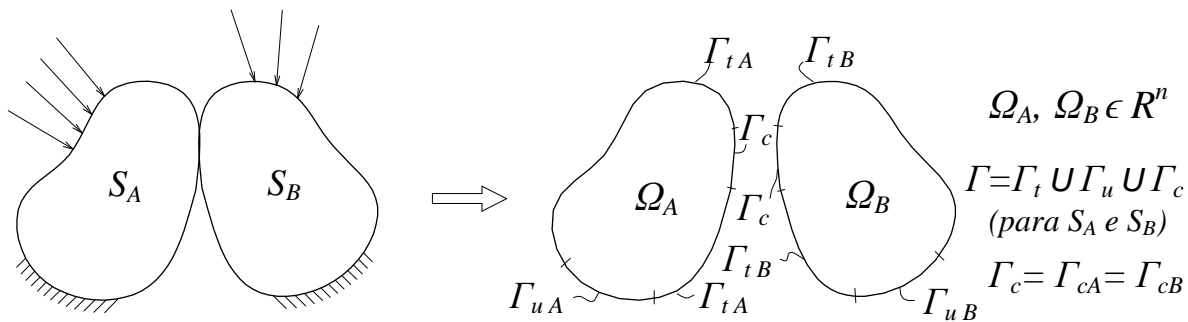


Figura 2.2 - Modelos físico e matemático para um conjunto de dois sólidos

Como o modelo físico, naturalmente, não deve permitir que partes de sólidos distintos ocupem a mesma posição do espaço simultaneamente, o modelo passa a incorporar uma nova condição, dita de impenetrabilidade.

Entretanto, como discute (BELYTSCHO; LIU; MORAN, 2003), a condição de impenetrabilidade não pode ser aplicada diretamente sobre o sistema, na forma de uma expressão analítica ou diferencial, podendo apenas ser expressa em termos gerais, como

$$\Omega_A \cap \Omega_B = \emptyset. \quad (2.1)$$

Ainda segundo o mesmo autor, ela também poderia ser entendida como uma condição de compatibilidade. Seja qual for a forma de entendimento, o desconhecimento prévio da região de contato, que configura a situação mais geral, impõe não-linearidade ao problema.

O contorno passa também a apresentar um novo subconjunto, Γ_c , formado em um dado instante do processo físico pela região de contato entre os sólidos. Para a caracterização do contato, introduz-se uma função escalar (g) que mede localmente, em um dado instante, a distância entre as superfícies dos sólidos, conforme ilustra a Figura 2.3.

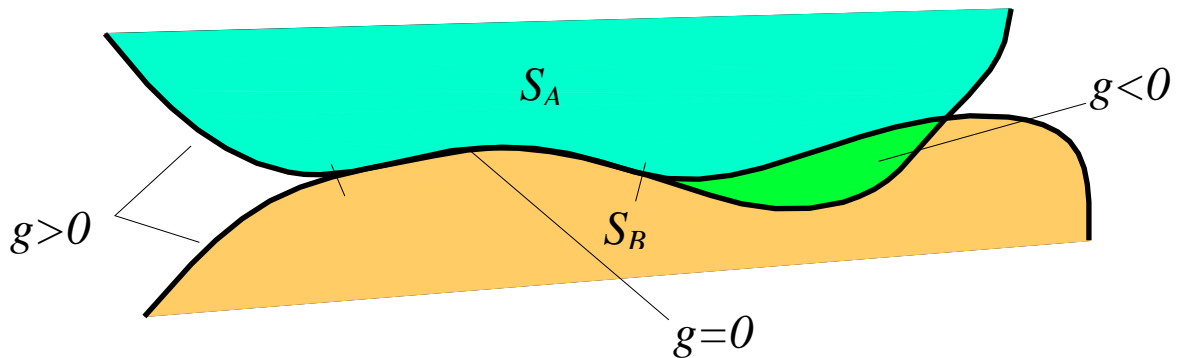


Figura 2.3 - Interpretação física dos valores obtidos para função g

A função é definida de tal maneira que, ao apresentar valor nulo, o par de pontos de referência dos sólidos encontra-se em contato no dado instante. Caso a função tenha valor positivo, há um intervalo de distância entre os mesmos; já o valor negativo indica a penetração, que apesar de não admitida pela teoria, poderá ser permitida em etapas intermediárias da resolução por estratégias numéricas, como será discutido no próximo capítulo.

Como consequência da interação resultante do contato, na interface entre os sólidos aparecem forças de ação e reação. Admitindo-se uma superfície regular de contato, em cada sólido essas forças podem ser decompostas, num dado ponto, segundo as direções normal e tangencial à mesma, conforme ilustra a Figura 2.4.

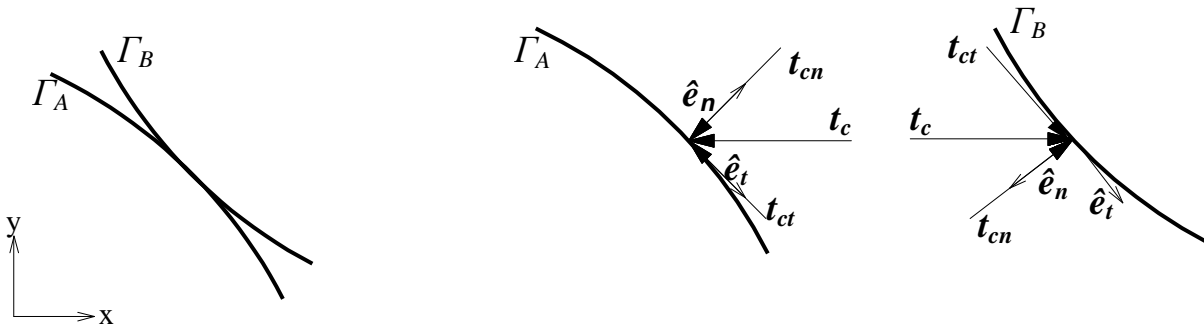


Figura 2.4 - Decomposição das forças de contato em cada sólido

Uma vez que o problema físico não admite a adesão das superfícies, define-se também uma condição sobre a componente do vetor da força de contato t_c segundo a direção do vetor unitário \hat{e}_n , normal à superfície no ponto. Como a situação admissível deve ser sempre de compressão, a projeção t_{cn} deve ser negativa, sendo ela obtida pelo produto interno indicado em (2.2):

$$t_{cn} = \vec{t}_c \cdot \hat{e}_n. \quad (2.2)$$

Essa segunda condição adicional observada para os problemas de contato tem as mesmas origens da primeira, sendo que ambas, por meio de g e t_{cn} , podem ser analisadas conjuntamente, definindo duas situações distintas possíveis:

i) quando o contato ocorre para um dado par de pontos da superfície dos sólidos, a função g apresenta valor nulo, observando-se a ocorrência de ações e reações t_{cn} de compressão (ou seja, negativas) nos mesmos pontos de cada superfície;

ii) quando o contato não ocorre (ou deixa de existir), a função g apresenta valor não-nulo (positivo) e, nesta situação, as ações e reações t_{cn} são nulas.

É notável a relação de dependência entre as duas medidas, sendo que ambas complementam-se de maneira que uma delas sempre será nula. Esse fato permite a reunião das duas condições anteriores em uma única, dita condição de complementaridade. Assim

sendo, o produto da função intervalo g pela projeção da força de contato t_{cn} em um dado ponto x de Γ_c é sempre nulo, ou seja

$$g(x)t_{cn}(x) = 0, \quad \forall x \in \Gamma_c. \quad (2.3)$$

Uma consequência da condição anterior é que as componentes normais de ação e reação observadas na interface de contato não realizam trabalho no processo físico. Essa propriedade ganha importância na abordagem energética do problema e será oportunamente retomada.

Apesar do produto de g por t_{cn} ser constante, no decorrer do processo físico as duas grandezas que o compõem são descontínuas, e isto representa a causa do comportamento não-linear quando se observa o contato. Para uma melhor análise da relação entre ambas, observe-se o gráfico da Figura 2.5.

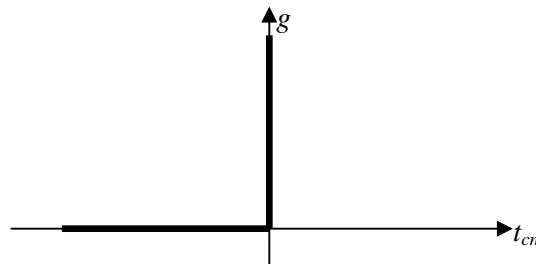


Figura 2.5 - Gráfico da relação entre o valor apresentado pela função g e por t_{cn}

Apesar da descontinuidade, conforme ilustrado na Figura 2.6(a), a relação entre ambas pode ser regularizada mediante aproximação por uma hipérbole, definida de tal modo que no limite reproduz-se a relação original.

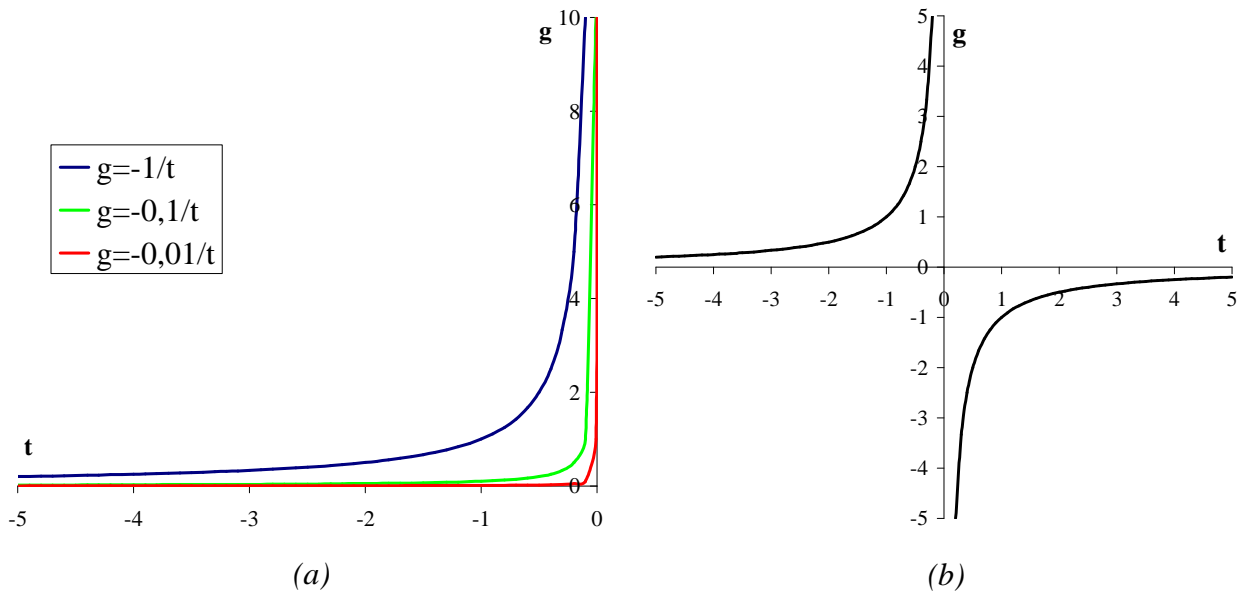


Figura 2.6 - Aproximação da condição de complementaridade por meio de funções hiperbólicas (a); Comportamento de uma função hiperbólica tanto para valores positivos quanto negativos da variável do eixo das abscissas (b).

A Figura 2.6(b) mostra que apesar da função hiperbólica aproximar bem o comportamento da condição de complementaridade no segundo quadrante dos eixos cartesianos, sua definição geral pode admitir valores positivos para a variável t_{cn} no quarto quadrante, o que, conforme já discutido, não é admitido pelo modelo físico. Esse comportamento demanda cuidados adicionais quando o procedimento de resolução empregar tal regularização.

Dadas essas peculiaridades, qualquer procedimento de resolução deve contemplar a imposição de restrições sobre as variáveis envolvidas no contato. Entre as alternativas mais difundidas nesse sentido estão as estratégias baseadas em multiplicadores de Lagrange e fator de penalização, aqui denominadas em conjunto como estratégias de restrição.

A primeira consiste na introdução de uma variável adicional ao sistema (λ_L), multiplicadora da restrição de impenetrabilidade (g), no caso, dada por uma igualdade. Dada a estrutura similar deste produto com a condição de complementaridade ($g t_{cn}$), tem-se que o

multiplicador λ_L tem o significado físico atrelado à projeção t_{cn} , e conseqüentemente, a estratégia equivale à soma de tal condição ao funcional de energia.

Já a segunda estratégia não introduz novas variáveis ao sistema, como no caso anterior. Nela, a restrição de impenetrabilidade é obtida por meio do fator de penalização λ_P , cujo valor é previamente adotado. Como não há equivalência com a condição de complementaridade, o resultado é que a condição de impenetrabilidade é relaxada. No entanto, quanto maior é o valor do termo de penalização, menor é o efeito de relaxação, totalmente anulada no limite do termo de penalização tendendo a infinito.

Assim como no caso do multiplicador de Lagrange, também ao termo de penalização é possível atribuir um significado físico. Dada sua característica de impor menor ou maior relaxação à função g , o mesmo pode ser interpretado com o valor da rigidez de uma mola, de dimensões infinitesimais, posicionada entre os pontos de contato dos sólidos. Quando o termo apresenta valor pequeno, a mola está bastante distendida e a penetração é significativa; quando a rigidez tende ao infinito, a mola permanece praticamente indeformada e os pontos de contato tendem a compartilhar a mesma posição no espaço. A Figura 2.7 ilustra essa interpretação física.

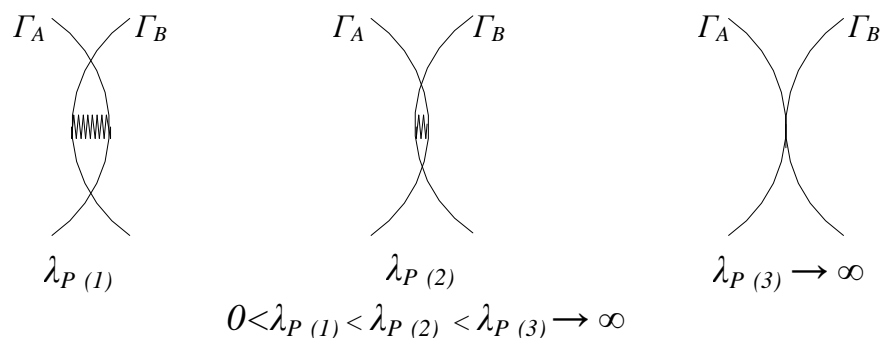


Figura 2.7 - Interpretação física do termo de penalização nos problemas de contato

Para ambos os métodos descritos, como a condição de complementaridade é implicitamente inserida na forma de uma igualdade, é necessário uma análise adicional para controlar os sinais das variáveis envolvidas na condição ($g \geq 0, t_{cn} \leq 0$).

Nesse contexto, no caso dos multiplicadores de Lagrange, essa análise é direta uma vez que eles representam a força de contato, e assim, uma análise de sinal do valor obtido para o multiplicador permite concluir sobre a manutenção ou não da imposição de uma restrição sobre o sistema. No caso do método da penalização essa conclusão não é direta, sendo necessários outros recursos para essa análise. Esse tema será discutido no próximo capítulo, que trata das estratégias numéricas utilizadas para a resolução dos problemas de contato.

Apresentadas as bases teóricas necessárias para o desenvolvimento do modelo matemático que descreve o problema de contato, as mesmas serão aplicadas a um problema simples, desenvolvido como base no exemplo apresentado em (PROENÇA, 2007), de maneira a ilustrar a aplicação da teoria discutida.

2.2. Uma categoria simples de problemas de contato

O objetivo deste item é introduzir as estratégias de restrição para a consideração do contato, particularmente envolvendo o emprego de multiplicadores de Lagrange e termo de penalização, considerando-se uma categoria simples de problemas, na qual as restrições e os pontos de contato são previamente conhecidos. Nesta categoria as restrições podem ser expressas mediante limitações sobre os valores das variáveis de deslocamento dos pontos de contato, numa forma denominada ‘variáveis canalizadas’.

Seja uma barra prismática de comprimento L , com seção transversal de área A e composta de material com Módulo de Elasticidade E . Na barra se aplica uma força axial distribuída q , estando fixa na extremidade esquerda e existindo à direita da extremidade livre

um anteparo rígido, que constitui um vínculo unilateral, limitante do deslocamento daquela seção, conforme ilustra a Figura 2.8. A restrição, portanto, é sobre o valor do deslocamento na extremidade livre, em forma ‘canalizada’ expressa como: $0 \leq u(L) \leq \bar{g}$.

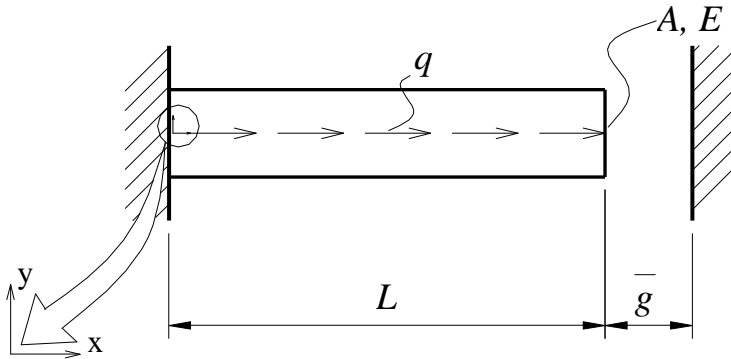


Figura 2.8 - Esquema estrutural da barra com vínculo unilateral à direita

Dadas suas características, o problema pode ser modelado apenas por meio da coordenada x , coincidente com eixo da barra, sendo a solução caracterizada pelos campos de deslocamento $u(x)$, na direção x , de tensão $\sigma_x(x)$ e de deformação específica $\varepsilon_x(x)$.

Adote-se inicialmente uma abordagem local do problema, a qual se refere a um elemento infinitesimal do sólido. Da aplicação da condição de equilíbrio a tal elemento, obtém-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d\sigma_x(x)}{dx} = \frac{-q}{A}. \quad (2.4)$$

Para modelar o sólido há também a necessidade da aplicação da condição de compatibilidade, que relaciona o campo de deformação $\varepsilon_x(x)$ ao campo de deslocamento $u(x)$:

$$\varepsilon_x = \frac{du(x)}{dx} = u'(x). \quad (2.5)$$

Em (2.5) foi utilizada a notação $u'(x)$ para derivada primeira de u em relação a x , bem como $u''(x)$ seria a derivada segunda de u em relação a x e assim sucessivamente.

Finalmente, completa-se o conjunto de equações que descrevem o sólido fazendo-se uso da relação constitutiva do material, a qual relaciona o campo de tensões $\sigma_x(x)$ ao de deformações $\varepsilon_x(x)$:

$$\sigma_x(x) = E\varepsilon(x). \quad (2.6)$$

Associando as três últimas, obtém-se uma única equação diferencial:

$$u''(x) = \frac{-q}{EA}. \quad (2.7)$$

A solução dessa equação diferencial pode ser facilmente obtida por meio da integração sucessiva da mesma:

$$u'(x) = \int u''(x)dx = \frac{-q}{EA}x + c_1 \quad (2.8)$$

$$u(x) = \int u'(x)dx = \frac{-q}{2EA}x^2 + c_1x + c_2 \quad (2.9)$$

Para a definição das constantes de integração c_1 e c_2 é necessária a aplicação das condições de contorno do problema.

A primeira delas diz respeito ao deslocamento observado na extremidade esquerda da barra, cujo valor sempre será nulo devido ao vínculo existente. Assim, a primeira condição de contorno é $u(0)=0$.

Já a segunda condição de contorno não pode ser definida *'a priori'*, uma vez que ela depende da solução obtida, que por sua vez depende da condição de contorno adotada. Essa relação de interdependência entre as condições de contorno e resultado obtido ilustra as dificuldades devidas ao comportamento não-linear observado nos problemas de contato.

Partindo-se da hipótese de que o contato não ocorre, temos como segunda condição de contorno $\sigma_x(L)=E\varepsilon_x(L)=0$, que implica em $u'(L)=0$. Utilizando-a juntamente com a outra condição em (2.8) e (2.9) a solução obtida é

$$u(x) = \frac{-q}{2EA}x^2 + \frac{qL}{EA}x. \quad (2.10)$$

Novamente é importante ressaltar que a (2.10) é válida apenas quando não ocorre o contato, ou seja, quando a seguinte relação é observada:

$$u(L) = \frac{qL^2}{2EA} < \bar{g}. \quad (2.11)$$

Quando essa hipótese não é observada, a segunda condição de contorno se altera, passando a ser expressa por $u(L) = \bar{g}$. Da aplicação de ambas as condições sobre (2.9) obtém-se a solução para o problema quando ocorre o contato com o vínculo unilateral, dada por

$$u(x) = \frac{-q}{2EA} x^2 + \left(\frac{qL}{2EA} + \frac{\bar{g}}{L} \right) x. \quad (2.12)$$

Tendo determinado o campo de deslocamentos $u(x)$, é possível obter os campos de tensão e deformação por meio da condição de compatibilidade e da relação constitutiva.

A fim de ilustrar o comportamento não-linear do modelo, os gráficos na Figura 2.9 ilustram a variação do campo de deslocamento e da força de contato com o aumento do valor da força distribuída q .

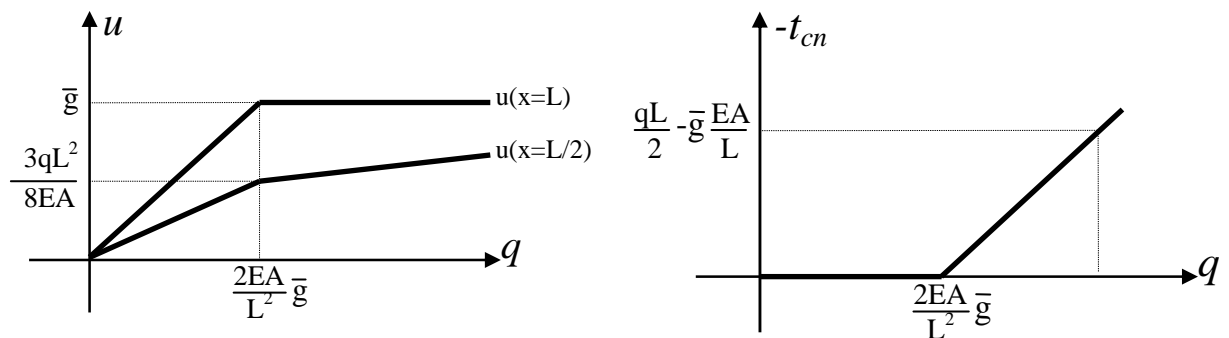


Figura 2.9 - Gráfico da relação entre o valor da força q e os deslocamentos em $x=L/2$ e $x=L$ (a) e da relação entre a força q e a força de contato t_{cn} (b).

Apesar da obtenção simples da solução para o caso apresentado, problemas com complexidade um pouco maior dificilmente podem ser resolvidos dessa forma, particularmente quando se pensa em automatizar o processo de solução.

Assim, é mais vantajosa uma formulação global, como por exemplo, a obtida por meio de princípios variacionais elaborados com base no método da energia (ASSAN, 1996), que combinada com a técnica dos elementos finitos permite a obtenção de soluções aproximadas para problemas de complexidade qualquer.

Segundo a abordagem global pelo método da energia é possível estabelecer um funcional que representa a energia potencial total do sistema estrutural, e expresso em função do campo de deslocamentos solução do problema. No caso do problema em questão, o funcional de energia, válido quando o contato não ocorre, pode ser escrito na forma:

$$\Pi(u) = \frac{1}{2} \int_0^L E.A.(u'(x))^2 dx - \int_0^L q.u(x) dx. \quad (2.13)$$

No funcional (2.13) a primeira parcela representa a energia interna acumulada na estrutura, dada pelo trabalho das tensões sobre as deformações no domínio da barra. A segunda parcela representa a energia potencial externa representada pelo trabalho das forças externas distribuídas ao longo do eixo da barra.

Ao equilíbrio corresponde a primeira variação nula do funcional, no caso dada por:

$$\delta\Pi = \int_0^L EAu'(x)\delta u'(x) dx - \int_0^L q\delta u(x) dx. \quad (2.14)$$

A condição de nulidade da primeira variação do funcional de energia é idêntica à que seria obtida pelo Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV), onde $\delta u(x)$ passa a ser interpretado como um campo de deslocamentos virtuais compatíveis e homogêneos nas condições de contorno essenciais do problema.

A forma obtida em (2.14) também é chamada de forma fraca, enquanto a que foi obtida por intermédio da abordagem local é dita forma forte. Essa denominação faz referência ao fato de que, na primeira formulação apresentada, a função solução deve satisfazer a equação diferencial que rege o problema em todo o seu domínio, enquanto na segunda a

solução da equação diferencial é atendida em média, definida por uma ponderação no domínio.

Quando o método dos elementos finitos é empregado na busca de uma solução aproximada para a forma fraca, o passo inicial é a discretização do domínio, definindo-se os nós e a rede de elementos que será utilizada na definição da função de aproximação da solução.

Considere-se, para a resolução do problema da barra proposto, uma rede composta de dois elementos de comprimento $l=L/2$ e três nós, localizados respectivamente em $x=0$, $x=L/2$ e $x=L$, conforme ilustra a Figura 2.10.

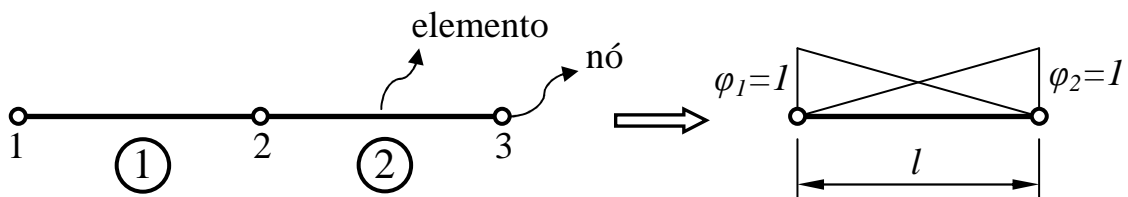


Figura 2.10 - Discretização da barra em dois elementos finitos.

Os campos $u(x)$ e $\delta u(x)$ passam a ser representados pelas seguintes aproximações:

$$\begin{aligned} u(x) &\approx \tilde{u}(x) = u_i \varphi_i(x) \\ \delta u(x) &\approx \delta \tilde{u}(x) = \delta u_j \psi_j(x) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Nessas expressões utilizou-se a notação indicial, segundo a qual a repetição de índices denota o somatório. Ainda nas relações (2.15) φ_i e ψ_j representam bases de funções linearmente independentes, e u_i e δu_j são parâmetros nodais. Substituindo-se essas aproximações em (2.14) e impondo-se sua nulidade, após um desenvolvimento simples, obtém-se:

$$\left(\int_0^l EA \varphi_i' \psi_j' dx \right) u_i = \int_0^l q \psi_j dx. \quad (2.16)$$

Pode-se mostrar que o termo à esquerda de (2.16) é uma forma bilinear, enquanto o da direita é uma forma linear. A expressão (2.16) trata-se de um sistema de equações que pode ser representado por:

$$K_{ij}u_j = F_j. \quad (2.17)$$

No sistema, u_j representa os parâmetros nodais (incógnitas do sistema), K_{ij} as componentes da chamada matriz de rigidez da estrutura e F_j as componentes do vetor de forças nodais equivalentes, definidos por:

$$\begin{aligned} K_{ij} &= \int_0^l EA \phi_i' \psi_j' dx \\ F_j &= \int_0^l q \psi_j dx \end{aligned} \quad (2.18)$$

Utilizando-se funções de aproximação lineares para ambos os campos, como as ilustradas na Figura 2.10, é possível obter um sistema cujas incógnitas u_1 , u_2 e u_3 são os valores dos deslocamentos u nos três nós que a discretizam. Aplicando-se a condição de contorno relativa ao nó 1 ($u_1=0$), o sistema resulta:

$$\frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} qL/2 \\ qL/4 \end{pmatrix}.$$

Da resolução do sistema, obtêm-se como respostas:

$$u_2 = \frac{3qL^2}{8EA}; u_3 = \frac{qL^2}{2EA}.$$

É importante observar que nesse caso, mesmo se tratando de um método numérico aproximado, a resposta coincide com a obtida por meio da abordagem local, considerada a solução exata do problema.

Assim como na resolução anterior, essa resposta é válida apenas para a hipótese de que o contato não é observado. Quando ele passa a ocorrer, deve ser adicionada ao funcional de energia uma parcela relativa ao contato.

Para tanto, utilize-se inicialmente a estratégia dada pelos multiplicadores de Lagrange, cuja formulação, como se viu, é idêntica a obtida pela introdução da condição de complementaridade no funcional, resultando em:

$$\Pi(u, \lambda) = \frac{1}{2} \int_0^L E.A.(u'(x))^2 dx - \int_0^L q.u(x)dx + \lambda_L (\bar{g} - u(L)). \quad (2.19)$$

Conforme fora mencionado, introduz-se ao funcional uma nova incógnita λ_L , que multiplica a restrição dada por meio da função $g(L) = \bar{g} - u(L)$. Nota-se que a condição de impenetrabilidade implica em: $g(L) \geq 0$.

A primeira variação do funcional expresso em (2.19) é:

$$\delta\Pi = \int_0^L E.A.u'(x).\delta u'(x)dx - \int_0^L q.\delta u(x).dx - \lambda_L.\delta u(L) + \delta\lambda_L.(\bar{g} - u(L)). \quad (2.20)$$

Os dois primeiros termos de (2.20) tem o mesmo significado que os expressos em (2.14), sendo o terceiro termo relativo ao trabalho virtual da força de contato na extremidade direita da barra, agora representada pelo nó 3. O quarto termo representa a imposição da restrição de ‘compatibilidade’ entre \bar{g} e $u(L)$ com o auxílio da força virtual $\delta\lambda_L$.

Para os campos $u(x)$ e $\delta u(x)$ utilizam-se as mesmas aproximações expressas em (2.15). Em princípio os multiplicadores de Lagrange, por serem variáveis, também admitem aproximação. No presente caso λ_L é uma variável associada a um único ponto da barra, e, além disso, não existe nenhuma ordem de derivada sobre ela. Assim, sua aproximação por uma constante é suficiente e a forma aproximada da expressão (2.20), igualada a zero, passa a ser dada por:

$$\left[\left(\int_0^L E.A.\varphi_i.\psi_j dx \right) u_i \right] \delta u_j - \left(\int_0^L q.\psi_j \right) \delta u_j - (\lambda_L \psi_j(L)) \delta u_j + (\bar{g} - u(L)) \delta\lambda_L = 0. \quad (2.21)$$

Impondo-se a condição que a relação anterior deve ser válida para todos os campos virtuais de deslocamento (compatíveis e homogêneos nas condições de contorno essenciais) e multiplicadores de Lagrange, após algum desenvolvimento obtém-se um sistema com a seguinte representação:

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{K}} & \underline{\underline{L}}^T \\ \underline{\underline{L}} & \underline{\underline{0}} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{F}_q \\ \underline{F}_c \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

No sistema expresso em (2.22) $\underline{\underline{K}}$ é mesma matriz de rigidez obtida no caso anterior, assim como \underline{F}_q é o vetor de forças nodais equivalentes; as componentes de ambas as grandezas seguem a definição dada na (2.18). As matrizes $\underline{\underline{L}}$ e $\underline{\underline{L}}^T$, assim como o vetor \underline{F}_c tem suas componentes determinadas pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned} L_j &= -\lambda_L \psi_j \\ F_c &= -\bar{g} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Nota-se que o vetor incógnito é composto pelo vetor de deslocamentos nodais u e pelo vetor λ , no caso com um único componente.

Considerando-se a discretização do problema tratado, o sistema resultante, já imposta a condição de contorno $u_1=0$, assume a forma:

$$\frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 4 & -2 & 0 \\ -2 & 2 & -L/(EA) \\ 0 & -L/(EA) & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \\ \lambda_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} qL/2 \\ qL/4 \\ -\bar{g} \end{pmatrix}.$$

A resposta coincide com a solução obtida por meio da forma forte, para a situação em que se observa o contato:

$$u_2 = \frac{qL^2}{8EA} + \frac{\bar{g}}{2}; u_3 = \bar{g}; \lambda_L = \bar{g} \frac{EA}{L} - \frac{qL}{2}.$$

Por outro lado, empregando-se a estratégia da penalização, o funcional de energia, incluindo a restrição, fica dado por:

$$\Pi(u) = \frac{1}{2} \int_0^L E.A.(u'(x))^2 dx - \int_0^L q.u(x)dx + \frac{1}{2} \lambda_p (\bar{g} - u(L))^2. \quad (2.24)$$

Como já comentado, esta abordagem não implica na introdução de novas variáveis ao sistema, sendo λ_p um escalar de valor a ser previamente adotado. A primeira variação de (2.24) é expressa por:

$$\delta\Pi = \int_0^L E.A.u(x).\delta u(x)dx - \int_0^L q.\delta u(x)dx + \lambda_p.u(L).\delta u(L) - \lambda_p.\bar{g}.\delta u(L). \quad (2.25)$$

Procedendo da mesma maneira que nos casos anteriores, o sistema resultante é:

$$\begin{bmatrix} (4EA)/L & (-2EA)/L \\ (-2EA)/L & (2EA)/L + \lambda_p \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} qL/2 \\ qL/4 + \bar{g}\lambda_p \end{pmatrix}$$

Da sua resolução obtém-se:

$$u_2 = \frac{(qL^3 + 4\bar{g}AEL)\lambda_p + 3qAEL^2}{8EAL\lambda_p + 8A^2E^2}$$

$$u_3 = \frac{2\bar{g}L\lambda_p + qL^2}{2L\lambda_p + 2AE}$$

Observa-se que:

- Quando $\lambda_p \rightarrow \infty, u_2 \rightarrow \frac{qL^2}{8EA} + \frac{\bar{g}}{2}$;
- Quando $\lambda_p \rightarrow \infty, u_3 \rightarrow \bar{g}$.

Assim, a resposta obtida converge para o valor exato quando o termo de penalização λ_p tende a infinito. Na prática utilizam-se valores elevados para termo de penalização, a fim de se obter uma aproximação suficientemente precisa e ainda próxima da que seria obtida com o uso dos multiplicadores de Lagrange.

2.3. Considerações finais

Apesar de simples, o exemplo apresentado no item anterior permite elaborar algumas considerações gerais importantes a respeito dos problemas de contato, particularmente em relação à sua formulação e resolução, que serão bastante úteis no desenvolvimento do presente trabalho.

O problema de contato formulado via método da energia por um lado pode ser entendido como um problema de minimização com restrição, isto é, a configuração de

equilíbrio além de satisfazer as condições de contorno usuais bilaterais em deslocamentos e estáticas, deve atender a um conjunto de restrições associadas ao contato. Nessa forma, aplicam-se algoritmos de otimização restrita, desenvolvidos no âmbito da programação matemática, que se mostram estáveis, elegantes e com atributos de convergência garantidos sob certas condições. Tais algoritmos, por meio do emprego das estratégias de restrição, incorporam as restrições ao funcional da energia, transformando o problema em uma minimização irrestrita.

Outra formulação possível para o problema de contato é baseada diretamente na aplicação do princípio dos trabalhos virtuais, cuja expressão pode ser interpretada com a primeira variação da energia potencial total do método da energia. Nesse caso, o problema se resume à resolução de um sistema de equações não-lineares, para a qual se aplica uma estratégia do tipo Newton-Raphson, por exemplo. Entretanto, a característica de possível desativação do contato dentro do próprio processo iterativo penaliza a taxa de convergência, podendo ocorrer instabilidades a depender do tipo de problema, passo da carregamento, etc. Esse tipo de formulação, apesar de permitir enquadrar os problemas de contato entre os problemas de análise não-linear em geral, pode conduzir a procedimentos de resolução menos efetivos ou eficientes do que aqueles proporcionados pelos métodos de otimização.

Com base nessas constatações, o presente trabalho faz uso de estratégias de otimização como ferramenta matemática para a resolução de problemas de contato modelados por meio do MEF. Entretanto, em função de sua extensão, a descrição de tais estratégias é reservada para o apêndice. Ao longo do texto, priorizam-se a abordagem numérica dos problemas de contato quanto à aplicação do MEF, o desenvolvimento de estratégias para detecção do contato e a apresentação dos elementos de contato, seguindo o arranjo descrito no item 1.3.

3 - Abordagem numérica dos problemas de contato

Uma vez que para a modelação numérica o presente trabalho faz uso do Método dos Elementos Finitos (MEF), este capítulo se inicia introduzindo a formulação dos diversos elementos finitos empregados para a discretização dos sólidos e estruturas analisadas. Na seqüência, discutem-se as estratégias numéricas que permitem introduzir as restrições de contato e os elementos finitos de contato, formulados e implementados no programa computacional desenvolvido.

3.1. Modelação de estruturas por meio do Método dos Elementos Finitos

Conforme já discutido no capítulo anterior, o Método dos Elementos Finitos (MEF) trata-se de uma metodologia que em última análise permite a descrição aproximada do comportamento de um sólido, tendo por base a determinação numérica de parâmetros associados a pontos discretos do mesmo, ditos nós.

No caso deste trabalho o MEF é empregado também na geração de formas aproximadas para os funcionais de energia envolvidos, elaborados com base no Método da Energia.

Na abordagem adotada, restringindo-se o funcional da energia potencial total ao domínio de um elemento finito genérico empregado na discretização do sólido, da parcela de energia potencial interna Π_i , pode-se obter a matriz de rigidez do elemento, e da parcela de energia potencial externa Π_e , o vetor de forças nodais equivalentes.

As restrições de contato, em conformidade com as abordagens tanto por penalização quanto por multiplicador de Lagrange, discutidas no capítulo anterior, provêm de termos de energia Π_c , no primeiro caso relativo ao trabalho interno realizado na região de contato numa situação de interpenetração admitida, e no segundo, relativo ao trabalho da ‘força de contato’.

Como resultado, para o problema de um sólido com ocorrência de contato, o funcional de energia total resulta em: $\Pi = \Pi_i + \Pi_e + \Pi_c$.

A seguir serão apresentadas as matrizes de rigidez e o vetor de forças nodais equivalentes dos elementos implementados no programa computacional desenvolvido, e empregados na discretização dos sólidos. As hipóteses e desenvolvimentos matemáticos correspondentes são apresentados de maneira sucinta, por se tratarem de elementos de formulação clássica encontrada em diversas referências sobre o assunto como: (ASSAN, 2003), (SAVASSI, 2000) ou (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000), entre outros.

A estratégia de detecção do contato e os elementos finitos correspondentes são descritos na complementação deste capítulo.

3.1.1. Elementos unidimensionais (elementos de barra)

Elementos finitos de barra de eixo reto são representados num espaço euclidiano bidimensional, referenciado por um sistema cartesiano com eixo x na direção horizontal e eixo y na vertical. Nesse espaço, os elementos podem estar sujeitos a forças distribuídas segundo as direções axial e/ou transversal.

A formulação aqui descrita restringe-se aos casos de deformações suficientemente pequenas, desprezando-se, ainda, as deformações por cortante no caso da flexão.

Adote-se, então, uma barra prismática de comprimento L alinhada com o eixo de referência x , de seção transversal de área A , momento de inércia I e constituída de material

elástico linear com módulo de elasticidade E . Sendo $u(x)$ e $v(x)$ componentes de deslocamento nas direções horizontal e vertical, respectivamente, a parcela interna do funcional de energia é dada por:

$$\Pi_i = \frac{1}{2} \int_0^L EA(u'(x))^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L EI(v''(x))^2 dx. \quad (3.1)$$

Em (3.1) a primeira parcela decorre das tensões geradas pelas forças atuantes na direção axial e a segunda pelas forças aplicadas na direção transversal ao eixo. Sua primeira variação, de interesse para obter a matriz de rigidez do elemento, é dada por:

$$\delta \Pi_i = \int_0^L EA u'(x) \delta u'(x) dx + \int_0^L EI v''(x) \delta v''(x) dx. \quad (3.2)$$

O elemento finito clássico apresenta um nó em cada extremidade da barra, e cada nó possui como graus de liberdade os deslocamentos u e v , e o giro, representado pela primeira derivada de v (v'). A Figura 3.1 ilustra o elemento e seus respectivos graus de liberdade.

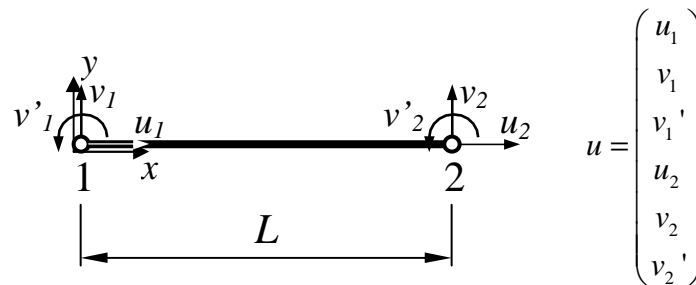


Figura 3.1 - Elemento finito de barra

Tendo-se em vista as ordens de derivadas sobre as componentes de deslocamento observadas em (3.2), utiliza-se uma aproximação por polinômio do primeiro grau para $u(x)$ e do terceiro grau para $v(x)$, expressas nas formas: $\tilde{u}(x) = u_1 \varphi_1(x) + u_2 \varphi_2(x)$ e $\tilde{v}(x) = v_1 \psi_1(x) + v_1' \psi_2(x) + v_2 \psi_3(x) + v_2' \psi_4(x)$. Aproximações análogas são adotadas para as variações δu e δv .

As bases de funções indicadas são:

- Para o campo u :

$$\varphi_1(x) = 1 - \frac{x}{L}; \quad (3.3)$$

$$\varphi_2(x) = \frac{x}{L}. \quad (3.4)$$

- Para o campo v :

$$\psi_1(x) = 2\left(\frac{x}{L}\right)^3 - 3\left(\frac{x}{L}\right)^2 + 1; \quad (3.5)$$

$$\psi_2(x) = \frac{x^3}{L^2} - 2\frac{x^2}{L} + x; \quad (3.6)$$

$$\psi_3(x) = -2\left(\frac{x}{L}\right)^3 + 3\left(\frac{x}{L}\right)^2; \quad (3.7)$$

$$\psi_4(x) = \frac{x^3}{L^2} - \frac{x^2}{L}. \quad (3.8)$$

Aplicando-se (3.3) a (3.8) em (3.2), e após algum desenvolvimento algébrico, que consistem em integrações por partes de modo a isolar as variações sobre as componentes do deslocamento, obtém-se a matriz de rigidez do elemento, dada por:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & -EA/L & 0 & 0 \\ 0 & 12EI/L^3 & 6EI/L^2 & 0 & -12EI/L^3 & 6EI/L^2 \\ 0 & 6EI/L^2 & 4EI/L & 0 & -6EI/L^2 & 2EI/L \\ -EA/L & 0 & 0 & EA/L & 0 & 0 \\ 0 & -12EI/L^3 & -6EI/L^2 & 0 & 12EI/L^3 & -6EI/L^2 \\ 0 & 6EI/L^2 & 2EI/L & 0 & -6EI/L^2 & 4EI/L \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Para a obtenção do vetor de forças nodais equivalentes, emprega-se a parcela de energia potencial associada ao carregamento externo:

$$\Pi_e = -\int_0^L q_a(x)u(x)dx - \int_0^L q_t(x)v(x)dx. \quad (3.10)$$

Considere-se, por exemplo, os carregamentos com distribuição linear, descritos com a ajuda das mesmas bases (3.3) e (3.4) conforme indicado na Figura 3.2.

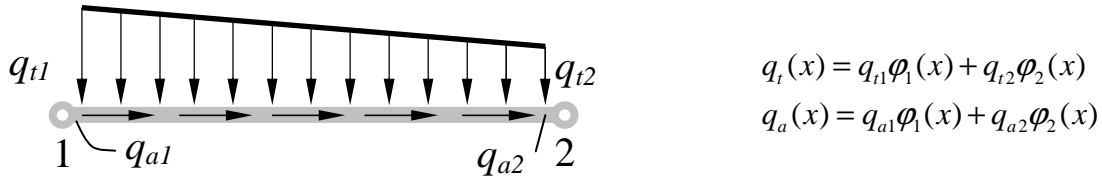


Figura 3.2 - Distribuição linear de forças axiais e transversais na barra

Com desenvolvimento semelhante ao anterior sobre a primeira variação da (3.10), pode-se deduzir o vetor de forças nodais equivalentes na forma:

$$\underline{F} = \begin{pmatrix} (2q_{a1} + q_{a2})L/6 \\ (7q_{t1} + 3q_{t2})L/20 \\ (3q_{t1} + 2q_{t2})L^2/60 \\ (q_{a1} + 2q_{a2})L/6 \\ (3q_{t1} + 7q_{t2})L/20 \\ -(2q_{t1} + 3q_{t2})L^2/60 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Para generalizar a aplicação deste elemento a uma composição estrutural qualquer é necessário transformar a matriz \underline{K} e o vetor \underline{F} para uma situação de barra com inclinação qualquer no espaço, o que é feito por operações que envolvem a matriz de rotação no plano. Portanto, para uma barra de inclinação θ arbitrária com relação ao eixo x , define-se a matriz de rotação \underline{R} por:

$$\underline{R} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \text{sen} \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\text{sen} \theta & \cos \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \theta & \text{sen} \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\text{sen} \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

A matriz de rigidez do elemento inclinado no sistema global de coordenadas globais $\underline{\underline{K}}_G$, assim como o vetor de forças nodais $\underline{\underline{F}}_G$ são obtidos pelas transformações:

$$\underline{\underline{K}}_G = \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{K}} \underline{\underline{R}}$$

$$\underline{\underline{F}}_G = \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{F}}$$

Considerando um arranjo estrutural, uma vez que todas as matrizes e vetores dos elementos que compõe a estrutura estejam todos escritos em relação ao mesmo sistema (global), pode-se então associá-los formando o sistema que representa o equilíbrio global como um todo.

3.1.2. Elementos bidimensionais planos (elementos de chapa)

A aplicação de elementos bidimensionais em um espaço euclidiano de mesma dimensão pode ser utilizada para modelar particularmente duas situações de interesse esquematicamente representadas na Figura 3.3: o Estado Plano de Tensões (EPT) e o Estado Plano de Deformações (EPD).

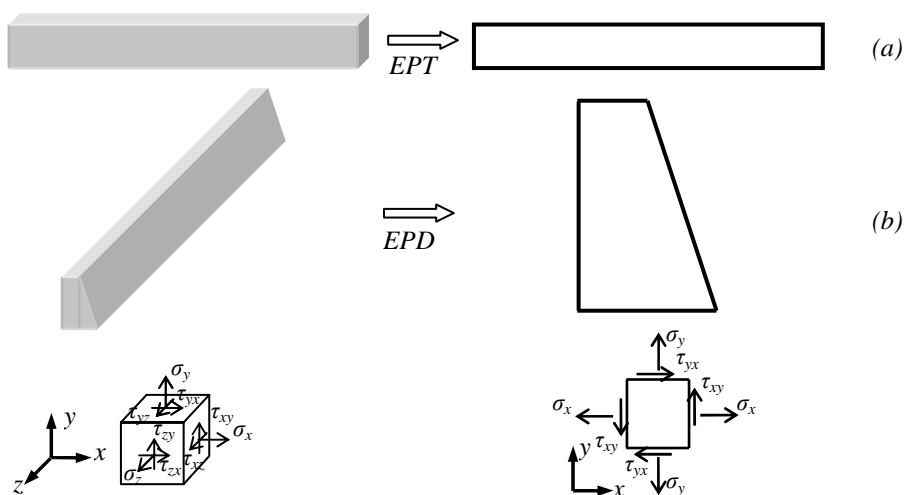


Figura 3.3 - Exemplos de idealizações de sólidos segundo o EPT (a) e o EPD (b)

O primeiro deles se aplica a sólidos que apresentam uma de suas dimensões bem menor que as demais, definida como sua espessura e , adotando-se, então, o plano médio em relação a esta dimensão como referência. As hipóteses do EPT relacionam-se à não ocorrência de forças na direção perpendicular ao plano de referência e carregamento com valor constante ao longo da espessura do sólido, resultando em componentes de tensão σ_x , σ_y e τ_{xy} (Figura 3.3) constantes na espessura, sendo nulas as demais.

O EPD se aplica na situação onde o sólido apresenta uma de suas dimensões bastante superior às outras duas; segundo esta dimensão a geometria e o carregamento não se alteram (ASSAN, 2003). Nessa situação, resultam não-nulas apenas as componentes de deformação ε_x , ε_y e γ_{xy} em seções transversais consideradas suficientemente longe das extremidades do sólido; as demais componentes de deformação são nulas.

Em ambos os casos a parcela relativa à energia interna é dada por:

$$\Pi_i = \frac{1}{2} \int_V (\sigma_x \varepsilon_x + \sigma_y \varepsilon_y + \tau_{xy} \gamma_{xy}) dV. \quad (3.13)$$

Nota-se que são válidas para o plano as seguintes condições de compatibilidade:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}; \quad \varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{e} \quad \gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (3.14)$$

Quando se utiliza o MEF, a relação entre os campos de deformações, agrupados em um vetor $\underline{\varepsilon} = (\varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \gamma_{xy})^T$, e o vetor de deslocamentos nodais \underline{u} pode ser obtida por meio de uma matriz \underline{B} tal que $\underline{\varepsilon} = \underline{B} \underline{u}$, a qual será descrita mais adiante.

Quanto à relação constitutiva entre os campos de tensão e deformação, (ASSAN, 2003) apresenta uma matriz \underline{D} em forma genérica, isto é, que pode ser aplicada tanto ao EPT quanto ao EPD, dada por:

$$\underline{\underline{D}} = \frac{E'}{1-\nu'^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu' & 0 \\ \nu' & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-\nu')}{2} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Onde:

- Para o EPT tem-se $E'=E$ e $\nu'=\nu$;
- Para o EPD tem-se $E'=E/(1-\nu^2)$ e $\nu'=\nu/(1-\nu)$.

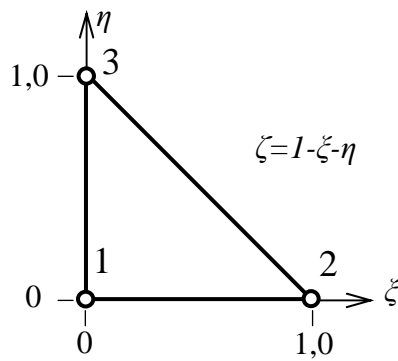
Cabe ressaltar que ν trata-se do Coeficiente de Poisson, observando-se que esse modelo aplica-se a um material isótropo.

É possível, com algum desenvolvimento algébrico, obter a matriz de rigidez de elementos finitos aplicáveis para ambas as situações, a qual, fazendo-se uso da matriz $\underline{\underline{D}}$ apresentada em (3.15), possui a seguinte representação genérica:

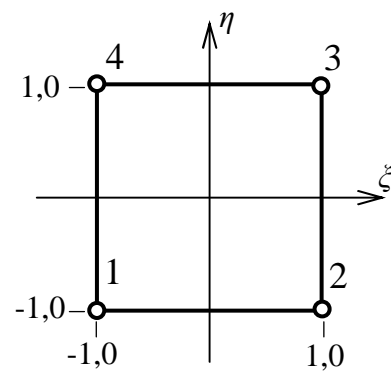
$$\underline{\underline{K}} = \int_{\Omega} \underline{\underline{B}}^T e \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B}} d\Omega. \quad (3.16)$$

Para os elementos desenvolvidos adotou-se uma formulação isoparamétrica, segundo a qual se utilizam as mesmas bases de funções de aproximação para representar a geometria e os campos de deslocamento. Nessa formulação empregam-se elementos de referência aos quais se atrelam coordenadas adimensionais ξ e η (e ζ , para domínios triangulares), que serão ilustradas mais adiante. Uma vantagem dessa abordagem é que os elementos podem se adaptar melhor à geometria do sólido modelado.

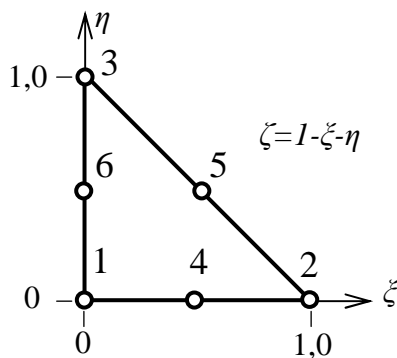
Quatro elementos distintos foram implementados, para os quais se adotou a nomenclatura indicada na Figura 3.4. Na mesma figura apresentam-se as formas dos elementos de referência e as coordenadas adimensionais utilizadas para descrever cada um deles.

**ISOT3**

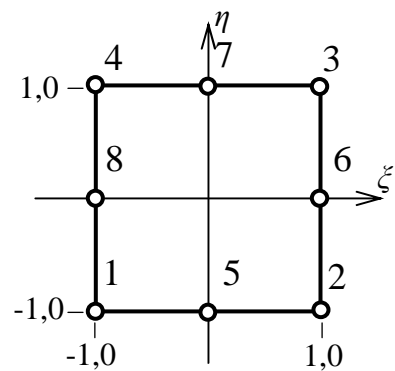
Aproximação 1º Grau
3 nós - 6 Graus Liberdade
(u e v p/ cada nó)

**ISOQ4**

Aproximação 1º Grau
4 nós - 8 Graus Liberdade
(u e v p/ cada nó)

**ISOT6**

Aproximação 2º Grau
6 nós - 12 Graus Liberdade
(u e v p/ cada nó)

**ISOQ8**

Aproximação 2º Grau
8 nós - 16 Graus Liberdade
(u e v p/ cada nó)

Figura 3.4 - Elementos finitos implementados e suas características

Nota-se que os elementos com domínio triangular utilizam coordenadas com valores entre 0 e 1, enquanto os quadrilaterais utilizam o intervalo de -1 a 1. Isso se deve ao fato de que no primeiro caso utiliza-se as tabelas de Hammer, que parametrizam o domínio no intervalo de 0 a 1 (COWPER, 1972), enquanto no segundo caso os pontos de Gauss-Legendre são distribuídos no intervalo de -1 a 1.

Para passar dos elementos de referência para os elementos do domínio discretizado, um operador importante é o Jacobiano da transformação, dado por:

$$J = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta}. \quad (3.17)$$

Passando à consideração das matrizes de rigidez de cada elemento, expressas genericamente pela (3.16), para o elemento ISOT3, por exemplo, cujo vetor de parâmetros nodais é dado por $\underline{u} = (u_1 \quad v_1 \quad u_2 \quad v_2 \quad u_3 \quad v_3)^T$, a matriz $\underline{\underline{B}}$ apresenta a seguinte forma:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial \varphi_3}{\partial y} \\ \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial y} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Sendo φ_i , x e y funções de ξ e η , os termos de $\underline{\underline{B}}$ podem ser obtidos por:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}; \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial y} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (3.20)$$

Para os demais elementos a matriz $\underline{\underline{B}}$ apresenta estrutura análoga, mudando de dimensão de acordo com os graus de liberdade respectivos a cada um deles.

Com isso, retomando a (3.16), podem-se obter as matrizes de rigidez dos elementos quadrilaterais e triangulares, mediante integração numérica, respectivamente representadas por:

$$\underline{\underline{K}}_{\square} = \int_{\Omega} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B}} e dx dy = \sum_i \sum_j \underline{\underline{B}}^T(\xi_i, \eta_j) \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B}}(\xi_i, \eta_j) e J(\xi_i, \eta_j) w_{GL}(\xi_i) w_{GL}(\eta_j) \quad (3.21)$$

$$\underline{\underline{K}}_{\triangle} = \int_{\Omega} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B}} e dx dy = \sum_i \underline{\underline{B}}^T(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B}}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) e J(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) w_H(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) \quad (3.22)$$

Em (3.21) e (3.22) w_{GL} são os pesos dados pela quadratura de Gauss-Legendre para os pontos de integração definidos pelo par (ξ_i, η_j) e w_H os pesos dados para os pontos (ξ_i, η_i, ζ_i) definidos pela tabela de integração de Hammer.

Para finalizar, apresentam-se as funções de forma utilizadas para cada elemento:

- Elemento ISOT3:

$$\varphi_1 = \xi; \quad (3.23)$$

$$\varphi_2 = \eta; \quad (3.24)$$

$$\varphi_3 = \zeta = 1 - \xi - \eta. \quad (3.25)$$

- Elemento ISOQ4:

$$\varphi_1 = \frac{(1-\xi)(1-\eta)}{4}; \quad (3.26)$$

$$\varphi_2 = \frac{(1+\xi)(1-\eta)}{4}; \quad (3.27)$$

$$\varphi_3 = \frac{(1+\xi)(1+\eta)}{4}; \quad (3.28)$$

$$\varphi_4 = \frac{(1-\xi)(1+\eta)}{4}. \quad (3.29)$$

- Elemento ISOT6:

$$\varphi_1 = \xi(2\xi - 1); \quad (3.30)$$

$$\varphi_2 = \eta(2\eta - 1); \quad (3.31)$$

$$\varphi_3 = \zeta(2\zeta - 1); \quad (3.32)$$

$$\varphi_4 = 4\xi\eta; \quad (3.33)$$

$$\varphi_5 = 4\eta\zeta; \quad (3.34)$$

$$\varphi_6 = 4\zeta\xi. \quad (3.35)$$

- Elemento ISOQ8:

$$\varphi_1 = -\left[\frac{(\xi-1)(\eta-1)(\eta+\xi+1)}{4} \right]; \quad (3.36)$$

$$\varphi_2 = \frac{(\xi+1)(\eta-1)(\eta-\xi+1)}{4}; \quad (3.37)$$

$$\varphi_3 = \frac{(\xi+1)(\eta+1)(\eta+\xi-1)}{4}; \quad (3.38)$$

$$\varphi_4 = -\left[\frac{(\xi-1)(\eta+1)(\eta-\xi-1)}{4} \right]; \quad (3.39)$$

$$\varphi_5 = \frac{(\xi-1)(\xi+1)(\eta-1)}{2}; \quad (3.40)$$

$$\varphi_6 = -\left[\frac{(\xi+1)(\eta-1)(\eta+1)}{2} \right]; \quad (3.41)$$

$$\varphi_7 = -\left[\frac{(\xi-1)(\xi+1)(\eta+1)}{2} \right]; \quad (3.42)$$

$$\varphi_8 = \frac{(\xi-1)(\eta-1)(\eta+1)}{2}. \quad (3.43)$$

O vetor de forças nodais equivalentes, para forças distribuídas nas direções x e y do sistema global, origina-se da parcela de variação de energia potencial das forças externas. Definindo-se um sistema local Γ ao longo de um lado do elemento, tal parcela é dada por:

$$\delta \Pi_e = -\int_{\Gamma} (q_x \delta u + q_y \delta v) d\Gamma. \quad (3.44)$$

Para a integração ao longo dos lados dos elementos, as funções de forma passam a ser dadas em termos da coordenada local adimensional ξ_l pelas seguintes relações:

- ISOT3 e ISOQ4 (1° grau)

$$\varphi_1 = \frac{1-\xi_l}{2}; \quad (3.45)$$

$$\varphi_2 = \frac{1+\xi_l}{2}. \quad (3.46)$$

- ISOT6 e ISOQ8 (2º grau)

$$\varphi_1 = \frac{\xi_l (\xi_l - 1)}{2}; \quad (3.47)$$

$$\varphi_2 = 1 - \xi_l^2; \quad (3.48)$$

$$\varphi_3 = \frac{\xi_l (\xi_l + 1)}{2}. \quad (3.49)$$

As funções que descrevem as componentes do carregamento distribuído ao longo dos lados podem também ser aproximadas empregando-se as mesmas bases φ_i . Aplicando tais funções sobre a expressão (3.44), após algum desenvolvimento, pode-se escrever a integração numérica que proporciona o vetor de forças nodais equivalentes na forma:

$$\underline{F}_q = \sum_i \underline{Q}^T \underline{Q} \underline{q}_n e J(\xi_{(l)i}) w_{GL}(\xi_{(l)i}). \quad (3.50)$$

Em (3.50) e é a espessura do elemento, w_{GL} e ξ_{li} são o peso e os pontos dados pela quadratura de Gauss-Legendre. Observa-se que agora o Jacobiano da transformação, J , é dado por:

$$J = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi_l}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi_l}\right)^2}. \quad (3.51)$$

Ainda na expressão (3.50), o vetor \underline{q}_n reúne os valores na altura dos nós das componentes da força distribuída no lado do elemento; já a matriz \underline{Q} agrupa as funções de forma adotadas. Para o caso linear, por exemplo, esses elementos são dados por:

$$\underline{q}_n = \begin{pmatrix} q_{x1} \\ q_{y1} \\ q_{x2} \\ q_{y2} \end{pmatrix}; \quad (3.52)$$

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 & \varphi_2 & 0 \\ 0 & \varphi_1 & 0 & \varphi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

3.2. Estratégias numéricas para detecção de contato

Conforme já discutido no capítulo anterior, para os casos particulares onde o contato resulta de uma restrição aos deslocamentos do sólido na forma de um anteparo rígido reto horizontal ou vertical, os valores máximos e mínimos de deslocamento a serem observados em cada nó são bem definidos, e assim, é possível realizar a abordagem do fenômeno com recurso às variáveis canalizadas.

Para o caso mais geral onde as superfícies de contato são deformáveis e podem apresentar qualquer geometria no espaço, as restrições a serem impostas ao sistema não são conhecidas de início e, portanto, é necessário acrescentar estratégias numéricas para detectar a distância entre as possíveis superfícies de contato; tais estratégias se aplicam em cada estágio do processo de análise. Uma vez que a distância se anule ou passe a apresentar sinal negativo, deve-se ativar a condição de impenetrabilidade. No caso particular da utilização da estratégia dos conjuntos ativos, essa condição é imposta mediante a determinação de um valor escalar que deve multiplicar os deslocamentos previstos para o sólido em cada etapa do processo, conforme será detalhado mais adiante.

3.2.1. Detecção da distância entre ponto e superfície de contato

Considerando-se o espaço bidimensional, utilizado neste trabalho, define-se a posição inicial de um ponto do sólido por meio de um vetor \mathbf{x} , posicionado em relação a um referencial adotado.

Em um determinado instante do processo físico, cada um dos pontos apresenta um deslocamento, com relação à posição inicial, representada por um vetor $\mathbf{u}=(u,v)$. Para o mesmo instante, a posição atual do ponto passa a ser representada pelo vetor $\mathbf{x}_u=(x_u,y_v)$, resultando que $\mathbf{x}_u=\mathbf{x}+\mathbf{u}=(x+u,y+v)$. Tais vetores são ilustrados na Figura 3.5.

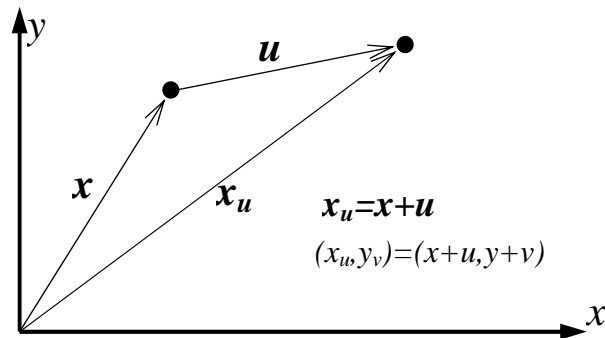


Figura 3.5 - Significado dos vetores \mathbf{x} , \mathbf{u} e \mathbf{x}_u no espaço bidimensional

No caso geral, para descrever a geometria da linha de contato utilizam-se as funções (3.45) a (3.49), que permitem aproximar sua forma por segmentos de curva definidos por interpolação das posições de nós distribuídos sobre a mesma.

Tome-se inicialmente o caso de determinar a distância de um ponto P até um segmento de reta como ilustrado na Figura 3.6(a).

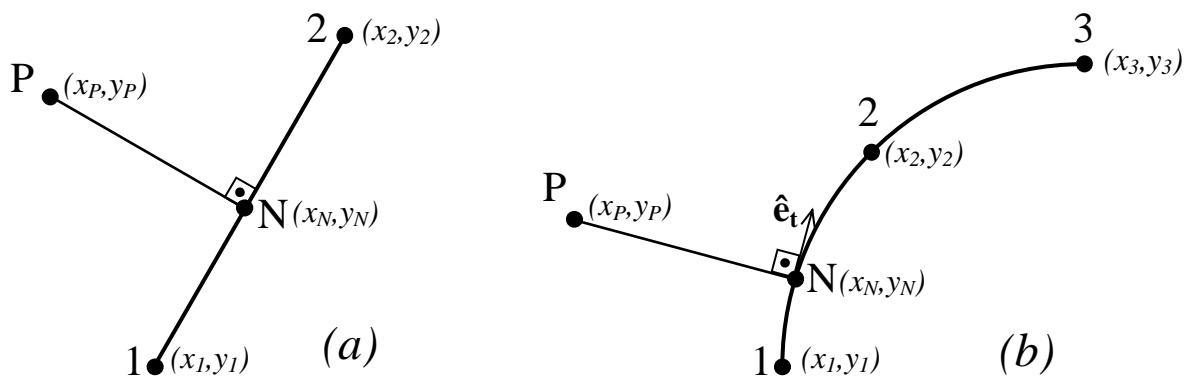


Figura 3.6 - Determinação da distância entre um ponto P e um segmento de curva definido com funções de forma de 1º grau (a) e de 2º grau (b)

Tal distância é definida como o comprimento P-N de um segmento de reta perpendicular ao segmento de reta 1-2. Deve-se, portanto, em primeiro lugar, obter a posição do ponto N que satisfaça tal condição.

Uma vez que N localiza-se no segmento 1-2 é possível obter suas coordenadas x_N e y_N e também o valor de sua coordenada adimensional local ξ_{IN} ; o modo adotado de obtê-la é descrito no quadro que consta na Figura 3.7.

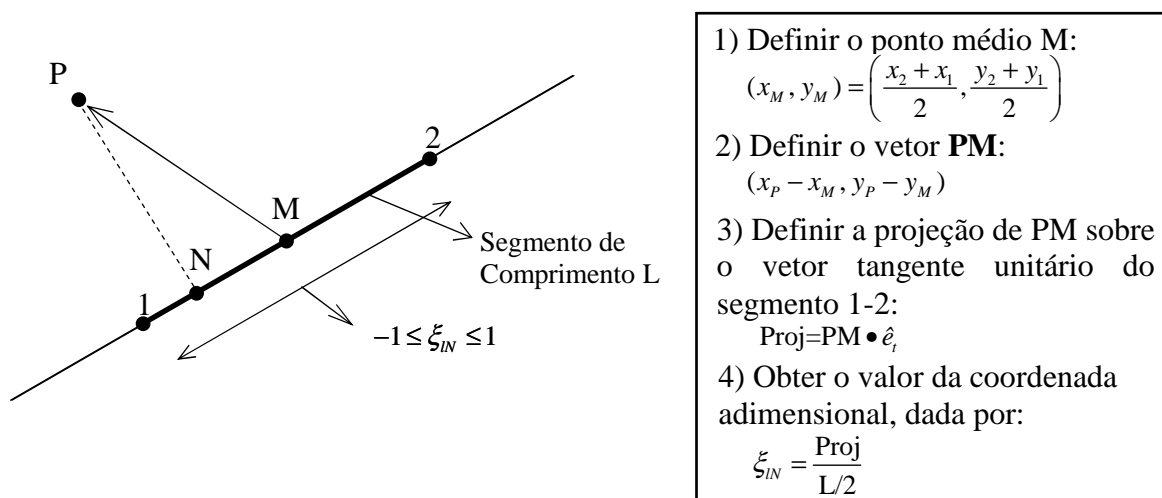


Figura 3.7 - Estratégia de obtenção da coordenada adimensional ξ_{IN} para um segmento definido por função de aproximação de 1º grau

A grande vantagem da utilização da estratégia apresentada na Figura 3.7 é que ela possibilita a rápida identificação de segmentos sobre os quais o ponto P apresenta projeção, uma vez que não existindo tal projeção o valor obtido para ξ_{IN} não estará no intervalo que define pontos pertencentes ao segmento (-1 a 1). A eficiência deste procedimento de identificação evidencia-se especialmente quando a superfície de contato é descrita por um número bastante grande de segmentos.

Tendo-se obtido ξ_{IN} pode-se calcular as coordenadas do ponto N por meio das funções de forma (3.45) e (3.46), resultando:

$$x_N = x_1\varphi_1(\xi_{IN}) + x_2\varphi_2(\xi_{IN}); \quad (3.54)$$

$$y_N = y_1\varphi_1(\xi_{IN}) + y_2\varphi_2(\xi_{IN}). \quad (3.55)$$

Finalmente o valor da distância g pode ser avaliado por meio da projeção do vetor P-N sobre o versor normal ao segmento 1-2 (\hat{e}_n). Nesse sentido, chama-se a atenção para a importância da definição adequada da conectividade dos nós que definem o segmento, atentando para que o versor \hat{e}_n aponte para fora do sólido, de tal forma que a penetração do ponto P gere valores de g negativos.

Tome-se agora o caso de segmentos com geometria dada por uma aproximação do 2º grau, como o ilustrado na Figura 3.6(b). Também neste caso, a distância é dada por um segmento de reta normal à curva. Entretanto, para a curva do 2º grau, os vetores tangentes dependem da posição no segmento.

Para um ponto qualquer dessa curva, o vetor tangente é dado por $(x'(\xi_l), y'(\xi_l))$, sendo x' e y' as derivadas de x e y com relação à coordenada adimensional ξ_l . Ainda, especificamente para o ponto N, que define a menor distância entre o ponto P e a curva, deve ser observada a seguinte relação, conforme ilustra a Figura 3.6(b):

$$(x_P - x_N, y_P - y_N) \bullet (x'(\xi_{IN}), y'(\xi_{IN})) = 0. \quad (3.56)$$

O produto interno apresentado resulta na seguinte equação:

$$[x_P - x(\xi_{IN})] x'(\xi_{IN}) + [y_P - y(\xi_{IN})] y'(\xi_{IN}) = 0. \quad (3.57)$$

A equação (3.57) pode ser resolvida numericamente de diversas maneiras, tendo-se adotado o Método Iterativo das Falsas Posições ou ‘*Regula Falsi*’, (HAMMING, 1973), pelo mesmo motivo que se utilizou a estratégia escolhida no caso linear: facilidade em identificar se há projeção sobre o segmento.

O Método das Falsas Posições baseia-se no fato de que para uma função contínua, se há uma raiz em um intervalo, seus valores nos extremos do mesmo apresentam sinais opostos.

Assim, calcula-se o valor resultante dos termos à esquerda da igualdade em (3.57), considerando-se cada um dos pontos extremos de ζ_l no segmento, ou seja, -1 e 1, em lugar de ζ_{IN} . Se para ambos, o valor desse termo tiver o mesmo sinal, isso significa que não há projeção sobre aquele segmento. Caso contrário, a projeção existe e aplica-se o método para encontrar o valor de ζ_{IN} .

Encontrado tal valor, passa-se a um procedimento análogo ao do caso anterior para determinar a distância, ou seja, calcula-se (x_N, y_N) e encontra-se a projeção de P-N sobre \hat{e}_n , definindo-se assim o valor da distância g .

Como observação final sobre as estratégias descritas, cabe ressaltar que apesar de todas as formulações terem sido apresentadas para a posição ‘inicial’ x , as mesmas também podem ser aplicadas utilizando-se a posição ‘atual’, dada pelo vetor x_u . Neste caso, a estratégia serve para identificar a violação da condição de impenetrabilidade em uma dada etapa do processo de resolução.

3.2.2. Condição de impenetrabilidade na estratégia dos conjuntos ativos

Por outro lado, quando se emprega a estratégia dos conjuntos ativos, a condição de impenetrabilidade não deve ser violada em nenhum instante, o que pode ser garantido por meio do uso de um fator escalar α que multiplica os deslocamentos previstos dos nós do sólido, de tal maneira a atender com igualdade aquela condição. Tal escalar deve ser calculado para cada um dos pontos de controle (nó ou ponto de Gauss) que potencialmente possa entrar em contato com a superfície do outro sólido, devendo ser adotado o menor valor positivo encontrado entre todos.

As estratégias para cálculo do fator α são brevemente descritas a seguir.

Considere-se novamente o caso de linha de contato descrita por segmentos lineares, e que para o ponto P tenha sido previsto um vetor deslocamento $\mathbf{u}=(u,v)$, conforme ilustrado na Figura 3.8(a).

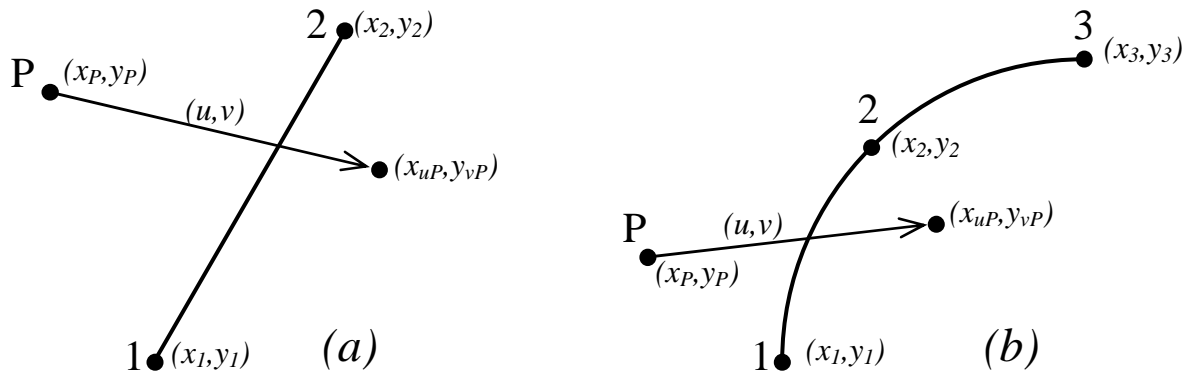


Figura 3.8 - Determinação do escalar α para um segmento de curva polinomial (a) de 1º grau e (b) de 2º grau

Uma vez que o vetor $\mathbf{u}=(u,v)$ aplicado em P cruza o segmento 1-2, é evidente que se pode determinar um escalar α tal que a seguinte relação vetorial seja satisfeita:

$$\mathbf{x}_p + \alpha \mathbf{u} = \mathbf{x}(\xi_l). \quad (3.58)$$

A expressão (3.58) resulta em um sistema nas incógnitas α e ξ_l (coordenada adimensional do ponto de contato), dado por:

$$\begin{cases} x_p + \alpha u = x_1 \varphi_1(\xi_l) + x_2 \varphi_2(\xi_l) \\ y_p + \alpha v = y_1 \varphi_1(\xi_l) + y_2 \varphi_2(\xi_l) \end{cases} \quad (3.59)$$

Isolando-se α em ambas as equações do sistema anterior, igualando-se as mesmas e após algumas manipulações algébricas, obtém-se a seguinte equação:

$$[y_1 \varphi_1(\xi_l) + y_2 \varphi_2(\xi_l) - y_p] u - [x_1 \varphi_1(\xi_l) + x_2 \varphi_2(\xi_l) - x_p] v = 0. \quad (3.60)$$

A equação (3.60) também pode ser resolvida numericamente por meio do Método das Falsas Posições, com a vantagem que com essa abordagem já na primeira iteração se pode identificar se o vetor u aplicado em P cruza ou não o segmento, possibilidade esta que pararia o processo.

Entretanto, uma vez que se tenha obtido o valor da coordenada adimensional ξ_l , isto é, que se encontre uma raiz para (3.60), é preciso confirmar se a interceptação com a linha de contato efetivamente ocorre. Assim, ainda é necessário analisar o valor de α , obtido a partir de qualquer uma das equações que formam o sistema (3.59).

Para linha de contato representada por segmentos quadráticos, com geometria dada pelas funções (3.47) a (3.49), o procedimento é similar, resultando na equação:

$$[y_1\varphi_1(\xi_l) + y_2\varphi_2(\xi_l) + y_3\varphi_3(\xi_l) - y_p]u - [x_1\varphi_1(\xi_l) + x_2\varphi_2(\xi_l) + x_3\varphi_3(\xi_l) - x_p]v = 0. \quad (3.61)$$

No que segue, o procedimento é idêntico ao caso linear.

3.3. Elementos de contato

Diferentemente dos elementos finitos descritos em 3.1, os elementos de contato não apresentam geometria, tratando-se, na verdade, de restrições a serem impostas ao sistema. Por essa razão, aos mesmos aplica-se o conceito de restrição ativa ou inativa (Apêndice A).

Assim, esses elementos devem ser prescritos nas regiões do contorno passíveis de contato, e em cada etapa do processo de resolução, avaliam-se, por meio das técnicas discutidas no item anterior, quais deles devem ser ativados ou desativados. Ao serem ativados, uma interpretação simplificada que se pode adotar é que fisicamente os mesmos ‘colam-se’ à outra superfície, e quando desativados, ‘descolam-se’ da mesma.

Serão a seguir apresentados os dois diferentes tipos de elemento de contato implementados no programa desenvolvido. Cabe ainda ressaltar que no presente trabalho, optou-se pela particularização da formulação para o caso específico do contato de um sólido com superfície indeformável e sem atrito, também conhecido como Problema de Signorini (WRIGGERS, 2006).

3.3.1. Elementos de contato do tipo ‘nó-segmento’

Tratam-se de elementos que se aplicam isoladamente a nós do sólido que entrará em contato com o anteparo. Esses elementos proporcionam uma generalização das estratégias aplicadas no caso da abordagem de variáveis canalizadas e uma vez que a linha de contato é descrita por meio de segmentos de curva, serão denominados, neste trabalho, como do tipo ‘nó-segmento’.

O elemento de contato é ativado quando em uma etapa do processo de resolução identifica-se que o nó ao qual está atrelado encostou ou penetrou na superfície de contato, condição que é detectada pelas estratégias discutidas no item anterior, aplicadas para a posição atual \mathbf{x}_u do ponto (nó) P.

Identificado o ponto (N) do segmento com o qual, na próxima etapa do processo iterativo, o nó deve estar em contato, ativa-se no sistema resolvente a restrição que corresponde à condição de impenetrabilidade, por meio da função g_{PN} , dada pelo seguinte produto interno:

$$g_{PN} = (\mathbf{x}_{uP} - \mathbf{x}_N) \bullet \hat{\mathbf{e}}_n = (x_P + u_P - x_N)n_x + (y_P + v_P - y_N)n_y. \quad (3.62)$$

Em (3.62) \mathbf{x}_{uP} é o vetor que representa a posição ‘atual’ do ponto P, \mathbf{x}_N a posição inicial do ponto N (que por hipótese não se altera ao longo do processo), e $\hat{\mathbf{e}}_n = (n_x, n_y)$, o vetor

normal unitário em N. Desenvolvendo-se a igualdade de modo a separar os valores constantes dos incógnitos, obtém-se:

$$g_{PN} = (x_P - x_N)n_x + (y_P - y_N)n_y + u_P n_x + v_P n_y = \bar{g} + \begin{pmatrix} n_x & n_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_P \\ v_P \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

Em (3.63) o termo \bar{g} é um valor escalar, dado por:

$$\bar{g} = (x_P - x_N)n_x + (y_P - y_N)n_y. \quad (3.64)$$

Pode-se então utilizar a forma apresentada pela última igualdade em (3.63) para definir os termos que devem ser somados ao sistema em equivalência com a restrição de impenetrabilidade.

Para o caso da utilização de multiplicadores de Lagrange como forma de considerar a restrição de impenetrabilidade, o termo do funcional relativo ao contato (Π_c) possui primeira variação dada por:

$$\delta \Pi_c = \lambda_L \delta g_{PN} + \delta \lambda_L g_{PN}. \quad (3.65)$$

Sendo λ_L aplicada a um único ponto, sua aproximação pode ser dada por uma constante. Desenvolvendo-se (3.65), e considerando que a (3.63) também fornece δg_{PN} , obtém-se em forma matricial:

$$\left\{ \delta u_P \quad \delta v_P \quad \delta \lambda_L \right\} \begin{bmatrix} 0 & 0 & n_x \\ 0 & 0 & n_y \\ n_x & n_y & 0 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} u_P \\ v_P \\ \lambda_L \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ \bar{g} \end{matrix} \right\} \quad (3.66)$$

Com a (3.66) e a condição de primeira variação nula do potencial de energia total, pode-se identificar as componentes de rigidez e força nodal equivalente que devem ser adicionados ao sistema global para levar em conta a situação de contato. Tais componentes podem ser reunidas numa matriz $\underline{\underline{K}}_c$ e no vetor \underline{F}_c dados por:

$$\underline{\underline{K}}_c = \begin{bmatrix} 0 & \underline{\underline{L}}^T \\ \underline{\underline{L}} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & n_x \\ 0 & 0 & n_y \\ n_x & n_y & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.67)$$

$$\underline{\underline{F}}_c = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{Bmatrix}. \quad (3.68)$$

Uma vez ativado um elemento de contato em certa iteração, nas próximas deve-se verificar o sinal do multiplicador de Lagrange associado, como forma de identificar uma eventual perda de contato no passo. Assim, um valor positivo para o multiplicador indica que o contato deve ser desativado e a correspondente restrição retirada do sistema.

No caso de se utilizar o termo de penalização como forma de inserir a restrição de impenetrabilidade, $\delta\Pi_c$ resulta em:

$$\delta\Pi_c = \lambda_p g_{PN} \delta g_{PN} \quad (3.69)$$

Desenvolvendo (3.69), obtém-se novas componentes de rigidez e força nodal equivalente que devem ser adicionados ao sistema global, nas posições relativas à u_p e v_p , para levar em conta a situação de contato. Neste caso, a matriz $\underline{\underline{K}}_c$ e o vetor $\underline{\underline{F}}_c$ ficam expressos por:

$$\underline{\underline{K}}_c = \lambda_p \begin{bmatrix} n_x n_x & n_x n_y \\ n_y n_x & n_y n_y \end{bmatrix}; \quad (3.70)$$

$$\underline{\underline{F}}_c = \lambda_p \begin{Bmatrix} -g & n_x \\ -g & n_y \end{Bmatrix}. \quad (3.71)$$

Ainda no caso do método da penalização, a avaliação quanto à desativação de um dado elemento demanda o uso de uma etapa de análise adicional, uma vez que não existem variáveis associadas diretamente à força de contato, como no caso dos multiplicadores de Lagrange.

No presente trabalho, a estratégia adotada para estimar a força de contato consiste num cálculo simples de reações nos vínculos unilaterais, empregando-se a matriz de rigidez do sistema livre das restrições de contato. Uma vez obtidas as componentes das reações nos vínculos unilaterais segundo o referencial global, realizam-se as suas projeções sobre o vetor normal unitário \hat{e}_n à superfície de contato (uma vez que não havendo atrito a reação é ortogonal à superfície) com o objetivo de avaliar o sinal da resultante; se o sinal obtido indicar tração sobre o anteparo, a restrição deve ser desativada. Essa situação é ilustrada na Figura 3.9.

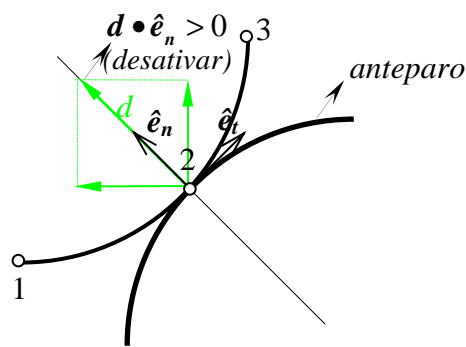


Figura 3.9 - Avaliação da desativação de elemento do tipo 'nó-segmento' com formulação de penalização

3.3.2. Elementos de contato 'mortar'

Diferentemente dos elementos anteriores que se aplicam a nós isoladamente, os elementos de contato 'mortar' estão atrelados a um segmento do contorno do sólido que entrará em contato com o anteparo e derivam de uma técnica originalmente desenvolvida para compatibilizar redes de malhas não-coincidentes (BERNADI; MADAY; PATERA, 2001) apud (FISHER; WRIGGERS, 2005).

O método é uma técnica de discretização baseada nos multiplicadores de Lagrange, segundo a qual as restrições são atendidas por meio da interpolação de tais multiplicadores ao longo do lado de um elemento (WRIGGERS, 2006). Resulta que a função g também é interpolada ao longo do lado do elemento.

No caso tratado de contato entre um sólido deformável e um anteparo rígido, este último é tomado como referência, sendo dito superfície ‘mortar’, enquanto a superfície do primeiro é referida como superfície ‘non-mortar’, conforme ilustrado na Figura 3.10.

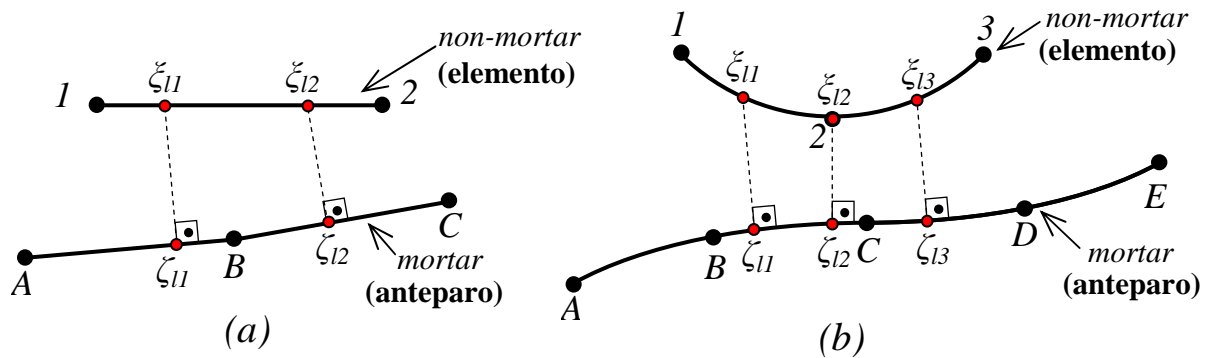


Figura 3.10 – Lados de elementos finitos aos quais se aplicam elementos ‘mortar’ com funções de aproximação linear (a) e quadrática (b), e seus respectivos anteparos.

Uma vez que o método emprega a integração numérica, a formulação é imposta considerando-se os pontos de integração de Gauss da superfície ‘non-mortar’ ($\xi_{(l)i}$) e seus respectivos pares de contato na superfície ‘mortar’ ($\zeta_{(l)i}$). No presente trabalho, para o caso linear adotam-se dois pontos de Gauss (Figura 3.10(a)) e três pontos de integração para o caso quadrático (Figura 3.10(b)).

Quando verificada a condição de penetração, o contato deve ser ativado sobre todo o lado do elemento. Assim, para avaliar a penetração no caso geral, essencialmente assume-se que se a maior parte do elemento atende à condição, então todo ele entra em contato com o anteparo. Uma forma de realizar tal controle consiste em estimar o sinal da área sobre o

gráfico da função g ao longo do elemento, o que pode ser obtido, por integração numérica sobre um domínio adimensional de referência na forma:

$$g_m = \int_{\Gamma_e} g d\Gamma = \sum_i g(\xi_{(l)i}, \zeta_{(l)i}) w_{GL}(\xi_{(l)i}) J(\xi_{(l)i}). \quad (3.72)$$

Então, se $g_m \leq 0$ deve-se ativar a restrição.

Analogamente ao caso dos elementos do tipo ‘*nó-segmento*’, quando utilizada a estratégia dos conjuntos ativos, a verificação da ativação do contato é precedida pelo cálculo do fator α que multiplica o vetor deslocamento aplicado em cada iteração (vide estrutura geral do algoritmo no item 3.4). Neste caso, se o valor de α estiver atrelado a cada um dos pontos de Gauss isoladamente, isto pode gerar não-convergência para a solução, uma vez que devido à utilização do critério dado pela (3.72), o elemento ‘*mortar*’ se ativaria apenas quando todos os pontos de Gauss apresentassem o mesmo valor de α . Assim sendo, neste trabalho, ao empregar a estratégia dos conjuntos ativos com o elemento ‘*mortar*’, o valor do escalar α é determinado por: $\alpha_e = \text{máx}[\alpha_i]$, sendo α_i os escalares α calculados nos pontos de Gauss ($\zeta_{(l)i}$) do elemento.

Uma vez constatada a penetração ou contato com o anteparo, a restrição relativa ao elemento deve ser adicionada ao sistema. Para o desenvolvimento desta formulação, tome-se inicialmente o caso linear, ilustrado na Figura 3.10(a).

Devido à abordagem ao longo de uma face, a componente da primeira variação do funcional de energia é representada por:

$$\delta\Pi_c = \int_{\Gamma_c} (\delta\lambda_L g + \lambda_L \delta g) d\Gamma. \quad (3.73)$$

Conforme já discutido, o valor de (3.73) é obtido por meio de integração numérica, sendo necessário desenvolver a formulação que representa $\lambda_L(\zeta_{(l)i})$ e $g(\zeta_{(l)i})$ nos pontos de Gauss $\zeta_{(l)i}$. A primeira delas pode ser facilmente obtida por meio das funções de forma (3.45) e (3.46):

$$\lambda_L(\xi_{li}) = (\lambda_{L1} \quad \lambda_{L2}) \begin{pmatrix} \varphi_1(\xi_{li}) \\ \varphi_2(\xi_{li}) \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Já tendo sido determinado o ponto $\zeta_{(li)}$ do anteparo onde o contato com o ponto dado por $\xi_{(li)}$ ocorre, o termo $g(\zeta_{(li)})$ é calculado de forma análoga à procedida para os elementos do tipo ‘*nó-segmento*’, sendo dado por:

$$g(\xi_{(li)}) = \bar{g} + \begin{pmatrix} u_1 & v_1 & u_2 & v_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_1(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_2(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_2(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Em (3.75) \bar{g} é dado por:

$$\bar{g} = (x(\xi_{(li)}) - x(\zeta_{(li)})) n_x(\zeta_{(li)}) + (y(\xi_{(li)}) - y(\zeta_{(li)})) n_y(\zeta_{(li)}). \quad (3.76)$$

Aplicando-se (3.74) e (3.75) em (3.73) e realizando desenvolvimento semelhante ao apresentado para o elemento do tipo ‘*nó-segmento*’, obtém-se matriz $\underline{\underline{K}}_c$ e o vetor \underline{F}_c :

$$\underline{\underline{K}}_c = \sum_i \underline{\underline{K}}_{ci}(\xi_{(li)}, \zeta_{(li)}) w_{GL}(\xi_{(li)}) J(\xi_{(li)}); \quad (3.77)$$

$$\underline{\underline{K}}_{ci}(\xi_{(li)}, \zeta_{(li)}) = \begin{bmatrix} 0 & \underline{\underline{L}}^T \\ \underline{\underline{L}} & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.78)$$

$$\underline{\underline{L}}^T = \begin{bmatrix} \varphi_1(\xi_{(li)}) \varphi_1(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) & \varphi_2(\xi_{(li)}) \varphi_1(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_1(\xi_{(li)}) \varphi_1(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) & \varphi_2(\xi_{(li)}) \varphi_1(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_1(\xi_{(li)}) \varphi_2(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) & \varphi_2(\xi_{(li)}) \varphi_2(\xi_{(li)}) n_x(\zeta_{(li)}) \\ \varphi_1(\xi_{(li)}) \varphi_2(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) & \varphi_2(\xi_{(li)}) \varphi_2(\xi_{(li)}) n_y(\zeta_{(li)}) \end{bmatrix}; \quad (3.79)$$

$$\underline{F}_c = \sum_i \underline{F}_{ci}(\xi_{(li)}) w_{GL}(\xi_{(li)}) J(\xi_{(li)}); \quad (3.80)$$

$$\underline{F}_{ci}(\xi_{(li)}) = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{g} \varphi_1(\xi_{(li)}) \\ \bar{g} \varphi_2(\xi_{(li)}) \end{array} \right\}. \quad (3.81)$$

Para as expressões anteriores, o jacobiano J é o mesmo dado por (3.51).

No caso dos elementos quadráticos (Figura 3.10(b)), a formulação é desenvolvida utilizando-se as funções de interpolação (3.47) a (3.49), resultando em uma matriz $\underline{\underline{K}}_c$ de dimensão (9x9) e um vetor \underline{F}_c de dimensão (6x1), semelhantes aos obtidos para o caso linear, sendo a dimensão de $\underline{\underline{L}}^T$ igual a (3x6).

Apesar de terem sido criados com base na formulação dos multiplicadores de Lagrange, também é possível desenvolver sua formulação para o método da penalização. Nesse caso, a primeira variação do funcional da energia relativa ao contato fica dada por:

$$\delta \Pi_c = \int_{\Gamma_c} \lambda_p g \delta g d\Gamma. \quad (3.82)$$

No que segue o desenvolvimento é semelhante ao realizado para os multiplicadores de Lagrange, resultando para o caso linear nos mesmos somatórios expressos em (3.77) e (3.80), sendo a matriz $\underline{\underline{K}}_{ci}$ e o vetor \underline{F}_{ci} dados por:

$$\underline{\underline{K}}_{ci} = \begin{bmatrix} \varphi_1 n_x \varphi_1 n_x & \varphi_1 n_x \varphi_1 n_y & \varphi_1 n_x \varphi_2 n_x & \varphi_1 n_x \varphi_2 n_y \\ \varphi_1 n_x \varphi_1 n_x & \varphi_1 n_y \varphi_1 n_y & \varphi_1 n_y \varphi_2 n_x & \varphi_1 n_y \varphi_2 n_y \\ \varphi_2 n_x \varphi_1 n_x & \varphi_2 n_x \varphi_1 n_y & \varphi_2 n_x \varphi_2 n_x & \varphi_2 n_x \varphi_2 n_y \\ \varphi_2 n_y \varphi_1 n_x & \varphi_2 n_y \varphi_1 n_y & \varphi_2 n_y \varphi_2 n_x & \varphi_2 n_y \varphi_2 n_y \end{bmatrix}; \quad (3.83)$$

$$\underline{F}_{ci} = \begin{Bmatrix} \overline{g} \varphi_1 n_x \\ \overline{g} \varphi_1 n_y \\ \overline{g} \varphi_2 n_x \\ \overline{g} \varphi_2 n_y \end{Bmatrix}. \quad (3.84)$$

É importante lembrar que em (3.83) e (3.84) φ_1 e φ_2 são calculadas em $\zeta_{(l)i}$ e n_x e n_y em $\zeta_{(l)i}$. O caso quadrático resulta em forma semelhante, com matriz $\underline{\underline{K}}_{ci}$ de dimensão (6x6) e vetor \underline{F}_{ci} de dimensão (6x1).

Quanto à avaliação da condição de tensão para desativação de elementos, no caso da formulação dos multiplicadores de Lagrange, a mesma é semelhante à efetuada nos elementos do tipo ‘*nó-segmento*’, adotando-se agora como referência o valor preponderante no elemento:

$$\lambda_{Lm} = \int_{\Gamma_e} \lambda_L d\Gamma = \sum_i \lambda_L(\xi_{(l)i}) w_{GL}(\xi_{(l)i}) J(\xi_{(l)i}). \quad (3.85)$$

No caso do método da penalização, em lugar de λ_L na expressão (3.85) toma-se o valor estimado da reação no anteparo, já discutida no item 3.3.1.

3.4. Comentários gerais sobre o programa computacional desenvolvido

Apresentadas as estratégias numéricas adotadas para modelação dos sólidos e tratamento do contato, apresenta-se neste item uma breve descrição da estrutura do programa desenvolvido.

Para a elaboração do programa empregou-se a linguagem Fortran. Apesar da versão utilizada (Fortran 95) não possuir funções específicas para programação orientada a objetos, buscou-se na medida do possível elaborar a estrutura do código de maneira a se obter os benefícios dessa filosofia. Para tanto, os trabalhos apresentados em (BECK, 2008) e (DECYK; NORTON; ZSYMANSKI, 1996) foram de fundamental importância.

Em linhas gerais, a programação orientada a objetos é um paradigma de programação que, entre inúmeras outras vantagens, acaba possibilitando que o código do programa apresente uma estrutura mais flexível, em termos de possibilidades de expansão, do que aquela que seria obtida por meio da programação estruturada convencional.

Para tanto, abstrações de entidades reais (objetos) são criadas no código, sendo separadas em classes. As classes são unidades de software basicamente compostas por uma

estrutura de dados, que definem os atributos do objeto, e seus métodos, que são as funções e rotinas que a ela se aplicam. Fazendo ainda uso de outros conceitos, é possível elaborar de maneira organizada programas de estrutura bastante complexa, cujo sistema resultante se dá por meio do funcionamento integrado de todas as classes.

A estrutura geral do programa desenvolvido é apresentada na Figura 3.11.

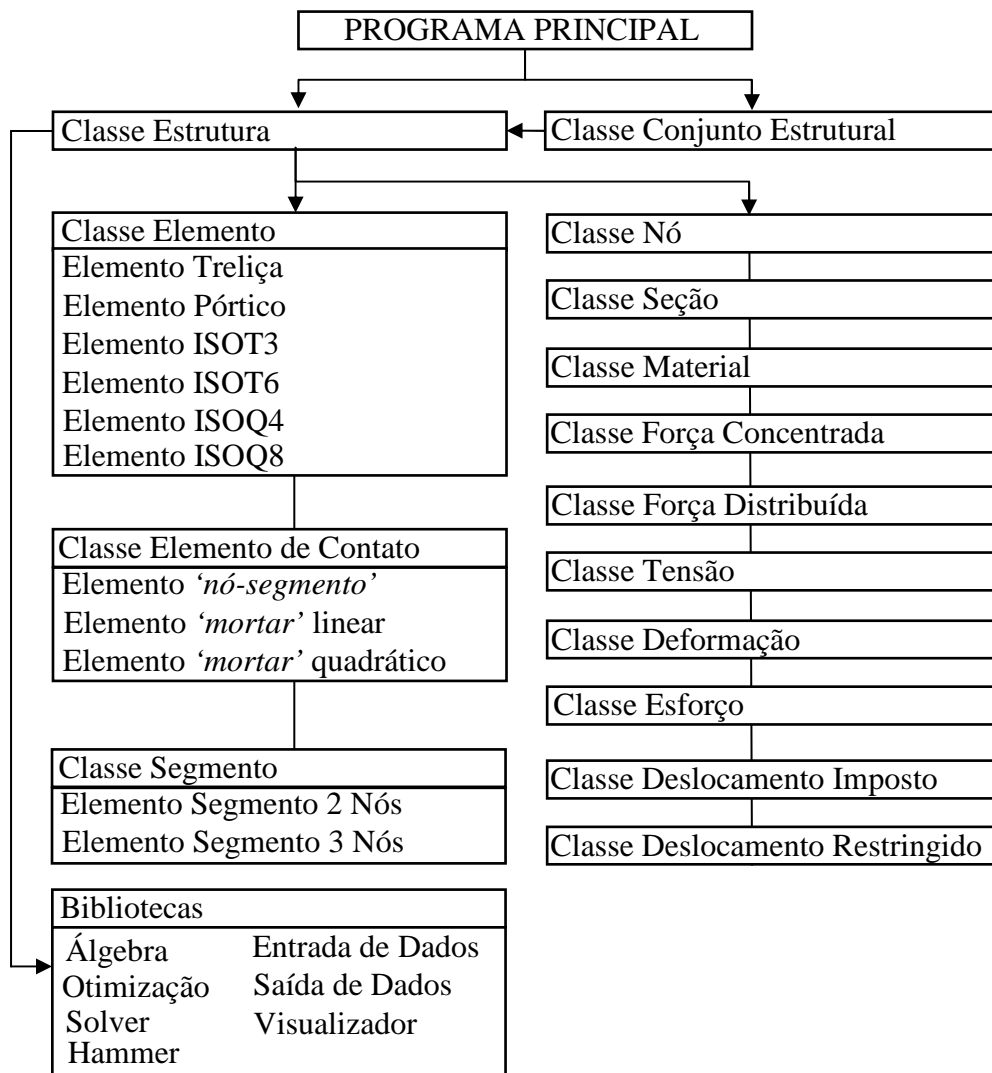


Figura 3.11 - Estrutura geral do programa desenvolvido

No caso do programa elaborado, quando o mesmo é iniciado, existe a opção de analisar diretamente uma estrutura isolada, sem contato ou com contato por variáveis

canalizadas, ou definir um conjunto estrutural, composto por um sólido deformável e um anteparo rígido.

A partir de então a classe estrutura passa a gerenciar as demais classes, solicitando métodos de competência exclusiva das mesmas, que por sua vez também interagem entre si. No caso específico do contato essa estrutura contribuiu bastante para organização do código, permitindo ao programa realizar tarefas de maneira mais livre do que aquela que seria obtida por meio da programação estruturada.

No caso do contato entre sólido deformável e anteparo rígido, a estrutura geral do algoritmo para tratamento do contato é a seguinte:

- 1) Calcular a matriz de rigidez e vetor de forças nodais do sólido deformável; Avaliar se existe contato já na situação inicial e, caso exista, somar restrições respectivas ao sistema.
- 2) Enquanto n° iterações menor que n° máximo adotado de iterações fazer:
 - 2.1) Conforme o método de Newton, calcular o vetor gradiente $grad = Ku - F$ e resolver o sistema utilizando-o como vetor. A resposta resulta num vetor Δu ;
 - 2.2) Se estiver utilizando estratégia dos conjuntos ativos, calcular α ; caso contrário, $\alpha = 1$ (Método de Newton); Calcular então novo vetor $u^{it+1} = u^{it} + \alpha \Delta u$ e $n^\circ it. = n^\circ it. + 1$;
 - 2.3) Avaliar quais elementos de contato foram ativados; somar novas restrições ao sistema;
 - 2.4) Avaliar a norma do vetor gradiente $|grad|$. Se $|grad| < \text{tolerância}$ então:
 - 2.4.1) Verificar se há restrições a serem desativadas;
 - a) Caso não haja desativação, terminar o processo iterativo;
 - b) Caso contrário, atualizar restrições e retornar a 2.1).

Além da estrutura de classes apresentada, complementam as classes algumas bibliotecas que dão subsídio para o funcionamento das mesmas. Dentre elas, destaca a

biblioteca ‘otimização’, que contém os métodos descritos no Apêndice A, bem como o processo iterativo de Gauss-Seidel (PROENÇA; SAVASSI; MUNAIAR NETO, 1987), também implementado no programa e avaliado neste trabalho.

Além dela, ressalta-se a importância da biblioteca desenvolvida denominada ‘álgebra’, que faz a preparação dos dados para utilização de um ‘*solver*’ de matrizes esparsas empregado no programa (DUFF; REID, 1983), desenvolvido pelo *Numerical Analysis Group*, do *Rutherford Appleton Laboratory*.

Especificamente no caso desse último aspecto, devido à alta esparsidade dos sistemas obtidos, o mesmo apresenta importância fundamental no programa, possibilitando ganhos muito elevados de desempenho computacional. Para ilustrar esse ganho, a Figura 3.12 apresenta um comparativo entre os recursos computacionais disponibilizados para o armazenamento e resolução para sistemas esparsos gerados aleatoriamente.

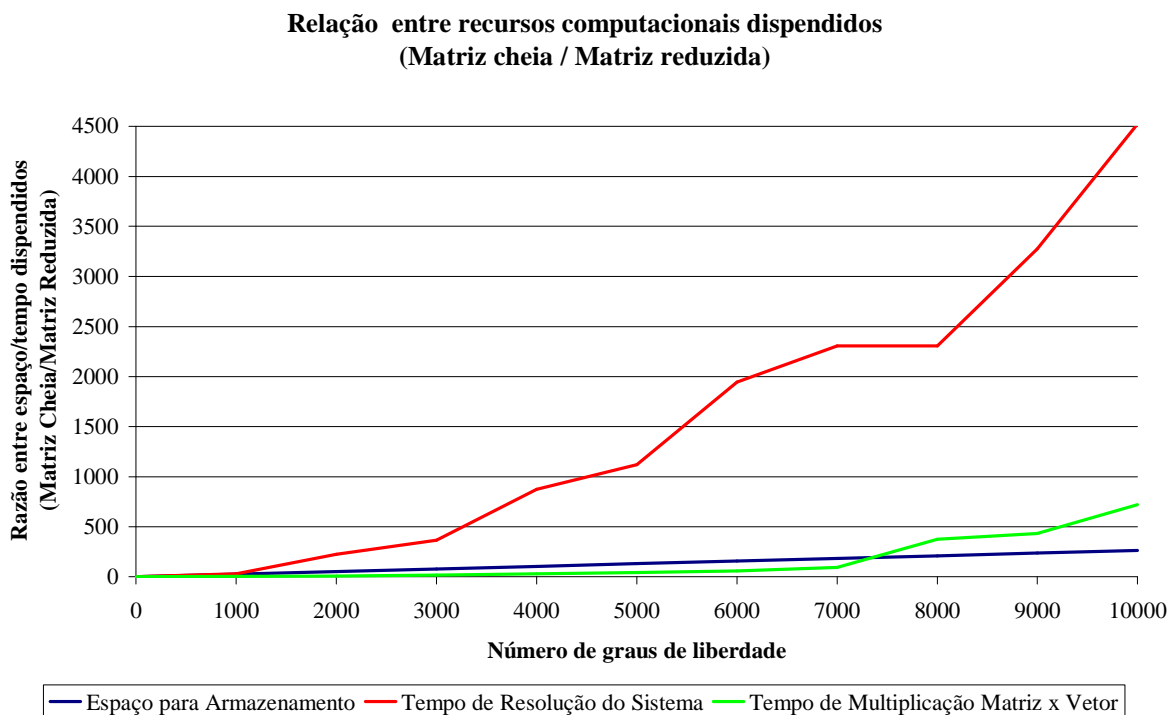


Figura 3.12 - Comparação entre recursos computacionais dispendidos com a utilização de matrizes cheias (com todos os termos) e reduzidas (apenas termos não-nulos)

4 - Exemplos Numéricos

Para avaliar o desempenho das estratégias propostas quanto aos aspectos de precisão e eficiência, diversos exemplos de problemas de contato foram resolvidos por intermédio do código computacional desenvolvido. Em particular, destacam-se os exemplos que apresentam os resultados obtidos com os elementos ‘*nó-segmento*’ e ‘*mortar*’, os quais permitem avaliar vantagens e desvantagens na utilização de uma ou outra opção.

Em todos os casos considerou-se linearidade geométrica e contato sem atrito.

O termo de penalização adotado (nos casos em que se utilizou tal estratégia) é igual ao valor do maior termo da matriz de rigidez multiplicado por 10^7 . Com exceção do último exemplo, todos os demais tiveram o carregamento aplicado em apenas um passo de carga.

Na avaliação quanto à precisão, as respostas obtidas por meio do programa foram confrontadas com resultados analíticos ou numéricos fornecidos pelo programa de elementos finitos ANSYS®; naturalmente os valores de referência serão apresentados em cada exemplo.

Já para comparar a eficiência relativa entre os métodos estudados foram considerados dois outros aspectos: número de iterações e tempo de processamento. Para que este último aspecto não seja subjetivo, é importante informar as características do equipamento utilizado: um computador com processador Intel Pentium III® de 650 MHz e memória RAM de 256 MB.

É importante ressaltar que todas as figuras de resultados obtidos com o código computacional deste trabalho foram elaboradas com a ajuda do Pós Processador do GMEC (Grupo de Mecânica Computacional do Departamento de Engenharia de Estruturas (SET) da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC)), programa desenvolvido pelo Dr. Rodrigo Ribeiro Paccola, que autorizou sua utilização no presente trabalho.

4.1. Viga em balanço com restrições pontuais de deslocamentos por meio de vínculos unilaterais

Este exemplo visa avaliar o aspecto de eficiência dos métodos de otimização com variáveis canalizadas quando a modelagem envolve um número reduzido de variáveis e discretização por elementos unidimensionais de viga. Para esta abordagem, a condição de contato é ativada ou não mediante restrição sobre o valor de algumas das variáveis, no caso os deslocamentos dos nós sujeitos à ação dos vínculos unilaterais.

A Figura 4.1 indica os detalhes do problema.

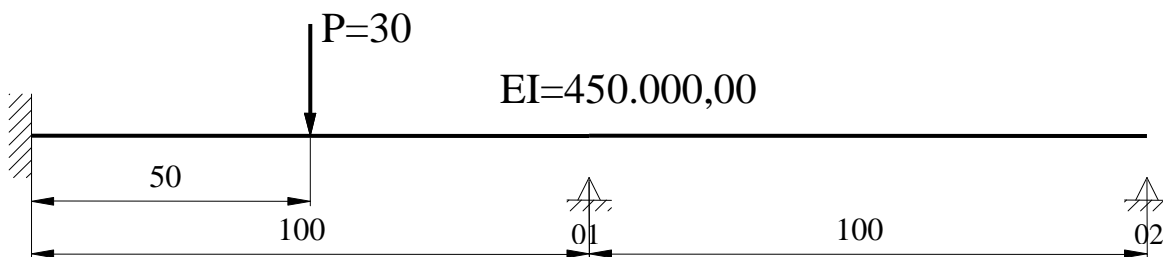


Figura 4.1 - Esquema estrutural da viga

A distância entre a face inferior da viga e os vínculos unilaterais (01 e 02) é igual a 1,00. A intensidade da força aplicada pode induzir o contato naqueles vínculos, sendo ainda possível a desativação do contato no apoio 02.

O resultado referência é apresentado na Figura 4.2, indicando-se o valor dos deslocamentos nodais verticais v no ponto de aplicação da força e nos nós onde ocorre o contato, bem com os diagramas de esforço cortante (V) e momento fletor (M). Tal resultado pode ser facilmente obtido procedendo a resolução conforme apresentado nos exemplos do item 2.2.

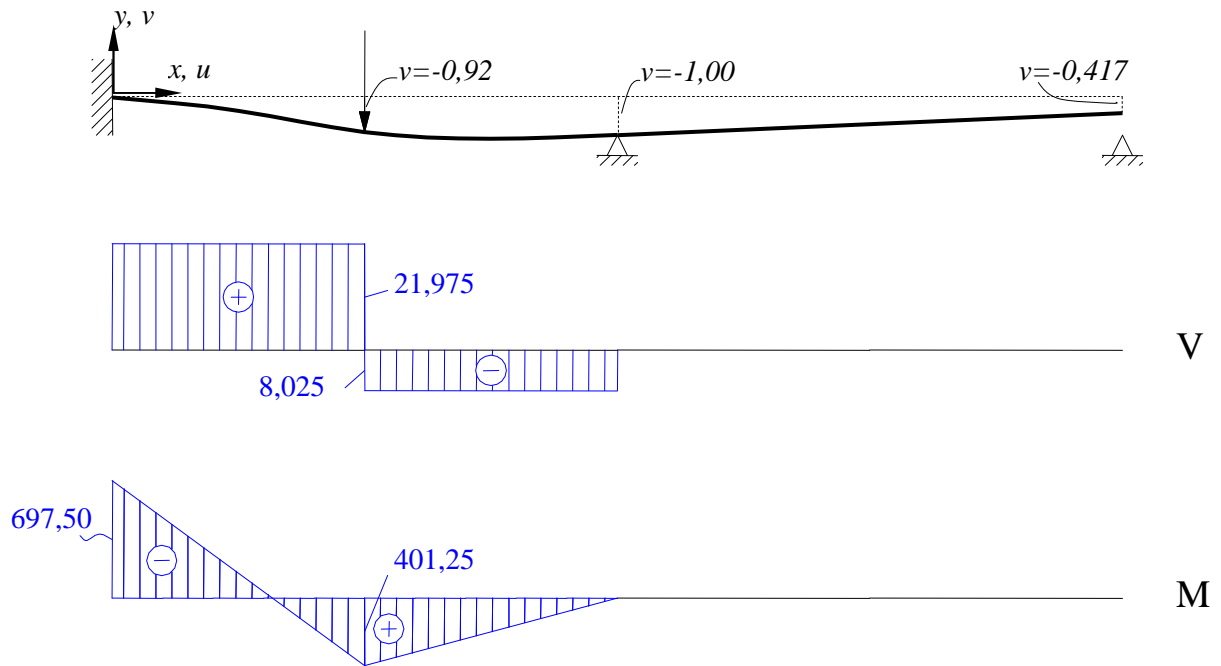


Figura 4.2- Deformada e diagramas de esforço cortante e momento fletor para $P=30$

Foram processados exemplos com três redes distintas de elementos finitos, visando comparar a eficiência de cada um dos métodos com o aumento do número de variáveis. A Tabela 4.1 indica as características de cada rede.

Tabela 4.1 – Informações gerais das redes utilizadas para resolução do exemplo.

Rede	Número de Elementos	Comprimento do Elemento	Número de Nós	Número de Graus de Liberdade
01	4	50,00	5	15
02	20	10,00	21	63
03	40	5,00	41	123

Foram aplicados todos os métodos de otimização tratados no Apêndice A, associados às seguintes estratégias para imposição das restrições sobre as variáveis: estratégia dos multiplicadores de Lagrange, estratégia da penalização, estratégia dos multiplicadores de Lagrange associada à estratégia dos conjuntos ativos e estratégia da penalização associada à estratégia dos conjuntos ativos, referenciados na Tabela 4.2 respectivamente por ‘L’, ‘P’, ‘L+C.A.’ e ‘P+C.A.’

Tabela 4.2 - Número de Iterações (N.I.) e Tempo de Processamento (T.P.) para cada uma das redes testadas, para os diversos métodos avaliados.

Método de otimização	E. restrição variáveis	Rede 01		Rede 02		Rede 03	
		N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)
Gradientes Conjugados	L	53	0,0000	423	0,0501	1097	0,2203
	P	35	0,0000	358	0,0401	937	0,2003
	L+C.A.	54	0,0100	540	0,0601	1367	0,2704
	P+C.A.	41	0,0000	450	0,0501	1219	0,2504
Newton	L	3	0,0000	3	0,0000	3	0,0100
	P	3	0,0000	3	0,0100	3	0,0100
	L+C.A.	4	0,0000	4	0,0100	4	0,0100
	P+C.A.	4	0,0000	4	0,0000	4	0,0100
Quase-Newton DFP	L	10	0,0000	50	0,1001	87	0,5808
	P	10	0,0000	45	0,0601	88	0,4206
	L+C.A.	13	0,0100	63	0,1402	132	0,8813
	P+C.A.	11	0,0000	61	0,0901	132	0,6309
Quase-Newton BFGS	L	10	0,0000	44	0,1001	85	0,6309
	P	10	0,0100	44	0,0701	86	0,4306
	L+C.A.	11	0,0000	49	0,1102	94	0,701
	P+C.A.	11	0,0000	49	0,0801	93	0,4707
Processo Iterativo Gauss-Seidel		34	0,0000	-	-	25834	5,4879

O critério de parada para este e os demais exemplos foi que a norma L2 (módulo do vetor gradiente) fosse menor que 10^{-6} e/ou número de iterações superior a 30000.

Todos os métodos convergiram para a mesma solução, com exceção do Processo Iterativo de Gauss-Seidel, o qual para a Rede 02 mostrou-se de convergência muito lenta, não tendo sido atingida com o número máximo de iterações adotado.

Observa-se que o Método dos Gradientes com variáveis canalizadas tem sua aplicação limitada aos casos em que não há desativação das restrições e, por este motivo, não foi aplicado neste exemplo.

Ainda como se observa da Tabela 1.2, claramente o Método de Newton apresentou resultados incomparavelmente superiores, preservando eficiência mesmo nas redes mais refinadas; os demais métodos se mostraram menos eficientes com o aumento do número de variáveis.

Para melhor ilustrar essa variação relativa entre os métodos do tipo Quase-Newton e Gradientes Conjugados, na Figura 4.3 apresenta-se um gráfico comparativo do número de iterações.

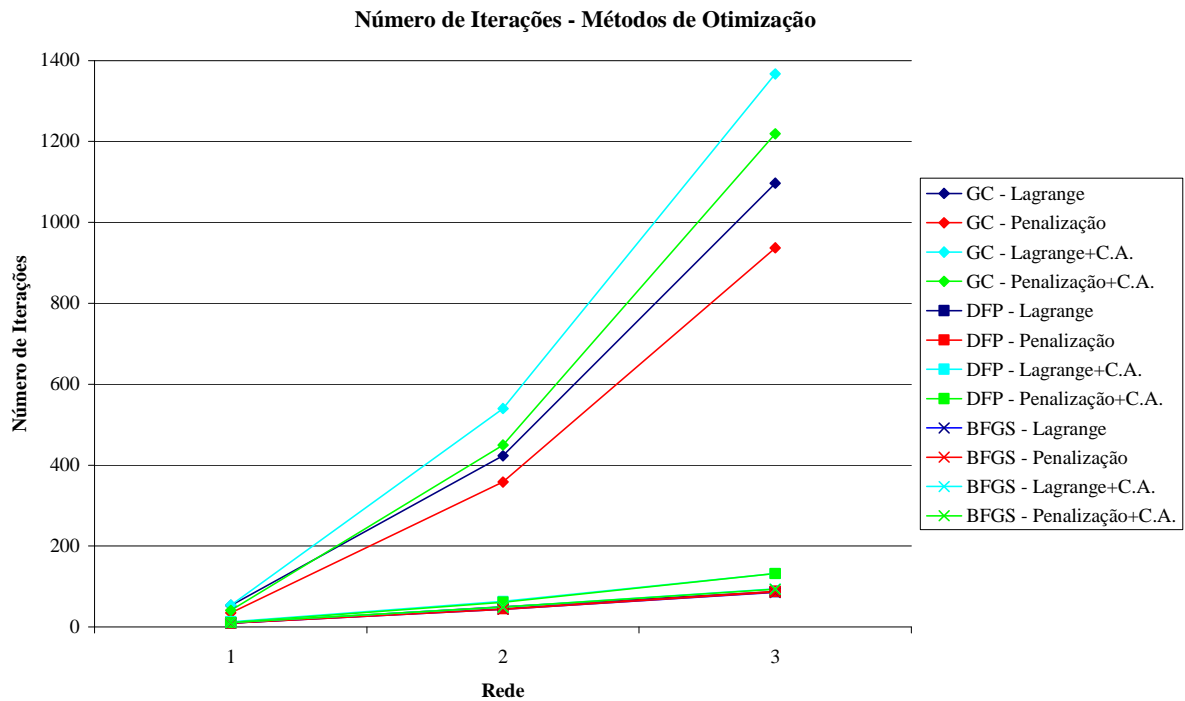


Figura 4.3 - Comparativo do Número de Iterações entre o Método dos Gradientes Conjugados (GC) e os Métodos Quase-Newton DFP e BFGS

Observa-se que existe uma diferença substancial entre o número de iterações apresentado pelo Método dos Gradientes Conjugados em relação aos Métodos do tipo Quase-Newton. Uma comparação exclusivamente focada no número de iterações advogaria em favor destes métodos, entretanto, apesar de parecer mais subjetivo, o comparativo dos tempos de processamento (Figura 4.4) mostra que este parâmetro também deve ser levado em conta na análise de eficiência.

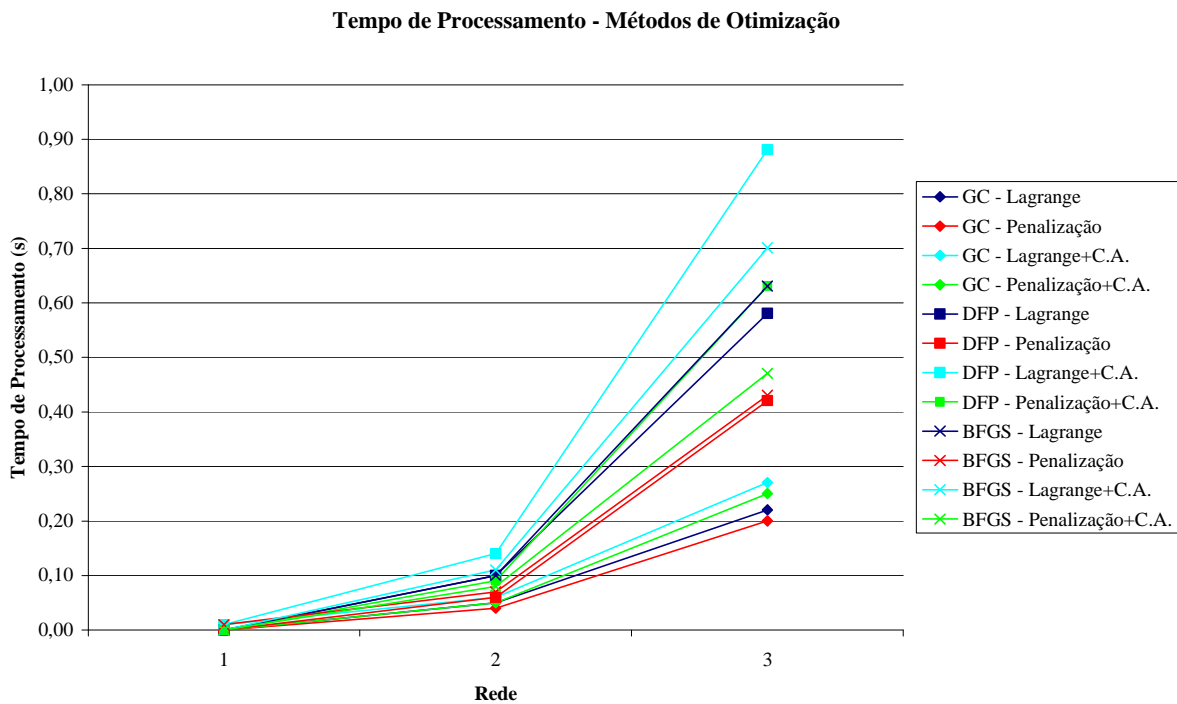


Figura 4.4 - Comparativo do Tempo de Processamento (em segundos) entre o Método dos Gradientes Conjugados (GC) e os Métodos Quase-Newton DFP e BFGS

Como se pode observar, apesar de resultar em um número de iterações maiores, o Método dos Gradientes Conjugados apresentou tempo de processamento menor do que os Métodos Quase-Newton. Além disso, para um mesmo método de otimização, a resolução utilizando a estratégia dos conjuntos ativos resultou em um número maior de iterações e maior tempo de processamento com relação às estratégias que não a utilizaram. Isso se deve ao fato de que a mesma procede a busca pela solução sempre dentro da região factível, e portanto, cada vez que ocorre o contato em um ponto, o processo é reiniciado de tal maneira a continuá-la sem a observação de penetração.

Cabe também observar que em termos gerais, para o presente problema, a estratégia da penalização apresentou-se mais eficiente que a estratégia dos multiplicadores de Lagrange, associada ou não à estratégia dos conjuntos ativos.

Para finalizar este primeiro exemplo, é interessante registrar a deformada da estrutura com o aumento da força aplicada. Para tanto a Figura 4.5 ilustra as configurações deformadas da viga para diferentes valores de força.

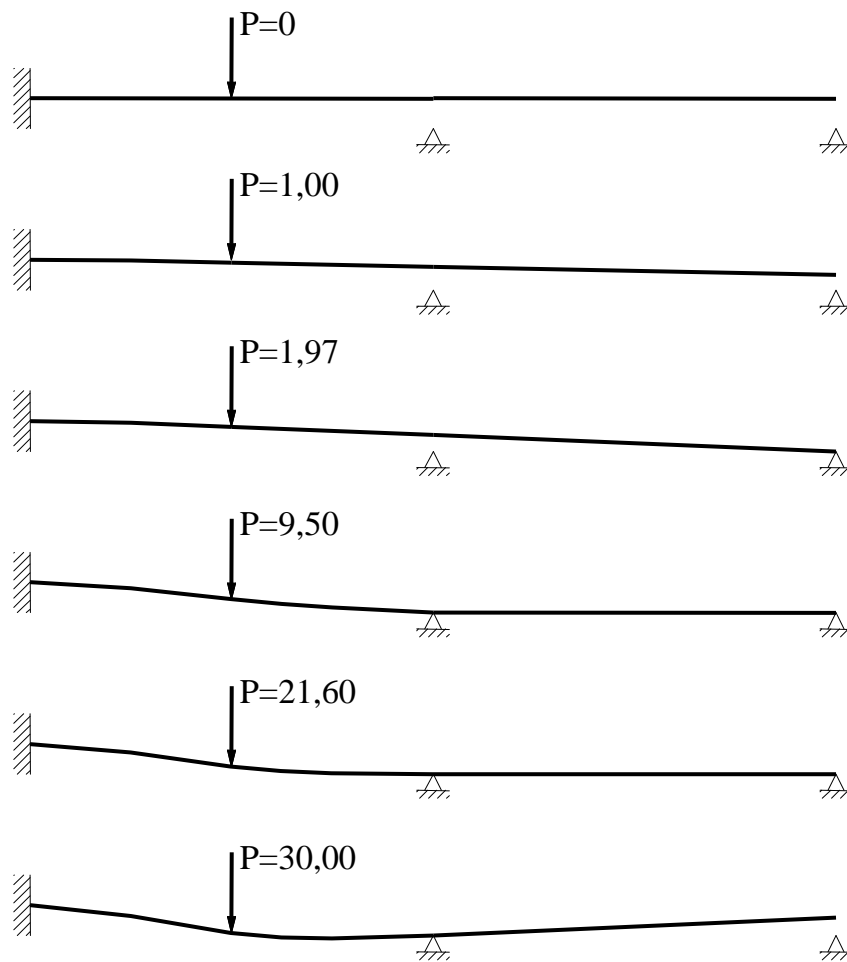


Figura 4.5 - Configurações deformadas da viga para valores de força entre 0 e 30.

O primeiro contato, com o apoio 02, ocorre para $P=1,97$. A partir deste valor, o mesmo passa a exercer uma reação na estrutura. Para $P=9,50$ inicia-se o contato também com o apoio 01, e a partir deste valor, com o aumento de P , observa-se então uma diminuição gradativa da reação no apoio 02 e uma aumento da reação no apoio 01. Para P maior que 21,60 cessa o contato com apoio 02 e passa haver o contato exclusivamente como o apoio 01. Este comportamento não-linear pode ser bem visualizado nas Figuras 4.6 e 4.7.

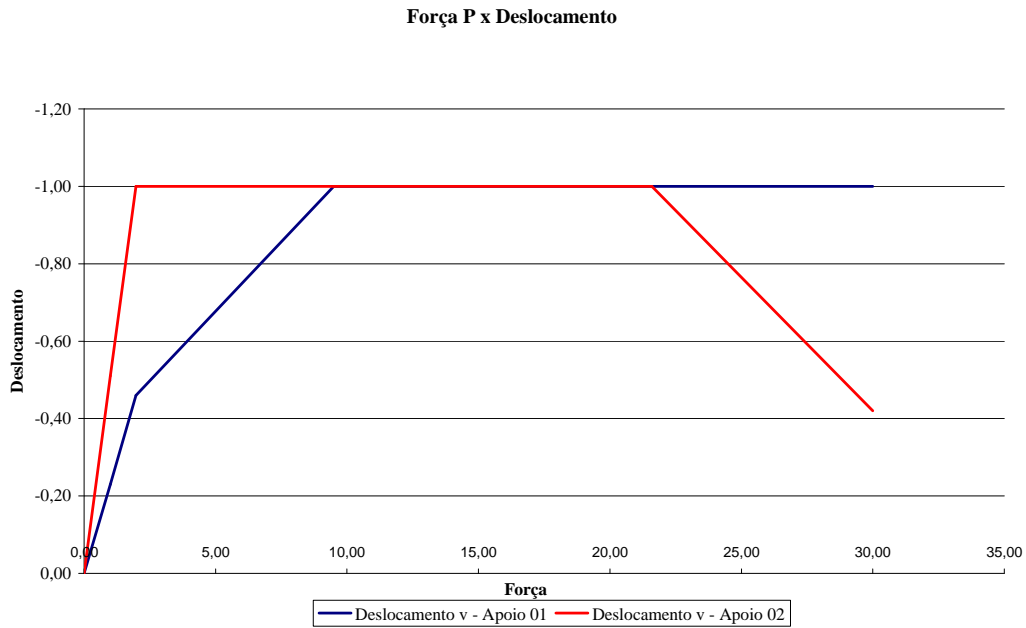


Figura 4.6 - Deslocamento vertical de acordo com a Força P

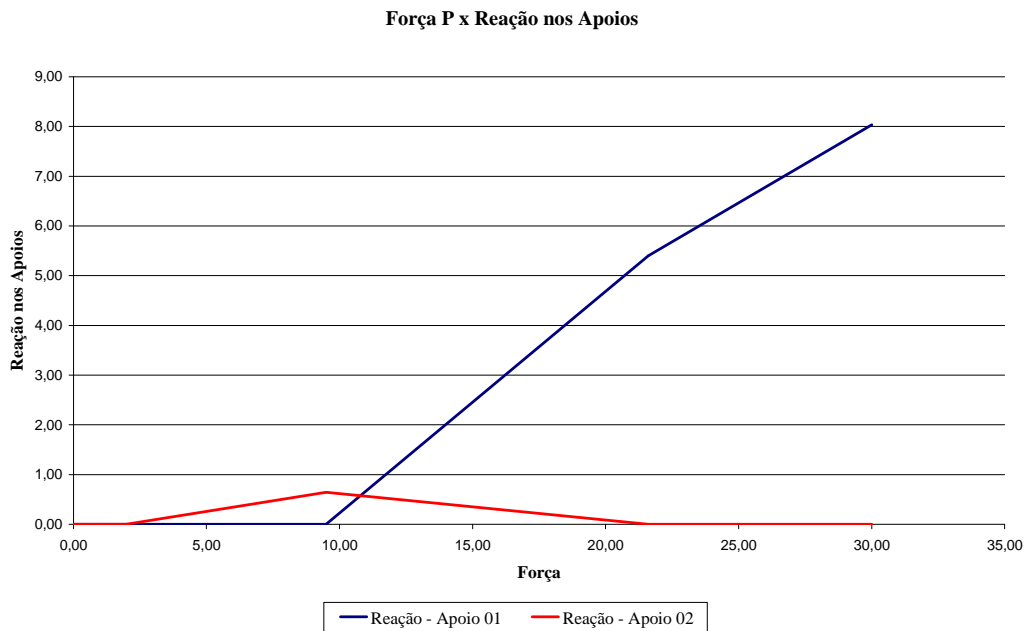


Figura 4.7 - Reação nos apoios 01 e 02 de acordo com a Força P

4.2. Problema de Contato de Hertz

De acordo com (JOHNSON, 2003), o primeiro estudo relativo à mecânica do contato foi desenvolvido por *Heinrich Hertz* em seu artigo “*Über die Berührung fester Elastischer Körper*” em 1881, como forma de explicar os efeitos do contato sobre o desvio de imagens em lentes. Deste estudo resultou a solução analítica para um problema de contato tido hoje como clássico, ilustrado na Figura 4.8 com valores aqui adotados para sua resolução numérica.

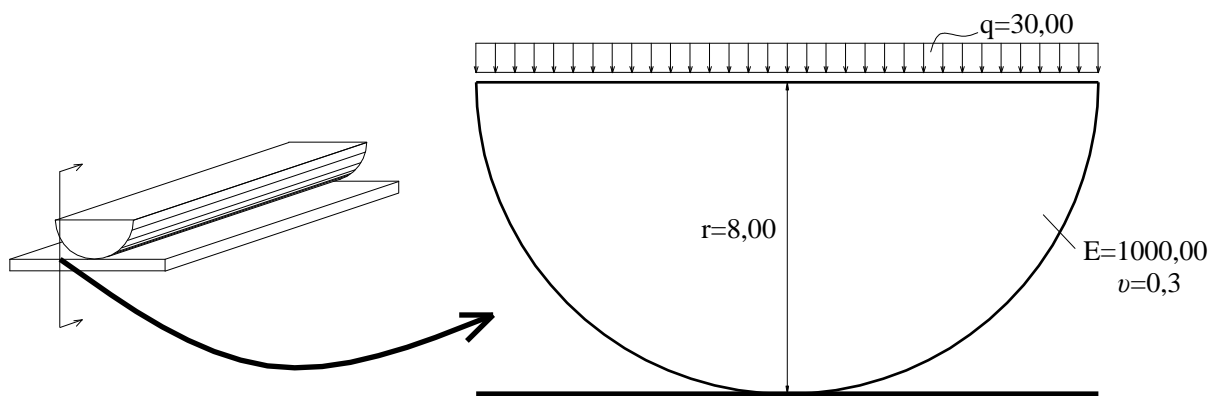


Figura 4.8 - Exemplo de problema de contato de Hertz, com valores adotados para o raio(r), força distribuída(q), Módulo de Elasticidade (E) e Coeficiente de Poisson (ν).

Trata-se de um problema envolvendo um sólido deformável e um anteparo rígido, para o qual as características de geometria, restrições e força aplicada permitem a modelagem como problema bidimensional em Estado Plano de Deformações (EPD).

A solução encontrada por Hertz para caracteriza-se por:

Largura da semi-faixa de contato (metade da largura final da zona de contato):

- $$a = \left(\frac{4P \cdot r}{\pi E^*} \right)^{1/2}$$

Na relação anterior, P é a força por unidade de comprimento longitudinal do cilindro, e E^* é dado por

$$E^* = \frac{E}{1-\nu^2}.$$

Pressão máxima (reação) de contato:

$$\bullet \quad p_0 = \frac{2P}{\pi a} = \left(\frac{PE^*}{\pi r} \right)^{1/2}$$

Tensão máxima de cisalhamento:

$$\bullet \quad \tau = 0,30 p_0 \text{ (em } x = 0 \text{ e } y = 0,78a)$$

Considerando-se os dados adotados, tem-se:

$$a = 2,11; p_0 = 144,87; \tau = 43,46$$

Para a modelagem do sólido foram utilizadas redes de malhas irregulares formadas por elementos triangulares, tanto de elementos com 3 nós (ISOT3) quanto com 6 nós (ISOT6). A Figura 4.9 apresenta o aspecto das redes utilizadas.

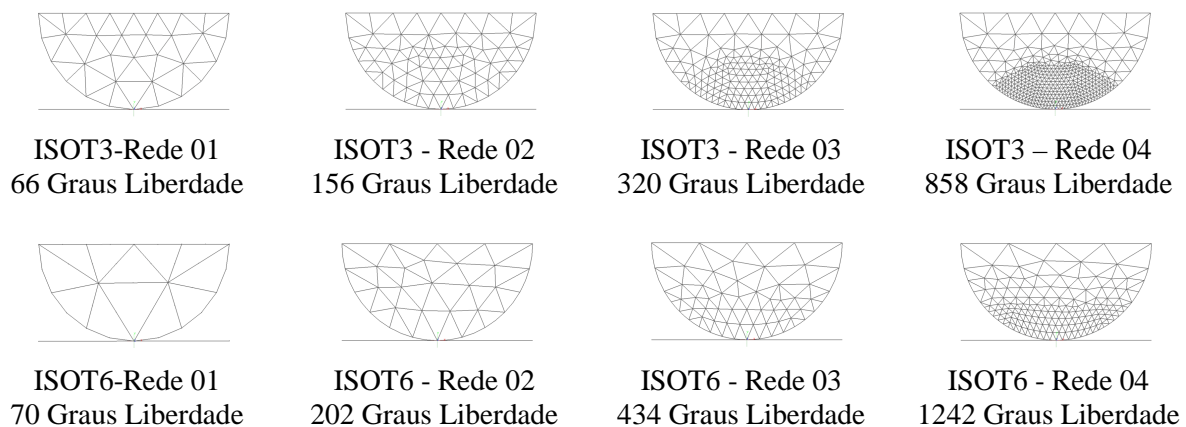


Figura 4.9 - Redes de elementos triangulares de 3 nós (ISOT3) e de 6 nós (ISOT6)

Como a superfície inferior constitui um anteparo rígido reto, e o processo de carregamento não implica em desativação de vínculos de contato, neste problema, ao contrário do anterior, o método do gradiente passou também a ser empregado. Além disso, duas abordagens são consideradas: variáveis canalizadas, nos moldes do exemplo anterior, e o emprego de elementos de contato (do tipo ‘nó-segmento’ e ‘mortar’).

Tome-se inicialmente a primeira abordagem. A fim de avaliar a eficiência dos mesmos métodos utilizados no exemplo anterior, os resultados obtidos quanto ao número de iterações e tempo de processamento estão indicados nas Tabela 4.3 e 4.4.

Tabela 4.3 - Parâmetros de eficiência (N.I. – Número de Iterações e T.P. – Tempo de Processamento) dos métodos de otimização com variáveis canalizadas para redes com elementos ISOT3

Variáveis Canalizadas - ISOT3									
	Rede 01		Rede 02		Rede 03		Rede 04		
	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	
M. Gradiente	7660	2,9743	9214	9,3034	22589	48,6299	-	-	
Gradientes Conjugados	L	187	0,0300	683	0,2604	3050	2,3734	8692	19,2777
	P	147	0,0200	444	0,1602	1162	0,8813	2340	5,2375
	L+C.A.	223	0,0300	858	0,3104	2163	1,8426	7182	15,7326
	P+C.A.	229	0,0300	746	0,2504	1400	1,0515	3663	7,5809
Newton	L	6	0,0200	13	0,1202	14	0,3104	19	1,6624
	P	4	0,0100	13	0,1001	17	0,3705	18	1,4321
	L+C.A.	3	0,0000	5	0,0401	7	0,1502	10	0,8312
	P+C.A.	3	0,0000	5	0,0401	7	0,1502	10	0,7911
Quase-Newton DFP	L	261	0,8612	279	4,7769	468	34,3794	-	-
	P	60	0,1102	108	1,0715	164	8,342	274	96,8993
	L+C.A.	87	0,2804	281	4,6467	640	47,1879	-	-
	P+C.A.	-	-	110	1,0916	167	8,5823	275	98,7019
Quase-Newton BFGS	L	210	0,6810	8392	141,0628	3336	252,7835	-	-
	P	60	0,1102	106	1,0415	156	8,0015	304	107,4545
	L+C.A.	-	-	-	-	-	-	-	-
	P+C.A.	60	0,1102	106	0,9213	154	7,7111	253	88,287
Gauss-Seidel	527	0,0801	1085	0,3906	1299	0,9814	3058	6,3692	

Tabela 4.4 - Parâmetros de eficiência (N.I. – Número de Iterações e T.P – Tempo de Processamento) dos métodos de otimização com variáveis canalizadas para redes com elementos ISOT6

Variáveis Canalizadas - ISOT6									
		Rede 1		Rede 2		Rede 3		Rede 4	
		N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)	N.I.	T.P. (s)
M. Gradiente		8816	5,6381	-	-	-	-	-	-
Gradientes Conjugados	L	167	0,0401	1260	0,9313	5201	8,4421	17241	99,4129
	P	190	0,0401	705	0,5107	1813	2,9142	4426	24,6855
	L+C.A.	282	0,0701	1617	1,1817	5796	9,4636	23641	136,9469
	P+C.A.	296	0,0701	1160	0,8412	3327	5,2776	10267	58,4240
Newton	L	4	0,0200	15	0,2103	18	0,6710	7	1,2117
	P	6	0,0200	11	0,1502	12	0,4406	9	1,6524
	L+C.A.	3	0,0000	5	0,0801	9	0,3205	16	2,6438
	P+C.A.	3	0,0100	5	0,0701	9	0,3205	16	2,8441
Quase-Newton DFP	L	127	0,5107	338	10,5852	832	113,4431	-	-
	P	71	0,1803	158	3,2447	244	23,0531	434	325,6382
	L+C.A.	141	0,5608	386	11,9872	-	-	-	-
	P+C.A.	74	0,1903	165	3,4049	237	22,3121	410	312,4493
Quase-Newton BFGS	L	179	0,7210	-	-	940	131,8195	-	-
	P	71	0,1803	153	3,3048	228	21,0603	-	-
	L+C.A.	-	-	-	-	-	-	-	-
	P+C.A.	71	0,1602	152	3,0344	228	21,2606	386	285,9111
Gauss-Seidel		349	0,0701	2362	1,6323	3349	5,1574	6123	37,6341

Para estas tabelas também se utilizou a indicação ‘L’ para a estratégia dos multiplicadores de Lagrange, ‘P’ para estratégia da penalização e ‘+C.A.’ quando as mesmas foram associados à estratégia dos conjuntos ativos. Os casos indicado por ‘-’ não convergiram dentro do número máximo de iterações adotado (30000 para Método dos Gradientes, Gradientes Conjugados e Processo Iterativo de Gauss-Seidel, e 1000 para os métodos do tipo Quase-Newton).

Para avaliar a precisão das estratégias em cada uma das redes, os valores obtidos foram confrontados com os resultados analíticos de referência, sendo o de compressão na direção vertical (p_0) apresentado na Figura 4.10, e os resultados de tensões de cisalhamento na Figura 4.11. Também são apresentados nas mesmas figuras os resultados do pacote computacional ANSYS®, utilizando redes e elementos idênticos aos utilizados no programa

desenvolvido. Cabe observar que, de um modo geral, todas as estratégias produziram valores numéricos praticamente idênticos, salvo em situações que serão descritas mais adiante.

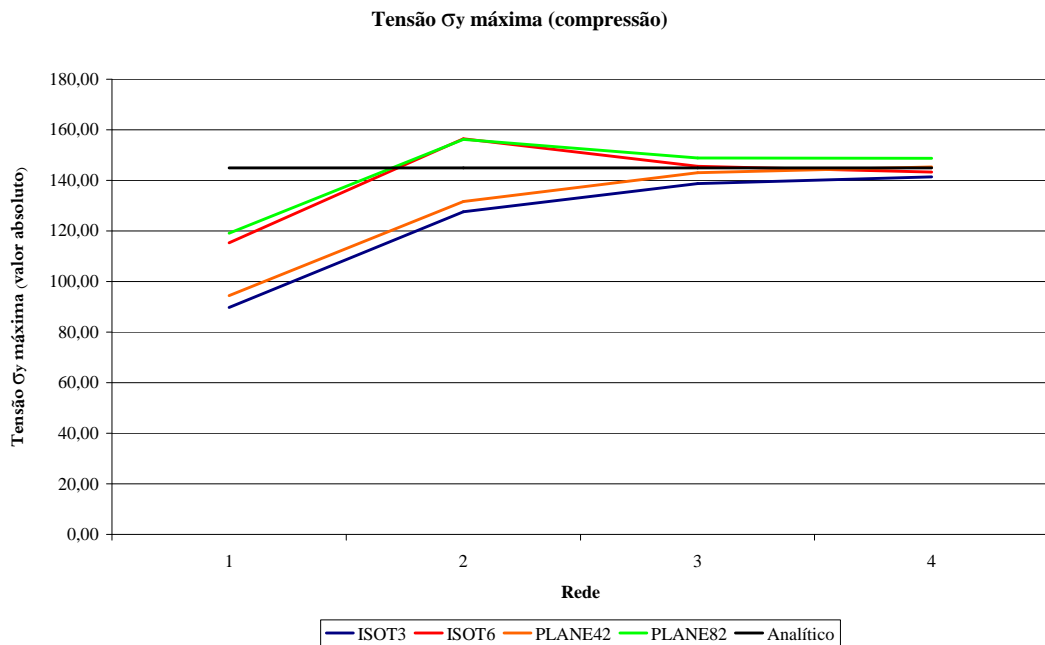


Figura 4.10 - Tensão de compressão máxima obtida para cada uma das redes

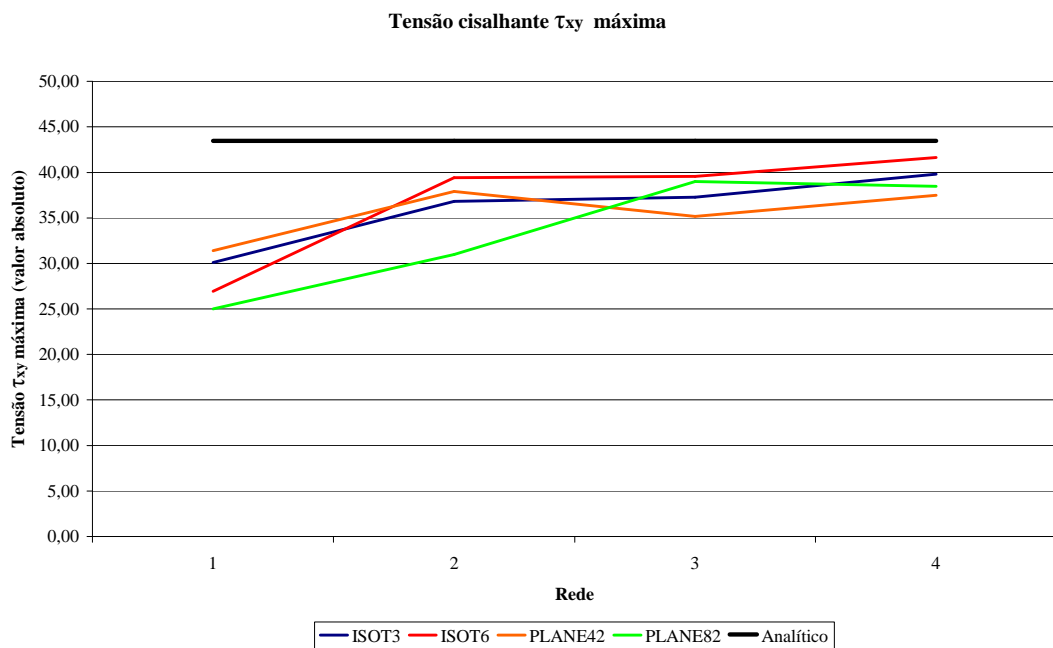


Figura 4.11 - Tensão cisalhante máxima obtida para cada uma das redes

Na segunda abordagem a resolução do mesmo problema foi conduzida utilizando-se elementos de contato. Cabe lembrar que tais elementos constituem uma estratégia de resolução geral que se aplica para superfícies de contato de qualquer geometria.

Em particular, os elementos de contato do tipo ‘*nó-segmento*’, por empregarem um critério de contato pontual, constituem uma generalização da estratégia das variáveis canalizadas. De fato, os resultados obtidos com esse tipo de elemento foram idênticos aos obtidos pelos métodos de otimização com variáveis canalizadas. Nesse sentido, tal concordância constitui-se numa primeira comprovação da boa implementação e precisão dos mesmos.

Já os elementos de contato ‘*mortar*’ apresentam uma formulação mais elaborada, e empregam um critério de contato que envolve não apenas o nó e seus respectivos graus de liberdade, mas um conjunto de graus de liberdade associados ao lado do elemento. Por esse motivo é bastante interessante proceder a comparação dos resultados obtidos por meio dos mesmos com os apresentados anteriormente.

Observou-se que alguns dos resultados obtidos utilizando-se elementos ‘*mortar*’ mostraram-se sensíveis ao arredondamento ou precisão numérica, não conseguindo apresentar uma configuração de equilíbrio simétrica, tanto para redes assimétricas (Figura 4.12 (a)), quanto simétricas (Figura 4.12 (b)).

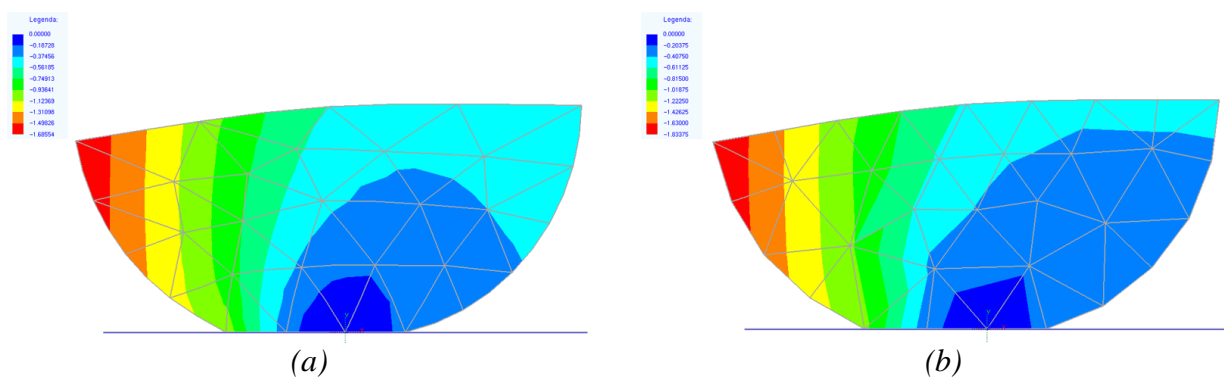


Figura 4.12 - Exemplos de diagramas de cores do deslocamento vertical *v* não-simétrico obtidos por meio do uso de elementos de contato ‘*mortar*’

A assimetria observada tem origem numérica, e uma vez que ocorreram apenas para tais elementos, evidenciam uma maior sensibilidade dessa estratégia a esse tipo de erro.

É importante ressaltar, entretanto, que os problemas do elemento ‘*mortar*’ quanto à simetria podem ser contornados quando os mesmos são associados com a estratégia dos conjuntos ativos. Nessa situação, as respostas obtidas foram simétricas, sendo idênticas as que foram obtidas por meio dos elementos do tipo ‘*nó-segmento*’.

A Figura 4.13 ilustra os resultados satisfatórios que foram obtidos utilizando-se a estratégia dos conjuntos ativos para resolução via elementos ‘*mortar*’, para as mesmas redes apresentadas na Figura 4.12.

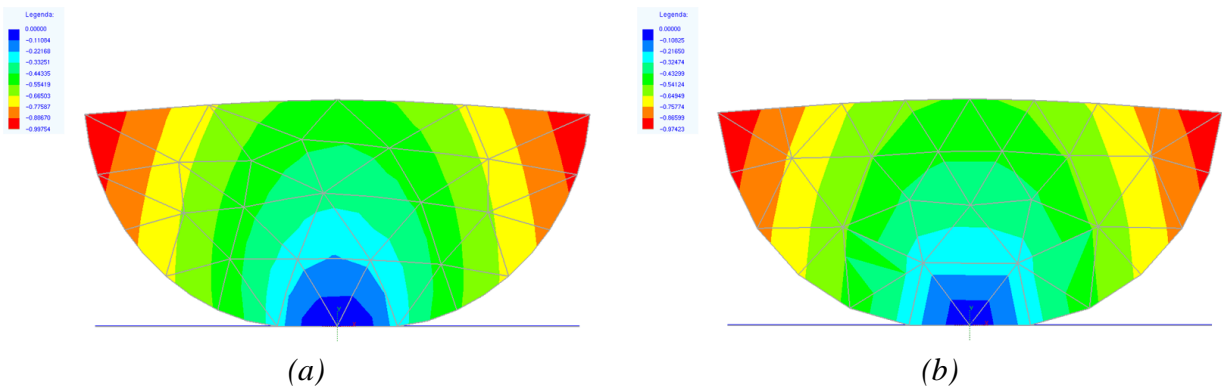


Figura 4.13 - Exemplos de diagramas de cores do deslocamento vertical v simétrico obtidos por meio do uso de elementos de contato ‘*mortar*’ associados a estratégia dos conjuntos ativos, para as mesmas redes apresentadas na Figura 4.12.

Quanto aos resultados obtidos com os elementos do tipo ‘*nó-segmento*’, as distribuições de tensões obtidas utilizando-se a rede 4 de elementos ISOT6 são apresentadas nas Figura 4.14, 4.15 e 4.16.

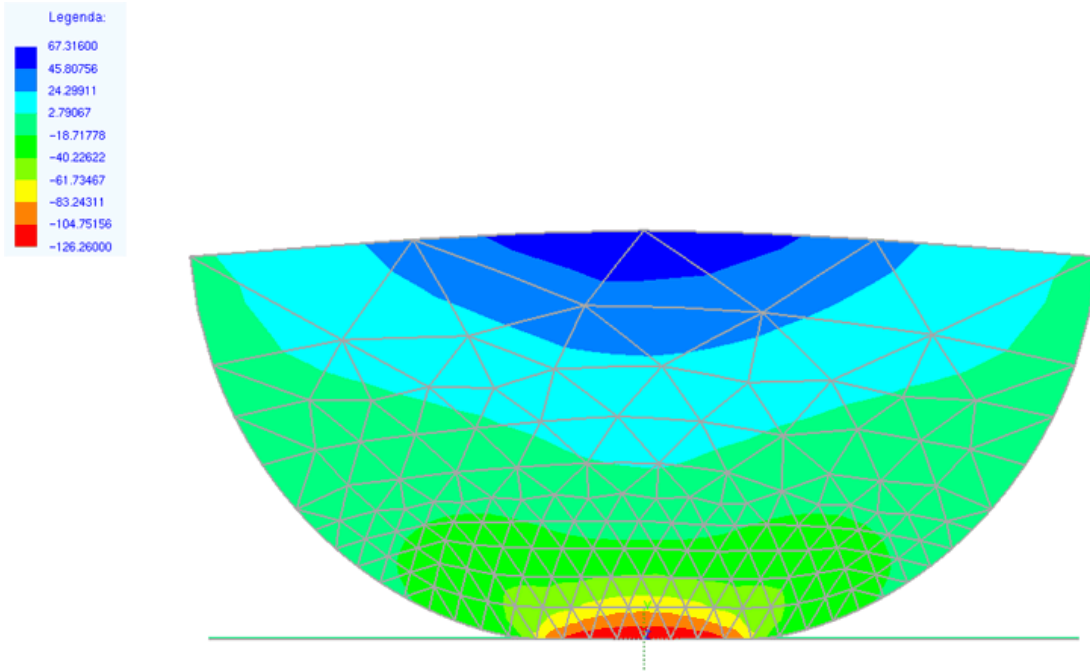


Figura 4.14 - Campo de tensão na direção x (σ_x) obtido para a rede 04 de elementos ISOT6, com elementos de contato do tipo 'nó-segmento'

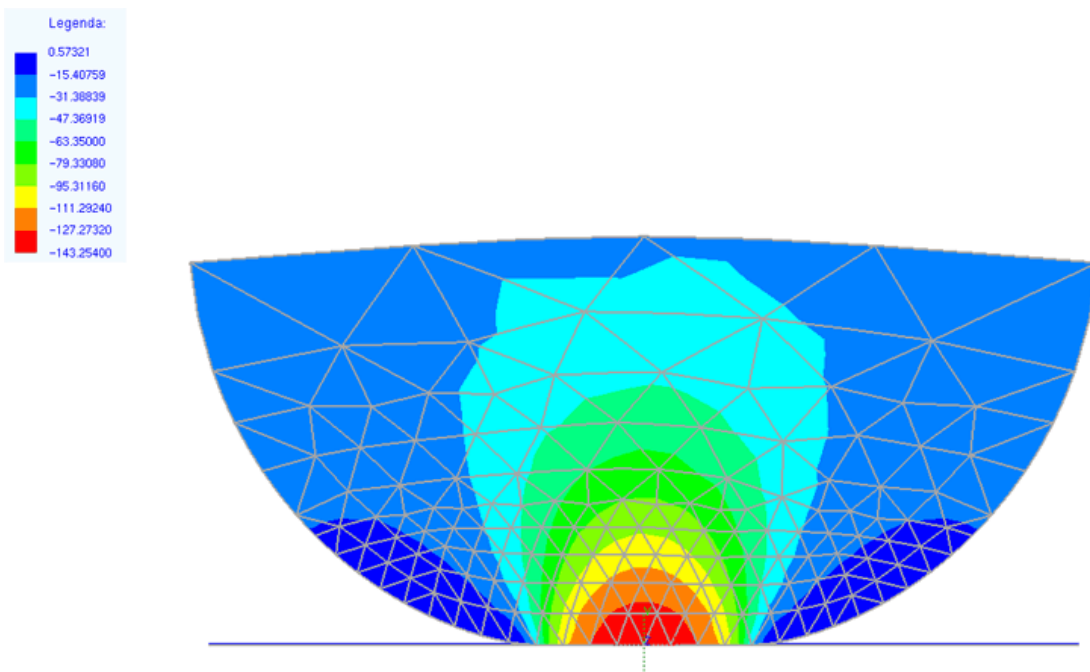


Figura 4.15 - Campo de tensão na direção y (σ_y) obtido para a rede 04 de elementos ISOT6, com elementos de contato do tipo 'nó-segmento'

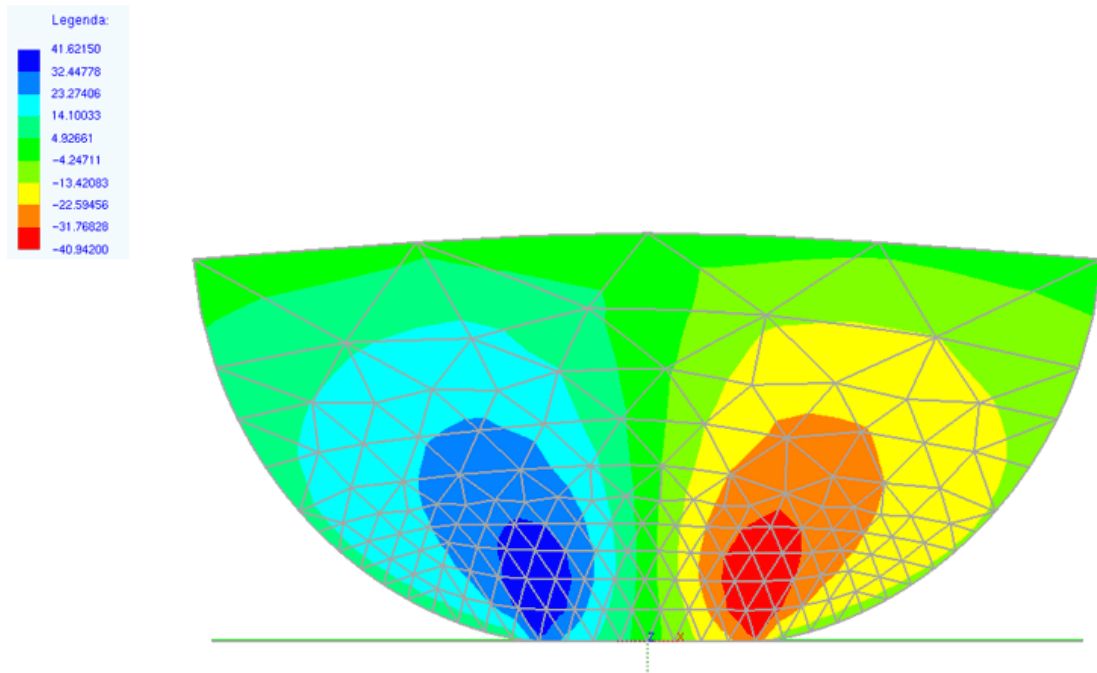


Figura 4.16 - Campo de tensão cisalhante (τ_{xy}) obtido para a rede 04 de elementos ISOT6, com elementos de contato do tipo 'nó-segmento'

O aspecto dos diagramas contempla simetria e é bastante similar ao obtido por meio do ANSYS utilizando-se a rede 04 de elemento PLANE82 (equivalente ao elemento ISOT6), indicados na Figura 4.17.

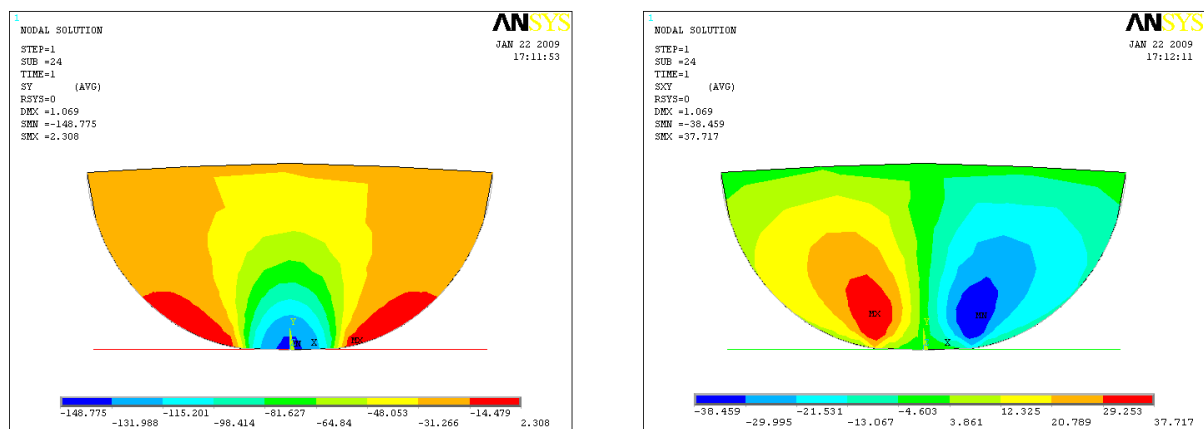


Figura 4.17 - Diagramas da distribuição de tensões obtidos por meio do ANSYS

4.3. Viga em balanço sujeita a ação de vínculos unilaterais (modelagem com elementos bidimensionais)

Este terceiro exemplo trata-se basicamente do mesmo problema apresentado em 4.1, agora modelado com elementos bidimensionais (Estado Plano de Tensões). Os detalhes estão apresentados na Figura 4.18.

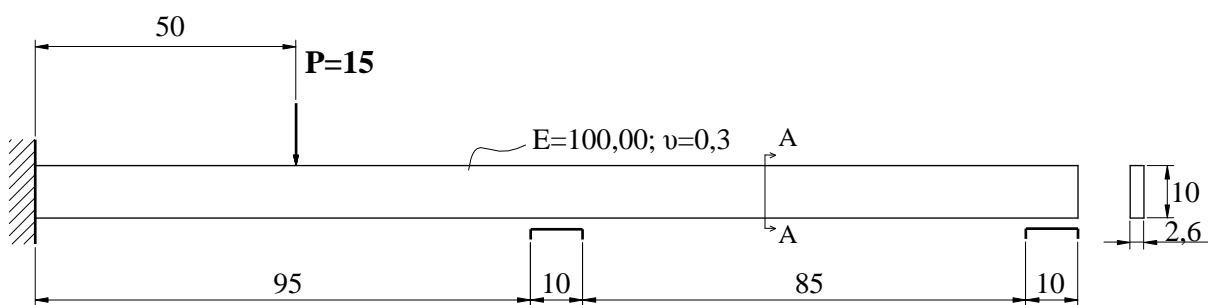


Figura 4.18 - Esquema estrutural e dimensões do problema da viga

A distância entre a face inferior da viga e a face superior dos apoios, diferentemente de em 4.1 é igual a 2,00. Adotou-se também um Módulo de Elasticidade diferente do adotado para a outra modelagem, para tornar a deformada mais pronunciada e com melhor visualização.

Novamente duas abordagens foram empregadas: variáveis canalizadas e elementos de contato. A primeira abordagem serviu de referência particularmente para os resultados obtidos utilizando-se os elementos do tipo 'nó-segmento', por motivo já mencionado anteriormente. Os resultados de ambas as abordagens foram comparados com uma solução de referência gerada com o ANSYS a partir das seguintes características:

- Rede regular com 2000 elementos PLANE42 (10x200 elementos), totalizando 2211 nós, ou seja, 4422 graus de liberdade.

- Para o contato foram utilizados elementos CONTACT175, cuja formulação considera contato entre nó e superfície, sendo esta última definida por elementos TARGET169. Observa-se que a estratégia disponibilizada no ANSYS é mais próxima da abordagem aqui realizada com o elemento ‘*nó-segmento*’. Para restrição de variáveis utilizou-se a estratégia Lagrangiano Aumentado, opção ‘*default*’ do programa.

Nestas condições, foram obtidos como valores extremos de deslocamento 16,35 (para cima, na extremidade livre) e -6,82 (para baixo, no ponto de aplicação da força).

De início, programaram-se simulações com o programa deste trabalho utilizando redes de malhas regulares compostas por elementos quadrilaterais tanto do tipo ISOQ4 quanto ISOQ8; as características destas redes constam na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 - Características das redes regulares (N.E. - número de elementos, N.N - número de nós e N.G.L. - número de graus de liberdade)

Rede de elementos ISOQ4				Rede de elementos ISOQ8			
Rede	N.E.	N.N.	N.G.L	Rede	N.E.	N.N.	N.G.L
01	320 (4x80)	405	810	01	80 (2x40)	325	650
02	720 (6x120)	847	1694	02	180 (3x60)	667	1334
03	1280 (8x160)	1449	2898	03	320 (4x80)	1129	2258
04	2000 (10x200)	2211	4422	04	500 (5x100)	1711	3422

Entretanto, após os processamentos das redes compostas por elementos ISOQ8 combinadas com elementos de contato do tipo ‘*mortar*’, notaram-se respostas inconsistentes, brevemente descritas no que segue.

A Figura 4.19 ilustra as soluções obtidas utilizando os elementos de contato ‘*mortar*’ (a) e ‘*nó-segmento*’ (b), para o nível máximo de força aplicado, que deve induzir ‘*descolamento*’ da extremidade livre em relação ao apoio. Claramente a resposta obtida com o elemento ‘*mortar*’ é incoerente.

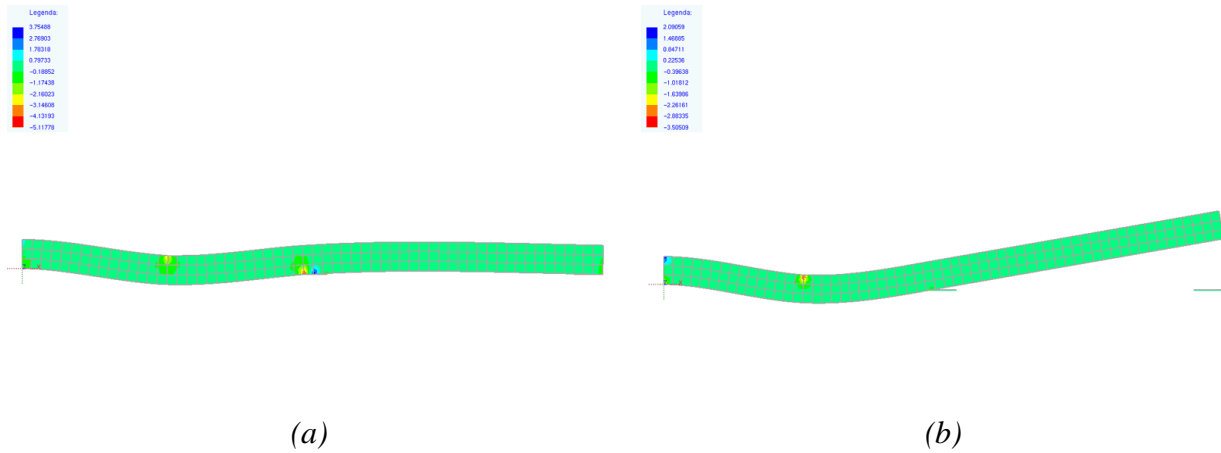


Figura 4.19 - Configuração de equilíbrio obtida por rede de elementos ISOQ8; (a) para elementos de contato do tipo ‘mortar’; (b) para elementos de contato do tipo ‘nó-segmento’

Lembrando que nos elementos de contato ‘mortar’ o valor da tensão de controle considerado na interface de contato é obtido por uma integração das tensões ao longo da face do elemento, o comportamento incoerente obtido pode ser mais facilmente compreendido observando-se em detalhe a região do apoio extremo, ao qual a viga ficou, por assim dizer, ‘presa’ (vide Figura 4.20).

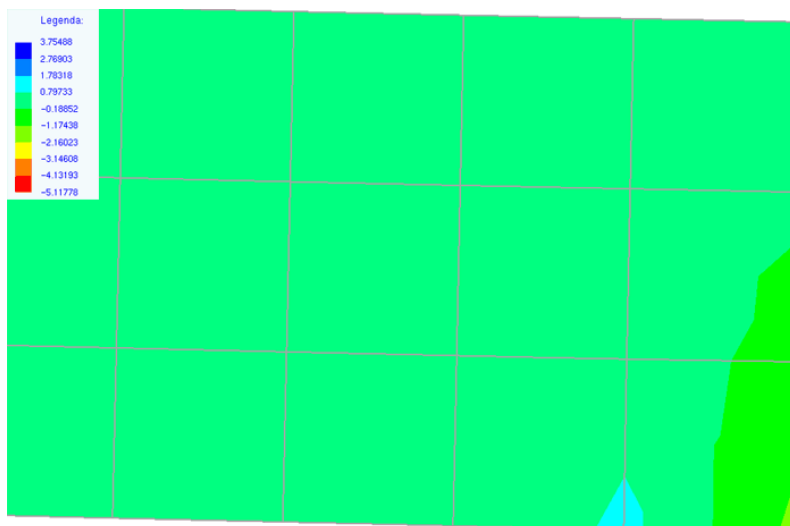


Figura 4.20 - Região do apoio extremo na configuração deformada obtida para a rede 02 de elementos ISOQ8 utilizando-se elementos de contato ‘mortar’ (diagrama de cores referente a tensão na direção y (σ_y))

Na Figura 4.20 pode-se claramente observar a ocorrência de tensões de tração e de compressão ao longo da interface de contato (regiões com coloração azul clara e em tonalidades de verde). Na integração ao longo da face, as tensões de compressão prevalecem, não desativando o contato.

Quando a mesma rede foi utilizada com elementos de contato do tipo ‘*nó-segmento*’, esse comportamento não foi observado, como mostrado na Figura 4.19(b), já que os mesmos tomam valores pontuais de tensão como referência para a desativação do contato.

Isto não quer dizer que os elementos ‘*mortar*’ não sejam eficientes, mas sim que, a depender do caso, sua utilização adequada possa requerer maior refinamento das redes, ou ainda, a combinação com estratégias de refinamento do tipo adaptativo.

Evidenciada a limitação descrita, optou-se por dar continuidade ao estudo do presente problema apenas considerando as redes de elementos ISOQ4.

Primeiramente, avalia-se a estratégia de otimização pelo Método de Newton com variáveis canalizadas.

A Tabela 4.6 apresenta o número de iterações e tempo de processamento despendido para a resolução com cada uma das quatro possibilidades de restrição de variáveis estudadas.

Tabela 4.6 - Número de iterações e tempo de processamento observados para resolução pelo Método de Newton com variáveis canalizadas

	Número de Iterações			
	Lagrange	Penalização	Lagrange+C.A.	Penalização+C.A.
Rede 1	6	6	20	20
Rede 2	6	6	26	26
Rede 3	7	7	32	32
Rede 4	7	7	39	39
	Tempo de Processamento (s)			
	Lagrange	Penalização	Lagrange+C.A.	Penalização+C.A.
Rede 1	0,2804	0,2904	0,9313	0,9313
Rede 2	0,7611	0,7911	3,2046	3,2847
Rede 3	1,9929	2,0129	9,0730	8,9128
Rede 4	3,2747	3,4349	18,4365	18,8771

Como pode ser observado, para o exemplo em questão o desempenho tanto da estratégia dos multiplicadores de Lagrange quanto da penalização foi praticamente equivalente, o que também foi evidenciado quando ambas foram associadas à estratégia dos conjuntos ativos. Cabe também ressaltar que quando esta foi utilizada, observou-se um aumento significativo no número de iterações e tempo de processamento, proporcionalmente ao número de graus de liberdade da rede. Na Figura 4.21 esse aspecto fica bastante evidente.

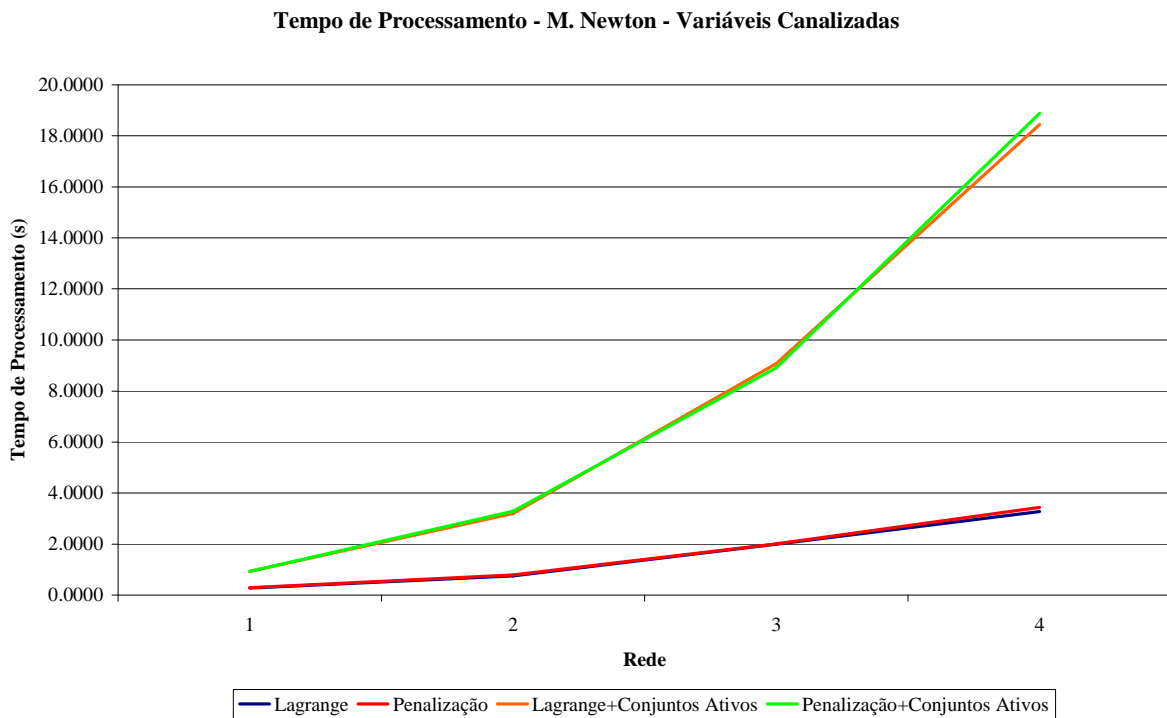


Figura 4.21 - Tempo de processamento para as diversas redes de elemento ISOQ4 utilizando-se o Método de Newton com variáveis canalizadas

Na seqüência, na abordagem utilizando elementos de contato, optou-se por tomar apenas a resolução utilizando a estratégia da penalização. A Tabela 4.7 apresenta os parâmetros de eficiência obtidos para cada caso, incluindo, para confronto, aqueles correspondentes à abordagem por variáveis canalizadas.

Tabela 4.7 - Comparativo da eficiência da resolução utilizando elementos de contato com relação a otimização com variáveis canalizadas (V.C.)

Rede	Número de Iterações			Rede	Tempo de Processamento (s)		
	mortar	nó-segmento	V.C.		mortar	nó-segmento	V.C.
01	8	6	6	01	0,4206	0,3305	0,2904
02	10	6	6	02	1,3519	0,8612	0,7911
03	10	7	7	03	2,9943	2,1531	2,0129
04	100	7	7	04	49,3309	3,6753	3,4349

Um primeiro aspecto bastante evidente é que para todas as redes a resolução por elementos do tipo ‘*nó-segmento*’ demandou exatamente o mesmo número de iterações que a resolução por variáveis canalizadas.

Tal diagnóstico era esperado, uma vez que ambas tratam-se basicamente da mesma estratégia de restrição de variáveis, conforme já discutido no exemplo anterior. Já quanto ao tempo de processamento, elementos do tipo ‘*nó-segmento*’ requerem tempos ligeiramente superiores devido ao processamento adicional para a avaliação da ocorrência do contato.

Quanto à solução com elementos ‘*mortar*’ pode-se notar que o desempenho sempre foi inferior, tanto em termos de número de iterações quanto de tempo de processamento. Mais ainda, para a rede 04, com maior número de graus de liberdade, observou-se um salto grande no número de iterações e tempo de processamento com relação à tendência que vinha sendo observada para as demais redes. A Figura 4.22 apresenta este comportamento ainda não totalmente esclarecido (uma explicação plausível é apresentada mais adiante).

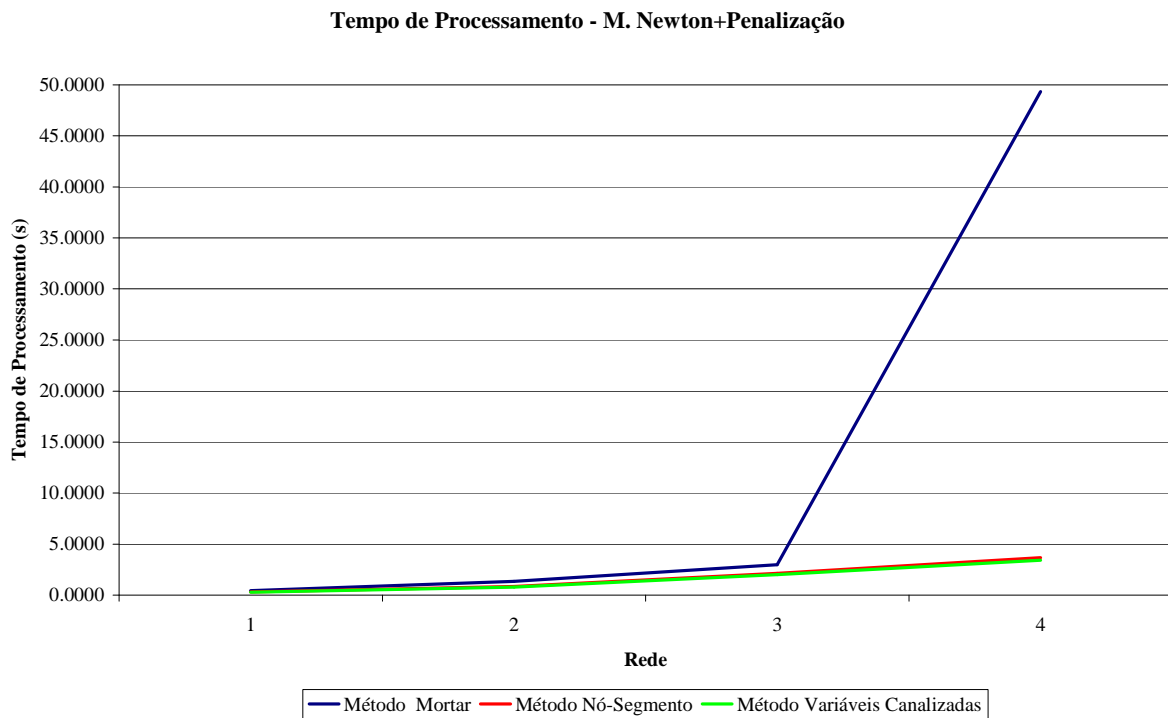


Figura 4.22 - Comparação do tempo de processamento necessário para resolução utilizando-se as diferentes abordagens adotadas.

Em relação à precisão dos resultados é necessário retomar os valores de referência citados anteriormente, no caso, relativos ao deslocamento máximo (maior valor de deslocamento para cima) e mínimo (maior valor de deslocamento para baixo). A Figura 4.23 indica a convergência para o primeiro valor, enquanto a Figura 4.24 indica a convergência para o segundo.

Pode ser notado que tanto a solução obtida utilizando-se variáveis canalizadas quanto a obtida utilizando elementos de contato do tipo ‘*nó-segmento*’ aproximaram-se bastante dos resultados de referência, mesmo para as redes com malhas mais grosseiras. Já os elementos de contato ‘*mortar*’ não propiciaram resultados tão próximos dos valores adotados como de referência, divergindo para a rede mais refinada.

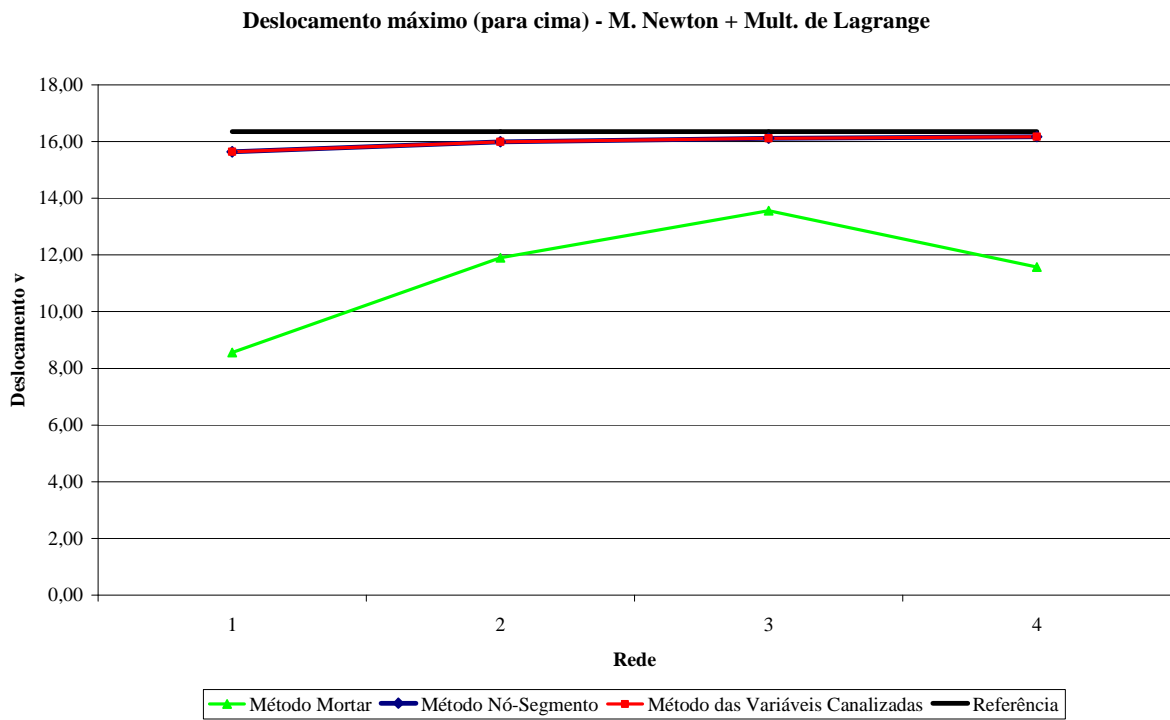


Figura 4.23 - Convergência do valor de deslocamento máximo (para cima)

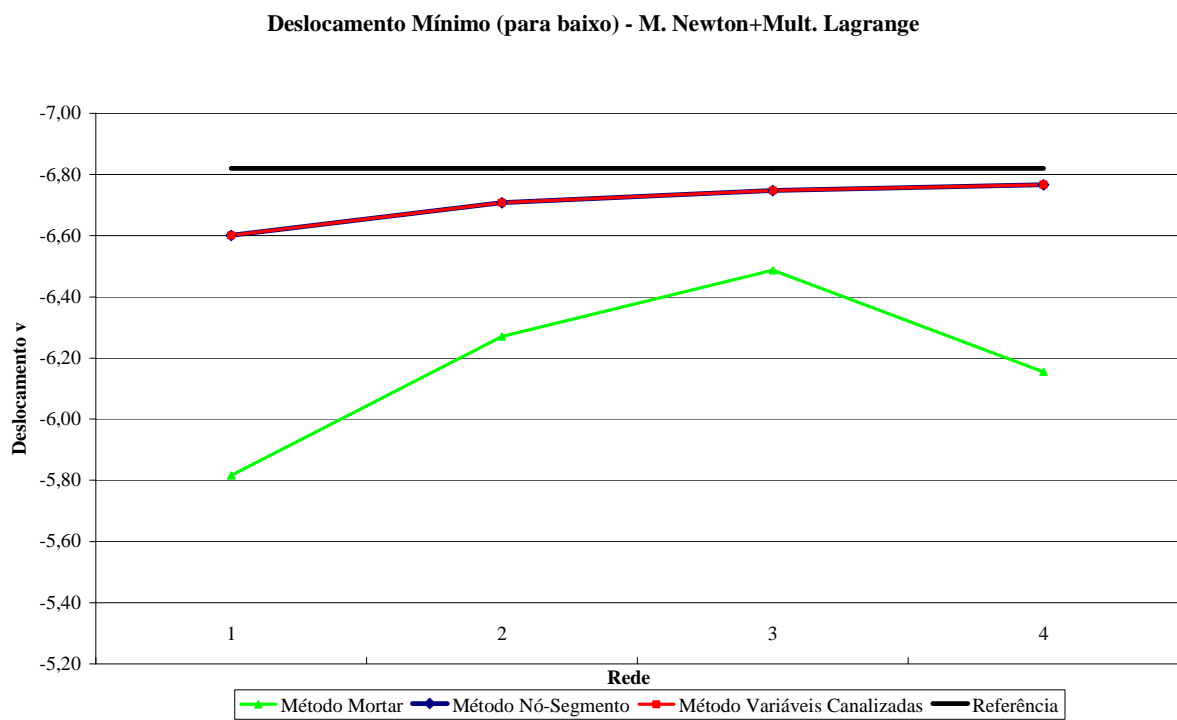


Figura 4.24 - Convergência do valor de deslocamento mínimo (para baixo)

A explicação para o distanciamento entre os resultados de referência e os obtidos utilizando-se elementos de contato ‘mortar’ pode mais uma vez ser obtida analisando-se mais detalhadamente a região de contato que ocorre no apoio intermediário (Figura 4.25).

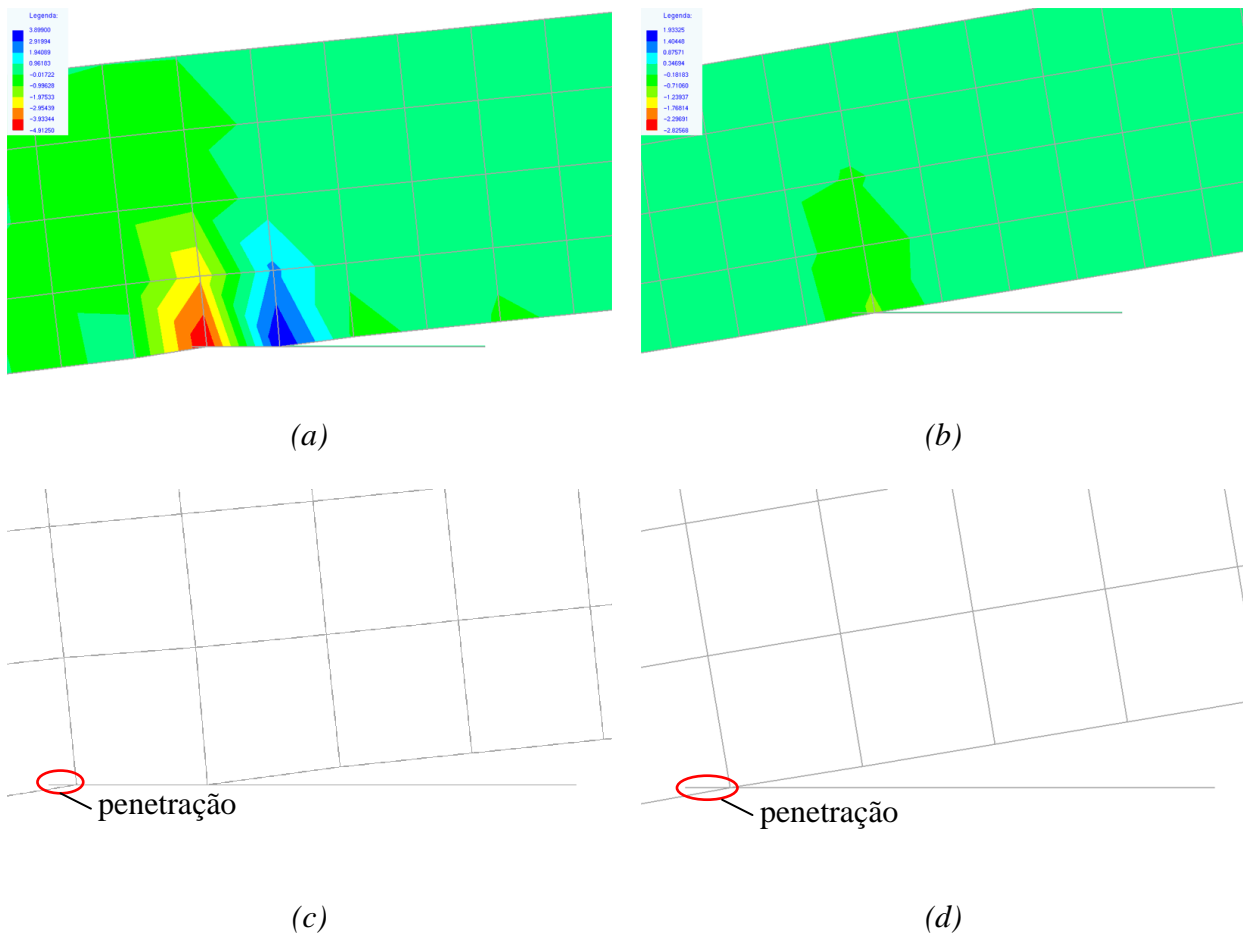
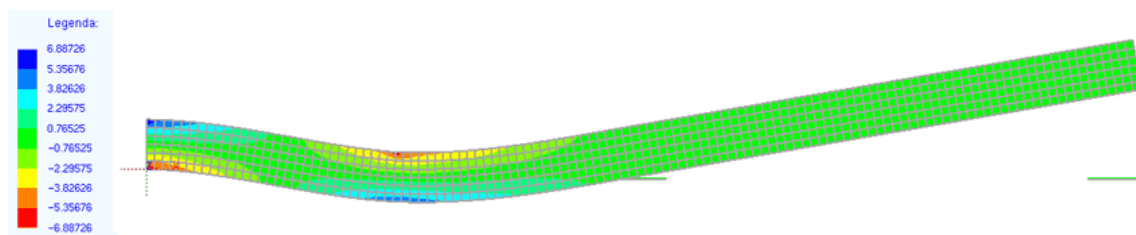


Figura 4.25 - Campos de tensão vertical obtidos utilizando elementos de contato ‘mortar’ (a) e do tipo ‘nó-segmento’ (b). Em (c) e (d) são apresentadas apenas a configuração das redes deformadas, para facilitar visualização da região/ponto de contato.

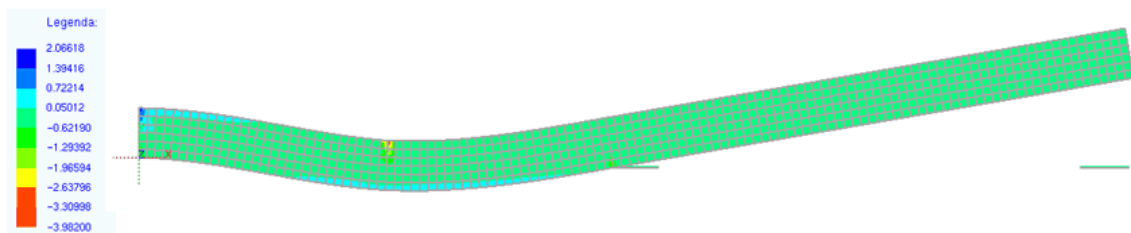
Mais uma vez a causa do mau comportamento dos elementos de contato ‘mortar’ foi basicamente o fato de eles admitirem tensões de tração no contato. A ativação ou desativação do contato com base na integral da tensão em toda a face de cada elemento (Figura 4.25 (a) e (b)) pode, então, dar origem a configurações deformadas bastante distintas (Figura 4.25 (c) e (d)). É importante também atentar nas mesmas figuras que em ambos os elementos observou-

se a ocorrência de penetração entre as superfícies de contato, que constitui um erro decorrente da discretização adotada.

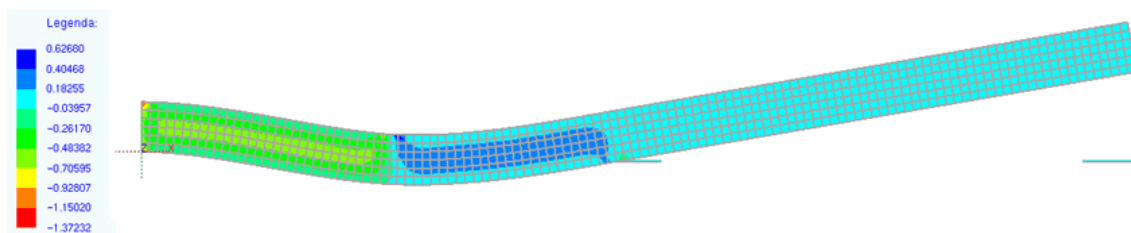
Para finalizar, apresentam-se os campos de tensões obtidos utilizando-se elementos de contato do tipo 'nó-segmento', na Figura 4.26.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.26 - Campos de tensões obtidos utilizando-se elementos de contato do tipo nó-segmento (rede 02 – elementos ISOQ4), sendo (a) a tensão na direção horizontal (σ_x), (b) na direção vertical (σ_y) e (c) a tensão cisalhante (τ_{xy}).

4.4. Viga com apoios inclinados

Visando avançar no nível de dificuldade de resolução, propõe-se um novo problema, relativo a uma viga com as mesmas dimensões da utilizada no problema anterior, agora sujeita à ação de anteparos não-retos, conforme o esquema da Figura 4.27.

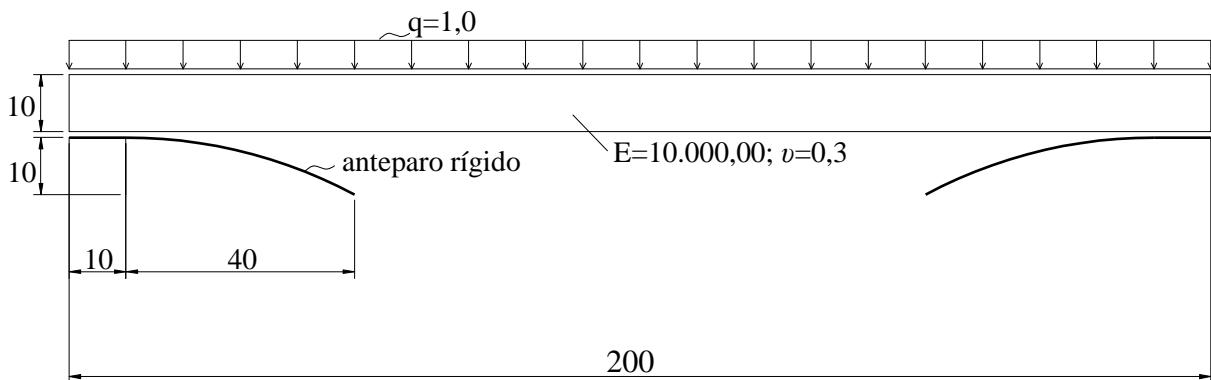


Figura 4.27 - Esquema estrutural para o presente exemplo

Nas simulações os nós pertencentes à seção do meio do vão tiveram seus deslocamentos horizontais impedidos para eliminar movimento de corpo rígido nesta direção.

Mais uma vez o valor de referência foi gerado com o ANSYS, com as mesmas características (rede e elementos) descritas no exemplo anterior.

No ANSYS o fato de as restrições darem-se apenas por contato impôs grande dificuldade para o algoritmo de resolução. Para superar essa dificuldade foi necessário ativar a opção de não-linearidade geométrica e, também, alterar a opção do comportamento entre as superfícies de contato, impondo-se o *status 'Rough'* nas opções do elemento CONTACT175, seguindo orientações do manual do programa para essa situação.

Como o ANSYS apresenta hipóteses distintas das utilizadas pelo programa desenvolvido, foram tomados como referência apenas os valores para o deslocamento máximo (para cima) e mínimo (para baixo), respectivamente iguais a 2,55 e -9,20.

Uma vez que foram processados exemplos com as mesmas redes do exemplo anterior, as características são idênticas às da Tabela 4.5.

Neste exemplo, em função da geometria da restrição não é possível empregar a abordagem por variáveis canalizadas.

Em termos dos resultados com a abordagem por elementos de contato, em primeiro lugar, a estratégia de penalização não apresentaram convergência. As estratégias de conjuntos ativos também não foram bem sucedidas. A única estratégia que apresentou convergência para todas as redes foi a que emprega multiplicadores de Lagrange (não-associada à estratégia dos conjuntos ativos).

Para esta estratégia, as respostas em termos de deslocamento máximo e mínimo são ilustradas respectivamente nas Figuras 4.28 e 4.29.

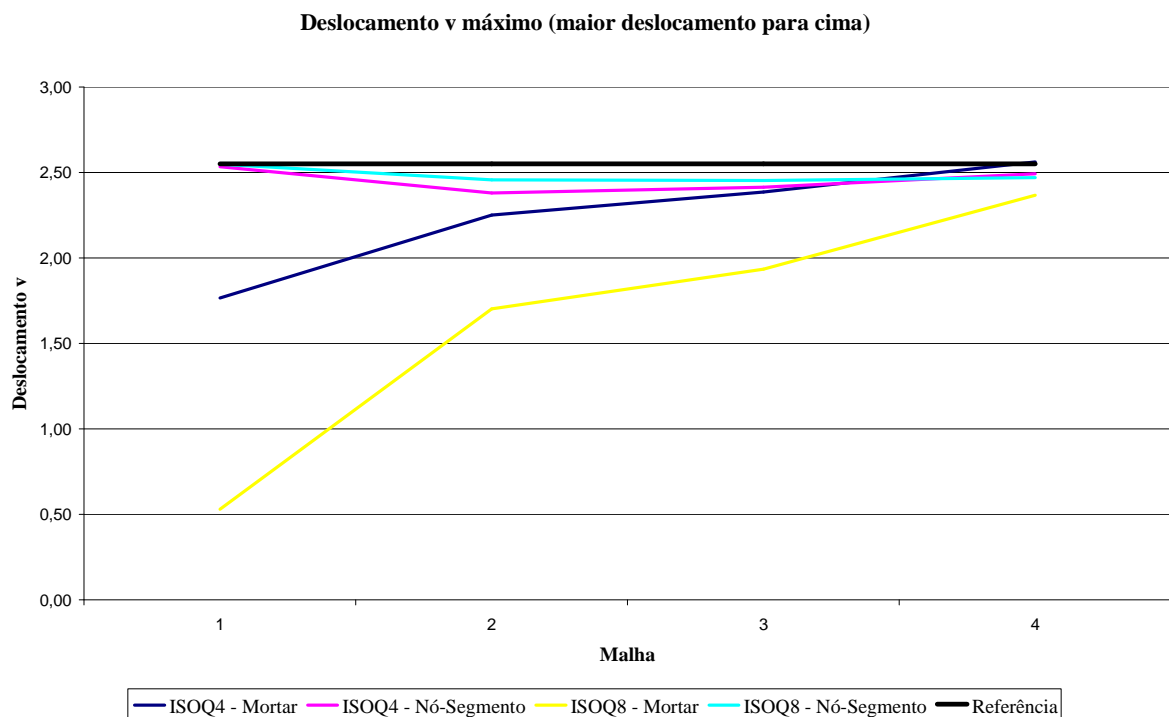


Figura 4.28 - Deslocamento máximo (para cima) obtido utilizando-se para a restrição de variáveis a estratégia dos multiplicadores de Lagrange

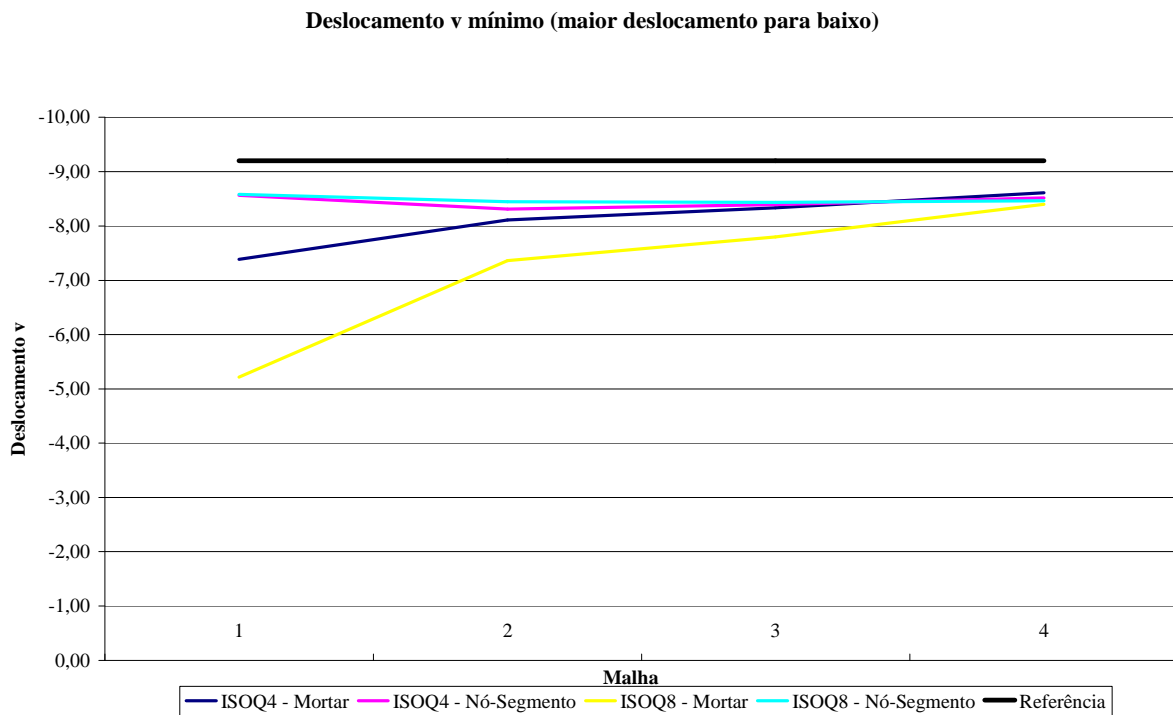


Figura 4.29 - Deslocamento mínimo (para baixo) obtido utilizando-se para a restrição de variáveis a estratégia dos multiplicadores de Lagrange

Os valores de deslocamento máximo aproximaram-se mais do valor de referência do que os valores de deslocamento mínimo, para os quais se observou uma diferença considerável. Entretanto, cabe novamente ressaltar que a resposta de referência foi gerada a partir de condições distintas das adotadas no programa desenvolvido.

Mais uma vez os resultados mais destoantes comparativamente foram os obtidos com elementos ‘mortar’, para os quais novamente observou-se a ocorrência de tensões de tração localizadas em regiões de ocorrência de contato (Figura 4.30).

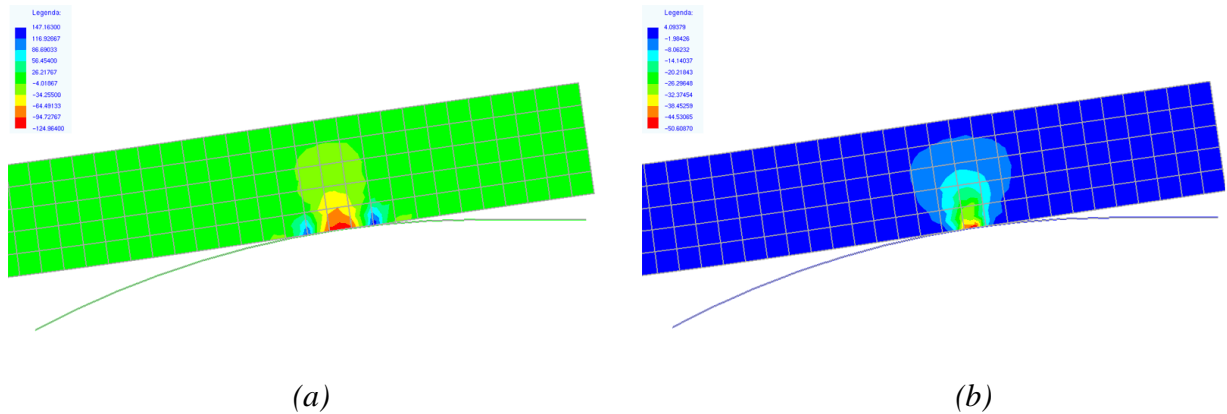


Figura 4.30 - Distribuição de tensões na direção vertical (σ_y) na região de contato, utilizando elementos de contato 'mortar' (a) e do tipo 'nó-segmento' (b).

Este efeito torna-se mais evidente quando analisados os valores de tensões de tração máximas obtidos para cada um dos tipos de elementos de contato, conforme pode ser visto na Figura 4.31; localmente os elementos 'mortar' geram tensões de tração sem correspondência física.

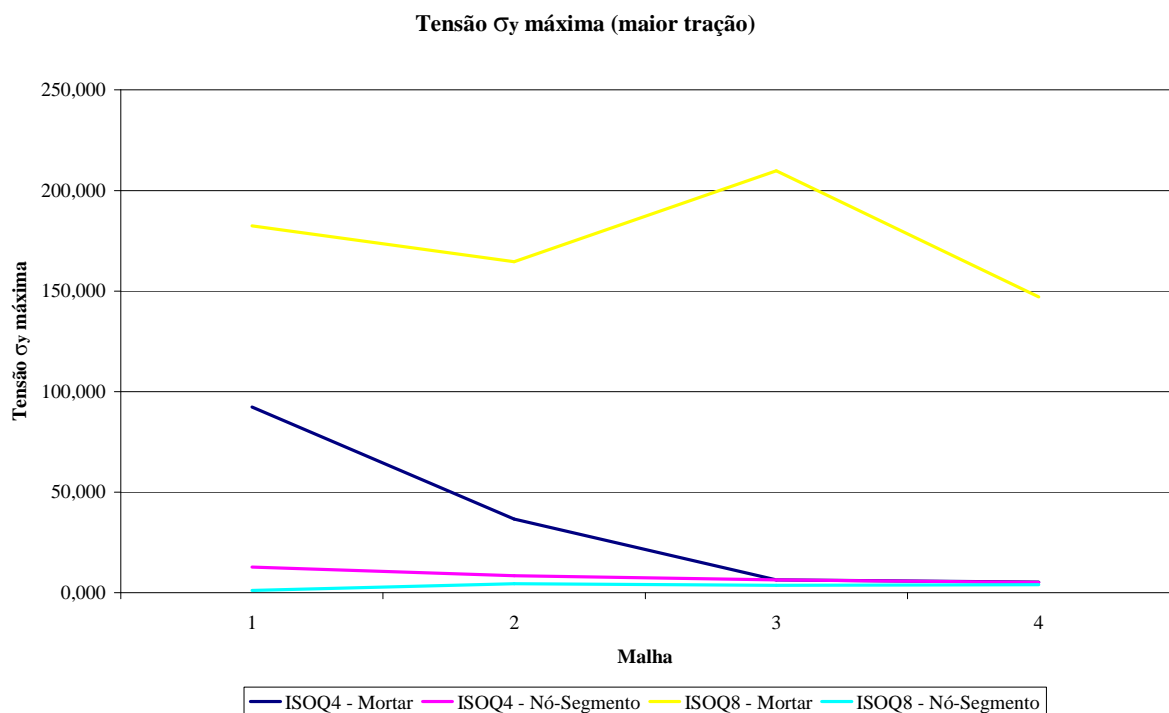
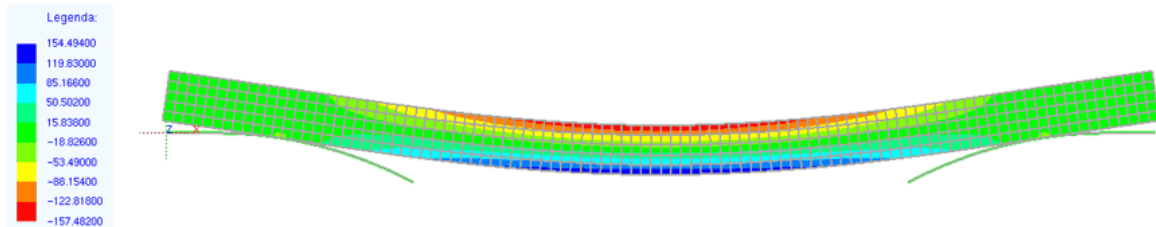
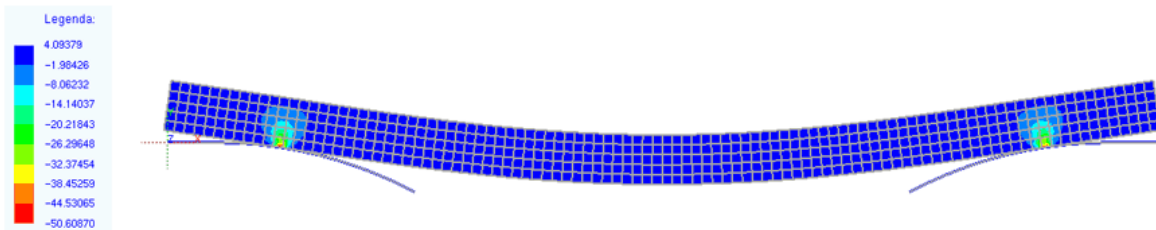


Figura 4.31 - Tensão na direção y (σ_y) máxima (tração) obtida para cada situação

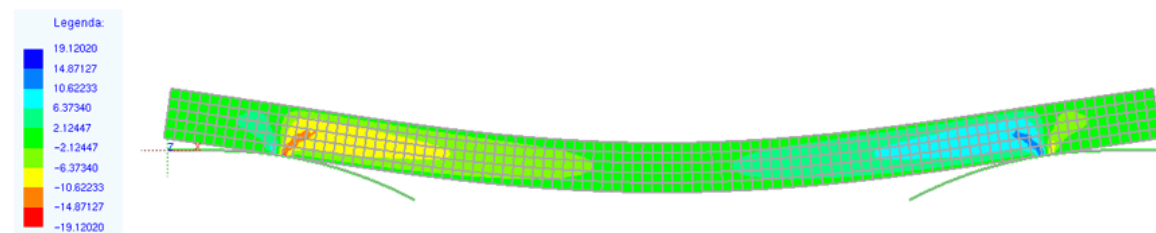
Apresentam-se na Figura 4.32 os campos de tensões obtidos para a rede 04 de elementos ISOQ8, utilizando-se elementos de contato do tipo 'nó-segmento'.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.32 - Campos de tensões obtidos utilizando-se elementos de contato do tipo nó-segmento (rede 04 – elementos ISOQ8), sendo (a) a tensão na direção horizontal (σ_x), (b) na direção vertical (σ_y) e (c) a tensão cisalhante (τ_{xy}).

Dada a geometria curva dos apoios é interessante ainda apresentar algumas configurações deformadas para diversos valores de carga, para as quais se observam alterações consideráveis não apenas da forma viga, mas principalmente da posição da região de contato ao longo dos apoios curvos. A Figura 4.33 ilustra as configurações de equilíbrio obtidas por intermédio do programa desenvolvido para diferentes valores de força q .

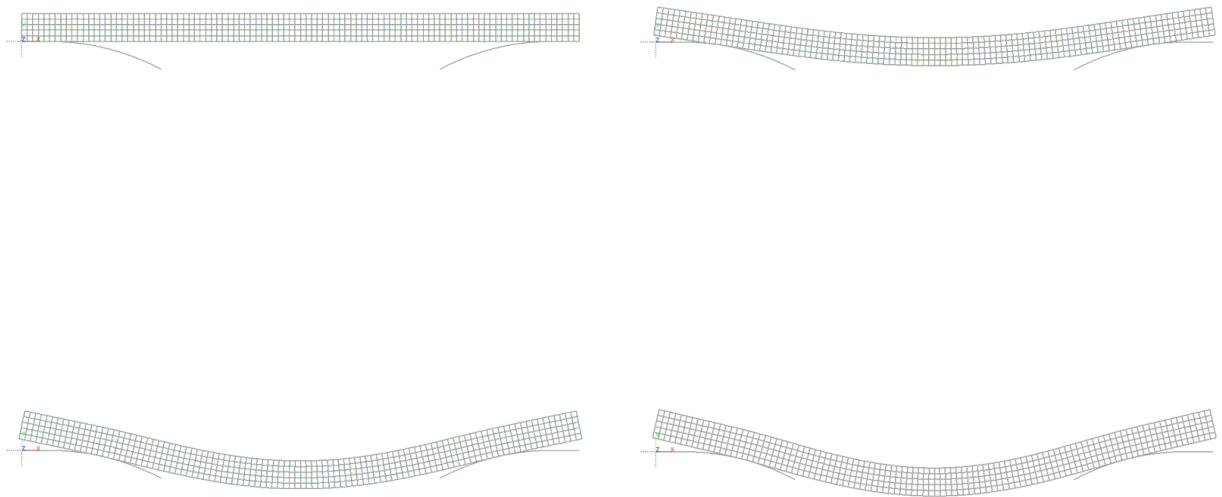


Figura 4.33 - Configurações de equilíbrio para diversos valores de força q

4.5. Arco com deslizamentos sobre anteparo curvo

Como último exemplo optou-se por analisar um problema de contato com maior grau de complexidade. Para tanto escolheu-se o problema do contato entre um arco e um anteparo curvo indeformável, conforme esquematizado na Figura 4.34.

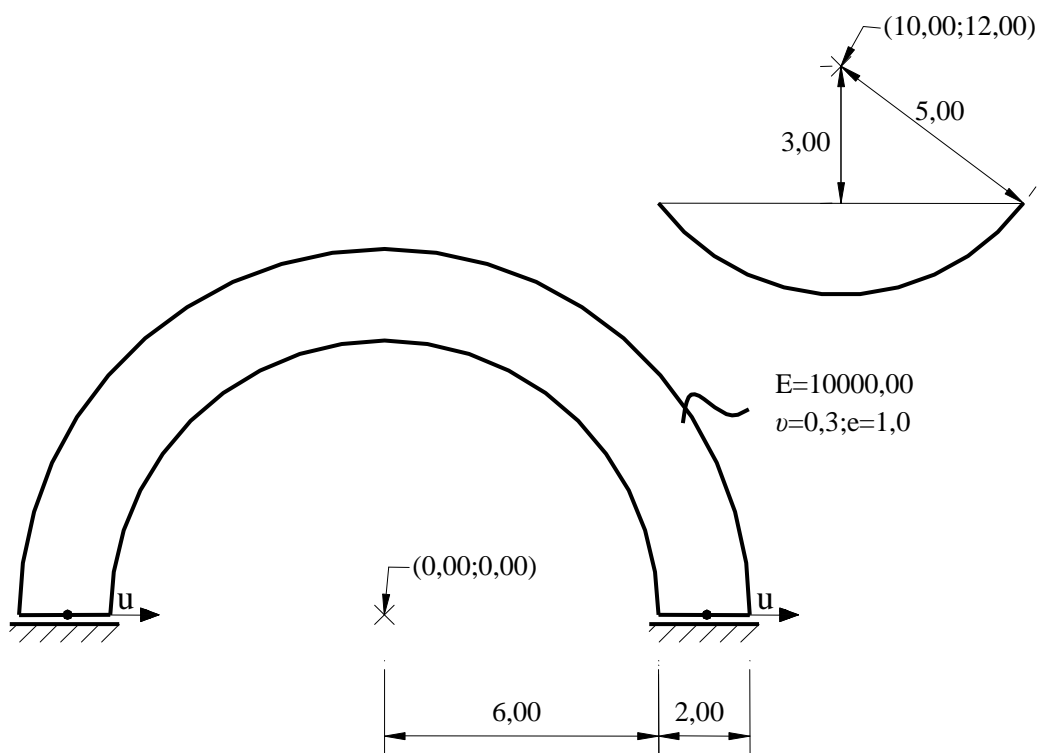
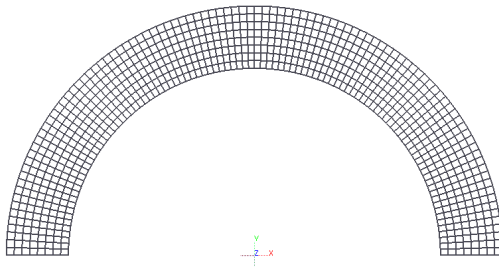


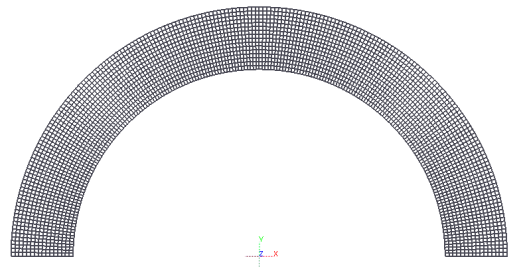
Figura 4.34 - Dimensões, formas e deslocamentos imposto para o presente problema

Nas simulações adotou-se inicialmente um deslocamento imposto u igual a 8,00, para o qual ocorre o contato entre os sólidos.

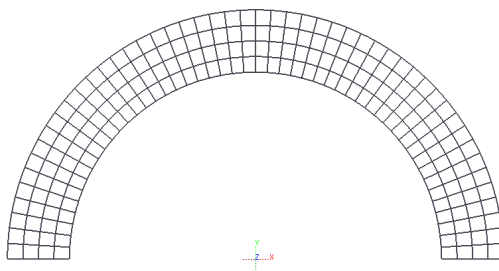
Para discretizar o arco foram geradas redes de malhas retangulares compostas pelos elementos isoparamétricos ISOQ4 e ISOQ8 em Estado Plano de Tensões. Os aspectos das redes, bem como os dados sobre número de elementos, nós e graus de liberdade, estão apresentados na Figura 4.35.



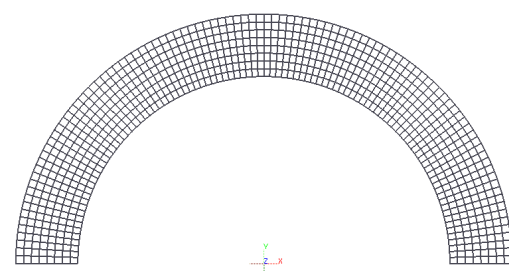
ISOQ4 – Rede 01
800 elementos – 909 nós
1818 graus de liberdade



ISOQ4 – Rede 02
3200 elementos – 3417 nós
6834 graus de liberdade



ISOQ8 – Rede 01
200 elementos – 709 nós
1418 graus de liberdade



ISOQ8 – Rede 02
800 elementos – 2617 nós
5234 graus de liberdade

Figura 4.35 - Redes utilizadas para a discretização do arco

Mais uma vez o resultado de referência adotado foi obtido por meio do ANSYS, utilizando-se uma rede de malhas irregulares compostas por elementos triangulares (PLANE42) e elementos de contato CONTACT175. A superfície rígida foi discretizada por elementos TARGET169. Os resultados de tensões máximas e mínimas obtidas estão apresentados na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 - Valores máximos e mínimos de tensão obtidos por meio do ANSYS

	Valor Máximo	Valor Mínimo
σ_x	88,312	-144,667
σ_y	106,283	-133,208
τ_{xy}	33,162	-41,957

Assim como no exemplo anterior, o emprego de multiplicadores de Lagrange se mostrou o mais eficiente, convergindo para todos os casos, motivo pelo qual foi a estratégia adotada para a avaliação dos elementos de contato ‘mortar’ e do tipo ‘nó-segmento’. Os resultados obtidos para as diferentes redes, para ambos os tipos de elementos de contato, são apresentados na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 - Valores de tensões máximos e mínimos obtidos por meio do programa elaborado, utilizando-se os dois diferentes elementos de contato.

	Elementos de contato ‘mortar’		Elementos de contato do tipo ‘nó-segmento’	
	σ_x máximo	σ_x mínimo	σ_x máximo	σ_x mínimo
ISOQ4 – Rede 01	92,11	-126,72	91,86	-126,17
ISOQ4 – Rede 02	92,72	-138,54	92,60	-138,53
ISOQ8 – Rede 01	98,98	-141,05	93,01	-131,42
ISOQ8 – Rede 02	93,17	-131,21	92,55	-130,50
	σ_y máximo	σ_y mínimo	σ_y máximo	σ_y mínimo
ISOQ4 – Rede 01	98,74	-117,68	98,76	-117,70
ISOQ4 – Rede 02	115,33	-140,47	116,07	-141,29
ISOQ8 – Rede 01	101,48	-123,46	101,15	123,58
ISOQ8 – Rede 02	116,49	-145,93	116,86	-146,24
	τ_{xy} máximo	τ_{xy} mínimo	τ_{xy} máximo	τ_{xy} mínimo
ISOQ4 – Rede 01	33,55	-40,30	32,28	-40,30
ISOQ4 – Rede 02	29,63	-41,26	29,53	-41,42
ISOQ8 – Rede 01	44,38	-41,58	30,73	-41,81
ISOQ8 – Rede 02	36,18	-42,16	31,94	-42,22

Como pode ser observado, não houve um comportamento predominante de um ou outro elemento em relação aos valores de referência, uma vez que, de modo geral, todas as redes apresentaram valores de tensão máximos e mínimos relativamente próximos entre si.

Por se tratar de um exemplo com geometria e condições de contorno não-triviais, resultando, portanto, em configurações deformadas e campos de tensões igualmente complexos, optou-se por complementar os diagramas de cores dos campos de tensão com uma imagem reduzida da distribuição dos campos de tensões correspondentes do ANSYS. Atentando-se para as ordens inversas dos diagramas de cores resultantes do programa desenvolvido e do ANSYS, pode-se observar que visualmente em ambos as distribuições de tensões são semelhantes (Figuras 4.36, 4.37 e 4.38).

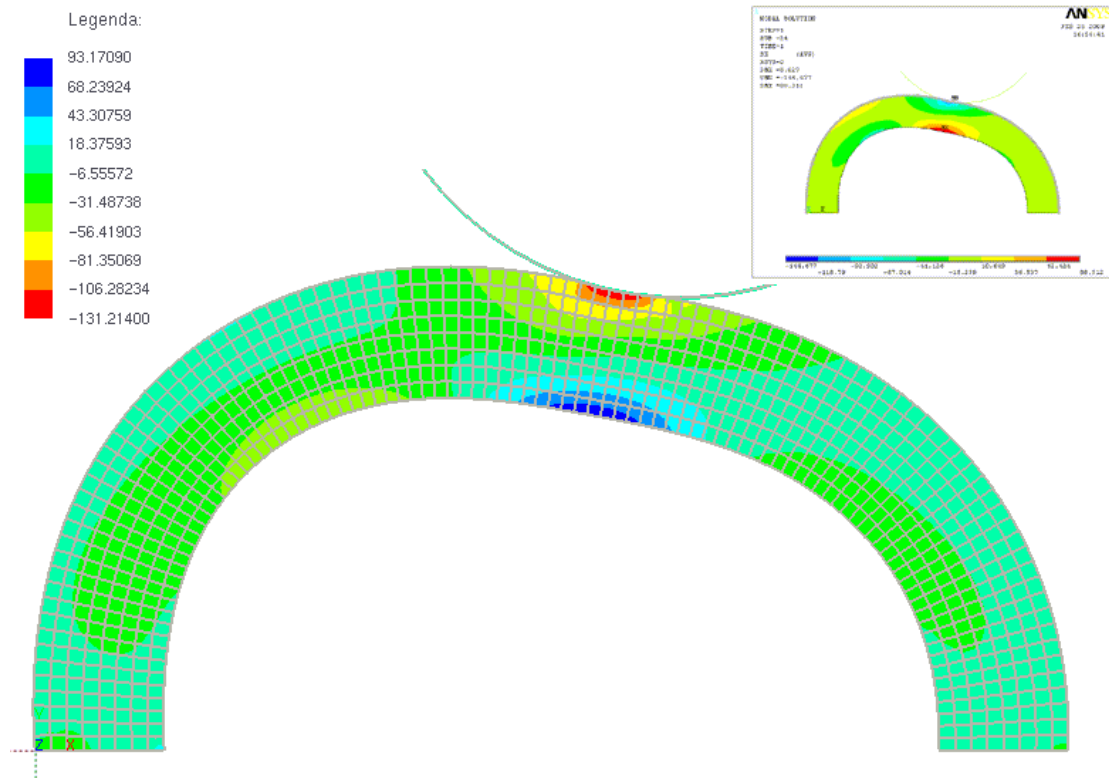


Figura 4.36 - Tensões na direção horizontal (σ_x) obtidas utilizando-se elementos de contato 'nó-segmento'; no topo à direita, imagem gerada pelo ANSYS para o mesmo campo

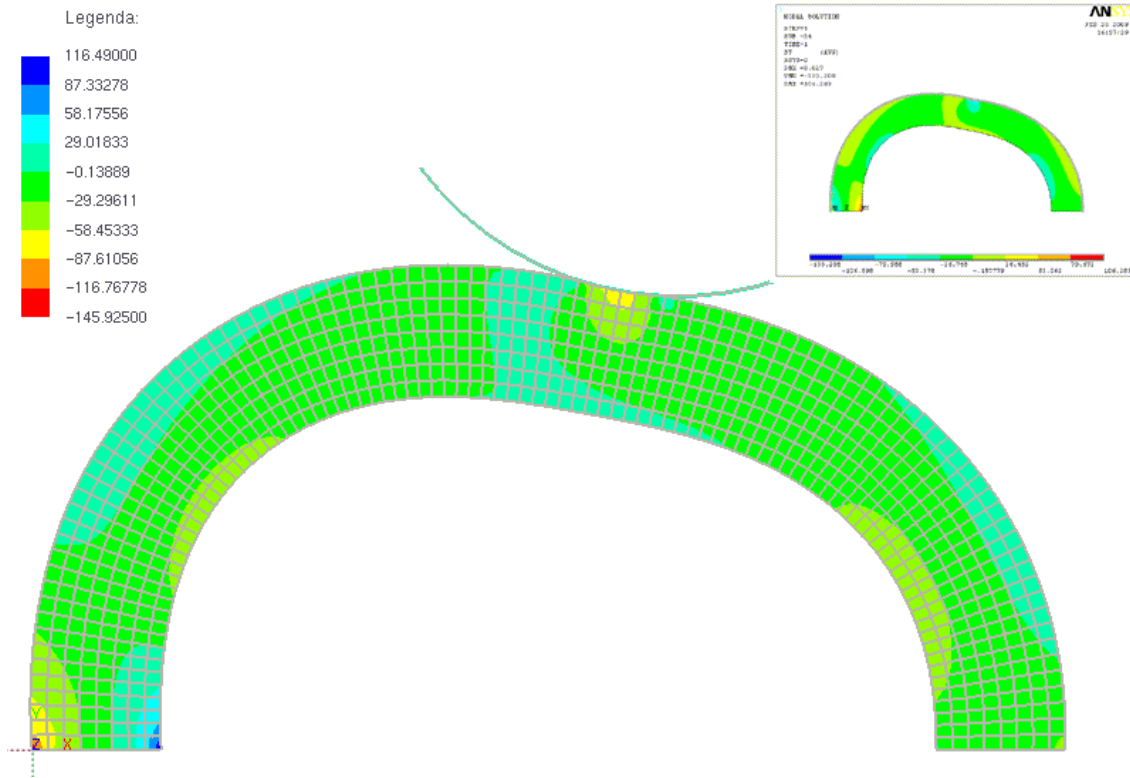


Figura 4.37 - Tensões na direção vertical (σ_y) obtidas utilizando-se elementos de contato 'nó-segmento'; no topo à direita, imagem gerada pelo ANSYS para o mesmo campo

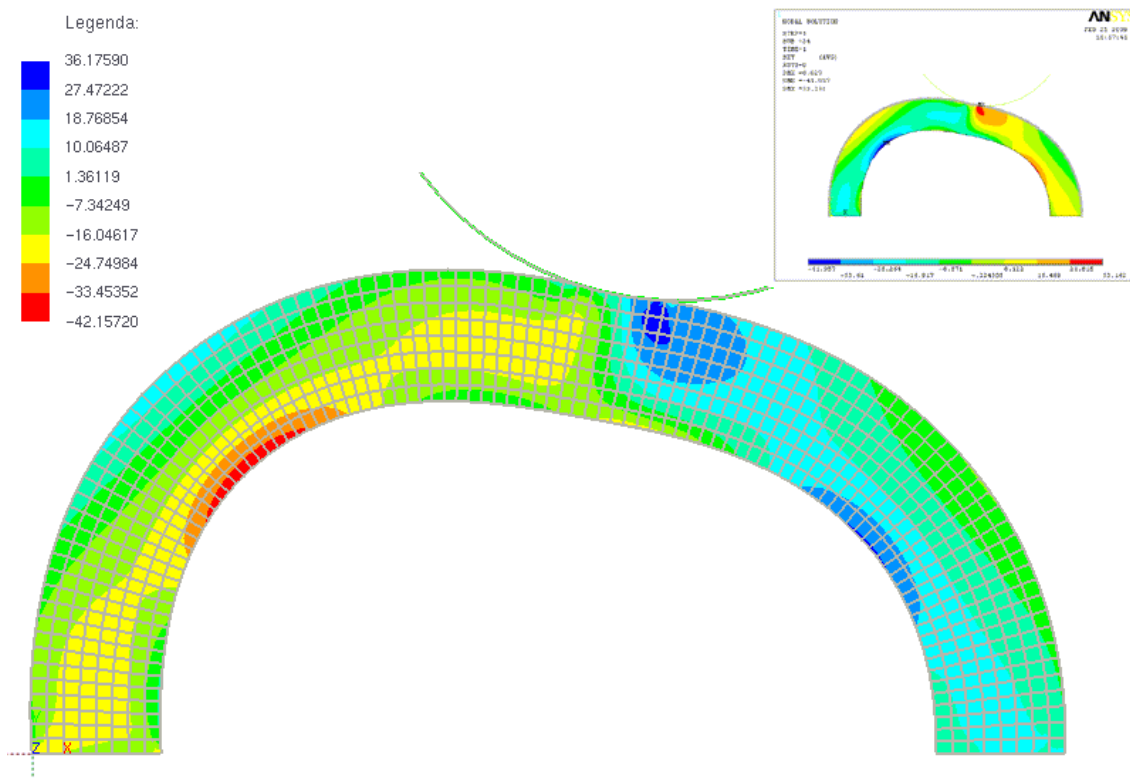


Figura 4.38 - Tensões cisalhantes (τ_{xy}) obtidas utilizando-se elementos de contato 'nó-segmento'; no topo à direita, imagem gerada pelo ANSYS para o mesmo campo

É ainda importante mencionar que os exemplos anteriores foram processados a partir da imposição do valor total do carregamento. Ao contrário, este exemplo demandou a utilização de um processo incremental-iterativo (com subdivisão da carga aplicada em incrementos regulares). Além disso, observou-se que a estabilidade do sistema é bastante sensível ao tamanho do passo de carga.

Numa etapa final de análise, optou-se por processar novas situações com diferentes valores para o deslocamento final (u) imposto (variando de 6 a 12). Em cada uma delas procurou-se observar o desempenho dos dois tipos de elementos. Os parâmetros para avaliação do desempenho são apresentados na Tabela 4.10, e ilustrados na Figura 4.39 e 4.40.

Tabela 4.10 - Número de iterações e tempo de processamento para diversos valores de deslocamento imposto u .

ISOQ4 - Rede 01					ISOQ8 - Rede 01				
	Número de Iterações		Tempo de processamento (s)			Número de Iterações		Tempo de processamento (s)	
u	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>	u	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>
6	32	14	6,41	3,70	6	24	38	5,05	6,62
8	49	36	9,73	6,76	8	45	76	9,62	13,45
10	92	43	18,44	8,07	10	148	101	31,58	18,08
12	197	57	38,79	10,74	12	123	163	26,02	29,11
ISOQ4 - Rede 02					ISOQ8 - Rede 02				
	Número de Iterações		Tempo de processamento (s)			Número de Iterações		Tempo de processamento (s)	
u	<i>mortar</i>	<i>nó-Seg.</i>	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>	u	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>	<i>mortar</i>	<i>nó-seg.</i>
6	39	19	42,56	17,86	6	35	41	44,51	39,54
8	67	34	71,78	32,22	8	72	75	90,89	72,70
10	163	51	172,70	48,77	10	104	491	132,88	464,08
12	291	48	305,14	47,27	12	144	167	183,99	163,50

Tempo de Processamento x Deslocamento u (Rede 1)

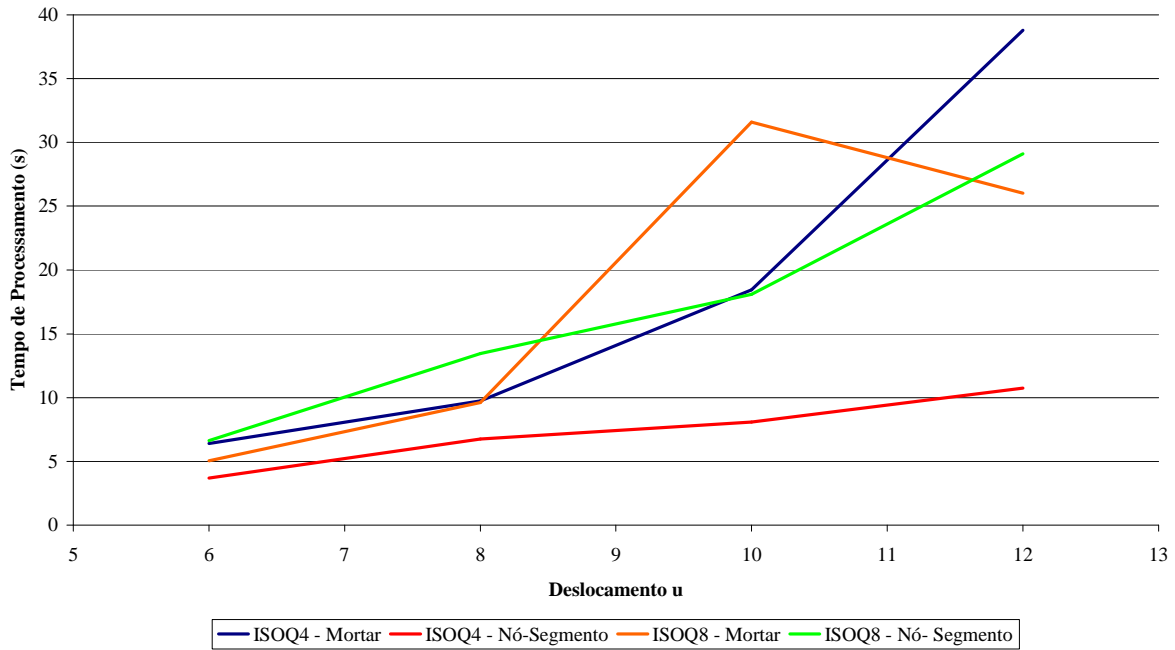


Figura 4.39 - Tempo de processamento para diversos valores de deslocamento imposto u, para as redes menos refinadas (redes 01)

Tempo de Processamento x Deslocamento u (Rede 2)

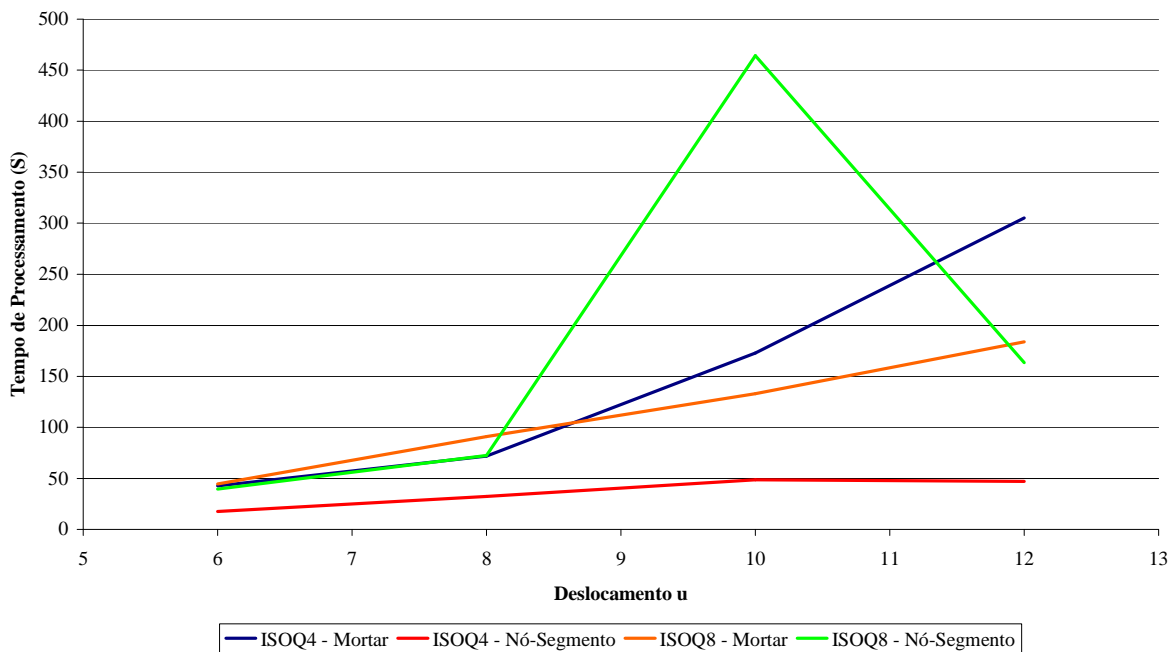


Figura 4.40 - Tempo de processamento para diversos valores de deslocamento imposto u, para as redes mais refinadas (redes 02)

Mais uma vez pode-se afirmar que não há um elemento com comportamento predominante em termos de desempenho.

Para finalizar são apresentadas na Figura 4.41 as configurações deformadas para alguns valores de deslocamento imposto adotados.

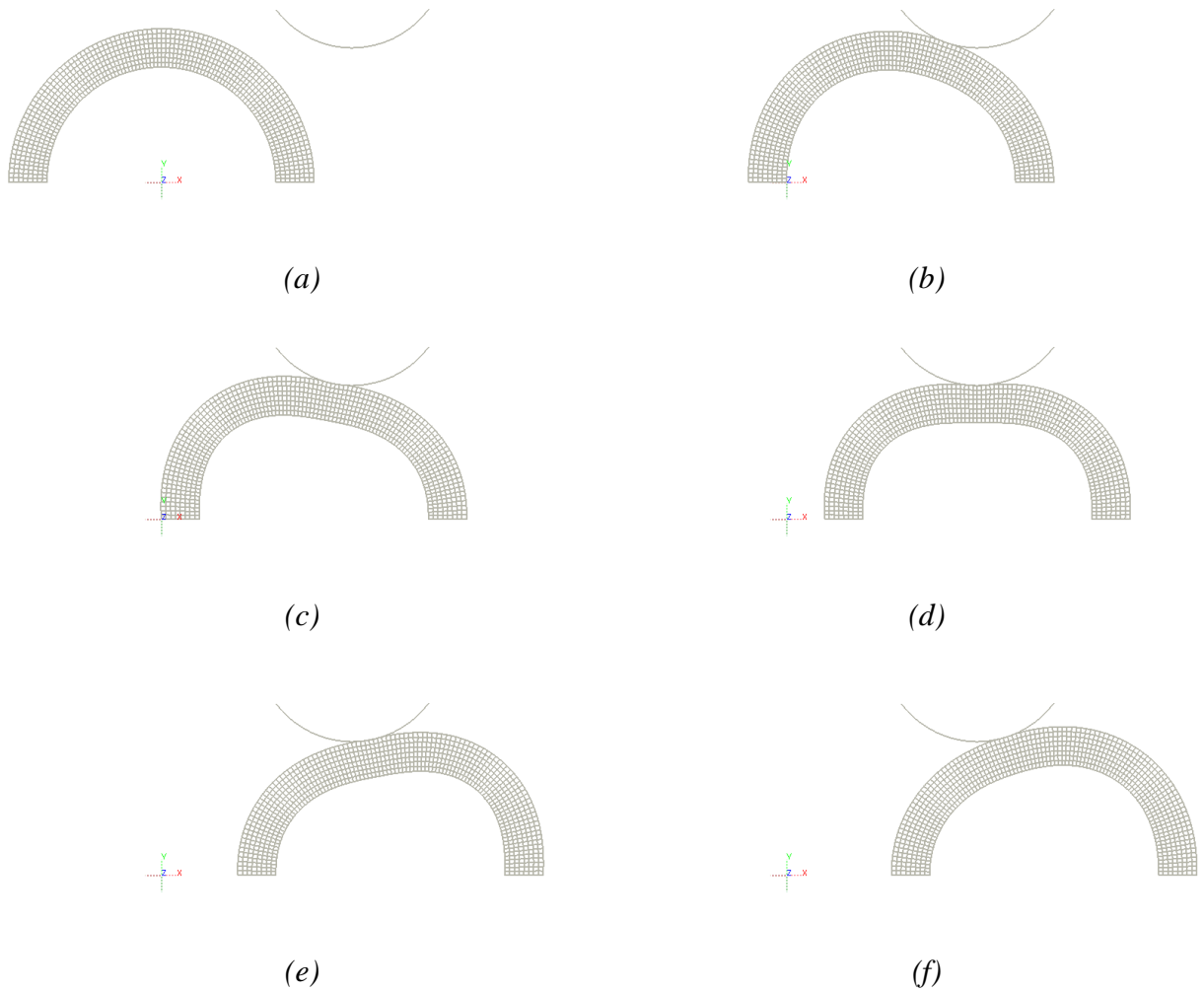


Figura 4.41 - Configuração deformada do arco para diversos valores de deslocamento imposto; (a) $u=0$; (b) $u=6$; (c) $u=8$; (d) $u=10$; (e) $u=12$; (f) $u=13,5$

5 - Conclusões

Inicialmente são apresentadas algumas considerações elaboradas principalmente com base nas observações realizadas durante a implementação do programa e nos resultados obtidos por intermédio do mesmo.

Na seqüência, são levantadas as principais conclusões resultantes da pesquisa.

Finalmente, indicam-se os principais assuntos identificados como de interesse para desenvolvimento de estudos futuros.

5.1. Considerações finais

A pesquisa iniciou-se avaliando a aplicação de técnicas de otimização com variáveis canalizadas para modelar exemplos simples de contato (RIGO, 1999). O primeiro exemplo numérico apresentado retomou este estudo, utilizando elementos prismáticos para modelar uma estrutura sujeita à ação de vínculos unilaterais.

Conforme discutido no Capítulo 4, no primeiro exemplo o Método dos Gradientes não foi utilizado devido à sua incapacidade de tratar problemas com desativação de variáveis.

No entanto foi avaliado o Método dos Gradientes Conjugados (MGC), que constitui um aprimoramento do Método dos Gradientes, possuindo uma taxa de convergência bastante superior à do primeiro. É importante observar que no caso dos problemas lineares irrestritos o MGC apresenta eficiência elevada; especialmente com sistemas esparsos se observa um ganho de desempenho notável quando exploradas estruturas de armazenamento e resolução de

sistemas que desconsideram os termos nulos. Entretanto, quando o método foi utilizado com a introdução de restrições no sistema, essa eficiência acabou sendo bastante diminuída.

Com relação ao Método de Newton, que recai na resolução sucessiva de sistemas lineares, este sem dúvida apresentou-se como o método mais eficiente e robusto. Entretanto, nota-se que sua destacada eficiência em relação aos demais métodos deve-se ao uso das funções de resolução de sistemas esparsos comentadas no capítulo 3.

Finalmente, duas variantes de métodos do tipo Quase-Newton foram testadas, como forma de obter uma aproximação para a inversa da matriz de rigidez ('hessiana'). Porém, nos testes preliminares, observou-se que o grau de esparsidade da aproximação da matriz inversa obtida era muito menor do que a inversa do sistema original, inviabilizando o uso das estratégias de exclusão de termos nulos. Isto tornou o método adequado apenas para sistemas com pequeno número de variáveis.

Com relação ao processo iterativo de Gauss-Seidel, apesar de ter se mostrado ineficiente no primeiro exemplo, observou-se que o mesmo teve resultado bastante superior no segundo exemplo, mesmo este apresentando número bem maior de incógnitas. Cabe relatar que este comportamento já havia sido observado nos testes realizados durante o desenvolvimento do programa. Nesses testes, quando utilizado com elementos prismáticos de barra em flexão (pórtico), o método era capaz de resolver apenas sistemas pequenos; quando utilizado para problemas bidimensionais, apresentou-se eficaz para sistemas muito maiores.

Realizado o estudo comparativo dos métodos de otimização nos dois primeiros exemplos, partiu-se então para a avaliação dos elementos de contato desenvolvidos, variando-se apenas as estratégias de restrição de variáveis (multiplicadores de Lagrange ou penalização). Para a resolução do sistema, utilizou-se o Método de Newton, que nos exemplos anteriores se mostrou incomparavelmente superior aos demais.

Dois tipos distintos de elementos de contato foram utilizados: os elementos do tipo '*nó-segmento*', que constituem uma generalização das estratégias utilizadas na abordagem em variáveis canalizadas, e os elementos '*mortar*', para os quais o contato deixa de ser pontual e passa a ser considerado em toda a face do elemento.

O segundo e terceiro exemplo foram propositalmente propostos de maneira a permitir uma avaliação da precisão da resolução por meios desses elementos e, também, o confronto com os resultados obtidos pelo emprego da estratégia por variáveis canalizadas.

No problema de Hertz observou-se que os elementos do tipo '*nó-segmento*' apresentaram resultados idênticos aos obtidos com o uso de variáveis canalizadas. Já para os elementos '*mortar*' observou-se a convergência para configurações de equilíbrios não-simétricas, incoerente com o esperado em função da simetria inicial do problema, evidenciando que provavelmente esses elementos são mais sensíveis às questões de precisão numérica. Entretanto, observou-se que a combinação com a estratégia dos conjuntos ativos solucionou este problema.

No terceiro problema, os elementos '*mortar*' também apresentaram resultados inadequados, particularmente devido ao fato da condição de contato estabelecida na formulação dos mesmos ser dependente de um valor 'médio' de tensão. Nesse sentido podem ocorrer tensões de tração em alguns trechos da interface de contato e ainda assim o mesmo continuar ativado, com reflexos negativos sobre os aspectos de convergência e precisão.

No quarto exemplo, propôs-se um problema com anteparos rígidos curvos, visando avaliar a capacidade do algoritmo de tratar superfícies com essa geometria.

Para tal problema, a única estratégia de restrição de variáveis que foi capaz de convergir para todas as redes propostas foi a dos multiplicadores de Lagrange. Em uma análise de convergência, para situações equivalentes em termos do número de graus de liberdade, observou-se que os elementos do tipo '*nó-segmento*' apresentaram resultados

sempre próximos entre si, tanto quando utilizadas redes de elementos ISOQ4, quanto de elementos ISOQ8. O mesmo não ocorreu para os elementos '*mortar*', principalmente quando utilizados em conjunto com os elementos ISOQ8, provavelmente em decorrência das dimensões das malhas.

O último exemplo apresenta o grau de dificuldade mais elevado, por tratar não apenas de superfícies de contato curvas, mas pelo fato do carregamento induzir escorregamentos relativos entre os sólidos. Cabe observar que dos exemplos apresentados este foi o único que demandou a adoção de uma estratégia incremental-iterativa. Nessas condições, observou-se uma forte dependência do tamanho do passo de carga para a convergência da solução, sendo que passos muito pequenos não necessariamente garantiram convergência. Entretanto, é importante observar que ao aplicar essa estratégia, não foi explorado o recurso à matriz tangente, mas sim um método direto, atualizando-se a matriz de rigidez secante de acordo com a ativação ou desativação das restrições. Também é importante informar que assim como no quarto exemplo, a única estratégia de restrição de variáveis que convergiu para todas as redes, e para ambos os elementos de contato, foi a dos multiplicadores de Lagrange.

5.2. Conclusões

Apesar de muitas das estratégias de otimização estudadas terem apresentado comportamento satisfatório nos problemas de estruturas de barras, como já havia sido constatado por (RIGO, 1999), as mesmas perderam eficiência quando extrapoladas para casos com grande número de graus de liberdade associados a problemas de modelagem bi e tridimensional; nestas situações o Método de Newton apresentou eficiência e robustez muito maiores. Observa-se, também, que em sistemas lineares resultantes do Método de Newton

com esparsidade baixa, provavelmente a alternativa mais eficiente para a sua resolução é dada pelo Método dos Gradientes Conjugados.

Quanto aos elementos de contato utilizados, os dois exemplos finais demonstraram que o código desenvolvido foi capaz de reproduzir resultados adequados, bastante próximos aos obtidos pelo código computacional consagrado, tomado como referência.

Em geral, os elementos de contato do tipo '*nó-segmento*' apresentaram resultados mais adequados que os elementos '*mortar*'. Entende-se que a principal causa dos resultados insatisfatórios destes últimos decorre do critério de contato, baseado na consideração do valor preponderante da força no elemento, que acaba permitindo a ocorrência de tensões de tração em alguns trechos da superfície sem desativação do contato. Essa situação pode proporcionar grandes diferenças tanto na distribuição local de tensões quanto na configuração deformada da estrutura.

Entretanto, apesar dos resultados adequados obtidos, deve-se atentar para o fato de que o elemento '*nó-segmento*' considera o contato apenas nos nós, o que em superfícies curvas pode representar uma aproximação grosseira a depender da discretização adotada, podendo violar a condição de impenetrabilidade entre nós.

Por outro lado, nos casos de contato entre sólidos deformáveis, os elementos '*mortar*' quando ativos implicam em relacionamento dos graus de liberdade dos nós dos sólidos distintos pertencentes à região de contato, o que reduz uma eventual violação da condição de impenetrabilidade entre nós quando comparado com o elemento do tipo '*nó-segmento*'. Isto acaba também por constituir uma grande vantagem desses elementos, particularmente em redes não-coincidentes, pois a minimização de energia do sistema fornece a posição equilibrada para qualquer que seja a posição relativa dos nós.

Quanto às estratégias de restrição de variáveis, por multiplicadores de Lagrange ou Penalização, apesar de em alguns exemplos o programa desenvolvido não ter obtido solução

para ambas quando utilizados os elementos de contato, não caberia uma defesa exclusiva em favor daquela que funcionou nos dois últimos exemplos, isto é, os multiplicadores de Lagrange. Na verdade, não se investiu no aprimoramento do algoritmo implementado para a estratégia de penalização, que, em tese, deveria ser mostrar tão eficiente quanto à primeira; isto pode ser objeto de desenvolvimentos futuros.

Além disso, deve-se ressaltar que mesmo em programas comerciais consagrados, muitas dessas dificuldades de convergência são igualmente constatadas. Assim, tratando-se da resolução de problemas de contato, um bom código deve apresentar mais de uma estratégia de restrição de variáveis, de maneira que se possa testá-las e optar pela mais adequada a depender das características do problema formulado.

Quanto à utilização da estratégia dos conjuntos ativos em combinação com as estratégias de restrição, observaram-se vantagens apenas para alguns casos. Esperava-se obter um procedimento capaz de evitar a penetração durante o processo iterativo, evitando a geração de campos de tensões irreais durante o mesmo, comprometendo a convergência do sistema. Entretanto, ao contrário do esperado, foi com o seu uso que a resolução do sistema mostrou-se menos estável, como foi observado nos dois últimos exemplos, para os quais o processo iterativo em certo ponto passou a oscilar indefinidamente entre algumas configurações de equilíbrio. A causa provável dessa instabilidade numérica é a incapacidade do algoritmo em identificar as direções de busca quando mais de uma restrição passou a ser ativada simultaneamente.

5.3. Proposta para trabalhos futuros

Considerando o comportamento observado pelos elementos de contato '*mortar*', e levando-se em consideração as vantagens discutidas no item anterior, uma proposta bastante

promissora para trabalhos futuros é o desenvolvimento de alterações na formulação dos mesmos, visando solucionar os problemas evidenciados no presente trabalho decorrentes do critério de contato.

Quanto à resolução de sistemas de equações, um estudo quanto às causas das instabilidades observadas e possíveis soluções para esta questão seria outro tema para futuros trabalhos.

Além das propostas anteriores, pode-se com especial atenção citar a possibilidade do emprego do Método dos Elementos Finitos Generalizados para problemas de contato, uma vez que o recurso ao enriquecimento das aproximações, inerente a este método, pode proporcionar alternativas eficientes aos elementos de contato aqui testados.

Referências Bibliográficas

ASSAN, A. E. (1996). **Métodos Energéticos e Análise Estrutural**. Editora Unicamp. Campinas.

ASSAN, A. E. (2003). **Métodos dos Elementos Finitos – Primeiros Passos**. Segunda Edição. Editora Unicamp. Campinas.

BATHE, K. J. (1996). **Finite Element Prodecures**. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey.

BECK, A. T. (2008). **Programação Orientada a Objetos em Fortran**. Notas de Aula. São Carlos. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

BELYTSCHKO, T.; LIU, W.; MORAN, B. (2000). **Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures**. JohnWiley & Sons. New York.

BERNARDI C.; MADAY Y.; PATERA A. (2001). **A new conforming approach to domain decomposition: the mortar element method**. In Brezis H, Lions JL (eds). *Nonlinear Partial Differential Equations and Their Applications*. John Wiley & Sons. New York, pp 13-51

COWPER, G. R. (1972). **Gaussian Quadrature Formulas for Triangles**. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Vol. 7, Issue 3: 405-408.

DECYK, V. K.; NORTON, C. D.; ZSYMANSKI, B. K. (1996). **Introduction to Object-Oriented Concepts using Fortran90**. Disponível em: http://exodus.physics.ucla.edu/Fortran95/F90_Objects.pdf. Acesso em: fevereiro de 2008

DUFF, I. S.; REID, J. K. (1983). **The multifrontal solution of Indefinite Sparse Symmetric Linear Equations**. *ACM Transactions on Mathematical Software*. Vol. 9. N. 3. p. 302-325.

FISHER, K. A.; WRIGGERS, P. (2005). **Frictionless 2d contact formulation for finite deformations based on the mortar method**. *Computational Mechanics*. 36: 226-244.

FOX, R. L. (1971). **Optimization Methods for Engineering Design**. Addison - Wesley Publishing Company.

HAMMING, R. W. (1973) **Numerical Methods for Scientists and Engineers**. Second Edition. Dover Publications Inc. New York.

HUMES, A. F. P. C. et al. (1984). **Noções de cálculo numérico**. McGraw-Hill. São Paulo.

JOHNSON, K. L. (2003) **Contact Mechanics**. Cambridge University Press.

KIKUCHI, N.; ODEN, J. T. (1988). **Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods**. Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, U.S.A.

LAURSEN, T. A. (2002). **Computational Contact and Impact Mechanics: Fundamentals of Modeling Interfacial Phenomena in Nonlinear Finite Element Analysis**. Springer-Verlag, Heidelberg.

LUENBERGER, D. G. (2005). **Linear and Nonlinear Programming**. Second Edition. Springer.

MCDEVITT, T. W.; LAUSERN, T.A. (2000). **A mortar-finite element formulation for frictional contact problems**. International Journal for Numerical Methods in Engineering. **48**:1525-1547.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. (2006). **Numerical Optimization**. Second Edition. Springer. New York.

PROENÇA, S. P. B.; SAVASSI, W. MUNAIAR NETO, J. (1987). **Aplicação do procedimento iterativo de Gaus-Seidel na automatização do cálculo de vigas contínuas**. Publicação 009/87. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo. São Carlos

PROENÇA, S. P. B. (2007). **Análise Não-Linear de Estruturas**. Notas de Aula. São Carlos. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

PROENÇA, S. P. B. (2007). **Introdução aos Métodos Numéricos**. Notas de Aula. São Carlos. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

RIGO, E. (1999). **Métodos de otimização aplicados à análise de estruturas**. São Carlos, Dissertação (Mestrado). Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

SAVASSI, W. (2000). **Introdução ao método dos elementos finitos em análise linear de estruturas**. Reimpressão. Serviço de publicações da EESC. São Carlos.

WRIGGERS, P. (2006). **Computational Contact Mechanics**. Second Edition. Springer-Verlag. Berlin.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. (2000). **The finite element method, Vol. I e II**. 5th edition. Butterworth-Heinemann. Oxford.

Bibliografia adicional consultada

ARENALES, M. N. (1998). **Otimização Não Linear**. Notas de Aula. São Carlos. Universidade de São Paulo

BARBOSA, H. J. C.; FEIJÓO, R. A. (1984). **Numerical Algorithms for contact problems in linear elastostatics**. Relatório de Pesquisa e Desenvolvimento N° 013/84. Laboratório Nacional de Computação Científica. Petrópolis. RJ.

BARBOSA, H. J. C.; RAUPP, F. M. C.; BORGES, C. C. H. (1993). **Estudo comparativo de algoritmos para resolução de inequações variacionais em mecânica**. Relatório de Pesquisa e Desenvolvimento N° 025/93. Laboratório Nacional de Computação Científica. Petrópolis. RJ.

BECKER, R.; HANSBO, P.; STENBERG, R. (2003). **A finite element method for domain decomposition with non-matching grids**. Mathematical Modelling and Numerical Analysis. Vol. 37, N° 2: 209-225.

CUNHA, M. C. C. (2003). **Métodos Numéricos**. Editora da Unicamp. Editora da Unicamp. Campinas.

CUNHA, R. D. (2005). **Introdução à linguagem de programação FORTRAN 90**. Editora da UFRGS. Porto Alegre.

FANCELLO, E. A.; FEIJÓO, R. A.; ZOUAIN, N. (1990). **Formulação variacional do problema de contato com atrito: resolução via regularização**. Relatório de Pesquisa e Desenvolvimento N° 035/90. Laboratório Nacional de Computação Científica. Petrópolis. RJ.

FLEMISCH, B.; PUSO, M. A.; WOHLMUTH, B. I. (2005). **A new dual mortar method for curved interfaces: 2D elasticity**. International Journal for Numerical Methods in Engineering. **63**:813-832.

FRACAROLLI, S. (1961). **Princípios dos trabalhos virtuais. Teoremas de Betti - Maxwell - Clapeyron - Castigliano - Menabrea**. FAU. Universidade de São Paulo. São Paulo.

FREY, S. L.; SAMPAIO, R.; GAMA, R. M. S. (1989). **Simulação de problemas de contato unilateral a partir de problemas clássicos de contorno**. Relatório de Pesquisa e Desenvolvimento N° 030/89. Laboratório Nacional de Computação Científica. Petrópolis. RJ.

GEYMONAT, L. (1997). **Galileu Galilei**. (Tradução: Eliana Aguiar). Editora Nova Fronteira. Rio de Janeiro.

GRECO, M. (2004). **Análise de problemas de contato/impacto em estruturas de comportamento não linear pelo método dos elementos finitos**. Tese (Doutorado). Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

LAURSEN, T. A. (1992). **Formulation and treatment of frictional contact problems using finite elements**. (Ph.D. Dissertation). Stanford University.

MINSKI, R. L. (2008). **Aprimoramento de formulação de identificação e solução do impacto bidimensional entre estrutura e anteparo rígido.** Dissertação (Mestrado). Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

PAIVA, J. B. (2007). **Aplicações do Método dos Elementos Finitos.** Notas de Aula. São Carlos. Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo.

PARK, K. C.; FELIPPA, C. A.; REBEL, G. (2000). **A simple algorithm for localized construction of non-matching structural interfaces.** International Journal for Numerical Methods in Engineering. **53**:2117-2142.

REBEL, G.; PARK, K. C.; FELIPPA, C. A.; (2002). **A contact formulation based on localized Lagrange multipliers: formulation and application to two-dimensional problems.** International Journal for Numerical Methods in Engineering. **54**:263-297.

SIMMONS, G. F. (1987). **Cálculo com Geometria Analítica, Vol. I e II.** McGraw-Hill. São Paulo.

SIMO, J. C.; WRIGGERS, P.; TAYLOR, L. (1984). **A perturbed Lagrangian formulations for the finite element solution of contact problems.** Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. **50**: 163-180

SORIANO, H. L. (2003). **Método de elementos finitos em análise de estruturas.** Edusp. São Paulo.

STADTER, J. T.; WEISS, R. O. (1979). **Analysis of contact through finite element gaps**. Computer & Structures. Vol. 10. pp 867-873.

TIMOSHENKO, S. P. (1969). **Resistência dos Materiais, Vol. I**. Ao livro Técnico S.A. Rio de Janeiro.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N. (1983). **Teoria da elasticidade**. 3ª.edição Editora Guanabara Dois, Rio de Janeiro.

VALLIAPPAN, S. (1981). **Continuum Mechanics Fundamentals**. A. A. Balkema. Rotterdam, Netherlands.

Apêndice A - Estratégias de otimização

Em termos matemáticos, otimização é a minimização ou maximização de uma função sujeita a restrições em suas variáveis. Segundo (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) sua origem ocorreu junto ao Cálculo Variacional e nos trabalhos de Euler e Lagrange, tendo evoluído muito a partir da década de 1940 com o desenvolvimento da informática e das técnicas de programação.

Em geral, os algoritmos clássicos de otimização têm como estrutura básica adotar um valor inicial para a solução e iterativamente buscar soluções melhores, ou seja, que mais se aproximem do valor mínimo (ou máximo) da função objetivo, atendendo às restrições impostas pelo modelo. Supondo um problema de minimização, a estrutura geral de um algoritmo de otimização é da forma:

Passo 1: Caso se trate do início do procedimento, adotar um valor inicial para o vetor solução x^k envolvendo as variáveis da função objetivo;

Passo 2: Obter uma direção de descida representada pelo vetor d^k , segundo um procedimento denominado busca direcional;

Passo 3: Determinar o fator escalar α que deve multiplicar o vetor d^k de tal maneira que se obtenha o menor valor da função objetivo na direção de d^k (tal determinação decorre de uma estratégia de busca unidimensional);

Passo 4: Obter o novo valor de x , (valor perturbado de x na iteração k) dado por $x^{k+1} = x^k + \alpha d^k$;

Passo 5: Retornar ao passo 2 e repetir o processo até que um dado de critério de verificação de convergência em relação à solução seja satisfeito.

A estratégia de busca direcional adotada, mencionada em termos gerais no passo 3, distingue cada algoritmo dos demais, os quais, conforme (NOCEDAL; WRIGHT, 2006), idealmente devem possuir:

- **Robustez:** funcionamento satisfatório em diversas variedades de problemas, para qualquer valor inicial aceitável adotado;
- **Eficiência:** não demandar tempo de processamento e armazenamento de dados excessivos;
- **Acurácia:** capacidade de encontrar a solução com precisão, sem afetar-se pelo arredondamento de valores no decorrer das iterações.

Não existe um método que seja superior aos demais para toda e qualquer situação, existindo sim diversos algoritmos, cada qual com características mais adequadas para determinada classe de problema. Assim a escolha de um algoritmo conveniente para certo problema a ser tratado é de extrema importância, influenciando não apenas na velocidade de convergência da solução, mas principalmente no sucesso da busca do ponto ótimo.

Neste apêndice apresentam-se alguns dos diversos métodos de otimização não-linear existentes, apontando suas características mais expressivas.

A.1. Formulação matemática de um problema de otimização

Considere-se o problema da minimização de uma função definida no espaço R^n .

Quando as variáveis independentes podem assumir valores quaisquer, tem-se um problema de otimização irrestrita, da forma:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x), x \in R^n \\ &f : R^n \rightarrow R, x = x_i; (i = 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (A.1.1)$$

Quando existem restrições sobre o valor que as variáveis podem assumir, tem-se um problema de otimização restrita, colocado em forma geral como:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x) \\ &\text{sujeito a } c_i(x) = 0, i \in Eq \\ &\quad c_i(x) \leq 0, i \in In \\ &\quad x \in \Omega \subset R^n \end{aligned} \quad (A.1.2)$$

Em (A.1.2) Eq é o conjunto das restrições do problema dadas por igualdades (equações), e In o conjunto das restrições dadas por desigualdades (inequações).

Quando a função objetivo $f(x)$ e/ou qualquer das expressões dadas por $c_i(x)$ não são lineares, tem-se um problema de otimização não-linear.

Para o caso particular das restrições serem dadas exclusivamente por imposição da faixa de valores permitidos por cada uma das variáveis isoladamente, tem-se um tipo simplificado de problema restrito dito otimização com variáveis canalizadas, da forma:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x), x \in \Omega = \{x \in R^n / a \leq x \leq b\} \\ &f : \Omega \rightarrow R, x = x_i; a = a_i; b = b_i; (i = 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (A.1.3)$$

Em qualquer um dos casos apontados a resolução do problema consiste em encontrar o valor das n variáveis, reunidas no vetor n -dimensional x^* , para o qual a função apresenta valor mínimo. O vetor x^* é dito a solução ótima, sendo caracterizado matematicamente por:

$$x^* / f(x^*) < f(x), \forall x \in \Omega \quad (A.1.4)$$

Em outras palavras, diz-se que o vetor é um mínimo global, ou seja, garante o menor valor da função objetivo em todo seu domínio.

Como geralmente apenas uma região da função é conhecida, tem-se também o conceito de mínimo local, que proporciona o valor mínimo da função para uma determinada região do domínio.

Para ilustrar ambos, tome-se o caso mais simples de otimização, dado por uma função objetivo com $n=1$, neste caso representada por um polinômio de quarto grau, o qual possui três pontos estacionários candidatos a mínimo da função (*Figura A.1.1*).

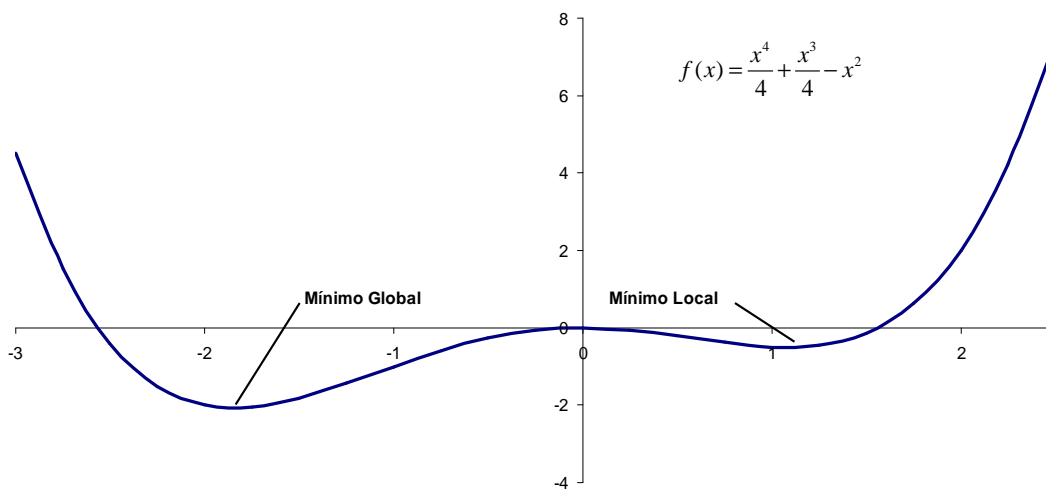


Figura A.1.1 - Mínimo global e local de uma função de uma única variável.

Para uma função suave de uma única variável diz-se que um ponto é estacionário quando sua primeira derivada é nula, enquadrando-se nesta situação os pontos de máximo, de mínimo e de inflexão. Quando um ponto estacionário tem segunda derivada positiva, pode-se afirmar que ele se trata de um ponto de mínimo local.

Esses conceitos estendem-se para funções com argumentos de qualquer dimensão, para os quais se definem o vetor gradiente e a matriz hessiana, respectivos equivalentes à derivada primeira e segunda no cálculo de funções de uma única variável.

O vetor gradiente é dado pela taxa de variação da função com relação a cada uma das variáveis, ou seja, seus componentes são obtidos pelas derivadas parciais da função com relação a cada uma das variáveis:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

A matriz hessiana tem seus termos obtidos pelas derivas parciais dos componentes do vetor gradiente com relação a cada uma das variáveis:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

Para funções de várias variáveis o vetor gradiente e a matriz hessiana constituem-se em elementos de extrema utilidade para identificação de pontos extremos. Utilizando esses recursos matemáticos, enunciam-se a seguir dois teoremas de fundamental importância para o estudo de pontos extremos de funções de várias variáveis, cuja prova pode ser obtidas em livros relativos ao assunto, como (NOCEDAL;WRIGHT, 2006).

Teorema 1: Condições necessárias de Primeira Ordem

Se x^ é um mínimo local e $f(x)$ é continuamente diferenciável na vizinhança de x^* , então o gradiente de $f(x)$ em $x=x^*$ é nulo.*

Teorema 2: Condições suficientes de Segunda Ordem

Seja uma função $f(x)$ com gradiente nulo em $x=x^$, com matriz hessiana contínua nessa vizinhança. Se a matriz hessiana em x^* é definida positiva, então x^* é um mínimo local.*

Da álgebra linear tem-se que uma matriz definida positiva é uma matriz simétrica (ou seja, para a qual $A^T=A$) tal que, tomando-se qualquer vetor u não nulo, tem-se que $u^T A u > 0$.

Mais uma vez estabelece-se um paralelo com o cálculo de uma única variável, sendo a condição de matriz hessiana definida positiva equivalente à de derivada segunda positiva no cálculo de uma variável.

Tem-se ainda um terceiro teorema de interesse para o caso de funções objetivo convexas.

Teorema 3: Mínimos irrestritos em funções convexas

Quando $f(x)$ é convexa, todo ponto de mínimo x^ é um mínimo global. Além disso, se $f(x)$ é diferenciável, então todo ponto estacionário x^* é um mínimo global de $f(x)$.*

Aproveita-se ainda para enunciar também o Teorema de Taylor para aproximação de funções, generalizado para o caso de espaço de dimensão qualquer, o qual será muito utilizado tanto na definição dos métodos de busca direcional (determinação de uma direção de descida), quanto na busca unidimensional (determinação do tamanho do “passo” a ser dado em certa direção).

Teorema 4: Teorema de Taylor

Seja $f(x)$, $f: R^n \rightarrow R$ continuamente diferenciável e x^ um dado ponto de R^n . Numa vizinhança de x^* a função $f(x)$ pode ser obtida por*

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f^T(x^*)(x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T \nabla^2 f(x^*)(x - x^*) + \vartheta |x - x^*|^2$$

sendo a última parcela dada por termos de ordem superior caracterizadas por

$$\frac{\mathcal{O}(|x - x^*|^2)}{(x - x^*)} \rightarrow 0 \text{ para } x \rightarrow x^*$$

A.2. Otimização Irrestrita

Apesar do principal interesse para o presente trabalho estar nos métodos de otimização com restrições de variáveis, os métodos de otimização irrestrita são base para os problemas com restrições, uma vez que estes utilizam basicamente as mesmas estratégias para busca direcional e unidimensional, acrescidas de outras técnicas que serão tratadas mais adiante.

A.2.1. Método do gradiente

Conforme já mencionado, a estratégia geral dos métodos de otimização consiste em partir de um ponto do espaço R^n e seguir sucessivamente em direções para as quais o valor da função objetivo mais se aproxima do valor ótimo procurado. Dentro de um processo iterativo, um novo ponto é dito o valor perturbado de x na iteração k , sendo representado por um vetor x^{k+1} . Tal ponto é obtido pela soma ao vetor posição na atual iteração (x^k) de um vetor d^k escalonado por um fator α , ou seja,

$$x^{k+1} = x^k + \alpha d^k, \text{ com } d = d_i \text{ e } x = x_i \text{ (} i = 1, \dots, n \text{), } \alpha \in R$$

O fator α define o “passo” a ser dado segundo a direção d^k .

Seja então uma aproximação da função $f(x)$ no valor perturbado na iteração k , dada pelo desenvolvimento de série de Taylor explicitado até o termo de primeira ordem:

$$f(x^k + \alpha d^k) = f(x^k) + \nabla f^T(x^k) \alpha d^k + \vartheta(\alpha) \quad (A.2.1)$$

Manipulando-se os termos de (A.2.1) e dividindo-se ambos os lados da igualdade por α obtém-se:

$$\frac{f(x^k + \alpha d^k) - f(x^k)}{\alpha} = \nabla f^T(x^k) d^k + \frac{\vartheta(\alpha)}{\alpha} \quad (A.2.2)$$

Para $\alpha > 0$, no limite de $\alpha \rightarrow 0$, tem-se que:

$$\frac{f(x^k + \alpha d^k) - f(x^k)}{\alpha} \rightarrow \frac{df}{d\alpha} \text{ e } \frac{\vartheta(\alpha)}{\alpha} \rightarrow 0 \quad (A.2.3)$$

Admitindo-se que a direção d^k seja de descida então o valor da função no ponto perturbado deve ser menor do que em x^k . Assim, por um lado tem-se que o lado esquerdo da igualdade (A.2.2) é negativo, e por outro lado como para α tendendo a zero o segundo termo do lado direito tende a zero, conclui-se que:

$$\nabla f^T(x^k) d^k < 0 \quad (A.2.4)$$

O produto expresso em (A.2.4) equivale ao produto interno do vetor gradiente de f em x^k com o vetor d^k . Como o produto interno de dois vetores tem por significado geométrico a projeção de um vetor sobre o outro, tem-se que o maior valor em módulo do produto será obtido quando ambos estiverem na mesma direção. Por definição, o vetor gradiente aponta a direção de maior variação positiva de uma função no ponto. Conseqüentemente tomando-se o sentido oposto do gradiente obtém-se a direção de maior variação negativa. Assim sendo, a direção de descida d^k dada pelo Método do Gradiente é dada por:

$$d^k = -\nabla f(x^k) \quad (A.2.5)$$

Determinada a direção, o valor do escalar α é obtido por um dos métodos de buscas unidimensional apresentados mais adiante no item A.3.

Apesar da direção indicada pelo método ser a de maior inclinação negativa, observa-se que a aplicação do Método do Gradiente proporciona uma trajetória de busca de soluções em ‘zigzague’ até o ponto de mínimo, com taxa de convergência bastante lenta (ver exemplos no item A.5). Ainda assim, segundo (LUENBERGER, 2005), o método é extremamente importante sob ponto de vista teórico, servindo como base para outros métodos, bem como padrão de referência para comparação da taxa de convergência dos mesmos.

A.2.2. Método dos Gradientes Conjugados

O Método dos Gradientes Conjugados compõe uma classe de métodos propostos originalmente para resolver grandes sistemas de equações com vantagens sobre o Método de eliminação de Gauss nessas condições. O Método do Gradiente Conjugado Linear foi proposto por Hestenes e Stiefel nos anos 1950, sendo que a primeira variante não linear foi dada por Fletcher e Reeves nos anos 1960.

Parte-se de um problema de minimização quadrática da forma

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x \quad (\text{A.2.6})$$

onde A é uma matriz $n \times n$ simétrica definida positiva, sendo seu gradiente dado por

$$\nabla f(x) = Ax - b \quad (\text{A.2.7})$$

Da condição de primeira ordem tem-se que o gradiente é nulo no ponto de mínimo, e assim o problema de otimização equivale ao sistema de equações lineares

$$Ax = b \quad (\text{A.2.8})$$

Pode-se assim resolver (A.2.8) tomando-se a estratégia geral utilizada nos métodos de otimização, ou seja, partir-se de um ponto inicial x^0 e iterativamente aplicar a ele deslocamentos até encontrar o ponto x^k onde Ax^k é igual a b . Mais ainda, pode-se tratar o gradiente de $f(x)$ com uma função resíduo r^k dada por

$$r^k(x) = Ax^k - b \quad (A.2.9)$$

a qual busca-se anular para a resolução de (A.2.6) ou equivalentemente (A.2.8).

Os deslocamentos no valor de x^k nada mais são do que a soma de vetores d^k multiplicados por escalares α^k que minimizam a função na direção d^k , ou seja

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k \quad (A.2.10)$$

Desenvolvendo a função por Série de Taylor e aplicando (A.2.9) obtém-se o valor exato de α^k para a função quadrática (A.2.6), resultando

$$\alpha^k = \frac{-(r^k)^T d^k}{(d^k)^T A d^k} \quad (A.2.11)$$

Das diversas seqüências de direções a serem adotadas em (A.2.10) destaca-se o conjunto de vetores não-nulos d^k , $k=1, \dots, n$ tais que

$$d_i^T A d_j = 0, \quad \forall i \neq j \quad (A.2.12)$$

ditos conjugados com a matriz simétrica definida positiva A , vetores esses linearmente independentes entre si. A vantagem em se utilizar tais direções conjugadas é indicada no

Teorema 5.

Teorema 5:

Para qualquer x^0 pertencente a R^n a seqüência $\{x^k\}$ gerada por direções conjugadas segundo (A.2.12) com α^k de acordo com (A.2.11), converge-se para a solução x^k do sistema linear (A.2.8) em no máximo n iterações.

A prova do **Teorema 5** é simples e pode ser obtida em (NOCEDAL; WRIGHT, 2006).

O conjunto dos auto-valores de A é um dos inúmeros conjuntos de direções conjugadas que podem ser utilizados, sendo, entretanto, uma opção com custo computacional elevado para as aplicações que o método se propõe (grandes sistemas de equações).

O método de ortogonalização de Gram-Schmidt seria outra opção, devendo ser feitas pequenas adaptações para encontrar direções conjugadas ao invés de direções ortogonais, porém também a um custo computacional elevado.

Destaca-se então a principal vantagem do Método dos Gradientes Conjugados: ele é capaz de gerar um conjunto de direções conjugadas calculando-se cada direção d^k utilizando apenas a direção anterior d^{k-1} sem necessitar das demais anteriores.

Cada direção é obtida por

$$d^k = -r^k + \beta^k d^{k-1} \quad (A.2.13)$$

sendo β^k um escalar tal que d^k e d^{k-1} sejam conjugados com relação à matriz A .

Para tomar vantagem da propriedade decorrente de (A.2.12) multiplica-se ambos os lados da igualdade (A.2.13) por $[d^{k-1}]^T A$, obtendo

$$[d^{k-1}]^T A d^k = -[d^{k-1}]^T A r^k + \beta^k [d^{k-1}]^T A d^{k-1} = 0 \quad (A.2.14)$$

de onde finalmente obtém-se

$$\beta^k = \frac{[r^k]^T A d^{k-1}}{[d^{k-1}]^T A d^{k-1}} \quad (A.2.15)$$

O primeiro d^k é dado pela direção obtida pelo Método do Gradiente no ponto inicial x^0 .

Tem-se assim elementos suficientes de maneira a criar um algoritmo preliminar segundo a filosofia desse método. Entretanto é possível ainda simplificar o cálculo de α^k e β^k obtendo-se o algoritmo padrão do método, o qual apresenta a seguinte forma:

Passo 1: Adotar o valor inicial de partida x^0

Passo 2: Calcular r^0 e d^0 por

$$r^0 = Ax^0 - b, \quad d^0 = -r^0, \quad k = 0$$

Passo 3: Enquanto $r^k \neq 0$ (maior que uma dada tolerância) proceder a seguinte seqüência:

$$\alpha^k = \frac{(r^k)^T r^k}{(d^k)^T A d^k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$$

$$r^{k+1} = r^k + \alpha^k A d^k$$

$$\beta^{k+1} = \frac{(r^{k+1})^T r^{k+1}}{(r^k)^T r^k}$$

$$d^{k+1} = -r^{k+1} + \beta^{k+1} d^k$$

$$k = k + 1$$

Fim do Enquanto (**Passo 3**)

Observa-se que no algoritmo são utilizados vetores apenas das duas últimas iterações, o que significa baixo custo computacional relacionado ao armazenamento de valores na memória e baixo custo relacionado ao processamento, uma vez que são realizadas apenas operações de multiplicação entre vetores e matrizes.

Para casos onde a função objetivo não é quadrática foram desenvolvidos variantes do Método, dentre elas as mais famosas atribuídas as duplas Fletcher-Reeves e Polak-Ribière. Uma vez que tais formulações não serão desenvolvidas no presente trabalho, deixa-se de mencionar detalhes das mesmas, que podem ser obtidos em (NOCEDAL; WRIGHT, 2006).

A.2.3. Método de Newton

No Método de Newton parte-se de uma aproximação da função $f(x)$ no valor perturbado na iteração k , utilizando-se o desenvolvimento por série de Taylor explicitada até o termo de segunda ordem:

$$f(x^k + \alpha d^k) = f(x^k) + \nabla f^T(x^k) \alpha d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 (d^k)^T \nabla^2 f^T d^k + \vartheta(\alpha^2) \quad (\text{A.2.16})$$

Então como ao ponto de mínimo corresponde a nulidade do gradiente da função, tem-se que em $x^k + \alpha d^k$: $\nabla f(x^k + \alpha d^k) = 0$. Assim, desprezando-se a contribuição dos termos de ordem superior para o gradiente da (A.2.16), obtém-se:

$$\nabla^2 f(x^k) \alpha d^k = -\nabla f(x^k) \quad (\text{A.2.17})$$

Supondo-se que matriz hessiana seja positiva definida, a direção de descida αd^k é obtida pela resolução do sistema (A.2.17), sendo que o vetor associado já possui o tamanho necessário para determinar o valor perturbado, sem necessidade da definição de α na busca unidimensional.

O Método de Newton se destaca pela taxa de convergência quadrática do processo de busca da solução, superior à dos demais métodos. Entretanto é importante lembrar que o método parte da suposição de que a matriz hessiana é positiva definida, tendo sido imposta apenas a condição necessária de primeira ordem (vide **Teorema 1** no item A.1). Caso a matriz não seja positiva definida, pode-se obter uma solução perturbada x^{k+1} que se distancia da solução do problema, ou mesmo ter-se uma matriz não inversível, o que inviabiliza a solução do sistema.

Uma alternativa para tais casos é a utilização de aproximações numéricas para a matriz hessiana, desenvolvidas de maneira que tal aproximação origine uma matriz positiva definida.

Tais métodos são genericamente chamados de Métodos do tipo Quase Newton, os quais serão desenvolvidos a seguir.

A.2.4. Métodos do tipo Quase-Newton

O primeiro método do tipo Quase Newton foi desenvolvido em meados de 1950 por W.C. Davidson com a finalidade de solucionar um problema de otimização cuja solução não estava sendo alcançada pelos limitados recursos disponíveis na época. Davidson desenvolveu então um algoritmo que para (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) veio a tornar-se uma das idéias mais criativas da Otimização não-linear. Rapidamente Fletcher e Powell demonstraram que o novo algoritmo era bastante eficiente e o Método passou a ser referido pelas iniciais do sobrenome dos três (DFP).

O nome Quase Newton é devido ao fato do método ter sido desenvolvido baseado no Método de Newton, com a diferença de utilizar uma aproximação para a matriz hessiana.

Para a aproximação são utilizadas apenas informações relativas ao vetor gradiente, mas apesar disto taxa de convergência obtida é muito superior ao Método dos Gradientes, principalmente em problemas de elevada dimensão. A literatura se refere à taxa de convergência do método como superlinear, por ser superior à convergência linear do Método do Gradiente e inferior à quadrática do Método de Newton. Ainda segundo (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) apesar da taxa de convergência ser inferior à do Método de Newton, devido ao custo computacional para a obtenção das derivadas segundas exigidas por este ser elevado, a eficiência global dos Métodos Quase Newton em muitos problemas mostra-se superior.

Assim como no Método de Newton, parte-se de uma aproximação truncada na segunda ordem da função objetivo, em $x^k + \alpha d^k$:

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + \alpha d^k) = f(x^k) + \nabla f^T(x^k) \alpha d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 (d^k)^T \nabla^2 f(x^k) d^k$$

O gradiente em x^{k+1} , já considerando uma aproximação B^{k+1} para a hessiana fica:

$$\nabla f(x^{k+1}) = \nabla f(x^k + \alpha d^k) = \nabla f(x^k) + B^{k+1} \alpha d^k \quad (\text{A.2.18})$$

Rearranjando-se os termos de (A.2.18) obtém-se:

$$B^{k+1} \alpha d^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \quad (\text{A.2.19})$$

O vetor αd^k equivale à diferença entre os ‘vetores-posição’ x^{k+1} e x^k e é usualmente referido na literatura por s^k , sendo também comum a referência ao vetor originado pela diferença dos gradientes do termo à direita da igualdade como y^k . Com essa simplificação na notação (A.2.19) passa a ser expressa como

$$B^{k+1} s^k = y^k \quad (\text{A.2.20})$$

também referida na literatura como Equação Secante.

Pré-multiplicando ambos os lados da Equação Secante pelo transposto do vetor s^k obtém-se no termo da esquerda o produto $(s^k)^T B^{k+1} s^k$, o qual, sendo positivo para qualquer s^k garante que a matriz B^{k+1} seja definida positiva. Isso resulta em

$$(s^k)^T y^k > 0 \quad (\text{A.2.21})$$

também referida como Condição de Curvatura, a qual uma vez satisfeita garante que B^{k+1} possa ser obtida por intermédio da Equação Secante. Existindo infinitas soluções possíveis para B^{k+1} , outras condições devem ser impostas, entre elas a de que entre duas iterações B^{k+1} e B^k sejam o mais próximo possível uma da outra, originando um problema de otimização na forma

$$\begin{aligned} & \min \| B - B^k \| \\ & \text{sujeito a } B = B^T \text{ e } B s^k = y^k \end{aligned} \quad (\text{A.2.22})$$

Das diferentes normas que podem ser utilizadas na minimização (A.2.22) derivam os diferentes tipos de Método Quase Newton, sendo que a dada por

$$\|A\|_W \equiv \|W^{1/2} A W^{1/2}\|_F$$

ou ‘*Weighted Frobenius Norm*’, que de acordo com (NOCEDAL; WRIGHT, 2006), além de possibilitar uma resolução fácil do problema origina um método de otimização não sensível à escala.

Feitas estas imposições e desenvolvidas as formulações obtém-se a aproximação de B^{k+1} desenvolvida por Davidson, Fletcher e Powell, a qual resulta em

$$B^{k+1} = (I - \rho^k y^k s^{kT}) B^k (I - \rho^k s^k y^{kT}) + \rho^k y^k y^{kT} \quad (A.2.23)$$

onde ρ^k é a inversa da multiplicação expressa na Condição de Curvatura, ou seja

$$\rho^k = \frac{1}{(y^k)^T s^k} \quad (A.2.24)$$

resultando na fórmula proposta por Davidson em 1959.

Há ainda como tornar mais prático o método utilizando a inversa da aproximação da matriz hessiana dada por

$$H^k = (B^k)^{-1}$$

e procedendo manipulações algébricas obter a formulação para H^{k+1} , com a vantagem de que com a inversa da hessiana é possível encontrar a direção de descida apenas pela multiplicação

$$d^k = -H^{k+1} \nabla f(x^k)$$

não recaindo em uma resolução de sistema de equações com em (A.2.19).

Segue a formulação final do Método do tipo Quase Newton desenvolvida por Davidson, Fletcher e Powell:

(DFP)

$$H^{k+1} = H^k - \frac{H^k y^k (y^k)^T H^k}{(y^k)^T H^k y^k} + \frac{s^k (s^k)^T}{(y^k)^T s^k} \quad (A.2.25)$$

A aproximação obtida pelo método é atualizada a cada passo pela subtração e soma do segundo e terceiro termo de (A.2.25), respectivamente, à aproximação obtida no passo anterior, que ainda carrega informações nela introduzidas nas iterações anteriores.

Posteriormente, baseado no DFP, foi elaborado um novo método por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno, (BFGS), o qual segundo (NOCEDAL; WRIGHT, 2006); é considerado o mais eficiente dos métodos do tipo Quase Newton.

Basicamente o método parte da Equação Secante (A.2.20) do DFP, porém ao invés de considerar a hessiana B^{k+1} trabalha com sua inversa H^{k+1} , ou seja:

$$H^{k+1} y^k = s^k \quad (A.2.26)$$

Procedendo analogamente, para esta abordagem a minimização (A.2.22) passa agora a ser:

$$\begin{aligned} \min \| H - H^k \| \\ \text{sujeito a } H = H^T \text{ e } Hy^k = s^k \end{aligned} \quad (A.2.27)$$

Utilizando a mesma norma e procedidos os devidos desenvolvimentos, obtém-se a aproximação de H^{k+1} proposta por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno:

(BFGS)

$$H^{k+1} = (I - \rho^k s^k y^{kT}) H^k (I - \rho^k y^k s^{kT}) + \rho^k s^k s^{kT} \quad (A.2.28)$$

Para (A.2.28) ρ^k também é dado por (A.2.24).

Caso se tenha interesse, também é possível o cálculo da hessiana e não de sua inversa, que será dada por:

$$B^{k+1} = B^k - \frac{B^k s^k (s^k)^T B^k}{(s^k)^T B^k s^k} + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} \quad (\text{A.2.29})$$

Tanto para o DFP quanto para o BFGS, o primeiro passo é dado segundo o método do gradiente, uma vez que a formulação do método requer informações do passo anterior. A partir da segunda iteração adota-se uma primeira aproximação da hessiana e aplica-se método para a busca direcional como nos demais métodos já mencionados.

O primeiro valor de hessiana a ser considerado, segundo (NOCEDAL; WRIGHT, 2006), pode ser uma aproximação feita pelo método das diferenças finitas (ou sua inversa, nas fórmulas que trabalham com ela) ou mesmo a matriz identidade I multiplicada por um escalar, a fim de refletir a escala do problema em questão. Cita ainda como um procedimento heurístico bastante efetivo para determinar a primeira inversa da hessiana:

$$H^0 = \frac{(y^k)^T s^k}{(y^k)^T y^k} I \quad (\text{A.2.30})$$

(NOCEDAL; WRIGHT, 2006) indica também que para a eficiência adequada dos métodos Quase Newton apresentados, o método de busca unidimensional a ser utilizado deve atender às condições dadas por Wolfe, referidas na literatura em língua inglesa com '*Wolfe Conditions*', as quais são apresentadas em A.3.

A.3. Busca Unidimensional

A busca unidimensional concentra-se na obtenção de um valor escalar α que multiplicado pelo vetor d^k , previamente obtido por um dos métodos de busca direcional,

minimiza a função naquela direção. Trata-se, portanto, de um problema de minimização de uma função de uma única variável, já que sendo fixados x^k e d^k a função $f(x^k + \alpha d^k)$ passa a ter como única variável o escalar α .

No caso da função de uma variável apresentada na *Figura A.1.1*, os candidatos a ponto de mínimo anulam o valor da primeira derivada da função, ou seja

$$\frac{df(x)}{dx} = x^3 + \frac{3}{4}x^2 - 2x = 0 \rightarrow x(x^2 + \frac{3}{4}x - 2) = 0$$

o que resulta em três pontos:

$$x_1 = 0; x_2 = \frac{-3 - \sqrt{137}}{8} \approx -1,838; x_3 = \frac{+3 - \sqrt{137}}{8} \approx 1,088$$

A identificação de quais deles são pontos de máximo ou de mínimo se dá pela análise do sinal da derivada segunda de $f(x)$:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = 3x^2 + \frac{3}{2}x - 2 = f''(x)$$

Uma vez que f'' em x_2 e em x_3 é positiva, tem-se que eles são pontos de mínimo; já f'' em x_1 é negativo, sendo um ponto de máximo local. Ainda da análise comparativa dos valores da função nesses pontos, conclui-se que x_3 é um mínimo local, enquanto x_2 é o mínimo global.

A determinação dos pontos com derivada primeira nula, para o caso em questão, demandou a resolução exata de uma equação do terceiro grau. Uma alternativa numérica para a resolução dessa equação seria a utilização do Método de Newton, o qual parte de uma aproximação quadrática para função, utilizando uma Série de Taylor estendida até o termo de segundo grau:

$$f(x^{k+1}) = f(x^k) + f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + \frac{1}{2} f''(x^k)(x^{k+1} - x^k)^2 \quad (A.3.1)$$

Pretende-se que na próxima iteração ($k+1$) encontre-se o ponto de mínimo, onde a derivada se anula, o que sendo imposto em (A.3.1) resulta em

$$f'(x^{k+1}) = f'(x^k) + f''(x^k)(x^{k+1} - x^k) = 0 \quad (\text{A.3.2})$$

Procedidas as devidas manipulações algébricas obtém-se:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f'(x^k)}{f''(x^k)} \quad (\text{A.3.3})$$

Utilizando-se (A.3.3) parte-se de um ponto inicial, e iterativamente aproxima-se do ponto estacionário mais próximo, o qual pode ser de máximo ou de mínimo, a depender do sinal da derivada segunda.

Para o caso de uma função no R^n a idéia é basicamente a mesma, introduzindo-se o conceito de derivada direcional, que é a derivada de uma função de várias variáveis segundo uma direção d , sendo definida matematicamente como:

$$D(f(x); d) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x + \alpha d) - f(x)}{\alpha} \quad (\text{A.3.4})$$

A derivada segunda é definida de maneira análoga, resultando em:

$$D^2(f(x); d) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f'(x + \alpha d) - f'(x)}{\alpha} \quad (\text{A.3.5})$$

É possível obter a derivada direcional (A.3.4) partindo-se da Série de Taylor truncada no termo linear:

$$f(x + \alpha d) = f(x) + \nabla f^T(x) \alpha d + \vartheta \|\alpha\| \quad (\text{A.3.6})$$

Manipulando-se os termos de (A.3.6) obtém-se:

$$\frac{f(x + \alpha d) - f(x)}{\alpha} = \nabla f^T(x) d + \frac{\vartheta \|\alpha\|}{\alpha} \quad (\text{A.3.7})$$

Quando α tende a zero, o termo à esquerda de (A.3.7) se aproxima da definição da derivada direcional (A.3.4), assim como o segundo termo do lado direito tende a zero. Desta forma a direcional definida em (A.3.4) é dada por:

$$D(f(x^k); d) = \nabla f^T(x^k)d \quad (\text{A.3.8})$$

Da mesma forma, pode-se obter a derivada direcional (A.3.5) partindo-se da Série de Taylor truncado no termo de segunda ordem:

$$f(x + \alpha d) = f(x) + \nabla f^T(x)\alpha d + \frac{1}{2}d^T \nabla^2 f(x)\alpha^2 d + \vartheta \|\alpha\|^2 \quad (\text{A.3.9})$$

Manipulando-se os termos de (A.3.9) obtém-se:

$$\frac{f(x + \alpha d) - f(x)}{\alpha} = d^T \nabla^2 f(x)d + \frac{\vartheta \|\alpha\|^2}{\alpha} \quad (\text{A.3.10})$$

Procedendo a mesma análise analogamente à feita anteriormente, obtém-se a expressão para a derivada direcional definida em (A.3.5):

$$D^2(f(x^k); d) = d^T \nabla^2 f(x^k)d \quad (\text{A.3.11})$$

Definidas as derivas direcionais, procede-se a aproximação por séries de Taylor da função em x^{k+1} , analogamente ao feito caso unidimensional, agora para a função de várias variáveis:

$$f(x^{k+1}) = f(x^k) + \alpha D(f(x^k); d) + \frac{1}{2}\alpha^2 D^2(f(x^k); d) \quad (\text{A.3.12})$$

Pretende-se que na próxima iteração ($k+1$) encontre-se o ponto de mínimo, onde a derivada na direção d anula-se, o que sendo imposto em (A.3.12) resulta em:

$$D(f(x^{k+1}; d)) = D(f(x^k; d)) + \alpha D^2(f(x^k; d)) = 0 \quad (\text{A.3.13})$$

Procedendo as manipulações algébricas necessárias, obtém-se a fórmula da busca linear pelo Método de Newton:

$$\alpha = -\frac{D(f(x^k; d))}{D^2(f(x^k; d))} = -\frac{\nabla f^T(x^k)d}{d^T \nabla^2 f(x^k)d} \quad (A.3.14)$$

Para o caso de uma função quadrática, como em (A.2.6), o valor de α obtido é exato, uma vez que a aproximação adotada possui o mesmo grau da função a ser minimizada.

Já para os demais casos, tem-se um processo iterativo como o descrito por (A.3.3), resultando na fórmula iterativa:

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i d \quad (A.3.15)$$

Procede-se a iteração dada por (A.3.15) até que o módulo da diferença em x_{i+1} e x_i seja menor que um valor pequeno arbitrado (tolerância). O valor de α é a soma do valor dos n α_i calculados nas n iterações procedidas, ou seja:

$$\alpha = \sum_{i=1}^n \alpha_i \quad (A.3.16)$$

Tem-se que em problemas de grande escala esse método apresenta um custo elevado relativo ao processamento para obtenção da hessiana, situação na qual podem ser utilizados outros métodos que demandam tempos menores de processamento como o Método da Secante, o Método da Bisseção e o Método das Falsas Posições, também conhecido como ‘*Regula Falsi*’.

Alerta-se, porém, que para os métodos aproximados é importante avaliar a qualidade do valor do α obtido, ou seja, se seu valor permite obter uma redução suficiente da função objetivo segundo aquela direção. Para tanto se utilizam alguns critérios, referidos na literatura como ‘Condições de Wolfe’ (‘*Wolfe Conditions*’).

A primeira delas visa garantir uma diminuição suficiente do valor da função objetivo, impondo-se que o valor mínimo de redução em um dado ponto seja proporcional ao tamanho do passo α e da derivada direcional, sendo dita Condição de Diminuição Suficiente, também citada na literatura como Condição de Armijo, dada em termos matemáticos por:

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + c_1 \alpha (\nabla f^T(x^k) d^k), \quad 0 < c_1 < 1 \quad (\text{A.3.17})$$

Alguns métodos de busca unidimensional inexata são baseados apenas em (A.3.17), porém ela permite a adoção de valores de α muito pequenos que podem prejudicar a eficiência do método de otimização.

Para resolver esta questão, uma segunda condição, denominada Condição de Curvatura é introduzida. Ela impõe que a inclinação da função, ou seja, sua derivada direcional, tenha valor pequeno, proporcional à inclinação da função no ponto de início da busca ($\alpha=0$). Em sua forma mais forte tal imposição é feita com base no módulo desse valor, resultando:

$$|\nabla f^T(x^k + \alpha d^k) d^k| \leq c_2 |\nabla f^T(x^k) d^k|, \quad 0 < c_1 < c_2 < 1 \quad (\text{A.3.18})$$

Em (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) são citados alguns valores adotados na prática para essas constantes. Para c_1 cita-se o valor 10^{-4} , enquanto para c_2 valores típicos são 0,9 para os Métodos de Newton ou Quase-Newton, e 0,1 para os métodos não-lineares de Gradiente Conjugados (Fletcher-Reeves e Polak-Ribière). Os mesmos autores apresentam ainda um método de busca inexata visando o atendimento dessas condições.

Um método bastante prático e eficiente é apresentado por (FOX, 1974) e consiste em tomar três pontos da função na direção de d^k e utilizá-los para interpolar uma função de aproximação quadrática. Tomando-se o ponto x^k como primeiro ponto (x_1), e o segundo e terceiro para $\alpha=t$ e $2t$ respectivamente, ou seja, $x_2=x^k+td^k$ e $x_3=x^k+2td^k$, e impondo-se a nulidade da derivada da função de interpolação, pode-se facilmente obter a expressão:

$$\alpha_{\text{aprox.}} = \frac{4f(x_2) - 3f(x_1) - f(x_3)}{4f(x_2) - 2f(x_2) - 2f(x_1)} t \quad (\text{A.3.19})$$

Cuidados adicionais com relação ao sinal da derivada segunda são necessários para garantir que α indique a posição de um valor de mínimo, o que implica que

$$f(x_3) + f(x_1) > 2f(x_2) \quad (\text{A.3.20})$$

condição que pode ser imposta por regras na adoção do valor t , completando a lógica do algoritmo para a busca aproximada de α .

A literatura em geral recomenda sempre a adoção de algoritmos não excessivamente refinados, os quais em geral podem representar um esforço desnecessário que pouco influencia na eficiência global do processo de minimização.

A.4. Otimização Restrita

O problema de otimização restrita ocorre quando existem limitações impostas sobre o problema, reduzindo o espaço para busca da solução ótima, que no caso irrestrito era o próprio R^n . Tais restrições podem ser dadas diretamente sobre intervalos de valores permitidos para cada uma das variáveis ou por meio de igualdades (Equações) ou desigualdades (Inequações) relacionando as mesmas. A formulação matemática geral dos problemas de otimização restrita é da forma:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } f(x) \\ &\text{sujeito a } c_i(x) = 0, \quad i \in Eq \\ &\quad \quad \quad c_i(x) \leq 0, \quad i \in In \\ &\quad \quad \quad x \in \Omega \subset R^n \end{aligned} \quad (\text{A.4.1})$$

Define-se como *região factível* o subespaço obtido pela intersecção dos subespaços dados por todas as restrições, representando o conjunto de pontos candidatos à solução. Por consequência, os pontos que a essa região pertencem são ditos *pontos factíveis*.

Havendo uma redução no espaço de candidatos à solução é direta a conclusão de que as condições de primeira e segunda ordem apresentadas para o caso irrestrito não são mais válidas. Mais ainda, tem-se que devido à existência de limitações no espaço, a noção de direção de descida precisa ser complementada, surgindo então a definição de *direção factível*.

Define-se *direção factível* como uma direção d^k tal que a solução perturbada x^{k+1} a ser obtida por $x^{k+1} = x^k + ad^k$, assim com x^k , também seja factível.

Utilizando simultaneamente as definições de direção factível e de direção de descida (direção que gera diminuição na função objetivo), ter-se-á que o ponto de mínimo local, no caso de minimização restrita, se dá quando não existe direção de descida factível, ou seja, qualquer perturbação factível que seja aplicada ao ponto implique em aumento na função objetivo, ou ainda:

$$\nexists x^{k+1} / f(x^{k+1}) < f(x^k) \text{ para } d^k \text{ factível} \quad (\text{A.4.2})$$

No caso de restrições de igualdade a verificação quanto à factibilidade de uma direção de descida é direta. Já para os casos que possuem restrições de desigualdade (ou seja, para os quais In não é um conjunto vazio), essa análise depende não apenas da direção, mas também do ponto em que a mesma esteja sendo tomada, uma vez que tal ponto pode estar em um limite da região factível.

Define-se então *conjunto ativo* (W) como o conjunto de todas as restrições $c_i(x)$ de igualdade somado a todas as restrições de desigualdade que estão em seu limite, ou seja, para as quais em uma dada iteração vale a igualdade da inequação, resultando:

$$W = \{i / (i \in Eq) \cup (i \in In : c_i = 0)\} \quad (\text{A.4.3})$$

Nesta situação, refere-se à restrição de desigualdade como **ativa**.

O conhecimento de quais restrições estão ativas em uma dada iteração permite que o problema com restrições definidas por desigualdade possa ser resolvido como um problema com restrições de igualdade que se alteram dependendo da posição no hiperespaço das soluções. Nessa abordagem as condições de contorno se alteram de acordo com o valor do vetor incógnito, configurando-se, desta forma, um problema não-linear.

Na seqüência introduzem-se duas das mais difundidas estratégias para abordagem de problemas de otimização restrita: a estratégia dos multiplicadores de Lagrange e a estratégia da penalização. Em seguida é apresentada a estratégia dos conjuntos ativos, a qual pode ser associada com ambas de maneira a impedir que a busca se estenda a regiões não-factíveis antes de atingir o ponto de mínimo restrito.

A.4.1. Estratégia dos Multiplicadores de Lagrange

Para introduzir-se o significado dos Multiplicadores de Lagrange tome-se um problema de minimização quadrático sujeito a uma restrição linear dada por uma igualdade.

No item A.2.1 viu-se que o vetor gradiente apresenta a propriedade de indicar a direção de maior variação positiva de uma função em um dado ponto do domínio. No caso de um problema restrito como o apresentado tem-se que no ponto de mínimo o vetor gradiente da função objetivo possui mesma direção e sentido contrário ao gradiente da função que define a restrição. Fazendo uso desta constatação define-se um escalar $\lambda_L > 0$ que no ponto de mínimo do problema restrito atende à seguinte relação

$$\nabla f(x) = -\lambda_L \nabla c(x) \text{ para } x = x^* \quad (\text{A.4.4})$$

ou ainda

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} + \lambda_L \frac{\partial c(x)}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{A.4.5})$$

O escalar λ_L é denominado multiplicador de Lagrange, com o qual se pode definir uma nova função chamada Função Lagrangiana ou Lagrangiano de $f(x)$:

$$l(x, \lambda) = f(x) + \lambda_L c(x) \quad (\text{A.4.6})$$

O Lagrangiano é uma função definida num espaço de dimensão superior ao de $f(x)$, uma vez que o escalar λ_L constitui uma incógnita a mais a ser determinada para a resolução do problema. É importante observar que a condição dada por (A.4.5) equivale a impor que o gradiente do Lagrangiano seja igual a zero, analogamente ao um problema restrito, uma vez que:

$$\nabla l(x, \lambda) = \nabla f(x) + \lambda_L \nabla c(x) \quad (\text{A.4.7})$$

É possível generalizar a definição para o caso de várias restrições, devendo-se atentar que são inseridas no Lagrangiano apenas aquelas que estão ativas. Para o caso de uma função no R^n com m restrições ativas, ter-se-á um sistema de dimensão $(n+m)$ cuja solução corresponde à resposta do problema sujeito àquelas restrições.

A.4.2. Estratégia da Penalização

A idéia básica da estratégia da Penalização é transformar o problema de otimização restrita em um problema equivalente irrestrito. A estratégia consiste em alterar a função objetivo de tal forma que fora da região factível se soma uma função, por exemplo quadrática, multiplicada por um fator de penalização. Ao se adotar um valor elevado para esse fator, o mínimo da função alterada passa a estar contido dentro da região factível, atendendo, portanto, à restrição.

A minimização da função $f(x)$ sujeita às restrições passa, então, a ser resolvida como:

$$\text{Minimizar } f(x) + \lambda_p P(x) \quad (\text{A.4.8})$$

onde $P(x)$ é a função de penalização a ser adotada.

Existem diversas funções de penalização que podem ser empregadas, mas uma alternativa bastante utilizada na prática é defini-la a partir do próprio conjunto de funções de restrição:

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_i (\max[0, c_i(x)])^2 \text{ para } i \in In \quad (\text{A.4.9})$$

Apesar de parecer ideal a aplicação inicial de um parâmetro λ_p bastante elevado, (FOX, 1976) demonstra por meio de exemplos que a aplicação de valores muito grandes para λ_p deformam exageradamente a topologia da função, reduzindo drasticamente a convergência dos métodos de busca. Com base nisso, aquele autor sugere, sempre que possível, a adoção de um processo de aumento gradativo do fator de penalização, partindo-se de um valor moderado, até que se observe a convergência do método para a solução do problema restrito.

A.4.3. A Estratégia dos Conjuntos Ativos

A Estratégia dos Conjuntos Ativos é baseada na idéia de dividir as restrições de desigualdade em dois grupos: um das restrições ativas, assim chamadas porque serão tratadas como igualdades, e outro das inativas, que basicamente são ignoradas até que se tornem ativas.

Para caracterizar cada um dos grupos, a estratégia parte da premissa de que em nenhum momento a busca ao ponto ótimo extrapole os limites da região factível (naturalmente, parte-se de um ponto dentro desta região para iniciar a busca). Quando o

método de otimização utilizado indica um ponto que ultrapassa os limites da região factível, a estratégia determina que seja tomada a posição limite daquela região (por meio da adoção de um passo α adequado) e imposta a igualdade da correspondente restrição de desigualdade, continuando a busca, a partir daí, no espaço de dimensão reduzida.

Cada vez que uma restrição é ativada procede-se da mesma maneira, até que se atinja o ponto de mínimo do espaço reduzido. Avalia-se então se naquele ponto há restrições ativas que devam ser desativadas. Havendo mais de uma, (LUENBERGER, 2005) afirma que se deve desativar uma a uma, escolhendo-se sempre a mais crítica, sob o risco de gerar instabilidade no processo.

A avaliação de qual restrição deve ser desativada depende da estratégia de imposição de restrição utilizada. No caso do emprego dos multiplicadores de Lagrange, o sinal e o módulo dos mesmos indicam qual delas deve ser a escolhida. No caso da estratégia da penalização, pode-se utilizar como subsídio para a decisão o vetor gradiente.

A fim de ilustrar a estratégia, tome-se o exemplo fictício de minimização restrita de uma função de duas variáveis, cuja topologia pode ser visualizada por meio das curvas de nível apresentadas na Figura A.4.1.

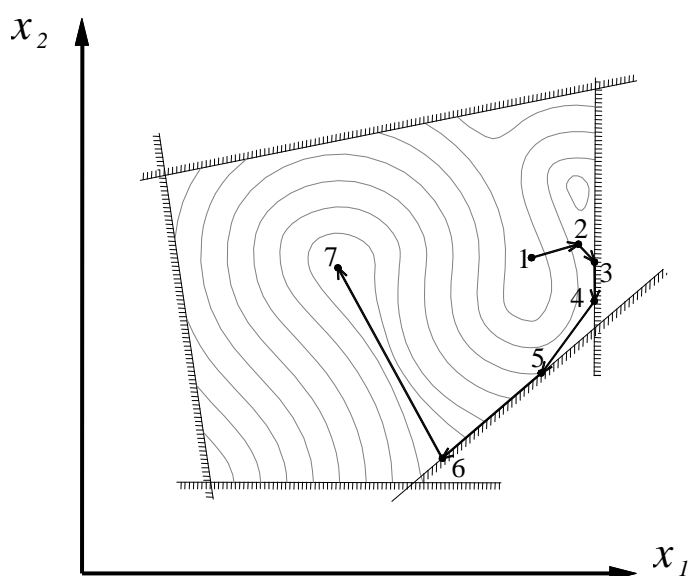


Figura A.4.1 - Trajetória de busca utilizando Método dos Conjuntos Ativos

Trata-se um problema com cinco restrições de desigualdade e nenhuma restrição de igualdade, sendo a solução indicada pelo ponto 7. Inicialmente é adotado um ponto factível, no caso o ponto 1.

Na primeira iteração (trajeto de 1 a 2) tem-se uma busca que não é afetada por nenhuma das restrições. Já na iteração 2 o mesmo não ocorre, já que a busca unidimensional é limitada por uma das restrições, no caso limitante do valor da variável x_1 . Adota-se, portanto, um valor de α tal que esta restrição passe a ser ativa. A partir do ponto 3 a busca passa a ser realizada no espaço reduzido representado pela restrição, até se obter o ponto de mínimo 4.

Desconsiderando a imposição da igualdade da restrição anterior (ou seja, ‘desativando’ a restrição) e realizando a busca direcional encontra-se uma direção de descida que aponta para dentro da região factível (direção de descida factível), indicando que 4 é ponto de mínimo apenas para o espaço reduzido. Prossegue-se então a minimização na nova direção de busca obtida.

O processo é continuado, observando-se ainda a ativação e desativação de mais uma restrição, até que o ponto de mínimo (ponto 7) seja atingido.

Nota-se que durante o processo de busca algumas das restrições não foram ativadas, sendo que se procedeu como se elas não existissem. Além disso, o conjunto das restrições ativas variou com o decorrer do processo, aumentando ou reduzindo.

Segundo (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) a estratégia é uma das mais eficientes para problemas de otimização restrita de pequeno e médio porte. Tal eficiência é também relatada por (RIGO,1999), que obteve resultados bastante satisfatórios empregando a estratégia dos conjuntos ativos junto ao Método de Newton e Quase-Newton para a resolução de problemas de contanto unilateral.

A.5. Exemplos

Para entender melhor o funcionamento de cada um dos métodos é interessante o desenvolvimento de um exemplo numérico simples em que a função objetivo é definida no espaço R^2 , permitindo a visualização de suas curvas de nível no plano.

Seja o problema de minimização irrestrita dado por

$$\min f(x_1, x_2) = 3(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2$$

cuja solução é $f(x_1, x_2) = 0$ para $x_1 = 2$ e $x_2 = 3$.

O vetor gradiente e a hessiana dessa função são dados por

$$\nabla f = \begin{pmatrix} 6x_1 - 12 \\ 2x_2 - 6 \end{pmatrix}; \nabla^2 f = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Partindo-se do ponto $x_1 = 0$; $x_2 = 0$, inicia a busca pelo Método do Gradiente, cuja direção de descida é dada por

$$d^0 = -\nabla f(0; 0) = \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Sendo a função quadrática, é possível obter o valor de α por

$$\alpha = -\frac{\nabla f^T d^0}{(d^0)^T \nabla^2 f d^0} = -\frac{\begin{pmatrix} -12 & -6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 12 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix}} = -\frac{-180}{936} = 0,192307$$

e com ambos valores obter o novo ponto

$$x^1 = x^0 + \alpha d^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 0,192307 \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix}; f(x_1^1; x_2^1) = 3,918370$$

Calculando-se o gradiente neste ponto obtém-se

$$\nabla f(x_1^1, x_2^1) = \begin{pmatrix} 1,846152 \\ -3,692308 \end{pmatrix}$$

cujo módulo nitidamente é bem maior que zero, e portanto não é ponto de mínimo da função.

Avançando nas iterações, observar-se-á que os pontos obtidos se aproximam lentamente da solução, seguindo uma trajetória em ziguezague, como se pode observar nos valores de x nas iterações de 2 a 4:

$$(x_1^2; x_2^2) = \begin{pmatrix} 1,648352 \\ 2,472527 \end{pmatrix}; (x_1^3; x_2^3) = \begin{pmatrix} 2,054100 \\ 2,675402 \end{pmatrix}; (x_1^4; x_2^4) = \begin{pmatrix} 1,938172 \\ 2,907258 \end{pmatrix}$$

Adotando-se como critério de parada o módulo do vetor gradiente ser menor que 10^{-3} são necessárias 10 iterações, obtendo-se como valores finais:

$$(x_1^{10}; x_2^{10}) = \begin{pmatrix} 1,999664 \\ 2,999496 \end{pmatrix}; f(x_1^{10}; x_2^{10}) = 5,93 \cdot 10^{-7}; |\nabla f(x_1^{10}; x_2^{10})| = 0,000434$$

Utilizando o Método dos Gradientes Conjugados observa-se uma grande melhora na convergência para a solução. Em sua primeira iteração ($k=0$), os valores de d^0 e α são os mesmos obtidos no primeiro método, assim como x^1 . Calcula-se então o resíduo r^1 :

$$r^1 = r^0 + \alpha d^0 = \begin{pmatrix} -12 \\ -6 \end{pmatrix} + 0,192307 \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,846104 \\ -3,692316 \end{pmatrix}$$

Com r^1 calculado, pode-se calcular β^1 :

$$\beta^1 = \frac{(r^1)^T r^1}{(r^0)^T r^0} = \frac{\begin{pmatrix} 1,846104 & -3,692316 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1,846104 \\ -3,692316 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 12 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix}} = \frac{17,041297}{180} = 0,094674$$

Termina-se a iteração calculando a direção de descida da nova iteração ($k=1$):

$$d^1 = -r^1 + \beta^1 d^0 = \begin{pmatrix} -1,846104 \\ +3,692316 \end{pmatrix} + 0,094674 \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,710016 \\ 4,260360 \end{pmatrix}$$

Já para a iteração nova, calcula-se inicialmente o valor no de α :

$$\alpha = \frac{(r^1)^T r^1}{(d^1)^T \nabla^2 f d^1} = \frac{\begin{pmatrix} 1,846104 & -3,692316 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1,846104 \\ -3,692316 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} -0,710016 & 4,260360 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -0,710016 \\ 4,260360 \end{pmatrix}} = \frac{17,041297}{39,326071} = 0,433333$$

Finalmente se calcula o valor do novo x :

$$x^2 = \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix} + 0,433333 \begin{pmatrix} -0,710016 \\ 4,260360 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,000018 \\ 3,000002 \end{pmatrix}$$

Observa-se que já na segunda iteração obteve-se praticamente o valor exato, que o método anterior demorou 10 iterações para obter. De fato, calculando-se o resíduo nesse ponto, tem-se que o mesmo já atende o critério de parada de mesma ordem de grandeza da tolerância adotada no Método do Gradiente:

$$r^2 = r^1 + \alpha \nabla^2 f d^1 = \begin{pmatrix} 1,846104 \\ -3,692316 \end{pmatrix} + 0,433333 \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -0,710016 \\ 4,260360 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,000064 \\ -0,000007 \end{pmatrix}$$

É importante observar ainda que a expectativa de convergência desse último método, dada pelo **Teorema 5**, foi plenamente atendida.

Resultado melhor ainda é observado pelo Método de Newton. Segundo ele o valor da direção de descida em seu tamanho final é obtido pela resolução do sistema:

$$[\nabla^2 f(x^k)] d^k = -\nabla f(x^k) \rightarrow \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} \therefore \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Na verdade, como a função objetivo é quadrática, nesse caso específico tem-se que o Método de Newton encontra diretamente a solução.

Para finalizar é interessante observar a capacidade de geração de aproximações da hessiana pelos Métodos do Tipo Quase Newton; para tanto se toma a variante DFP.

A primeira iteração do método é feito segundo o Método do Gradiente, e, portanto partindo-se de $(0;0)$ obtém-se os mesmos valores de d^0 , α e x^1 . Passando-se à iteração $k=1$, inicialmente calcula-se:

$$s^1 = x^1 - x^0 = \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix}$$

$$y^1 = \nabla f(x^1) - \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 1,846152 \\ -3,692308 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -12 \\ -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13,846152 \\ 2,307692 \end{pmatrix}$$

$$\rho^1 = \frac{1}{(y^1)^T s^1} = \frac{1}{(13,846152 \quad 2,307692) \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix}} = \frac{1}{34,615375} = 0,028889$$

Utilizando-se a identidade como primeira aproximação da hessiana (B^0), desenvolve-se a aproximação (B^1):

$$B^1 = (I - \rho^1 y^1 (s^1)^T) B^0 (I - \rho^1 s^1 (y^1)^T) + \rho^1 y^1 (y^1)^T$$

$$B^1 = \begin{bmatrix} 0,0769198 & -0,461540 \\ -0,153847 & 0,923077 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,0769198 & -0,153847 \\ -0,461540 & 0,923077 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5,538481 & 0,923080 \\ 0,923080 & 0,153847 \end{bmatrix}$$

$$B^1 = \begin{bmatrix} 5,757417 & 0,485209 \\ 0,485209 & 1,029586 \end{bmatrix}$$

Tendo-se obtido a primeira aproximação da hessiana, procede-se a resolução do sistema:

$$B^1 d^1 = -\nabla f(x^1) \rightarrow \begin{bmatrix} 5,757417 & 0,485209 \\ 0,485209 & 1,029586 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d^1 \\ d^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} \therefore \begin{pmatrix} d^1 \\ d^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,648648 \\ 3,891892 \end{pmatrix}$$

Passa-se então ao cálculo do passo α , o qual resulta:

$$\alpha = \frac{15,567567}{32,818112} = 0,474359$$

Obtendo-se x^2 com α e d^1 :

$$x^2 = \begin{pmatrix} 2,307692 \\ 1,153846 \end{pmatrix} + 0,474359 \begin{pmatrix} -0,648648 \\ 3,891892 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,000000 \\ 3,000000 \end{pmatrix}$$

Apenas para observar a capacidade de aproximação da hessiana, apresenta-se o valor que é obtido para B^2

$$B^2 = \begin{bmatrix} 5,900527 & -0,020566 \\ -0,020566 & 2,480143 \end{bmatrix}$$

a qual como se pode observar se aproxima relativamente bem da hessiana exata.

Seguem na Figura A.4.2 as trajetórias de aproximação da solução para cada um dos métodos desenvolvidos para o exemplo.

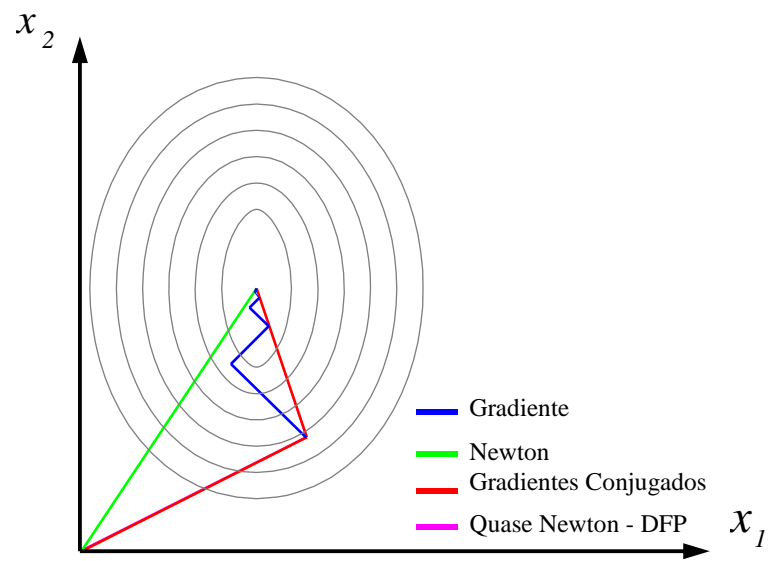


Figura A.4.2 - Trajetória da aproximação da solução de cada um dos métodos