

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR ALBERTO LUIZ
SERPA E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 08 / 8 . 91.

Francisco

ORIENTADOR

Otimização de Malhas de Elementos Finitos pelo Método da Relocação dos Nós na Elasticidade Linear

17/91

Otimização de Malhas de Elementos Finitos pelo Método da
Relocação dos Nós na Elasticidade Linear

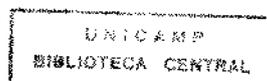
por

Alberto Luiz Serpa

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Agosto de 1991



BR.911.0074

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP
Faculdade de Engenharia Mecânica - FEM
Departamento de Mecânica Computacional - DMC

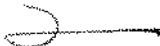
Dissertação de Mestrado

Otimização de Malhas de Elementos Finitos pelo Método da
Relocação dos Nós na Elasticidade Linear

Autor: Alberto Luiz Serpa

Orientador: Prof. Dr. Fernando Iguti †

Aprovado por

Fernando 

Prof. Dr. Fernando Iguti, Presidente

Euclides 

Prof. Dr. Euclides de Mesquita Neto, Membro

Paulo

Prof. Dr. Paulo Rizzi, Membro

Carlos Roberto 

Prof. Dr. Carlos Roberto Ribeiro, Suplente

Campinas, 08 de Agosto de 1991

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Professor Dr. Fernando Iguti, pelo seu interesse, sua atenção e seu suporte durante todas as fases deste trabalho de mestrado.

Agradeço também aos Professores Raul A. Feijó e Vinícius F. Arcaro pelas discussões e sugestões que em muito contribuíram para este trabalho.

Ao amigo Janito Vaqueiro Ferreira pelo acompanhamento na fase de acoplamento dos programas desenvolvidos com o programa ANAFIN de elementos finitos, pelo uso de seus programas para visualização gráfica dos resultados, e pelo constante incentivo.

Ao Departamento de Mecânica Computacional da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP por ter cedido todo apoio necessário ao bom desenvolvimento do trabalho.

Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP, pela atenção e seriedade no seu acompanhamento e pelo apoio financeiro para a realização deste mestrado.

Agradeço também à Equipamentos Clark Ltda pelo incentivo na fase final deste trabalho.

Alberto Luiz Serpa

Abstract

An r -method (nodal relocation method) to optimize finite element meshes in linear elasticity problems is presented in this work. The r -method consists in obtaining an adjusted position of the mesh nodes, in order to find better results related to the discretization errors.

The method is viewed here as a resolution scheme of an optimization problem, where the objective function is the total potential energy of the discretized structure. Equality and inequality constraints are present, and the optimization main variables are the nodal coordinates, because the optimization process is carried out iteratively in two steps: minimization related to the nodal displacements (standard finite element solution) and optimization related to the nodal coordinates. This optimization procedure is done by using the *Augmented Lagrangian Method* in two distinct ways. One in which the minimization with respect to the nodal displacements (resolution of equilibrium equations) is performed every time that the objective function is calculated, and the other in which the minimization with respect to the displacements is done once in a Lagrangian Augmented iteration. Numerical results and examples are commented.

Resumo

Apresenta-se neste trabalho, o método da “relocação” dos nós (método r) para otimização de malhas de elementos finitos em elasticidade linear. O método r consiste em obter a posição adequada para os nós da malha, no sentido de encontrar melhores resultados relacionados aos erros de discretização.

O método é visto aqui como um problema de otimização, onde a função objetivo é a energia potencial total do sistema discretizado. Restrições de igualdade e de desigualdade são presentes, e as variáveis principais de otimização são as coordenadas nodais, pois a minimização é feita de forma iterativa em dois passos: minimização com relação aos deslocamentos (solução padrão de elementos finitos) e otimização relacionada às coordenadas nodais. O processo de otimização é feito usando o Método do Lagrangeano Aumentado em duas formas distintas. Uma na qual a minimização com relação aos deslocamentos (resolução das equações de equilíbrio) é feita sempre que a função objetivo é calculada, e a outra na qual a minimização com respeito aos deslocamentos é feita apenas a cada iteração do Lagrangeano Aumentado. Resultados numéricos e exemplos são comentados.

Conteúdo

Agradecimentos	3
Abstract	4
Resumo	5
1 Introdução	14
1.1 Discussão inicial	14
1.2 Trabalhos relacionados	16
1.3 O método τ para otimização de malhas	18
1.4 Objetivos e organização deste trabalho	23
2 O método do Lagrangeano Aumentado para otimização com restrições	25
2.1 Introdução	25
2.2 Condições de Kuhn-Tucker associadas a um problema padrão	26
2.3 A função Lagrangeana	27
2.4 A função penalizada (base do método de penalidades)	27
2.5 O Lagrangeano Aumentado	29

2.6	O algoritmo do método Lagrangeano Aumentado	33
2.7	Alguns exemplos para verificação do comportamento do método do Lagrangeano Aumentado	34
2.7.1	Exemplo 1	34
2.7.2	Exemplo 2	35
2.8	Comentários e conclusões sobre o método do Lagrangeano Aumentado	36
3	A função objetivo, restrições e gradientes	37
3.1	Introdução	37
3.2	Considerações sobre a energia potencial total (função objetivo do método r)	38
3.3	Desenvolvimento matemático para o cálculo de Π e do respectivo gradiente com relação às coordenadas nodais	38
3.3.1	Cálculo de $\frac{\partial U}{\partial x_i^n}$	41
3.3.2	Cálculo de $\frac{\partial W}{\partial x_i^n}$	49
3.4	Particularização de Π e de seu gradiente no caso bidimensional	54
3.4.1	Energia de deformação no estado plano e seu gradiente	54
3.4.2	Potencial das cargas aplicadas e seu gradiente no estado plano de tensões	57
3.5	O tratamento da restrições e seus gradientes	58
3.6	Considerações sobre o modelamento	62
4	O método r e seu acoplamento com o método do Lagrangeano Aumentado	64
4.1	Introdução	64

4.2	O algoritmo “estado de equilíbrio semi-congelado, sc”	65
4.3	O algoritmo “estado de equilíbrio sempre-atualizado, sa”	67
4.4	Comentários sobre estes algoritmos	68
5	Resultados numéricos e exemplos	71
5.1	Introdução	71
5.2	Exemplos baseados no caso de uma placa com furo, estado plano de tensões	71
5.2.1	Exemplo para comparação dos algoritmos “sc” e “sa”	72
5.2.2	Exemplo que ilustra uma variação no ponto de partida	75
5.2.3	Exemplos para comparação com os resultados da referência [16]	76
5.2.4	Exemplo de falha por excessiva distorção dos elementos	80
5.2.5	Exemplos adicionais baseados na placa com furo	81
5.3	Exemplo de aplicação na mecânica de fratura, estado plano de deformações	86
5.4	Comentários	90
6	Conclusões	91
	Bibliografia	94
A	Aspectos práticos do método Quase-Newton para otimização irrestrita	110
A.1	Introdução	110
A.2	Equação básica do método Quase-Newton	110
A.3	O algoritmo Quase-Newton	113

A.4	As fórmulas para a matriz $C^{(K)}$ de correção	114
A.4.1	Fórmula DFP	115
A.4.2	Fórmula BFGS	115
A.4.3	Combinação das fórmulas DFP e BFGS	116
A.5	Comentários sobre aspectos computacionais do método Q.N.	117
A.6	Conclusões sobre o método Quase-Newton	118

Lista de Figuras

3.1	Elemento de superfície de um corpo sólido	50
3.2	Sistema local de coordenadas no estado plano	55
3.3	Esforços possíveis de atuar no elemento de placa	57
3.4	Exemplo para ilustrar os tipos de restrições.	59
5.1	Representação de 1/4 de placa simétrico, carregamento uniaxial. . . .	72
5.2	Malha inicial para comparação dos esquemas “sc” e “sa”, carregamento biaxial.	73
5.3	Malha inicial perturbada, carregamento biaxial.	76
5.4	Malha inicial: $\Pi = -6.5546E - 5 J, \sigma_y = 2755.91 Pa, E_\sigma = 12.09\%$.	78
5.5	Malha otimizada: $\Pi = -6.6177E - 5 J, \sigma_y = 2957.28 Pa, E_\sigma = 5.67\%$.	78
5.6	Malha inicial: $\Pi = -6.6157E - 5 J, \sigma_y = 2903.67 Pa, E_\sigma = 7.34\%$. .	79
5.7	Malha otimizada: $\Pi = -6.6363E - 5 J, \sigma_y = 3131.16 Pa, E_\sigma = 0.12\%$.	79
5.8	Malha com excessiva distorção de elementos.	80
5.9	Malha inicial: $\Pi = -135.653 J, \sigma_{max} = 1733.65 Pa, I_\sigma = 44.70\%$. . .	82
5.10	Malha otimizada: $\Pi = -136.927 J, \sigma_{max} = 2004.60 Pa, I_\sigma = 36.06\%$.	82
5.11	Malha inicial: $\Pi = -136.857 J, \sigma_{max} = 2110.87 Pa, I_\sigma = 32.67\%$. . .	83
5.12	Malha otimizada: $\Pi = -137.698 J, \sigma_{max} = 2701.30 Pa, I_\sigma = 13.83\%$.	83

5.13	Malha inicial: $\Pi = -137.488 J$, $\sigma_{max} = 2523.54 Pa$, $I_\sigma = 19.50\%$. . .	84
5.14	Malha otimizada: $\Pi = -137.887 J$, $\sigma_{max} = 2887.60 Pa$, $I_\sigma = 7.89\%$.	84
5.15	Malha inicial: $\Pi = -137.874 J$, $\sigma_{max} = 2592.30 Pa$, $I_\sigma = 17.31\%$. . .	85
5.16	Malha otimizada: $\Pi = -138.108 J$, $\sigma_{max} = 2974.00 Pa$, $I_\sigma = 5.13\%$.	85
5.17	Placa com trinca na lateral.	86
5.18	Representação de 1/2 placa simétrica, carregamento uniaxial.	87
5.19	Malha inicial: $\Pi = -6.2364E - 8 J$, $K_I = 419.27 N/m^{1.5}$, $E_K =$ 21.20%	89
5.20	Malha final: $\Pi = -6.5945E - 8 J$, $K_I = 499.47 N/m^{1.5}$, $E_K = 6.11\%$	89

Lista de Tabelas

2.1	Resultados do método Lagrangeano Aumentado no Exemplo 1	35
2.2	Resultados do método Lagrangeano Aumentado no Exemplo 2	35
5.1	Comparação entre esquemas “sc” e “sa”.	74
5.2	Resultados de malha com perturbação inicial.	75
5.3	Comparação com a referência [16], placa com furo.	77
5.4	Comparação com a referência [114], placa com trinca.	88
A.1	Comparação de alguns métodos de otimização irrestrita	118

Capítulo 1

Introdução

1.1 Discussão inicial

Apresenta-se neste trabalho o método da “relocação” dos nós (método r) para otimização de malhas de discretização estrutural para o Método dos Elementos Finitos (MEF) no caso de elasticidade linear bidimensional. O problema da otimização de malhas pelo método r é abordado neste trabalho como um problema de programação matemática (programação não linear).

Embora a aplicação específica refira-se ao MEF, a mesma formulação estudada pode ser utilizada também com o Método das Diferenças Finitas e com o Método dos Elementos de Contorno.

Este trabalho se insere no contexto da Engenharia Assistida por Computador (CAE), onde, na área de Mecânica Estrutural, o MEF tem papel destacado e onde a tendência atual é de que a análise estrutural seja realizada o mais automaticamente possível. Nesse sentido, tem-se verificado um grande desenvolvimento de teorias relacionadas com *Métodos Adaptativos* de análise estrutural. Essas técnicas *adaptativas* procuram integrar de forma iterativa as três fases principais de análise: pré-processamento de dados, análise propriamente dita e pós-processamento dos resultados obtidos.

Os programas de pré-processamento envolvem a geração de modelos geométricos

dos componentes estruturais a serem analisados utilizando as técnicas de Desenho Assistido por Computador, modelamento sólido, etc. e da geração de malhas de discretização estrutural. Estes programas de pré-processamento geram uma quantidade enorme de dados que serão posteriormente utilizados no programa de análise por elementos finitos.

O pós-processamento é normalmente composto de programas que processam os resultados numéricos obtidos e os apresentam em forma gráfica, permitindo ao analista uma avaliação mais rápida da qualidade dos resultados obtidos.

A integração das três fases de análise se processa de maneira iterativa. Após o primeiro ciclo de análise, o programa de pós-processamento deve incorporar um critério matemático que torne possível indicar as regiões da estrutura onde a malha de discretização deve ser melhorada. Novos dados são então gerados pelo programa de pré-processamento e assim por diante, até que, por algum critério matemático de convergência contido no programa de pós-processamento o ciclo iterativo é encerrado.

A formulação matemática do problema de obtenção de malhas ótimas quase nunca é única, já que, diferentes critérios de "otimalidade" podem ser usados. Como exemplo pode-se citar a situação em que se utiliza como critério, a minimização dos erros de discretização da malha de elementos finitos. Diferentes medidas de erros podem ser utilizadas, acarretando diferentes malhas ótimas.

Existem três tipos principais de métodos adaptativos para otimização de malhas no contexto do método dos elementos finitos: o método r (relocação dos nós), o método h (refinamento dos elementos da malha) e o método p (refinamento dos campos de interpolação dos elementos).

No refinamento do tipo h , o erro da aproximação por elementos finitos é reduzido por meio da subdivisão dos elementos da malha em elementos menores naquelas regiões onde o erro de discretização é superior a um valor pré-estabelecido. Uma das limitações desta formulação é que, no caso em que a solução possui uma distribuição de erro bastante não uniforme, um excessivo número de graus de liberdade devem

ser concentrados nas regiões de erros maiores.

No refinamento do tipo p , o erro estimado em um elemento da malha é reduzido pelo acréscimo da ordem do polinômio interpolador do elemento, permanecendo inalterada a geometria da malha. A principal vantagem do refinamento do tipo p é que a taxa de convergência é considerada melhor do que a taxa de convergência do refinamento do tipo h .

Os métodos h e p requerem a utilização de estimadores de erros e exigem um tratamento especial da estrutura de dados, [25,26], que torne possível incorporar os novos graus de liberdade criados no refinamento p , e os pontos nodais adicionais incorporados no refinamento do tipo h e/ou p .

O refinamento do tipo r é apresentado em maior detalhe na seção 1.3.

1.2 Trabalhos relacionados

Os métodos adaptativos de malhas (refinamentos r , p e h) vem sendo utilizados em praticamente todos os campos de aplicação do MEF, tanto em análises lineares como não lineares. A combinação destes métodos, isto é, refinamentos $h - p$, $r - p$ e $r - h$ atuando de forma conjunta também tem sido encontradas em muitas aplicações do MEF, podendo ser utilizada até mesmo uma combinação do tipo $r - p - h$.

A maioria das formulações adaptativas, em especial os refinamentos p e h envolvem a utilização de estimadores de erros para que sejam identificadas as regiões onde deve ser efetuado o refinamento. Na linha de trabalhos relacionados aos estimadores de erros é possível citar alguns autores que apresentam um número bastante grande de trabalhos. Autores tais como Babuska, Rheinboldt, Carey, Szabo, Gago, Kelly, Kikuchi, Melosh, Zienkiewicz, Miller e outros, possuem um vasto estudo relacionado ao cálculo e estimativas de erros sob os mais variados pontos de vista (enfoques puramente matemáticos, enfoques mais práticos, etc.) e não somente no caso de malhas de elementos finitos, mas também em malhas de diferenças finitas e de elementos de

contorno.

A presença dos métodos adaptativos em elementos de contorno é mostrada, por exemplo, no trabalho de Rank, [100], onde são apresentados exemplos dos refinamentos p e h e de uma combinação $h - p$, dando uma ênfase à melhor convergência obtida na presença de singularidades. Leal e Mota Soares, [82], apresentam o refinamento da malha de elementos de contorno no caso de elasticidade bidimensional, e os resultados destinam-se à otimização de forma. No trabalho de Carey e Kennon, [24], aplicam-se métodos adaptativos em malhas de elementos de contorno no caso de problemas potenciais. O estudo do comportamento de singularidades é apresentado por Han e Olson, [56].

Os métodos adaptativos tem estado presentes em muitos trabalhos relacionados à simulação de processos de conformação plástica dos metais usando o MEF. Trata-se de uma aplicação não linear, onde estão presentes grandes deformações (regime elasto-plástico). Alguns trabalhos relacionados a esta aplicação encontram-se nas referências [14,32,33,129,132].

Relacionados à aplicação do MEF ao estudo de escoamento de fluidos (linear ou não linear), os métodos adaptativos tem sido utilizados com bastante frequência. Aplicações relacionadas a escoamento compressível, dinâmica dos fluidos (regime transiente e regime permanente), escoamento multifásico, etc. podem ser encontradas em [22,35,36,37,38,44,84,85,86,95].

É possível citar também a presença dos métodos adaptativos em outras aplicações do MEF, como por exemplo na aerodinâmica [113], escoamento em meios porosos [102], torção [83], problemas de contato [79], difusão-convecção [53], campo eletromagnético [51], mecânica da fratura, [115].

Na linha estrutural (análises estática e dinâmica de estruturas) também são encontrados trabalhos relacionados ao uso de métodos adaptativos. Em [34,62,66,107,112] são apresentados aspectos relacionados à elasticidade, principalmente às situações não lineares. O refinamento h é usado em [68] no caso de um problema de análise

dinâmica (resposta em frequência). Outros trabalhos relacionados ao refinamento do tipo r na elasticidade são citados na seção 1.3.

No sentido de um resultado posterior à otimização de malhas, encontram-se trabalhos visando a otimização da forma geométrica de componentes. É o caso dos trabalhos [76,77,130], onde conceitos de métodos adaptativos são utilizados.

A bibliografia desta dissertação apresenta uma série de trabalhos mostrando muitas outras aplicações dos métodos adaptativos de malhas. Verifica-se o grande estudo que vem sendo feito no sentido de encontrar esquemas de refinamentos que levem a soluções melhores.

1.3 O método r para otimização de malhas

No refinamento do tipo r , o erro é reduzido por meio de uma relocação conveniente dos nós da malha. O método r tem como grande vantagem a não alteração do número de graus de liberdade da malha, não sendo necessário nenhum esquema especial para a administração da estrutura de dados (tanto com relação ao problema em estudo, como com relação ao programa de elementos finitos). A colocação dos nós em posições adequadas procura tornar mais homogênea a distribuição do erro na malha, melhorando os resultados obtidos. Um dos problemas encontrados nesta formulação é o mau condicionamento numérico causado pela distorção excessiva dos elementos, que pode muitas vezes causar a falha do método. Além disso, as funções envolvidas nesta formulação são geralmente não lineares, o que dificulta em muito os esquemas de solução.

A adaptação do método r a um programa de elementos finitos padrão não trás complicações quanto à estrutura de dados, representando apenas um bloco adicional ao programa, que pode ser utilizado tanto para procurar uma melhor solução como para verificar se cálculos anteriormente efetuados podem ou não ser refinados, e se este refinamento é compensador.

O método r tem sido visto basicamente por dois enfoques. O primeiro é puramente geométrico (topológico) onde os nós são relocados de modo a tornar os elementos mais regulares (menos distorcidos) evitando problemas de mau condicionamento numérico nos cálculos efetuados pelo MEF. Um exemplo deste tipo de enfoque é a relocação dos nós em uma malha formada por elementos triangulares (elementos simplex) onde se procura encontrar triângulos equiláteros. Alguns exemplos do uso de critérios topológicos podem ser encontrados nas referências [60] (metodologia baseada na densidade de graus de liberdade e na densidade da energia de deformação) e [40,41] (os nós são relocados via a redução do erro associado à interpolação. O tamanho do elemento é a variável de otimização - comprimento e área). O segundo ponto de vista para aplicação do método r (ponto de vista analítico) é aquele que utiliza os princípios físicos da mecânica. No caso da elasticidade, o princípio utilizado é o princípio da mínima energia potencial total, princípio este que leva ao estado de equilíbrio. Em outros campos de aplicação do MEF, tais como transferência de calor, escoamento de fluidos, etc. são encontrados funcionais equivalentes à energia potencial total que representam também um princípio físico associado, [39].

Na linha de trabalhos considerados analíticos pode-se citar as referências [89,119], onde a relocação dos nós é feita através da minimização da energia potencial total associada a um campo de deformação aplicado ao caso de barras e de vigas. Em [29,90] é utilizada a minimização da energia potencial em duas etapas, primeiro com relação aos deslocamentos e depois com relação às coordenadas nodais. Felippa, [46,47], em seus trabalhos apresenta o método r visto como um problema de programação matemática e são comentados alguns algoritmos de minimização. Alguns outros trabalhos usam a metodologia de minimizar a energia potencial total para encontrar a malha ótima, tais como os trabalhos [16,114,115] (elasticidade linear, gradiente da energia potencial total com relação às coordenadas nodais, elementos finitos isoparamétricos), [90,122,123] e outros.

Buscando uma maior generalidade e maior correlação com os princípios físicos, a formulação adotada neste trabalho é do tipo analítico, e consiste na minimização da

energia potencial total.

A energia potencial total do sistema discretizado (malha de elementos finitos) é função tanto dos deslocamentos nodais como das coordenadas nodais da malha. O MEF usualmente aplica o princípio da mínima energia potencial com relação a apenas os deslocamentos (deformações), caracterizando as equações de equilíbrio. Contudo, a localização dos nós também pode ser levada em consideração de modo a minimizar a energia potencial total. Isto é, minimizar a energia potencial total tanto com relação às coordenadas nodais, como com relação aos deslocamentos dos nós. Esta minimização pode ser abordada de duas formas:

- minimizar a energia potencial total com relação aos deslocamentos e às coordenadas nodais simultaneamente, obtendo diretamente a solução para os deslocamentos e também a configuração da malha ótima. Esta forma é abordada na referência [28], e conhecida como forma $x-u$.
- minimizar a energia potencial total com relação a apenas as coordenadas nodais, tendo sido satisfeita a equação de equilíbrio fornecida por uma solução padrão do método dos elementos finitos a cada passo. Esta forma é abordada nas referências [16,115], e é conhecida como forma x .

A forma $x-u$ de encarar o problema utiliza apenas conceitos de otimização, sendo necessário definir a função objetivo, restrições associadas aos deslocamentos e às coordenadas nodais, e aplicação de algum método de otimização para encontrar a solução ótima. Esta forma parece ser razoavelmente simples no caso de pequenos problemas, onde o número de variáveis (deslocamentos e coordenadas nodais) é relativamente pequeno. Com o aumento da complexidade da malha, o número de variáveis cresce rapidamente tornando difícil a definição das várias funções necessárias aos métodos de otimização. Neste sentido, a cada caso sendo analisado seria necessário formular um novo problema de otimização, o que parece ser pouco prático. A elaboração de um programa computacional por esta formulação exige um trabalho bastante longo no sentido de desenvolver totalmente um novo programa aplicado a sistemas de grande

porte, e que deve possuir certo grau de automatização para definir o problema.

A forma x de resolver o problema possui algumas vantagens em relação à forma $x-u$. A minimização da energia potencial total com relação aos deslocamentos é representada por uma solução padrão de elementos finitos. A minimização da energia potencial total com relação às coordenadas nodais representa um problema de otimização bem menor com relação ao número de variáveis de otimização do que a forma $x-u$. Além disso, toda a estrutura de dados de um programa de elementos finitos existente é disponível e pode ser utilizada. Neste sentido, a forma x estaria aproveitando recursos disponíveis e conhecidos, enriquecendo o pacote de elementos finitos.

Considerando a forma x de solução, o método r de otimização de malhas seria representado pelo seguinte algoritmo geral:

1. Definir uma malha inicial de partida.
2. Análise estática obtendo o estado de equilíbrio (deformações e tensões) usando um programa padrão de elementos finitos.
3. Minimização da energia potencial total com relação às coordenadas nodais, satisfazendo as restrições (forma, geometria) do problema, obtendo uma nova malha (nova configuração).
4. Critérios de parada:
 - energia potencial total não mais varia.
 - variáveis de otimização não mais variam (configuração da malha não mais varia).

Se os critérios de parada estabelecidos são satisfeitos vá para 6.

5. Baseado na nova configuração, volte para o passo 2.
6. Fim. A malha está otimizada.

Considerando que um programa para análise estática por elementos finitos pode estar disponível, o método r consiste basicamente em desenvolver os passos 3 e 4 do algoritmo apresentado.

O passo 3, isto é, a minimização da energia potencial total com relação às coordenadas nodais satisfazendo as restrições do problema é um típico problema de otimização restrita, que pode ser resolvido usando-se dos recursos disponíveis da programação não linear.

A função objetivo é a energia potencial total e as restrições que devem ser impostas podem ser de dois tipos: nós do domínio (nós interiores) não podem mover-se arbitrariamente pois iriam distorcer excessivamente os elementos ou até mesmo, num caso extremo, deixar de pertencer ao domínio, e os nós do contorno devem mover-se de modo a manter o mesmo contorno, de maneira a não alterar a geometria do problema em estudo. Estes dois tipos de restrições caracterizam restrições de desigualdade e de igualdade respectivamente.

Dispondo-se da função objetivo e das restrições associadas é possível usar um algoritmo de otimização restrita e efetuar a minimização com relação às coordenadas nodais (variáveis de otimização).

É importante salientar que tanto a função objetivo (energia potencial total) como as restrições são funções em geral não lineares com relação às coordenadas nodais. Além disso, uma malha relativamente pequena quanto ao número de elementos pode representar um número de variáveis de otimização já bastante grande do ponto de vista da otimização. Neste sentido os métodos de programação não linear e em especial aqueles voltados a sistemas de grande porte (grande número de variáveis de otimização) são mais aconselhados na aplicação ao método r de otimização de malhas.

O algoritmo da forma z apresentado efetua a otimização da energia potencial total tanto com relação aos deslocamentos como com relação às coordenadas nodais. Contudo esta otimização é feita em dois passos, gerando um processo iterativo (numa pri-

meira etapa tem-se uma otimização com relação aos deslocamentos. Posteriormente tem-se uma otimização com relação às coordenadas nodais, e assim sucessivamente). Detalhes deste procedimento e algumas variações são comentados no Capítulo 4 deste trabalho.

Salienta-se que o cálculo da função objetivo, isto é, o cálculo da energia potencial total associada à malha de discretização estrutural é feito usando-se os conceitos de elementos finitos, ou seja, contribuição de cada um dos elementos da malha e cálculo de cada elemento usando as técnicas de integração.

1.4 Objetivos e organização deste trabalho

Este trabalho procura estudar em detalhes o método r visto como um problema de otimização (programação matemática) aplicado ao caso da elasticidade linear bi-dimensional (estado plano de tensões e de deformações). O estudo permite obter conhecimentos tanto de métodos de programação matemática como do MEF.

O enfoque estudado visa a aproveitar as rotinas computacionais de um programa padrão de elementos finitos, tornando o método r uma extensão deste programa. O programa de elementos finitos utilizado é conhecido pelo nome de *ANAFIN*, [109], e está sendo desenvolvido por um grupo de pesquisadores do Departamento de Mecânica Computacional da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP.

Esta dissertação de mestrado é organizada em 6 Capítulos e 1 Apêndice onde procura-se apresentar de uma forma clara todas as etapas estudadas neste mestrado. Uma breve descrição dos capítulos e apêndices é apresentada a seguir.

No Capítulo 2 apresenta-se o Método do Lagrangeano Aumentado para otimização com restrições, que é empregado no trabalho.

No Capítulo 3 são apresentadas as formulações para a definição explícita da energia potencial total (função objetivo) e restrições associadas tanto aos nós interiores como aos nós do contorno. É apresentado também o procedimento seguido para obter de

forma explícita o gradiente da energia potencial total com relação às coordenadas nodais e os gradientes das restrições. Estes gradientes são muito importantes para o método de otimização do Lagrangeano Aumentado, mais especificamente no que se refere ao método Quase-Newton que atua no interior do Lagrangeano Aumentado.

O Capítulo 4 procura apresentar a forma como o método r é acoplado ao método do Lagrangeano Aumentado, sendo enfatizados dois esquemas de solução (dois algoritmos).

O Capítulo 5 apresenta alguns resultados obtidos, sendo comentados os comportamentos destes algoritmos. É neste Capítulo que os resultados numéricos são apresentados e discutidos.

Finalmente, um resumo do trabalho, áreas de pesquisas futuras e as principais conclusões deste estudo são apresentadas no Capítulo 6.

O Apêndice A apresenta os principais aspectos do método Quase-Newton de otimização irrestrita, permitindo ao leitor o entendimento deste método.

Capítulo 2

O método do Lagrangeano Aumentado para otimização com restrições

2.1 Introdução

O método r de otimização de malhas, da maneira como abordado neste trabalho, requer a utilização de um método genérico de otimização com restrições. Por esta generalidade entende-se um método que trabalhe com restrições de igualdade, de desigualdade, e com função objetivo lineares ou não lineares. Tais requisitos são preenchidos pelo método conhecido como *Lagrangeano Aumentado* que o torna bastante adequado ao caso de interesse. É um método que combina conceitos dos métodos de penalidades com métodos duais (lagrangeanos duais), eliminando algumas desvantagens associadas a estes métodos.

O método do Lagrangeano Aumentado resolve o problema restrito através da resolução de sucessivos problemas irrestritos, caracterizando-se pela facilidade de programação (elaboração de programas computacionais).

Alguns pontos do método do Lagrangeano Aumentado, tais como a definição dos parâmetros de penalidade e a atualização dos multiplicadores de Lagrange ainda requerem estudos visando aperfeiçoamentos.

Nos itens seguintes são apresentados conceitos relacionados às condições de otimalidade, método das penalidades, métodos duais e o método do Lagrangeano Aumentado propriamente dito.

Alguns trabalhos relacionados com o método do Lagrangeano Aumentado são apresentados nas referências [19,61,67,97,108,128].

2.2 Condições de Kuhn-Tucker associadas a um problema padrão

Seja o problema (P) de interesse,

$$(P) = \begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.a.} & c_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, l \\ & h_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \dots, m \end{cases} \quad (2.1)$$

onde as funções $f(x)$, $h(x)$ e $c(x)$ são quaisquer (lineares ou não lineares).

As condições de Kuhn-Tucker (K.T.) associadas a este problema são,

$$\begin{aligned} \nabla f(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla h_j(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i \nabla c_i(x) &= 0 \\ \mu_j h_j(x) &= 0 \quad j = 1, \dots, m \\ \mu_j &\geq 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

As condições dadas em (2.2) são condições necessárias para o ponto factível x ser a solução ótima do problema (P).

Um estudo detalhado das condições de K.T. é apresentado em [18].

Nas condições (2.2) λ e μ são os multiplicadores de Lagrange e existe um conjunto x^* , λ^* e μ^* que satisfaz (2.2) representando a solução ótima de (P).

2.3 A função Lagrangeana

A função Lagrangeana associada ao problema (P) é,

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i c_i(x) \quad (2.3)$$

ou usando a notação vetorial,

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \mu^t h(x) - \lambda^t c(x) \quad (2.4)$$

onde λ e μ são os vetores dos multiplicadores de Lagrange e $h(x)$ e $c(x)$ são os vetores das restrições.

Condições equivalentes às condições de K.T. podem ser escritas baseadas na função lagrangeana, isto é, condições necessárias para x ser um ótimo local de (P) é que sejam satisfeitas as condições,

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \mu} \leq 0 \quad e \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 \\ \mu^t h(x) = 0 \quad e \quad \mu^t \geq 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

No caso em que o valor de x tal que $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ seja o mesmo valor que minimiza a função lagrangeana, a condição (2.5) passa a ser uma condição suficiente para x ser a solução ótima de (P).

Observa-se das condições (2.5) a necessidade de se conhecer os multiplicadores de Lagrange associados ao ponto x .

2.4 A função penalizada (base do método de penalidades)

A forma clássica dos métodos de penalidades é adicionar um termo de penalização à função objetivo $f(x)$ quando o ponto x é infactível e obter a solução ótima desta função penalizada por algum método de otimização irrestrita.

Seja a função $p(x)$ (função penalizada) associada ao problema (P) ,

$$p(x) = f(x) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m r_j [h_j(x)]_+^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l r_i (c_i(x))^2 \quad (2.6)$$

onde $[a]_+ = \text{máximo}[0, a]$; r são os parâmetros de penalidade (valores escalares e positivos).

A observação da equação (2.6) mostra que a função $f(x)$ é penalizada toda vez que x é infactível. O tipo quadrático de penalização mostrado é o mais usual.

Os parâmetros de penalidade são associados a cada restrição e seu valor depende da iteração em questão. Observa-se que $x(r)$ tende para x^* à medida que os valores de r tendem para infinito. Salienta-se que aquelas restrições não violadas não são penalizadas, isto é, o parâmetro de penalidade só é aumentado para as restrições violadas.

A escolha adequada dos valores dos parâmetros de penalidade bem como a taxa de crescimento destes é adotada para cada problema particular, e em geral, estes valores só podem ser definidos por meio de testes com o próprio algoritmo.

Um dos problemas mais sérios dos métodos de penalidades é que, à medida que os valores de r crescem o problema torna-se numericamente mal condicionado, dificultando a resolução do problema irrestrito associado. Contudo valores grandes de r tendem a tornar a função $p(x)$ mais convexa, o que pode representar uma vantagem.

Demonstra-se, contudo, que a solução da otimização irrestrita de $p(x)$ pode não representar a solução ótima de (P) , e em geral isto ocorre.

O mínimo da função $p(x)$ deve satisfazer a condição de mínimo irrestrito,

$$\nabla p(x) = \nabla f(x) + \sum_{j=1}^m r_j [h_j(x)]_+ \nabla h_j(x) + \sum_{i=1}^l r_i c_i(x) \nabla c_i(x) = 0 \quad (2.7)$$

Nota-se que para $x = x^*$, $[h_j(x^*)]_+ = 0$ e $c_i(x^*) = 0$, implicando em,

$$\nabla p(x^*) = \nabla f(x^*) + 0 + 0 \quad (2.8)$$

Observa-se em (2.8) que para $x = x^*$, $\nabla p(x^*)$ não é necessariamente nulo, donde conclui-se que o resultado obtido na otimização irrestrita de $p(x)$ não é necessariamente a solução ótima do problema (P) .

Os métodos de penalidades são estudados em detalhes em [18].

2.5 O Lagrangeano Aumentado

O método do Lagrangeano Aumentado pode ser visto como uma extensão da idéia de função penalizada, que reduz a necessidade dos parâmetros de penalidade possuírem valores muito elevados, minimizando assim o problema do mau condicionamento associado aos métodos de penalidades, pois possui a propriedade de que a solução ótima do problema (P) é também a solução de um problema irrestrito associado.

Seja a função $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$ a função lagrangeana aumentada como definida a seguir,

$$\Phi(x, \lambda, \mu, r) = f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i c_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l r_i (c_i(x))^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m r_j [h_j(x)]_+^2 \quad (2.9)$$

O gradiente de Φ com relação a x é,

$$\begin{aligned} \nabla \Phi_x(x, \lambda, \mu, r) = & \nabla f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i \nabla c_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla h_j(x) + \\ & + \sum_{i=1}^l r_i (c_i(x)) \nabla c_i(x) + \sum_{j=1}^m r_j [h_j(x)]_+ \nabla h_j(x) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Seja $x = x^*$ a solução do problema (P) . Logo, $c_i(x^*) = 0$, $[h_j(x^*)]_+ = 0$ e $\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^l \lambda_i \nabla c_i(x^*) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0$, pois deve-se satisfazer as condições de K.T.. Assim, nota-se que para $x = x^*$ tem-se que,

$$\nabla \Phi_x(x^*, \lambda, \mu, r) = 0 \quad (2.11)$$

isto é, a solução do problema restrito (P) é também a solução da otimização irrestrita da função lagrangeana aumentada. Logo, x^* pode ser obtido por meio da otimização irrestrita de $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$.

É possível fazer um tratamento das restrições de desigualdade transformando-as em restrições de igualdade com o auxílio de variáveis de folga e tirar algumas vantagens disso como será mostrado a seguir.

As restrições de desigualdade podem ser transformadas em igualdades do tipo,

$$h_j(x) + z_j = 0 \quad \text{com} \quad z_j \geq 0 \quad (2.12)$$

Reescrevendo a expressão da função Lagrangeana Aumentada usando (2.12) tem-se,

$$\begin{aligned} \Phi(x, \lambda, \mu, r) = & f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i c_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j (h_j(x) + z_j) + \\ & + \sum_{i=1}^l \frac{r_i}{2} (c_i(x))^2 + \sum_{j=1}^m \frac{r_j}{2} (h_j(x) + z_j)^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Como o interesse é encontrar o ótimo da função lagrangeana aumentada, uma otimização direta com relação às variáveis z_j pode ser feita de forma analítica. Logo,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z_j} = 0 \Rightarrow \mu_j + r_j (h_j(x) + z_j) = 0 \quad (2.14)$$

Isolando z_j em (2.14) tem-se,

$$z_j = -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} \quad (2.15)$$

Como z_j representam as variáveis de folga, seu valor ou é zero ou é positivo (respeitando a equação (2.12)). Consequentemente pode-se escrever que,

$$z_j = \max\{0; -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j}\} \quad (2.16)$$

Usando os resultados de (2.16), pode-se escrever os termos em z_j de (2.13), isto é,

$$\mu_j [h_j(x) + z_j] = \begin{cases} \mu_j h_j(x) & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} \leq 0 \quad (z_j = 0) \\ -\frac{\mu_j^2}{r_j} & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} > 0 \quad (z_j = -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j}) \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\frac{r_j}{2} [h_j(x) + z_j]^2 = \begin{cases} \frac{1}{2} r_j (h_j(x))^2 & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} \leq 0 \quad (z_j = 0) \\ \frac{\mu_j^2}{2r_j} & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} > 0 \quad (z_j = -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j}) \end{cases} \quad (2.18)$$

Usando os resultados de (2.17) e (2.18) reescreve-se (2.13) na forma,

$$\begin{aligned} \Phi(x, \lambda, \mu, r) = & f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i c_i(x) + \sum_{i=1}^l \frac{r_i}{2} (c_i(x))^2 + \\ & + \begin{cases} \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x) + \sum_{j=1}^m \frac{r_j}{2} (h_j(x))^2 & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} \leq 0 \\ - \sum_{j=1}^m \frac{\mu_j^2}{2r_j} & \text{se } -h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Seja a notação em que $[a]_-$ representa o mínimo valor entre 0 e a , isto é,

$$[a]_- = \min[0, a] \quad (2.20)$$

é possível reescrever (2.19) na forma,

$$\Phi(x, \lambda, \mu, r) = f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i c_i(x) + \sum_{i=1}^l \frac{r_i}{2} (c_i(x))^2 + \sum_{j=1}^m \frac{r_j}{2} [-h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j}]_-^2 - \sum_{j=1}^m \frac{\mu_j^2}{2r_j} \quad (2.21)$$

A equação (2.21) representa a função lagrangeana aumentada numa forma melhor preparada para ser utilizada computacionalmente.

O resultado obtido em (2.11) assume que as condições de K.T. são satisfeitas. Para que isso seja válido é necessário conhecer os multiplicadores de Lagrange associados ao ponto ótimo, contudo tanto o ponto ótimo como os multiplicadores são desconhecidos. É neste ponto que os conceitos de dualidade tornam-se importantes, pois uma maneira de encontrar ou pelo menos estimar os multiplicadores de Lagrange faz-se necessária.

O método do Lagrangeano Aumentado utiliza, a cada iteração, uma estimativa para os multiplicadores de Lagrange. Existem algumas fórmulas já conhecidas para estimar estes multiplicadores e tais fórmulas têm a propriedade de que a medida que x aproxima-se de x^* , λ e μ aproximam-se de λ^* e μ^* . A fórmula usada neste trabalho é bastante simples e pode ser vista como uma decorrência direta das condições de K.T..

Usando a condição de gradiente nulo (ótimo irrestrito) da função Lagrangeana Aumentada, equação (2.21), tem-se,

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^l (\lambda_i + r_i c_i(x)) \nabla c_i(x) + \sum_{j=1}^m -r_j [-h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j}]_- \nabla h_j(x) = 0 \quad (2.22)$$

Observando a equação (2.22), pode-se dizer que para satisfazer as condições de K.T. os novos multiplicadores seriam,

$$\begin{aligned}\bar{\lambda}_i &= \lambda_i + r_i c_i(x) \\ \bar{\mu}_j &= -r_j \left[-h_j(x) - \frac{\mu_j}{r_j} \right]_-\end{aligned}\tag{2.23}$$

Verifica-se que $-[a]_- = [-a]_+$. Portanto pode-se escrever que,

$$\bar{\mu}_j = [\mu_j + r_j h_j(x)]_+\tag{2.24}$$

As equações (2.23) e (2.24) sugerem uma sequência para atualização dos multiplicadores de Lagrange a cada iteração, e à medida que λ e μ se aproximam de λ^* e μ^* , x se aproxima de x^* .

A sequência natural para atualização dos multiplicadores é do tipo,

$$\begin{aligned}\lambda_i^{(k+1)} &= \lambda_i^{(k)} + r_i c_i(x^{(k)}) \\ \mu_j^{(k+1)} &= [\mu_j^{(k)} + r_j h_j(x^{(k)})]_+\end{aligned}\tag{2.25}$$

Observa-se deste modo que o método do Lagrangeano Aumentado combina os conceitos dos métodos de penalidades (pois a função objetivo é penalizada pela violação das restrições) e métodos duais pela estimativa dos multiplicadores de Lagrange a cada iteração, buscando resolver o problema dual associado. Estes conceitos da forma como apresentados representam uma ferramenta matemática, que se explorada convenientemente, leva a um método bastante geral e versátil.

2.6 O algoritmo do método Lagrangeano Aumentado

Baseado nos conceitos apresentados anteriormente é possível formular um algoritmo padrão para o método do Lagrangeano Aumentado como descrito a seguir.

1. Definir os seguintes valores iniciais:

- ponto de partida: $x^{(0)}$
- multiplicadores de lagrange de partida: $\lambda^{(0)}, \mu^{(0)}$
- parâmetros de penalidade: $r_i^{(0)}, r_j^{(0)}$
- taxa de crescimento do parâmetro de penalidade: t ($t > 1$)

2. $k=0$

3. Montar a função Lagrangeana Aumentada,

$$\begin{aligned}\Phi(x, \lambda, \mu, r) = & f(x) + \sum_{i=1}^l \lambda_i^{(k)} c_i(x) + \sum_{i=1}^l \frac{r_i^{(k)}}{2} (c_i(x))^2 + \\ & + \sum_{j=1}^m \frac{r_j^{(k)}}{2} \left[-h_j(x) - \frac{\mu_j^{(k)}}{r_j^{(k)}} \right]^2 - \sum_{j=1}^m \frac{(\mu_j^{(k)})^2}{2r_j^{(k)}}\end{aligned}$$

4. Minimizar $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$ com relação a x usando algum método de otimização irrestrita, como por exemplo o método Quase-Newton, obtendo o ponto x .

5. $x^{(k)} = x$

6. Se algum critério de parada é satisfeito vá para 9. O critério mais natural é $x^{(k)}$ ser factível e $\|\nabla\Phi\| < \epsilon$.

7. Atualização dos multiplicadores e parâmetros de penalidade segundo algum esquema. No caso adotou-se a forma,

- se $c_i(x^{(k)}) \neq 0$ então faça :

$$r_i^{(k+1)} = r_i^{(k)} \times t$$

$$\lambda_i^{(k+1)} = \lambda_i^{(k)} + r_i^{(k)} c_i(x^{(k)})$$

- se $\mu_j^{(k)} + r_j^{(k)} h_j(x^{(k)}) > 0$ então faça,

$$r_j^{(k+1)} = r_j^{(k)} \times t$$

$$\mu_j^{(k+1)} = \mu_j^{(k)} + r_j^{(k)} h_j(x^{(k)})$$

caso contrário,

$$\mu_j^{(k+1)} = 0$$

8. $k = k + 1$, vá para 3

9. $x^{(k)}$ é solução ótima.

2.7 Alguns exemplos para verificação do comportamento do método do Lagrangeano Aumentado

O método do Lagrangeano Aumentado da forma como descrito anteriormente foi implantado computacionalmente e seu comportamento foi verificado em dois exemplos, [97,128]. Uma breve apresentação destes exemplos é dada a seguir. O critério de parada usado é que $\|\nabla\Phi(x, \lambda, \mu, r)\| \leq \epsilon$ e que as restrições estejam satisfeitas dentro do mesmo valor de ϵ . O número de iterações do Lagrangeano Aumentado é denotado pela variável *niter*.

2.7.1 Exemplo 1

$$\begin{aligned} \min f(x) &= e^{x_1 x_2 x_3 x_4 x_5} \\ \text{s.a.} \quad &x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 - 10 = 0 \\ &x_2 x_3 - 5 x_4 x_5 = 0 \\ &x_1^3 + x_2^3 + 1 = 0 \end{aligned}$$

r_0	t	$niter$	ϵ	Solução
0.01	1.1	19	0.001	(-1.718,1.597,1.826,-0.7637,-0.7637)
0.01	1.1	23	0.0001	(-1.718,1.596,1.827,-0.7636,-0.7636)
0.01	1.1	27	0.00001	(-1.717,1.596,1.827,-0.7636,-0.7636)
0.01	1.5	12	0.00001	(-1.717,1.596,1.827,-0.7636,-0.7636)
0.01	2.0	7	0.00001	(-1.717,1.596,1.827,-0.7636,-0.7636)

Tabela 2.1: Resultados do método Lagrangeano Aumentado no Exemplo 1

Os resultados obtidos são mostrados na tabela 2.1, partindo-se do ponto $(-2, 2, 2, -1, -1)$,

2.7.2 Exemplo 2

$$\begin{aligned}
 \min f(x) &= x_1^2 + x_2^2 + 2x_3^2 + x_4^2 - 5x_1 - 5x_2 - 21x_3 + 7x_4 \\
 \text{s.o.} \quad &x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_1 - x_2 + x_3 - x_4 - 8 \leq 0 \\
 &x_1^2 - 2x_2^2 + x_3^2 + 2x_4^2 - x_1 - x_4 - 10 \leq 0 \\
 &2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 2x_1 - x_2 - x_4 - 5 \leq 0
 \end{aligned}$$

r_0	t	$niter$	ϵ	Solução
0.01	1.1	61	0.001	(2.9249E-3,1.001,2.001,-0.9914)
0.01	1.1	73	0.0001	(8.4725E-4,1.000,2.000,-0.9974)
0.01	1.1	85	0.00001	(2.4175E-4,1.000,2.000,-0.9993)
0.01	1.5	25	0.00001	(3.9192E-4,1.000,2.000,-0.9988)
0.01	2.0	16	0.00001	(1.2863E-3,1.000,2.000,-0.9961)

Tabela 2.2: Resultados do método Lagrangeano Aumentado no Exemplo 2

Os resultados obtidos são mostrados na tabela 2.2, partindo-se do ponto $(0, 0, 0, 0)$,

2.8 Comentários e conclusões sobre o método do Lagrangeano Aumentado

Os resultados anteriores mostram o comportamento bastante geral do método do Lagrangeano Aumentado, aplicando-se a funções não lineares e com restrições tanto de igualdade como de desigualdade. O desempenho encontrado é considerado satisfatório face às facilidades de implementação computacional e generalidade do método.

Salienta-se, contudo, a importância em adotar valores adequados para os fatores de penalização (r_0 e t), pois estes têm uma influência direta no comportamento do método.

Outro aspecto de interesse é com relação aos critérios de parada. Um critério do tipo usado nos exemplos anteriores, isto é, $\|\nabla\Phi(x, \lambda, \mu, r)\| \leq \epsilon$ e restrições satisfeitas dentro do mesmo valor de ϵ pode não ser adequado em função de que as restrições possuem escalas diferentes entre si, e também entre a norma do gradiente. Consequentemente, o procedimento mais adequado seria definir critérios de parada independentes para $\|\nabla\Phi(x, \lambda, \mu, r)\|$ e para cada uma das restrições, já que cada um deles possui um significado "físico" diferente. A utilização de um único parâmetro para critério de parada pode comprometer o comportamento do método.

Capítulo 3

A função objetivo, restrições e gradientes

3.1 Introdução

Os métodos de otimização em geral caracterizam-se pelo tipo de informação que requerem no seu algoritmo. Como descrito no Capítulo 2, o método do Lagrangeano Aumentado resolve um problema restrito através de sucessivos problemas irrestritos. É importante diferenciar aqui a função objetivo do problema restrito (energia potencial total) da função objetivo do problema irrestrito equivalente (função Lagrangeana Aumentada).

Adotou-se o método Quase-Newton (Apêndice A) para a otimização irrestrita, que exige o cálculo da função objetivo e de seu gradiente. Salienta-se que a função objetivo vista pelo método Quase-Newton é a função Lagrangeana Aumentada. Consequentemente, o valor desta e do seu gradiente devem ser calculados, sendo necessários os gradientes da energia potencial total e das equações das restrições associadas.

Apresentam-se neste Capítulo as expressões para o cálculo da energia potencial total e do gradiente desta com relação às coordenadas nodais (variáveis de otimização) de uma malha de elementos finitos. O desenvolvimento é feito para elementos finitos isoparamétricos usados em problemas de elasticidade linear, sendo a generalização

para outros tipos de problemas (transmissão de calor, escoamento potencial de fluidos, torção de barras prismáticas, campo magnético, problemas não lineares, etc) uma simples extensão deste caso. Apresenta-se também o tratamento dado às restrições do problema, bem como aos gradientes destas restrições.

3.2 Considerações sobre a energia potencial total (função objetivo do método r)

A energia potencial total, Π , é um escalar que possui a propriedade de ser estacionário para a solução de um problema de equilíbrio (princípio da mínima energia potencial total), e de um modo geral depende na solução tanto do estado de deformação do corpo como da geometria deste.

O valor de Π na solução exata é desconhecido, mas é menor que o valor obtido pela solução de elementos finitos do tipo deslocamento. Neste sentido, deseja-se minimizar Π o quanto possível, minimizando assim o erro da solução (conseguindo-se conseqüentemente melhores resultados).

O problema de minimizar Π é um problema não linear (programação não linear) onde o gradiente de Π será de grande importância para vários métodos de minimização conhecidos.

3.3 Desenvolvimento matemático para o cálculo de Π e do respectivo gradiente com relação às coordenadas nodais

A energia potencial total de um sistema discretizado (malha de elementos finitos) depende tanto dos deslocamentos nodais (u_i^n) como das coordenadas nodais (x_i^n), isto é, tanto do estado de deformação como das características geométricas da malha. No caso, u_i^n refere-se ao deslocamento do nó n na direção i e x_i^n refere-se à coordenada i do nó n .

Neste trabalho utiliza-se a notação tensorial (indicial, usando-se também o opera-

dor de permutação - tensor alternante), já bem conhecida em elasticidade, [30,120].

Matematicamente escreve-se que,

$$\Pi = \Pi(u_i^n, x_i^n) \quad (3.1)$$

A energia potencial total para um sistema discretizado no caso de elasticidade linear é,

$$\Pi = \frac{1}{2} u^t K u - R^t u \quad (3.2)$$

onde u é o vetor deslocamento, K a matriz de rigidez e R o vetor das forças externas nodais equivalentes.

O vetor R e a matriz K dependem apenas das coordenadas nodais dos elementos. Logo, $K = K(x_i^n)$ e $R = R(x_i^n)$. Os deslocamentos são também função das coordenadas, $u_i^n = u_i^n(x_i^n)$. O gradiente de Π com relação às coordenadas é dado pela derivada da equação (3.2),

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n} = \left[\frac{1}{2} u^t \frac{\partial K}{\partial x_i^n} u - \frac{\partial R^t}{\partial x_i^n} u \right] + [(K u - R)^t \frac{\partial u}{\partial x_i^n}] \quad (3.3)$$

As soluções fornecidas por programas de elementos finitos clássicos utilizam a equação de equilíbrio,

$$K u - R = 0 \quad (3.4)$$

Adotando a utilização de uma solução de estado de equilíbrio (solução de um programa padrão de elementos finitos) é possível escrever,

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n} = \frac{1}{2} u^t \frac{\partial K}{\partial x_i^n} u - \frac{\partial R^t}{\partial x_i^n} u \quad (3.5)$$

Observa-se de (3.5) que tendo sido satisfeito o equilíbrio, equação (3.4), os deslocamentos, u , podem ser considerados independentes das coordenadas nodais, x .

Pode-se dizer que o gradiente de Π com relação às coordenadas nodais, satisfazendo também a equação de equilíbrio (3.4), determinam as condições de interesse para o problema de minimização. É interessante notar que a condição global de gradiente

nulo (ponto de mínimo),

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n} = 0 \quad e \quad \frac{\partial \Pi}{\partial u_i^n} = 0 \quad (3.6)$$

representa a mesma situação em que,

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n} = 0 \quad e \quad Ku = R \quad (3.7)$$

As equações (3.7) representam uma redução na dimensão do problema de minimização (no caso, é feita apenas uma minimização com relação a x_i^n), contudo é necessário resolver a cada etapa o sistema de equações $Ku = R$ (elementos finitos padrão). Esta forma de encarar o problema não é a única. A minimização pode ser direta e simultânea com relação a x_i^n e u_i^n , [28], mas este procedimento não aproveita a existência de um programa padrão de elementos finitos. Estuda-se, neste trabalho, a abordagem em que o gradiente de Π com relação às coordenadas nodais, $\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n}$, é obtido utilizando resultados de uma pré-análise feita com um programa de elementos finitos.

A energia potencial total é definida de forma mais geral como sendo,

$$\Pi = U - W \quad (3.8)$$

onde para um problema linear,

$$U = \frac{1}{2} \int_V \tau_{kl} \epsilon_{kl} dV \quad (3.9)$$

é a energia de deformação e

$$W = R_k^p u_k^p + \int_S f_k^S u_k dS + \int_V f_k^B u_k dV \quad (3.10)$$

é o potencial das cargas aplicadas, subdividido em,

$R_k^p u_k^p$: trabalho das forças concentradas no nó p .

$\int_S f_k^S u_k dS$: trabalho das forças de superfície.

$\int_V f_k^B u_k dV$: trabalho das forças de corpo.

Na equação (3.9) tem-se que τ_{kl} representa o tensor de tensão e ϵ_{kl} o tensor de deformação.

No caso de um sistema discretizado, a energia de deformação e o potencial das cargas aplicadas são dados pela contribuição de cada um dos elementos. Logo,

$$U = \sum_{elem} U^{(m)} = \sum_{elem} \frac{1}{2} \int_V \tau_{kl} \varepsilon_{kl} dV \quad (3.11)$$

$$W = \sum_{elem} W^{(m)} = R_k^p u_k^p + \sum_{elem} \int_S f_k^S u_k dS + \sum_{elem} \int_V f_k^V u_k dV \quad (3.12)$$

O gradiente de Π (como definido na equação (3.8)), é dado por,

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i^n} = \frac{\partial U}{\partial x_i^n} - \frac{\partial W}{\partial x_i^n} \quad (3.13)$$

A seguir são escritos de forma explícita cada um dos termos da equação (3.13) para o caso de um elemento finito tridimensional isoparamétrico, usando as hipóteses de elasticidade linear.

3.3.1 Cálculo de $\frac{\partial U}{\partial x_i^n}$

Derivando a equação (3.11) obtém-se,

$$\frac{\partial U}{\partial x_i^n} = \frac{\partial}{\partial x_i^n} \left[\sum_{elem} \int_V \frac{1}{2} \tau_{kl} \varepsilon_{kl} dV \right] = \sum_{elem} \left[\frac{\partial}{\partial x_i^n} \left(\frac{1}{2} \int_V \tau_{kl} \varepsilon_{kl} dV \right) \right] \quad (3.14)$$

A energia de deformação de um elemento isoparamétrico pode ser escrita como,

$$U^{(m)} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \tau_{kl} \varepsilon_{kl} |J| dr_1 dr_2 dr_3 \quad (3.15)$$

onde $|J|$ é o determinante da matriz jacobiana e r_1 , r_2 e r_3 são as coordenadas locais do elemento isoparamétrico.

Pode-se escrever que,

$$\tau_{kl} = C_{klpq} \varepsilon_{pq} \quad e \quad \tau_{kl} \varepsilon_{kl} = C_{klpq} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{pq} \quad (3.16)$$

onde C_{klpq} é um tensor constitutivo.

Sabe-se também que,

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} (u_{k,l} + u_{l,k}) \quad e \quad C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{jilk} \quad (3.17)$$

Portanto é possível escrever que,

$$\tau_{kl}\varepsilon_{kl} = C_{klpq}u_{k,l}u_{p,q} \quad (3.18)$$

Reescrevendo a equação (3.15) juntamente com a equação (3.18),

$$U^{(m)} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} C_{klpq}\varepsilon_{kl}\varepsilon_{pq}|J|dr_1dr_2dr_3 \quad (3.19)$$

Logo,

$$\frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^n} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{\partial}{\partial x_i^n} (C_{klpq}\varepsilon_{kl}\varepsilon_{pq}|J|) dr_1dr_2dr_3 \quad (3.20)$$

Calculando separadamente a derivada tem-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i^n} (C_{klpq}\varepsilon_{kl}\varepsilon_{pq}|J|) &= C_{klpq} \left(\varepsilon_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{pq}}{\partial x_i^n} |J| + \varepsilon_{pq} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i^n} |J| + \varepsilon_{kl}\varepsilon_{pq} \frac{\partial |J|}{\partial x_i^n} \right) = \\ &= C_{klpq}\varepsilon_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{pq}}{\partial x_i^n} |J| + C_{klpq}\varepsilon_{pq} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i^n} |J| + C_{klpq}\varepsilon_{kl}\varepsilon_{pq} \frac{\partial |J|}{\partial x_i^n} = \\ &= 2\tau_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i^n} |J| + \tau_{kl}\varepsilon_{kl} \frac{\partial |J|}{\partial x_i^n} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Contudo,

$$\tau_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i^n} = \tau_{kl} \frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_i^n} \quad (3.22)$$

Reescrevendo a equação (3.20) usando os resultados de (3.21) e (3.22),

$$\frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^n} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \left(2\tau_{kl} \frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_i^n} |J| + \tau_{kl}\varepsilon_{kl} \frac{\partial |J|}{\partial x_i^n} \right) dr_1dr_2dr_3 \quad (3.23)$$

Logo,

$$\frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^n} = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \left(\tau_{kl} \frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_i^n} |J| + \frac{1}{2} \tau_{kl}\varepsilon_{kl} \frac{\partial |J|}{\partial x_i^n} \right) dr_1dr_2dr_3 \quad (3.24)$$

É necessário calcular $\frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_i^n}$ e $\frac{\partial |J|}{\partial x_i^n}$ de forma explícita para tornar a equação (3.24) mais trabalhável.

Cálculo do termo $\frac{\partial |J|}{\partial x_i}$

Do cálculo diferencial tem-se que,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_k}{\partial r_1} \\ \frac{\partial u_k}{\partial r_2} \\ \frac{\partial u_k}{\partial r_3} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_3}{\partial r_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} & \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_3} & \frac{\partial x_2}{\partial r_3} & \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial u_k}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_k}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \frac{\partial u_k}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_k}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Generalizando (e pensando em termos de operador) tem-se,

$$\frac{\partial(\quad)}{\partial r} = J \frac{\partial(\quad)}{\partial x} \quad (3.26)$$

Reescrevendo a equação (3.25) usando a notação indicial obtém-se,

$$u_{k,r_a} = x_{j,r_a} u_{k,j} \quad (3.27)$$

O determinante da matriz jacobiana ($|J|$) é dado por,

$$\begin{aligned} |J| = & \frac{\partial x_1}{\partial r_1} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \frac{\partial x_3}{\partial r_3} + \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \frac{\partial x_1}{\partial r_3} + \frac{\partial x_1}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_3} \frac{\partial x_3}{\partial r_1} + \\ & - \frac{\partial x_1}{\partial r_3} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \frac{\partial x_3}{\partial r_1} - \frac{\partial x_2}{\partial r_3} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} - \frac{\partial x_1}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{aligned} \quad (3.28)$$

A equação (3.28) pode ser escrita usando o permutador (tensor alternante) ϵ_{abc} ,

$$|J| = \epsilon_{abc} \frac{\partial x_1}{\partial r_a} \frac{\partial x_2}{\partial r_b} \frac{\partial x_3}{\partial r_c} = \epsilon_{abc} x_{1,r_c} x_{2,r_b} x_{3,r_a} \quad (3.29)$$

O interesse é conhecer o comportamento das grandezas no sistema global de coordenadas. Neste sentido reescreve-se a equação (3.26) na forma,

$$\frac{\partial(\quad)}{\partial x} = J^{-1} \frac{\partial(\quad)}{\partial r} \quad (3.30)$$

A equação (3.30) representa a solução de um sistema de equações lineares. A regra de Cramer pode ser utilizada para resolvê-lo. Assim,

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_1} = \frac{\begin{vmatrix} \frac{\partial u_k}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_3}{\partial r_1} \\ \frac{\partial u_k}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} & \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \\ \frac{\partial u_k}{\partial r_3} & \frac{\partial x_2}{\partial r_3} & \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{vmatrix}}{|J|} =$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\partial u_k}{\partial r_1} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \frac{\partial x_3}{\partial r_3} + \frac{\partial u_k}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_3} \frac{\partial x_3}{\partial r_1} + \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \frac{\partial u_k}{\partial r_3} + \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial u_k}{\partial r_3} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \frac{\partial x_3}{\partial r_1} - \frac{\partial x_2}{\partial r_3} \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \frac{\partial u_1}{\partial r_1} - \frac{\partial u_1}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \right) \frac{1}{|J|} = \\
&= (e_{abc} \frac{\partial u_k}{\partial r_a} \frac{\partial x_2}{\partial r_b} \frac{\partial x_3}{\partial r_c}) / |J| \tag{3.31}
\end{aligned}$$

Portanto,

$$u_{k,1} = (e_{abc} u_{k,r_a} x_{2,r_b} x_{3,r_c}) / |J| \tag{3.32}$$

Analogamente, é possível escrever que,

$$\begin{aligned}
u_{k,2} &= (e_{abc} x_{1,r_a} u_{k,r_b} x_{3,r_c}) / |J| \\
u_{k,3} &= (e_{abc} x_{1,r_a} x_{2,r_b} u_{k,r_c}) / |J| \tag{3.33}
\end{aligned}$$

As relações entre coordenadas no sistema local e sistema global no caso de elementos finitos isoparamétricos são dadas por,

$$\begin{aligned}
x_1 &= \sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_1^i \\
x_2 &= \sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_2^i \\
x_3 &= \sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_3^i \tag{3.34}
\end{aligned}$$

onde h_i representa a função de interpolação associada ao nó i do elemento e \bar{m} representa o número de nós do elemento em questão.

As equações (3.34) podem ser reescritas na forma,

$$x_k = \sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_k^i = h_{\bar{m}} x_k^{\bar{m}} \tag{3.35}$$

Efetuada as derivadas de (3.35) com relação a r_1 , r_2 e r_3 é possível escrever que,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x_k}{\partial r_1} &= \frac{\partial}{\partial r_1} \left(\sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_k^i \right) = \sum_{i=1}^{\bar{m}} \frac{\partial h_i}{\partial r_1} x_k^i \\
\frac{\partial x_k}{\partial r_2} &= \frac{\partial}{\partial r_2} \left(\sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_k^i \right) = \sum_{i=1}^{\bar{m}} \frac{\partial h_i}{\partial r_2} x_k^i \tag{3.36}
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial x_k}{\partial r_3} = \frac{\partial}{\partial r_3} \left(\sum_{i=1}^{\bar{m}} h_i x_k^i \right) = \sum_{i=1}^{\bar{m}} \frac{\partial h_i}{\partial r_3} x_k^i$$

Ou ainda,

$$x_{k,r_a} = h_{\bar{m},r_a} x_k^{\bar{m}} \quad (3.37)$$

O interesse aqui é no cálculo do termo $\frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}}$. No caso, os nós de interesse serão apenas aqueles associados ao elemento m em questão. Os nós pertencentes ao elemento m são denotados aqui por \bar{m} . Conseqüentemente, deseja-se calcular a contribuição a nível do elemento, isto é, $\frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}}$.

Combinando (3.37) e (3.29) obtém-se,

$$|J| = e_{abc} (h_{\bar{m},r_a} x_1^{\bar{m}}) x_{2,r_b} x_{3,r_c} \quad (3.38)$$

Assim,

$$\frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}} = e_{abc} h_{\bar{m},r_a} x_{2,r_b} x_{3,r_c} \quad (3.39)$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} &= e_{abc} x_{1,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c} \\ \frac{\partial |J|}{\partial x_3^{\bar{m}}} &= e_{abc} x_{1,r_a} x_{2,r_b} h_{\bar{m},r_c} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Usando o resultado dado em (3.26) escreve-se que,

$$\frac{\partial h_{\bar{m}}}{\partial r_a} = J \frac{\partial h_{\bar{m}}}{\partial x_j} \quad (3.41)$$

Ou ainda,

$$h_{\bar{m},r_a} = x_{j,r_a} h_{\bar{m},j} \quad (3.42)$$

Escrevendo a equação (3.39) e substituindo (3.42) obtém-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}} &= h_{\bar{m},r_1} x_{2,r_2} x_{3,r_3} + h_{\bar{m},r_3} x_{2,r_1} x_{3,r_2} + h_{\bar{m},r_2} x_{2,r_3} x_{3,r_1} \\ &\quad - h_{\bar{m},r_1} x_{2,r_3} x_{3,r_2} - h_{\bar{m},r_2} x_{2,r_1} x_{3,r_3} + h_{\bar{m},r_3} x_{3,r_2} x_{3,r_1} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (x_{j,r_1} h_{\bar{m},j}) x_{2,r_2} x_{3,r_3} + (x_{j,r_3} h_{\bar{m},j}) x_{2,r_1} x_{3,r_2} + (x_{j,r_2} h_{\bar{m},j}) x_{2,r_3} x_{3,r_1} + \\
&\quad - (x_{j,r_2} h_{\bar{m},j}) x_{2,r_1} x_{3,r_3} - (x_{j,r_3} h_{\bar{m},j}) x_{2,r_2} x_{3,r_1} = \\
&= (x_{1,r_1} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_1} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_1} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_2} x_{3,r_3} + \\
&\quad + (x_{1,r_3} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_3} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_3} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_1} x_{3,r_2} + \\
&\quad + (x_{1,r_2} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_2} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_2} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_3} x_{3,r_1} + \\
&\quad - (x_{1,r_1} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_1} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_1} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_1} x_{3,r_2} + \\
&\quad - (x_{1,r_2} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_2} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_2} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_1} x_{3,r_3} + \\
&\quad - (x_{1,r_3} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_3} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_3} h_{\bar{m},3}) x_{2,r_2} x_{3,r_1} \tag{3.43}
\end{aligned}$$

Nota-se que os termos em $h_{\bar{m},2}$ e $h_{\bar{m},3}$ se cancelam, resultando em,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}} &= h_{\bar{m},1} (x_{1,r_1} x_{2,r_2} x_{3,r_3} + x_{1,r_3} x_{2,r_1} x_{3,r_2} + x_{1,r_2} x_{2,r_3} x_{3,r_1} + \\
&\quad - x_{1,r_1} x_{2,r_3} x_{3,r_2} - x_{1,r_2} x_{2,r_1} x_{3,r_3} - x_{1,r_3} x_{2,r_2} x_{3,r_1}) \tag{3.44}
\end{aligned}$$

Com o auxílio de (3.28) conclui-se que,

$$\frac{\partial |J|}{\partial x_1^{\bar{m}}} = h_{\bar{m},1} |J| \tag{3.45}$$

Analogamente é possível afirmar que,

$$\frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} = h_{\bar{m},2} |J| \quad e \quad \frac{\partial |J|}{\partial x_3^{\bar{m}}} = h_{\bar{m},3} |J| \tag{3.46}$$

Escrevendo de forma generalizada,

$$\frac{\partial |J|}{\partial x_i^{\bar{m}}} = h_{\bar{m},i} |J| \tag{3.47}$$

A relação entre $\frac{\partial |J|}{\partial x_i^{\bar{m}}}$ e $\frac{\partial |J|}{\partial x_i^{\bar{n}}}$ é que cada termo $\frac{\partial |J|}{\partial x_i^{\bar{n}}}$ deve levar em conta a contribuição de $\frac{\partial |J|}{\partial x_i^{\bar{m}}}$ no nó correspondente (é um caso semelhante à montagem de matriz de rigidez global, onde associado a cada grau de liberdade é somada a contribuição individual de cada elemento).

Cálculo de $\frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}}$

De forma análoga, considera-se que a derivação deve ser efetuada a nível de um elemento da malha. Logo, deve-se calcular a derivada $\frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}}$.

É importante ressaltar que no caso de elementos finitos isoparamétricos, o campo de deslocamentos é interpolado pelas mesmas funções de interpolação que representam a geometria do corpo. Consequentemente de (3.37),

$$u_{k,r_a} = h_{\bar{m},r_a} u_k^{\bar{m}} \quad (3.48)$$

Calcula-se o termo $\frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}}$ por ser um termo qualquer, sem particularidades, e que irá permitir uma futura generalização.

É sabido que (resultado da equação (3.32)),

$$u_{k,1} = (e_{abc} u_{k,r_a} x_{2,r_b} x_{3,r_c}) / |J| = g |J|^{-1} \quad (3.49)$$

Calculando a derivada de (3.49) tem-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}} &= |J|^{-1} \frac{\partial g}{\partial x_2^{\bar{m}}} - g |J|^{-2} \frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} = \\ &= |J|^{-1} \left(\frac{\partial g}{\partial x_2^{\bar{m}}} - g |J|^{-1} \frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} \right) = \\ &= |J|^{-1} \left(\frac{\partial g}{\partial x_2^{\bar{m}}} - u_{k,1} \frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} \right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Contudo,

$$\frac{\partial g}{\partial x_2^{\bar{m}}} = \frac{\partial}{\partial x_2^{\bar{m}}} [e_{abc} u_{k,r_a} (h_{\bar{m},r_b} x_2^{\bar{m}}) x_{3,r_c}] = e_{abc} u_{k,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c} \quad (3.51)$$

Substituindo (3.51), (3.49) em (3.50) tem-se,

$$\frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}} = |J|^{-1} e_{abc} (u_{k,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c} - u_{k,1} x_{1,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c}) \quad (3.52)$$

Seja,

$$\psi = e_{abc} (u_{k,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c} - u_{k,1} x_{1,r_a} h_{\bar{m},r_b} x_{3,r_c}) \quad (3.53)$$

Escrevendo explicitamente a expressão de ψ tem-se,

$$\begin{aligned}
\psi &= u_{k,r_1} h_{\bar{m},r_2} x_{3,r_3} + u_{k,r_2} h_{\bar{m},r_3} x_{3,r_1} + u_{k,r_3} h_{\bar{m},r_1} x_{3,r_2} + \\
&\quad - u_{k,r_1} h_{\bar{m},r_3} x_{3,r_2} - u_{k,r_2} h_{\bar{m},r_1} x_{3,r_3} - u_{k,r_3} h_{\bar{m},r_2} x_{3,r_1} - u_{k,1} \frac{\partial |J|}{\partial x_2^{\bar{m}}} = \\
&= u_{k,r_1} (x_{1,r_2} h_{\bar{m},1} + x_{2,r_2} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_2} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_3} + \\
&\quad + u_{k,r_2} (x_{1,r_3} h_{\bar{m},1} - x_{2,r_3} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_3} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_1} + \\
&\quad + u_{k,r_3} (x_{1,r_1} h_{\bar{m},1} - x_{2,r_1} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_1} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_2} + \\
&\quad - u_{k,r_1} (x_{1,r_3} h_{\bar{m},1} - x_{2,r_3} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_3} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_2} + \\
&\quad - u_{k,r_2} (x_{1,r_1} h_{\bar{m},1} - x_{2,r_1} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_1} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_3} + \\
&\quad - u_{k,r_3} (x_{1,r_2} h_{\bar{m},1} - x_{2,r_2} h_{\bar{m},2} + x_{3,r_2} h_{\bar{m},3}) x_{3,r_1} - u_{k,1} h_{\bar{m},2} |J| = \\
&= h_{\bar{m},1} (x_{1,r_2} u_{k,r_1} x_{3,r_3} + x_{1,r_3} u_{k,r_2} x_{3,r_1} + x_{1,r_1} u_{k,r_3} x_{3,r_2} + \\
&\quad - x_{1,r_3} u_{k,r_1} x_{3,r_2} - x_{1,r_1} u_{k,r_2} x_{3,r_3} - x_{1,r_2} u_{k,r_3} x_{3,r_1}) + \\
&\quad + h_{\bar{m},2} (u_{k,r_1} x_{2,r_2} x_{3,r_3} + u_{k,r_2} x_{2,r_3} x_{3,r_1} + u_{k,r_3} x_{2,r_1} x_{3,r_2} + \\
&\quad - u_{k,r_1} x_{2,r_3} x_{3,r_2} - u_{k,r_2} x_{2,r_1} x_{3,r_3} - u_{k,r_3} x_{2,r_2} x_{3,r_1}) + \\
&\quad + h_{\bar{m},3} (u_{k,r_1} x_{3,r_2} x_{3,r_3} + u_{k,r_2} x_{3,r_3} x_{3,r_1} + u_{k,r_3} x_{3,r_1} x_{3,r_2} + \\
&\quad - u_{k,r_1} x_{3,r_3} x_{3,r_2} - u_{k,r_2} x_{3,r_1} x_{3,r_3} - u_{k,r_3} x_{3,r_2} x_{3,r_1}) - u_{k,1} h_{\bar{m},2} |J| = \\
&= -h_{\bar{m},1} \epsilon_{abc} x_{1,r_a} u_{k,r_b} x_{3,r_c} + h_{\bar{m},2} \epsilon_{abc} u_{k,r_a} x_{2,r_b} x_{3,r_c} + 0 - u_{k,1} h_{\bar{m},2} |J| = \\
&= -h_{\bar{m},1} u_{k,2} |J| + h_{\bar{m},2} u_{k,1} |J| - u_{k,1} h_{\bar{m},2} |J| \tag{3.54}
\end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\psi = -h_{\bar{m},1} u_{k,2} |J| \tag{3.55}$$

Substituindo (3.55) em (3.52),

$$\frac{\partial u_{k,1}}{\partial x_2^{\bar{m}}} = -|J|^{-1} h_{\bar{m},1} u_{k,2} |J| = -h_{\bar{m},1} u_{k,2} \tag{3.56}$$

Generalizando tem-se,

$$\frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_i^{\bar{m}}} = -h_{\bar{m},l} u_{k,i} \tag{3.57}$$

Voltando à equação (3.24) e usando os resultados dados por (3.47) e (3.57) é possível escrever que,

$$\begin{aligned}\frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^{\bar{m}}} &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} [\tau_{kl}(-u_{k,i} h_{\bar{m},l})|J| + \frac{1}{2} \tau_{kl} \epsilon_{kl} h_{\bar{m},i} |J|] dr_1 dr_2 dr_3 = \\ &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} (\frac{1}{2} \tau_{kl} \epsilon_{kl} h_{\bar{m},i} - \tau_{kl} u_{k,i} h_{\bar{m},l}) |J| dr_1 dr_2 dr_3\end{aligned}\quad (3.58)$$

Calculou-se anteriormente a derivada da energia de deformação com relação às coordenadas nodais de um elemento particular m da malha. A derivada da energia de deformação com relação às coordenadas globais da malha deve levar em conta a contribuição de cada elemento. Consequentemente,

$$\frac{\partial U}{\partial x_i^n} = \sum_{elem} \frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^{\bar{m}}}\quad (3.59)$$

Na equação (3.59) os termos associados a cada nó \bar{m} de um elemento é computado convenientemente de forma a obter o respectivo valor associado ao nó n da malha, isto é, um mesmo nó n pode ter contribuição de mais de um elemento m .

3.3.2 Cálculo de $\frac{\partial W}{\partial x_i^n}$

Derivando-se a equação (3.10) obtém-se,

$$\frac{\partial W}{\partial x_i^n} = \frac{\partial}{\partial x_i^n} (\sum_{elem} W^{(m)}) = \frac{\partial}{\partial x_i^n} [R_k^p u_k^p + \sum_{elem} \int_S f_k^S u_k dS + \sum_{elem} \int_V f_k^B u_k dV]\quad (3.60)$$

Para os carregamentos nodais externos, que não dependem das coordenadas nodais, pois são associados ao problema físico e não à malha, tem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial x_i^n} (R_k^p u_k^p) = 0\quad (3.61)$$

Consequentemente,

$$\begin{aligned}\frac{\partial W}{\partial x_i^n} &= \frac{\partial}{\partial x_i^n} \left[\sum_{elem} \int_S f_k^S u_k dS + \sum_{elem} \int_V f_k^B u_k dV \right] = \\ &= \sum_{elem} \int_S \frac{\partial}{\partial x_i^n} (f_k^S u_k dS) + \sum_{elem} \int_V \frac{\partial}{\partial x_i^n} (f_k^B u_k dV)\end{aligned}\quad (3.62)$$

É necessário obter de forma explícita os termos da equação (3.62). Novamente serão levadas em conta as hipóteses da elasticidade linear e conceito de elementos finitos isoparamétricos.

Cálculo de $\frac{\partial}{\partial x_i^n}(f_k^s u_k dS)$

$$\frac{\partial}{\partial x_i^n}(f_k^s u_k dS) = f_k^s u_k \frac{\partial}{\partial x_i^n}(dS) \quad (3.63)$$

No caso dS representa um elemento de superfície do corpo em estudo, e pode ser definido com o auxílio da figura 3.1.

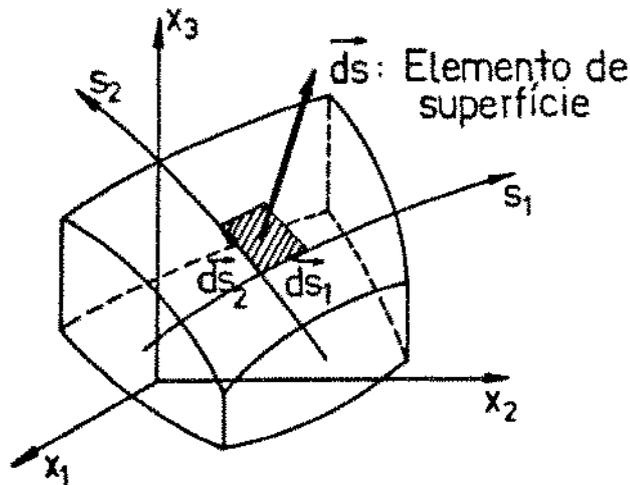


Figura 3.1: Elemento de superfície de um corpo sólido

Os vetores $d\vec{S}_1$ e $d\vec{S}_2$ podem ser escritos com o auxílio dos respectivos cossenos diretores,

$$\begin{aligned} d\vec{S}_1 &= dS_1 \left[\frac{dx_1}{dS_1} \vec{i} + \frac{dx_2}{dS_1} \vec{j} + \frac{dx_3}{dS_1} \vec{k} \right] \\ d\vec{S}_2 &= dS_2 \left[\frac{dx_1}{dS_2} \vec{i} + \frac{dx_2}{dS_2} \vec{j} + \frac{dx_3}{dS_2} \vec{k} \right] \end{aligned} \quad (3.64)$$

O elemento de área possui um vetor normal associado definido como,

$$\begin{aligned} d\vec{S} = d\vec{S}_1 \wedge d\vec{S}_2 = & \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial x_1}{\partial S_1} & \frac{\partial x_2}{\partial S_1} & \frac{\partial x_3}{\partial S_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial S_2} & \frac{\partial x_2}{\partial S_2} & \frac{\partial x_3}{\partial S_2} \end{vmatrix} = \left[\left(\frac{\partial x_2}{\partial S_1} \frac{\partial x_3}{\partial S_2} - \frac{\partial x_2}{\partial S_2} \frac{\partial x_3}{\partial S_1} \right) \vec{i} + \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial x_1}{\partial S_2} \frac{\partial x_3}{\partial S_1} - \frac{\partial x_1}{\partial S_1} \frac{\partial x_3}{\partial S_2} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial x_1}{\partial S_1} \frac{\partial x_2}{\partial S_2} - \frac{\partial x_1}{\partial S_2} \frac{\partial x_2}{\partial S_1} \right) \vec{k} \right] dS_1 dS_2 \quad (3.65) \end{aligned}$$

O valor numérico da área do elemento de integração é dado pela norma euclidiana do vetor $d\vec{S}$. Logo,

$$\begin{aligned} \|d\vec{S}\| = dS = & \left[(x_{2,s_1} x_{3,s_2} - x_{2,s_2} x_{3,s_1})^2 + (x_{1,s_2} x_{3,s_1} - x_{1,s_1} x_{3,s_2})^2 + \right. \\ & \left. + (x_{1,s_1} x_{2,s_2} - x_{1,s_2} x_{2,s_1})^2 \right]^{\frac{1}{2}} dS_1 dS_2 \quad (3.66) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} dS = & \left[x_{2,s_1} x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} - 2x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} + \right. \\ & - x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} - 2x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} + \\ & - x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} + \\ & \left. - 2x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} \right]^{\frac{1}{2}} dS_1 dS_2 \quad (3.67) \end{aligned}$$

Estuda-se primeiramente o termo $\frac{\partial S}{\partial x_1^m}$. Para tanto será utilizado uma equação análoga à (3.37) com relação aos termos em x_1 e substituir-se-á na equação (3.67). Cabe observar que nesta seção h' representa a função de forma que interpola a superfície a ser integrada.

$$\begin{aligned} dS = & \left[x_{2,s_1} x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} - 2x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} + \right. \\ & + \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right)^2 x_{3,s_1} x_{3,s_1} + \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right)^2 x_{3,s_2} x_{3,s_2} + \\ & - 2 \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) x_{3,s_1} \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right) x_{3,s_2} + \\ & + \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right)^2 x_{2,s_2} x_{2,s_2} + \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right)^2 x_{2,s_1} x_{2,s_1} + \\ & \left. - 2 \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right) x_{2,s_2} \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) x_{2,s_1} \right]^{\frac{1}{2}} dS_1 dS_2 \quad (3.68) \end{aligned}$$

Derivando-se (3.68) com relação a $x_1^{\bar{m}}$, tem-se,

$$\frac{\partial S}{\partial x_1^{\bar{m}}} = \frac{1}{2} \left[x_{2,s_1} x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} - 2x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} - 2x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} + \\
& + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} - 2x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} \Big]^{-\frac{1}{2}} \times \\
& \times \left[2 \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) h'_{\bar{m},s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + 2 \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right) h'_{\bar{m},s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + \right. \\
& - 4 \left(h'_{\bar{m},s_2} h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right) x_{3,s_1} x_{3,s_2} + 2 \left(h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} \right) h'_{\bar{m},s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + \\
& \left. + 2 \left(h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) h'_{\bar{m},s_2} x_{2,s_1} - 4 \left(h'_{\bar{m},s_1} h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) x_{2,s_2} x_{2,s_1} \right] dS_1 dS_2 = \\
= & \frac{1}{2} \left[x_{2,s_1} x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} - 2x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} + \right. \\
& + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} - 2x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} + \\
& + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} - 2x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} \Big]^{-\frac{1}{2}} \times \\
& \times \left[2x_{1,s_2} h'_{\bar{m},s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + 2h'_{\bar{m},s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + \right. \\
& - 4h'_{\bar{m},s_2} h'_{\bar{m},s_1} x_1^{\bar{m}} x_{3,s_1} x_{3,s_2} + 2h'_{\bar{m},s_1} x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + \\
& \left. + 2 \left(h'_{\bar{m},s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} - 4h'_{\bar{m},s_1} h'_{\bar{m},s_2} x_1^{\bar{m}} \right) x_{2,s_2} x_{2,s_1} \right] dS_1 dS_2 \quad (3.69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial x_1^{\bar{m}}} = & \frac{1}{2} \left[x_{2,s_1} x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} - 2x_{2,s_1} x_{3,s_2} x_{2,s_2} x_{3,s_1} + \right. \\
& + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} - 2x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{1,s_1} x_{3,s_2} + \\
& + x_{1,s_1} x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + x_{1,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} - 2x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{1,s_2} x_{2,s_1} \Big]^{-\frac{1}{2}} \times \\
& \times \left[2h'_{\bar{m},s_2} (x_{1,s_2} x_{3,s_1} x_{3,s_1} + x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{2,s_1} - x_{1,s_1} x_{3,s_1} x_{3,s_2} - x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_1}) + \right. \\
& + 2h'_{\bar{m},s_1} (x_{1,s_1} x_{3,s_2} x_{3,s_2} + x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} - x_{1,s_1} x_{2,s_2} x_{2,s_2} + \\
& \left. - x_{1,s_2} x_{2,s_1} x_{3,s_2} - x_{1,s_2} x_{2,s_2} x_{2,s_1}) \right] dS_1 dS_2 \quad (3.70)
\end{aligned}$$

No sentido de simplificar a equação (3.70) definem-se os termos,

$$\begin{aligned}
E & = x_{j,s_1} x_{j,s_1} = x_{1,s_1} x_{1,s_1} + x_{2,s_1} x_{2,s_1} + x_{3,s_1} x_{3,s_1} \\
F & = x_{j,s_1} x_{j,s_2} = x_{1,s_1} x_{1,s_2} + x_{2,s_1} x_{2,s_2} + x_{3,s_1} x_{3,s_2} \\
G & = x_{j,s_2} x_{j,s_2} = x_{1,s_2} x_{1,s_2} + x_{2,s_2} x_{2,s_2} + x_{3,s_2} x_{3,s_2} \quad (3.71)
\end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\begin{aligned}
x_{1,s_2} E - x_{1,s_1} F & = x_{1,s_2} (x_{1,s_1} x_{1,s_1} + x_{2,s_1} x_{2,s_1} + x_{3,s_1} x_{3,s_1}) + \\
& - x_{1,s_1} (x_{1,s_1} x_{1,s_2} + x_{2,s_1} x_{2,s_2} + x_{3,s_1} x_{3,s_2}) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= x_{1,s_2}x_{2,s_1}x_{2,s_1} + x_{1,s_2}x_{3,s_1}x_{3,s_1}x_{3,s_1} + \\
&\quad - x_{1,s_1}x_{2,s_1}x_{2,s_2} - x_{1,s_1}x_{3,s_1}x_{3,s_2}
\end{aligned} \tag{3.72}$$

$$\begin{aligned}
x_{1,s_2}G - x_{1,s_1}F &= x_{1,s_1}(x_{1,s_2}x_{1,s_2} + x_{2,s_2}x_{2,s_2} + x_{3,s_2}x_{3,s_2}) + \\
&\quad - x_{1,s_2}(x_{1,s_1}x_{1,s_2} + x_{2,s_1}x_{2,s_2} + x_{3,s_1}x_{3,s_2}) = \\
&= x_{1,s_1}x_{2,s_2}x_{2,s_2} + x_{1,s_1}x_{3,s_2}x_{3,s_2} + \\
&\quad - x_{1,s_2}x_{2,s_1}x_{2,s_2} - x_{1,s_2}x_{3,s_1}x_{3,s_2}
\end{aligned} \tag{3.73}$$

$$\begin{aligned}
EG - F.F &= (x_{1,s_1}x_{1,s_1} + x_{2,s_1}x_{2,s_1} + x_{3,s_1}x_{3,s_1})(x_{1,s_2}x_{1,s_2} + x_{2,s_2}x_{2,s_2} + x_{3,s_2}x_{3,s_2}) + \\
&\quad + (x_{1,s_1}x_{1,s_2} + x_{2,s_1}x_{2,s_2} + x_{3,s_1}x_{3,s_2}) \\
&\quad \times (x_{1,s_1}x_{1,s_2} + x_{2,s_1}x_{2,s_2} + x_{3,s_1}x_{3,s_2})
\end{aligned} \tag{3.74}$$

Observando os resultados de (3.70), (3.72), (3.73), (3.74) e comparando com (3.70), conclui-se que,

$$\frac{\partial S}{\partial x_{\bar{m}}} = [h'_{\bar{m},s_2}(x_{1,s_2}E - x_{1,s_1}F) + h'_{\bar{m},s_1}(x_{1,s_1}G - x_{1,s_2}F)](EG - F.F)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.75}$$

Generalizando, é possível escrever que,

$$\frac{\partial S}{\partial x_{\bar{i}}} = [h'_{\bar{m},s_2}(x_{i,s_2}E - x_{i,s_1}F) + h'_{\bar{m},s_1}(x_{i,s_1}G - x_{i,s_2}F)](EG - F.F)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.76}$$

Com o resultado dado em (3.76) avalia-se o termo dado em (3.63).

Cálculo de $\frac{\partial}{\partial x_{\bar{i}}}(f_k^B u_k dV)$

$$\frac{\partial}{\partial x_{\bar{i}}}(f_k^B u_k dV) = \frac{\partial}{\partial x_{\bar{i}}}(f_k^B u_k |J| dr_1 dr_2 dr_3) = f_k^B u_k \frac{\partial |J|}{\partial x_{\bar{i}}} dr_1 dr_2 dr_3 \tag{3.77}$$

Usando (3.47) em (3.77),

$$\frac{\partial}{\partial x_{\bar{i}}}(f_k^B u_k dV) = f_k^B u_k h_{\bar{m},i} |J| dr_1 dr_2 dr_3 \tag{3.78}$$

Consequentemente, usando os resultados de (3.61), (3.76) e (3.78) é possível escrever o resultado final,

$$\begin{aligned} \frac{\partial W^{(m)}}{\partial x_i^{\bar{m}}} = & \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} (f_k^S u_k) [h'_{\bar{m},s_2}(x_{i,s_2} E - x_{i,s_1} F) + \\ & + h'_{\bar{m},s_1}(x_{i,s_1} G - x_{i,s_2} F)] (EG - F^2)^{-\frac{1}{2}} ds_1 ds_2 + \\ & + \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f_k^B u_k h_{\bar{m},i} |J| dr_1 dr_2 dr_3 \end{aligned} \quad (3.79)$$

Consequentemente,

$$\frac{\partial W}{\partial x_i^n} = \sum_{elem} \frac{\partial W^{(m)}}{\partial x_i^{\bar{m}}} \quad (3.80)$$

onde os termos associados a cada nó \bar{m} de um elemento é computado convenientemente de forma a se obter o respectivo valor associado ao nó n da malha (isto é, um mesmo nó n pode receber uma contribuição de mais de um elemento m (nós \bar{m})).

Com os resultados anteriores é possível avaliar o gradiente da energia potencial total com relação às coordenadas nodais dado pela equação (3.13), tendo sido admitido que uma solução de elementos finitos é utilizada.

3.4 Particularização de Π e de seu gradiente no caso bidimensional

A aplicação de interesse neste trabalho é a situação de estado plano. Neste sentido, uma particularização das expressões obtidas na seção 3.3 faz-se necessária.

3.4.1 Energia de deformação no estado plano e seu gradiente

A energia de deformação no caso tridimensional é dada por,

$$U = \int_V \frac{1}{2} \tau_{kl} \varepsilon_{kl} dV \quad (k, l = 1, 2, 3) \quad (3.81)$$

Explicitando-se tem-se,

$$U = \int_V \frac{1}{2} (\tau_{11} \varepsilon_{11} + \tau_{22} \varepsilon_{22} + \tau_{33} \varepsilon_{33} + \tau_{12} \varepsilon_{12} + \tau_{13} \varepsilon_{13} + \tau_{21} \varepsilon_{21} + \tau_{23} \varepsilon_{23} + \tau_{31} \varepsilon_{31} + \tau_{32} \varepsilon_{32}) dV \quad (3.82)$$

Para de estado plano de tensões tem-se que,

$$\tau_{33} = \tau_{31} = \tau_{32} = 0 \quad (3.83)$$

e para estado plano de deformações tem-se,

$$\epsilon_{33} = \epsilon_{31} = \epsilon_{32} = 0 \quad (3.84)$$

Consequentemente, tanto para estado plano de tensões como para estado plano de deformações,

$$U = \int_V \frac{1}{2} (\tau_{11}\epsilon_{11} + \tau_{22}\epsilon_{22} + \tau_{12}\epsilon_{12} + \tau_{21}\epsilon_{21}) dV \quad (3.85)$$

ou,

$$U = \int_V \frac{1}{2} \tau_{kl}\epsilon_{kl} dV \quad (k, l = 1, 2) \quad (3.86)$$

É necessário escrever dV em termos locais. Seja a notação dada na figura 3.2, representando o sistema local do elemento,

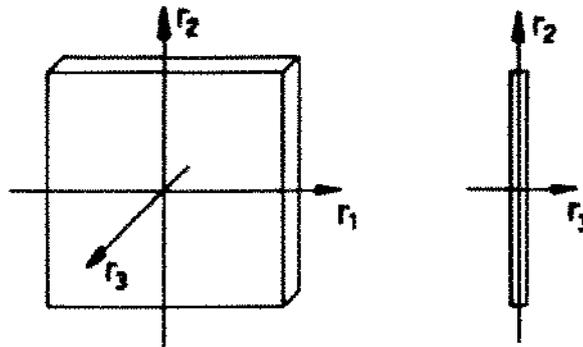


Figura 3.2: Sistema local de coordenadas no estado plano

Da relação entre sistema local e global de coordenadas do elemento tem-se que,

$$\text{para } r_3 = +1 \Rightarrow x_3 = +t/2 \quad (3.87)$$

$$\text{para } r_3 = -1 \Rightarrow x_3 = -t/2 \quad (3.88)$$

Logo,

$$x_3 = \frac{t}{2} r_3 \quad (3.89)$$

ou,

$$x_{3,r_3} = \frac{dx_3}{dr_3} = \frac{t}{2} \quad (3.90)$$

É sabido que (resultado bem conhecido em elementos finitos isoparamétricos),

$$dV = |J|dr_1dr_2dr_3 \quad (3.91)$$

onde,

$$|J| = e_{abc}x_{1,r_a}x_{2,r_b}x_{3,r_c} \quad (3.92)$$

A espessura t do elemento é constante, de modo que,

$$x_{3,r_1} = x_{3,r_2} = \frac{\partial x_3}{\partial r_1} = \frac{\partial x_3}{\partial r_2} = 0 \quad (3.93)$$

Substituindo (3.93) e (3.90) em (3.92) obtém-se,

$$|J| = \left[\frac{\partial x_1}{\partial r_1} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} - \frac{\partial x_1}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \right] \frac{t}{2} = |J|_{2D} \frac{t}{2} \quad (3.94)$$

onde definiu-se,

$$|J|_{2D} = \frac{\partial x_1}{\partial r_1} \frac{\partial x_2}{\partial r_2} - \frac{\partial x_1}{\partial r_2} \frac{\partial x_2}{\partial r_1} = x_{1,r_1}x_{2,r_2} - x_{1,r_2}x_{2,r_1} \quad (3.95)$$

Como a espessura do elemento é constante, dr_3 na equação (3.91) pode ser integrado, e como seus limites são -1 e $+1$, tem-se,

$$dV = |J|dr_1dr_2 \times 2 \quad (3.96)$$

Substituindo (3.94) em (3.96),

$$dV = t|J|_{2D}dr_1dr_2 \quad (3.97)$$

Consequentemente,

$$U = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{2} \tau_{kl} \varepsilon_{kl} t |J|_{2D} dr_1 dr_2 \quad (k, l = 1, 2) \quad (3.98)$$

A equação (3.98) é simplesmente uma particularização do caso tridimensional, de forma que o seu gradiente com relação às coordenadas é análogo ao caso tridimensional.

$$\frac{\partial U^{(m)}}{\partial x_i^n} = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \left[\frac{1}{2} \tau_{pq} \epsilon_{pq} h_{n,i} - \tau_{kl} u_{k,i} h_{n,i} \right] t |J|_{2D} dr_1 dr_2 \quad (k, l, p, q = 1, 2) \quad (3.99)$$

3.4.2 Potencial das cargas aplicadas e seu gradiente no estado plano de tensões

A expressão geral é,

$$W = R_k^p u_k^p + \int_A f_k^S u_k dS + \int_V f_k^B u_k dV \quad (3.100)$$

Seja a figura 3.3, mostrando os tipos de carregamentos presentes em um elemento de placa.

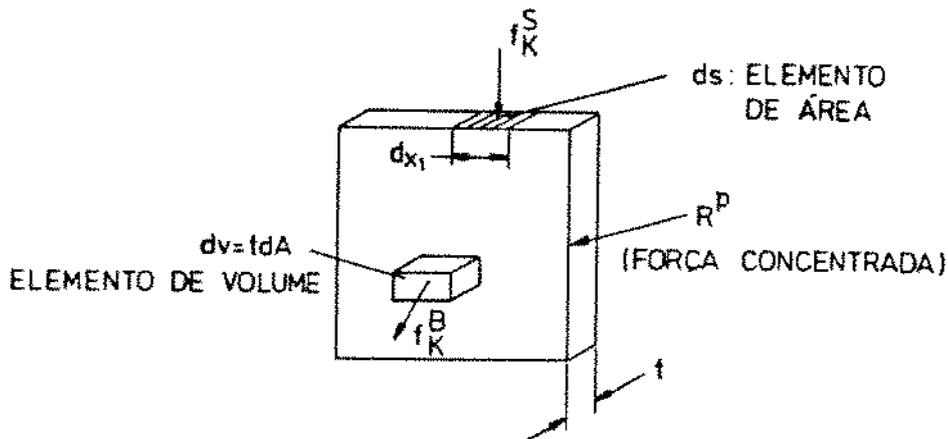


Figura 3.3: Esforços possíveis de atuar no elemento de placa

Devido à espessura do elemento ser constante, pode-se escrever,

$$dS = t dx_1 \quad e \quad dV = t dA \quad (3.101)$$

Usando a relação com o sistema local de coordenadas,

$$dS = t |J|_{1D} ds_1 \quad e \quad dV = t |J|_{2D} dr_1 dr_2 \quad (3.102)$$

onde s_1 representa a coordenada isoparamétrica sobre o lado do elemento e $|J|_{1D} = (x_{p,s_1} x_{p,s_1})^{\frac{1}{2}}$ é o equivalente ao determinante jacobiano em uma dimensão (transformação usando comprimento de arco).

Assim, reescrevendo (3.100) usando (3.102) tem-se,

$$W = R_k^p u_k^p + \sum_{\text{ladoss}} \int_{-1}^{+1} f_k^S u_k t |J|_{1D} ds_1 + \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f_k^B u_k t |J|_{2D} dr_1 dr_2 \quad (3.103)$$

O gradiente é obtido pela degeneração da expressão tridimensional apresentada anteriormente, fazendo-se as seguintes considerações,

$$x_{3,s_1} = x_{3,s_2} = 0 \quad (3.104)$$

e a variável s_2 deixa de existir. Assim,

$$E = x_{1,s_1} x_{1,s_1} + x_{2,s_1} x_{2,s_1} \quad (3.105)$$

$$F = x_{1,s_1} + x_{2,s_1} \quad (3.106)$$

$$G = 1 \quad (\text{não mais participa em } s_2) \quad (3.107)$$

e termos em h_{n,s_2} não mais existem, o mesmo ocorrendo com x_{i,s_2} . Fazendo estas substituições na expressão do gradiente tridimensional obtém-se,

$$\frac{\partial W^{(m)}}{\partial x_i^n} = \sum_{\text{ladoss}} \left[\int_{-1}^{+1} f_k^S u_k x_{i,s_1} h_{n,s_1} (|J|^S)^{-1} t ds_1 \right] + \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f_k^B u_k h_{n,it} |J|_{2D} dr_1 dr_2 \quad (3.108)$$

3.5 O tratamento da restrições e seus gradientes

O problema da otimização de malhas pelo método τ envolve dois tipos de restrições: nós interiores podem, a princípio, mover-se em qualquer direção, contudo não devem se mover a “longas” distâncias para que não distorçam demasiadamente os elementos. Este tipo de restrição é representado por uma desigualdade. Os nós do contorno (exceto aqueles nós que se movidos destróem a geometria do problema) devem mover-se mantendo a geometria do problema. Este tipo de restrição é de igualdade. Con-

tudo, também estes nós, não devem mover-se ao ponto de distorcer em excesso os elementos, sendo necessária uma restrição de desigualdade adicional.

A forma como as restrições foram modeladas é descrita e ilustrada no caso da figura 3.4.

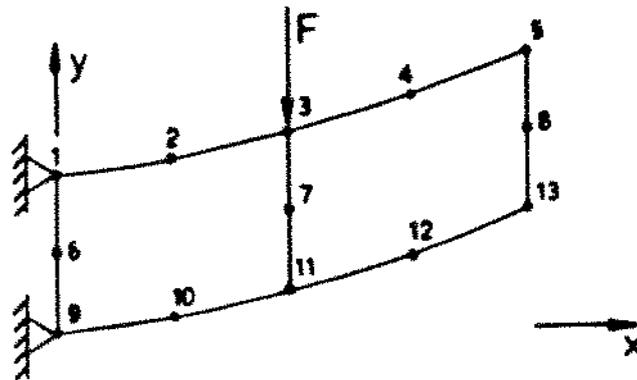


Figura 3.4: Exemplo para ilustrar os tipos de restrições.

a) Nós fixos

Alguns nós da malha não podem mover-se, pois o seu movimento descaracteriza o problema físico em estudo. No caso da figura 3.4 os nós fixos são 1, 3, 5, 9 e 13. Estes nós não participam como variáveis no problema de otimização. Para os casos considerados neste trabalho, por conveniência, os nós que possuem carregamentos são mantidos fixos. É o caso do nó 3.

b) Nós internos

No caso da figura 3.4 é o nó número 7.

Este nó pode mover-se em qualquer direção, contudo não deve distorcer os elementos demasiadamente. Logo, um ponto natural de referência a este movimento é a posição inicial do nó. No caso do nó número 7, suas coordenadas iniciais (configuração inicial) são representadas aqui por $(x_{0,7}, y_{0,7})$, ou genericamente a configuração inicial é representada por $(x_{0,n}, y_{0,n})$. As variáveis de otimização são denotadas por (x_n, y_n) .

Duas formas para definir o espaço de movimento dos nós interiores foram estuda-

das:

- Restrições canalizadas: o nó deveria pertencer a um quadrado de lado $2l$ representando as seguintes restrições,

$$\begin{aligned}x_{0,n} - l &\leq x_n \leq x_{0,n} + l \\ y_{0,n} - l &\leq y_n \leq y_{0,n} + l\end{aligned}\tag{3.109}$$

Por esta formulação, associadas ao nó n tem-se quatro restrições lineares de desigualdade.

- Restrições do tipo círculo: o nó deveria pertencer a um círculo de raio R , isto é,

$$(x_n - x_{0,n})^2 + (y_n - y_{0,n})^2 \leq R^2\tag{3.110}$$

O movimento do nó n é restrito a uma única equação não linear de desigualdade. Contudo trata-se de uma não linearidade bem definida e comportada.

As duas maneiras descritas foram testadas, verificando-se o melhor comportamento do tipo círculo. Além disso uma significativa economia no uso de memória é feita, pois ao invés de quatro restrições por nó (quatro multiplicadores de Lagrange, quatro parâmetros de penalidade, gradiente de quatro restrições por nó no cálculo do gradiente da função lagrangeana aumentada) uma única restrição é usada.

c) Nós do contorno

No caso da figura 3.4 são os nós 2, 4, 6, 8, 10, 11 e 12. Estes nós devem respeitar o contorno do elemento não distorcendo o elemento de forma excessiva. A distorção excessiva do elemento é evitada usando-se restrições do tipo círculo (descrita anteriormente).

A forma para definir as restrições que restringem o nó a pertencer à linha do contorno, consiste em interpolar conjuntos de nós (na configuração original) definindo equações para representar as restrições de igualdade.

O tipo de elemento finito sendo usado é quadrático (elemento QUAD8) de tal forma que restrições do tipo parábolas geradas a partir da configuração inicial são adequadas.

Dois tipos de parábolas (ou casos degenerados) são suficientes para definir um dado trecho do contorno representado por três nós, ou seja,

$$f(x, y) = y - (ax^2 + bx + c) = 0 \quad (3.111)$$

ou

$$f(x, y) = x - (ay^2 + by + c) = 0 \quad (3.112)$$

Os coeficientes a, b, c são obtidos por meio de interpolação convencional baseada em conjuntos de 3 nós da configuração inicial.

Assim no caso da figura 3.4, os nós 1, 2 e 3 definem uma curva $f_1 = y - (a_1x^2 + b_1x + c_1)$. Os nós 3, 4 e 5 definem a curva $f_2 = y - (a_2x^2 + b_2x + c_2)$. Os nós 1, 6 e 9 definem a curva $f_3 = x - (a_3y^2 + b_3y + c_3)$. Os nós 9, 10 e 11 definem a curva $f_4 = y - (a_4x^2 + b_4x + c_4)$. Os nós 10, 11 e 12 definem $f_5 = y - (a_5x^2 + b_5x + c_5)$ e os nós 11, 12 e 13 definem $f_6 = y - (a_6x^2 + b_6x + c_6)$.

Por este tipo de modelagem a geometria inicial é mantida e restrições simples e conhecidas de forma analítica (após a interpolação) são obtidas, facilitando o acoplamento com o método do Lagrangeano Aumentado.

Uma generalização deste tipo de abordagem para as restrições pode ser feita para o caso tridimensional. Neste caso, ao invés de se utilizar círculos seriam utilizadas esferas, e a interpolação do contorno seria feita por meio de uma superfície.

No caso de outros tipos de elementos, uma interpolação análoga de conjuntos de nós pode também ser feita.

O gradiente das restrições, da maneira como estas foram modeladas, é obtido de forma bastante simples e direta, bastando derivar as equações (3.110), (3.111) e (3.112) com relação às variáveis x e y .

3.6 Considerações sobre o modelamento

Nas seções anteriores deste Capítulo apresentou-se como é calculada a energia potencial total e o gradiente desta com relação às coordenadas nodais no caso de uma malha de elementos finitos. Verifica-se que estes cálculos requerem a integração sobre o elemento. O procedimento para esta integração no caso do elemento isoparamétrico utilizado é o da integração numérica usando o método da Quadratura Gaussiana, [17]. Como apresentado, os cálculos são feitos a nível de cada elemento, e posteriormente é obtido o valor para a malha como um todo. Trata-se de um procedimento semelhante àquele feito na montagem da matriz de rigidez global a partir das matrizes de rigidez individuais dos elementos, onde são somadas as contribuições em posições convenientes.

Como descrito anteriormente, a energia potencial total, Π , é obtida em função da energia de deformação, U , e do potencial dos carregamentos externos aplicados, W , calculados tendo como base uma solução padrão de elementos finitos.

É possível observar que no equilíbrio (u^*), isto é, substituindo o resultado de (3.4) em (3.2), tem-se que a energia potencial total assume numericamente o valor negativo da energia de deformação. Matematicamente,

$$\Pi(u^*) = -U(u^*) \quad \text{ou ainda} \quad \Pi^* = -U^* \quad (3.113)$$

Segundo o esquema do método r apresentado, a energia potencial total é sempre calculada baseada em uma solução de equilíbrio, e portanto seu valor pode ser calculado por meio da equação (3.113).

O caso particular sendo estudado neste trabalho não considera a possibilidade de movimentação dos nós que recebem carregamentos (tanto cargas concentradas como cargas distribuídas), e como consequência o gradiente do potencial das cargas aplicadas é sempre nulo (os carregamentos são sempre tratados como carregamentos nodais concentrados equivalentes e que são aplicados em nós fixos).

Face a equação (3.113) e ao fato de $\Pi(u)$ ser sempre calculado baseado numa

solução de equilíbrio, o cálculo da energia potencial total bem como de seu gradiente podem ser feitos baseando-se exclusivamente na energia de deformação. Este tipo de abordagem representa um significativo ganho em termos de tempo e esforço computacionais, e são adotados neste trabalho.

Apresentou-se também a abordagem utilizada para o tratamento das restrições, obtendo expressões analíticas para estas funções, e como decorrência direta, expressões para os gradientes destas.

Por meio deste modelamento, o problema de minimização restrita associado ao método r , possui o problema de minimização irrestrita equivalente, representado pela minimização da função Lagrangeana Aumentada. Considerando que o método Quase-Newton de otimização irrestrita é utilizado, a função Lagrangeana Aumentada e seu gradiente podem ser calculados baseado nas expressões dadas nas seções anteriores.

Capítulo 4

O método r e seu acoplamento com o método do Lagrangeano Aumentado

4.1 Introdução

Nos Capítulos 1 e 2 apresentou-se o algoritmo geral do método r para otimização de malhas e o algoritmo do método do Lagrangeano Aumentado.

Considerando que o método r como descrito no Capítulo 1 utiliza os resultados de análises por elementos finitos, para posteriormente efetuar o procedimento de minimização propriamente dito, um algoritmo acoplando os métodos r e Lagrangeano Aumentado faz-se necessário. Dois algoritmos para este acoplamento foram estudados: o primeiro, chamado aqui de “estado de equilíbrio semi-congelado, sc”, onde o estado de equilíbrio é mantido fixo ao longo das iterações do método Quase-Newton que atua no método do Lagrangeano Aumentado; e o segundo, chamado aqui de “estado de equilíbrio sempre-atualizado, sa”, no qual o estado de equilíbrio é atualizado a toda avaliação da função objetivo. Estes dois algoritmos são descritos nas seções seguintes.

4.2 O algoritmo “estado de equilíbrio semi-congelado, sc”

No algoritmo “estado de equilíbrio semi-congelado, algoritmo sc”, o estado de equilíbrio não é atualizado sempre que a função objetivo é avaliada. Esta atualização é feita somente a cada iteração do Lagrangeano Aumentado, isto é, durante as iterações do método Quase-Newton que atua interno ao Lagrangeano Aumentado, o estado de equilíbrio (deformações e tensões) é mantido fixo.

Este tipo de algoritmo é apresentado a seguir.

1. Definir uma malha inicial de partida (x_0).
2. Definir os valores iniciais (valores de partida) para:
 - multiplicadores de Lagrange (λ, μ).
 - parâmetros de penalidade (r).
 - taxa de crescimento dos parâmetros de penalidade (t).
 - máximo passo da busca unidimensional ($maxalpha$).
3. Definir o número máximo de iterações do Lagrangeano Aumentado ($nimax$).
4. $k=0$
5. Efetuar uma análise estática, obtendo o estado de equilíbrio (deformações e tensões) pelo MEF. Baseado neste estado de equilíbrio calcular a energia potencial total inicial (Π_0).
6. Montar a função Lagrangeana Aumentada $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$.
7. Minimizar $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$ com relação às coordenadas nodais (variáveis x) usando o método de otimização irrestrita Quase-Newton, obtendo uma nova configuração (x_1). Nos casos em que o passo da busca unidimensional (α) é superior ao valor $maxalpha$ ($\alpha > maxalpha$), usar o valor $maxalpha$ para o passo ($x_1 = x_0 + maxalpha \times d$), onde d é a direção de busca.

8. Seguir o seguinte mecanismo de aceitação ou rejeição da malha obtida:
- atualização do estado de equilíbrio (análise estática)
 - cálculo de Π_1
 - se $\Pi_1 > \Pi_0$:
 - fazer uma correção no valor do máximo passo da busca unidimensional do tipo: $maxalpha = \frac{maxalpha}{n} \quad n > 1$
 - voltar à configuração x_0 .
 - voltar ao passo 7
 - se $\Pi_1 \leq \Pi_0$: o passo é aceito.
9. Atualização dos multiplicadores de Lagrange e dos parâmetros de penalidade segundo algum esquema do método do Lagrangeano Aumentado.
10. Se a malha x_1 (configuração x_1) é factível (satisfaz as restrições dentro de certos limites) atualizar o valor de referência Π_0 , ($\Pi_0 = \Pi_1$).
11. Critérios de parada:
- se a malha é factível e x_1 representa a solução ótima de Φ , vá para 13.
 - se a malha é factível e $x_1 - x_0 \approx 0$, isto é, as coordenadas da malha não mais variam, vá para 13.
 - se $\Pi_1 - \Pi_0 \approx 0$, isto é, a energia potencial não mais varia, vá para 13.
 - se $k > n_{imax}$, parar com a falha do método. Contudo a malha x_1 pode ser melhor que a malha x_0 . Fim
12. • $k = k + 1$
- $x_0 = x_1$ (a malha obtida é agora novo ponto de partida).
 - volte ao passo 6.
13. Fim. x_1 é uma malha otimizada.

4.3 O algoritmo “estado de equilíbrio sempre-atualizado, sa”

No caso do algoritmo “estado de equilíbrio sempre-atualizado, algoritmo sa”, o estado de equilíbrio é atualizado sempre que a função objetivo é calculada, ou seja, no interior do método Quase-Newton quando está sendo efetuado o procedimento de busca unidimensional.

Este algoritmo é bastante semelhante ao do tipo “semi-congelado”, seguindo a mesma estrutura global. Deste modo, tem-se o seguinte algoritmo:

1. Definir uma malha inicial de partida (x_0).
2. Definir os valores iniciais (valores de partida) para:
 - multiplicadores de Lagrange (λ, μ).
 - parâmetros de penalidade (r).
 - taxa de crescimento dos parâmetros de penalidade (t).
 - máximo passo da busca unidimensional ($maxalpha$).
3. Definir o número máximo de iterações do Lagrangeano Aumentado ($nimax$).
4. $k=0$
5. Montar a função Lagrangeana Aumentada $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$.
6. Minimizar $\Phi(x, \lambda, \mu, r)$ com relação às coordenadas nodais (variáveis x) usando o método de otimização irrestrita Quase-Newton, obtendo uma nova configuração (x_1). Atualizar o estado de equilíbrio (solução de elementos finitos) para o cálculo da função objetivo sempre que esta for avaliada. No caso em que o passo da busca unidimensional (α) é superior ao valor $maxalpha$ ($\alpha > maxalpha$), usar o valor $maxalpha$ para o passo ($x_1 = x_0 + maxalpha \times d$), onde d é a direção de busca.
7. Seguir o seguinte mecanismo de aceitação ou rejeição da malha obtida:

- cálculo de Π_1
 - se $\Pi_1 > \Pi_0$:
 - fazer uma correção no valor do máximo passo da busca unidimensional do tipo: $maxalpha = \frac{maxalpha}{n} \quad n > 1$
 - voltar à configuração x_0 .
 - voltar ao passo 6
 - se $\Pi_1 \leq \Pi_0$: o passo é aceito.
8. Atualização dos multiplicadores de Lagrange e dos parâmetros de penalidade segundo algum esquema do método do Lagrangeano Aumentado.
9. Se a malha x_1 (configuração x_1) é factível satisfaz as restrições dentro de certos limites) atualizar o valor de referência Π_0 , ($\Pi_0 = \Pi_1$).
10. Critério de parada:
- se a malha é factível e x_1 representa a solução ótima de Φ , vá para 12.
 - se a malha é factível e $x_1 - x_0 \approx 0$, isto é, as coordenadas da malha não mais variam, vá para 12.
 - se $\Pi_1 - \Pi_0 \approx 0$, isto é, a energia potencial não mais varia, vá para 12.
 - se $k > n_{imax}$, parar com falha do método. Contudo a malha x_1 pode ser melhor que a malha x_0 . Fim.
11. • $k = k + 1$
- $x_0 = x_1$ (a malha obtida é agora novo ponto de partida).
 - volte ao passo 5.
12. Fim. x_1 é uma malha otimizada.

4.4 Comentários sobre estes algoritmos

É possível observar em ambos os algoritmos a necessidade de um mecanismo de controle do passo da busca unidimensional. Este controle é representado pelo valor

maxalpha, que representa o máximo valor do passo na direção de procura (busca unidimensional) para que os elementos da malha não se distorçam excessivamente. Este mecanismo de controle do passo é importante principalmente nas primeiras iterações do método do Lagrangeano Aumentado, onde os parâmetros de penalidade têm valores ainda pequenos, e como decorrência disto, a violação das restrições ocorre com bastante frequência, pois a penalização pela violação das restrições é ainda pequena. O valor de *maxalpha* é definido tendo como base a máxima distância que um nó pode mover-se em cada iteração. É um dado de entrada que depende do problema sendo analisado.

Observa-se que os algoritmos apresentados são bastante semelhantes. Pode-se dizer que o algoritmo do tipo “sempre-atualizado” surgiu como uma tentativa de melhorar o comportamento do algoritmo “semi-congelado”, ou alternativamente o algoritmo “semi-congelado” surgiu como uma simplificação do algoritmo “sempre-atualizado”.

No algoritmo “semi-congelado” constatou-se que a configuração obtida no passo 7 não representa necessariamente um estado de menor energia potencial total, quando se atualiza o estado de equilíbrio. Isto é, o ponto obtido representa um menor valor da energia potencial total quando esta é calculada tomando-se como base o estado de equilíbrio associado à configuração anterior. Se o estado de equilíbrio é atualizado, o ponto obtido pode representar um ponto “pior” (de maior energia potencial total) que o anterior. Face a esta dificuldade é necessário usar um mecanismo para aceitação ou rejeição da configuração obtida (passo 8 do algoritmo) baseado no valor da energia potencial total.

O tipo “semi-congelado” é um algoritmo que processa uma análise estática (utilização do MEF) a cada iteração do Lagrangeano Aumentado. Contudo a ocorrência de configurações rejeitadas pode ser alta. Além disso, a taxa de convergência do método do Lagrangeano Aumentado ser prejudicada devido ao ponto encontrado (x_1) não representar necessariamente o verdadeiro ponto ótimo da iteração (pois se o estado de equilíbrio estivesse atualizado outro ponto x_1 seria encontrado).

No algoritmo do tipo “sempre-atualizado” o número de análises estáticas processadas a cada iteração é bem maior, pois no processo de busca unidimensional a função objetivo é avaliada em geral várias vezes, e o procedimento de busca unidimensional é feito para cada iteração do método Quase-Newton. Este tipo de algoritmo envolve, aparentemente, um maior número de cálculos em relação ao algoritmo “semi-congelado”. Contudo não se sabe se realmente isto ocorre, pois a atualização do estado de equilíbrio a cada cálculo da função objetivo leva mais rapidamente ao ponto ótimo.

Parece ser redundante a necessidade do mecanismo de aceitação e rejeição da configuração obtida no caso do algoritmo sempre “sempre-atualizado”, já que a função objetivo é calculada tendo o estado de equilíbrio sempre atualizado. Salienta-se que este mecanismo verifica o valor da energia potencial total, e que a função objetivo vista pelo método Quase-Newton é a função Lagrangeana Aumentada ($\Phi(x, \lambda, \mu, \tau)$). É possível ter-se o caso em que Φ diminua e Π aumente, representando uma situação indesejável, sob o ponto de vista do método iterativo envolvido, onde a aceitação de um ponto de maior energia potencial total pode causar a não convergência do método como um todo, pois um ponto “pior” gera um estado de equilíbrio também pior que pode comprometer a iteração seguinte. Por este motivo, o mecanismo dado no passo 7 é mantido no algoritmo.

O melhor ou pior comportamento dos algoritmos é função do problema sendo estudado, e uma posição mais geral sobre estes comportamentos ainda não pode ser dada.

Uma outra variação possível de ser feita nestes dois algoritmos é utilizar um mecanismo de reinicialização. Este mecanismo consiste em executar os algoritmos por um dado número de iterações e então reiniciá-los baseando-se numa nova configuração de malha obtida. A principal vantagem deste mecanismo é que a cada reinicialização, a malha de partida é mais próxima da malha ótima e os parâmetros de penalidade são reiniciados, evitando o crescimento excessivo destes (o que causaria um mau condicionamento numérico na minimização pelo método Quase-Newton).

Capítulo 5

Resultados numéricos e exemplos

5.1 Introdução

Apresentam-se neste Capítulo alguns aspectos relacionados ao comportamento numérico dos algoritmos estudados, e também alguns exemplos didáticos que procuram mostrar as principais características do método da relocação dos nós da maneira como abordado neste trabalho.

Os códigos computacionais foram desenvolvidos em linguagem FORTRAN e a solução padrão de elementos finitos obtida por meio das rotinas do programa ANAFIN, [109]. Utilizou-se para o desenvolvimento deste trabalho um minicomputador Digirede modelo 8000 com 2 MBytes de memória.

5.2 Exemplos baseados no caso de uma placa com furo, estado plano de tensões

Os exemplos apresentados são baseados no caso de uma placa com furo, no caso de estado plano de tensões, onde sabe-se a priori que o campo de deformações possui uma certa perturbação nas imediações do furo. Devido à simetria do problema, apenas um quarto da placa é modelado por elementos finitos como representado na figura 5.1 com os respectivos tipos de restrições e carregamentos. Nos exemplos

seguintes são apresentados , para simplificação, apenas a representação da malha com os respectivos nós, não mostrando as condições de contorno e carregamentos. As características geométricas da placa são: placa quadrada de lado 10 m , furo de raio 1.0 m no centro, e espessura unitária.

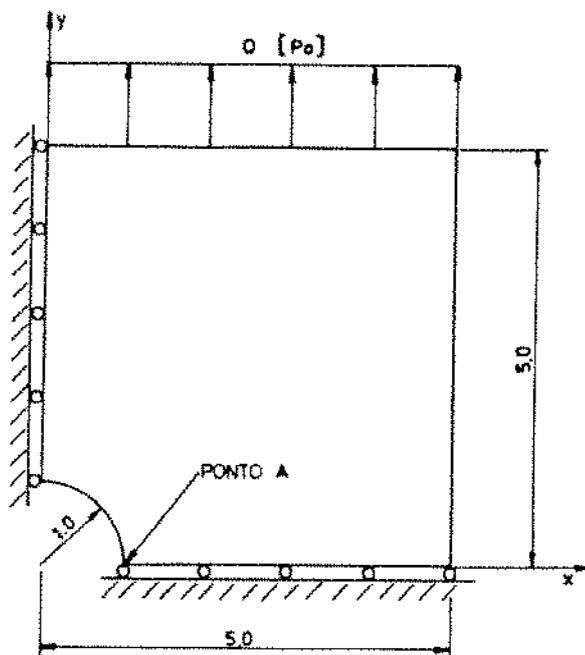


Figura 5.1: Representação de 1/4 de placa simétrica, carregamento uniaxial.

5.2.1 Exemplo para comparação dos algoritmos “sc” e “sa”

No sentido de comparar os algoritmos “sc” e “sa”, um problema bastante simples, com apenas 2 variáveis de otimização é estudado. Seja a malha da figura 5.2, composta por 2 elementos isoparamétricos quadrangulares de 8 nós representando um quarto de placa com furo no centro e solicitada biaxialmente por tensões de 1000 Pa . O módulo de elasticidade é $E = 100000\text{ Pa}$ e o coeficiente de Poisson é $\nu = 0.3$.

No caso da malha da figura 5.2 apenas o nó número 5, com posição inicial $(3.0, 3.0)$ tem a possibilidade de mover-se. A energia potencial total inicial é $\Pi_0 = -265.2\text{ J}$. Como restrição é colocado um círculo de raio unitário com centro no ponto $(3.0, 3.0)$ gerando uma restrição de desigualdade (o nó deve permanecer no interior do círculo).

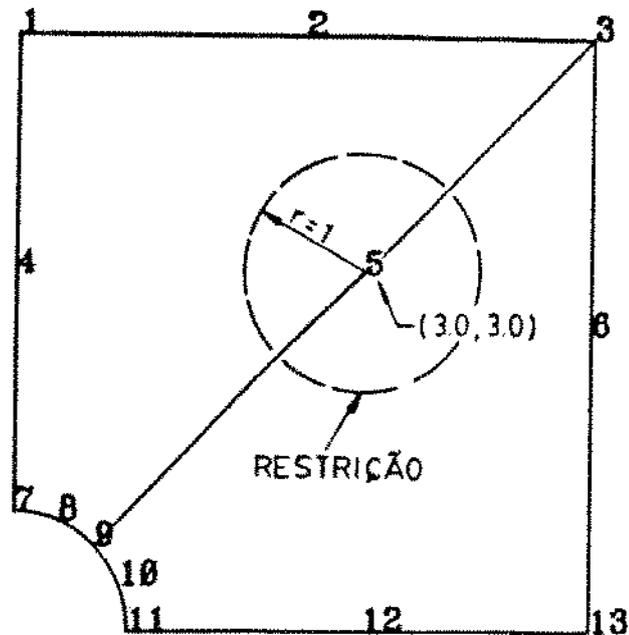


Figura 5.2: Malha inicial para comparação dos esquemas "sc" e "sa", carregamento biaxial.

A tabela 5.1 apresenta alguns resultados que permitem uma comparação dos algoritmos em estudo. Os resultados apresentados são baseados nos parâmetros de penalidade $r_0 = 1.0$ e $t = 2.0$. Nesta tabela define-se que:

- c*: parâmetro que define a precisão para critérios de parada;
- dist*: maior distância de movimento dos nós (valor que permite cálculo do parâmetro *mazalpha*);
- tempo*: tempo de execução dos programas na máquina utilizada (minutos);
- nila*: número de iterações do Lagrangeano Aumentado;
- nobj*: número de avaliações da função objetivo;
- nest*: número de análises estáticas;
- solução*: coordenadas finais do nó 5 (solução ótima do problema);

Π : valor da energia potencial total na solução ótima;

met.	ϵ	<i>dist</i>	<i>tempo</i>	<i>nila</i>	<i>nobj</i>	<i>nest</i>	Π	Solução
sc	0.1	0.5	6:55	5	424	9	-265.8	2.274,2.274
sa	0.1	0.5	14:40	3	109	109	-265.8	2.259,2.259
sc	0.01	0.5	14:40	11	941	15	-265.8	2.291,2.291
sa	0.01	0.5	18:03	4	147	147	-265.8	2.292,2.293
sc	0.01	1.0	6:12	6	390	7	-265.8	2.290,2.290
sa	0.01	1.0	17:36	3	132	132	-265.8	2.291,2.291

Tabela 5.1: Comparação entre esquemas “sc” e “sa”.

Os principais aspectos comparativos são:

- ambos os algoritmos convergem para a mesma solução dentro dos respectivos parâmetros de critérios de parada (precisão). A solução esperada neste exemplo é o ponto (2.2929, 2.2929).
- nos exemplos estudados o algoritmo “sc” alcançou a solução ótima num menor tempo de execução do programa do que o algoritmo “sa”. Não é possível afirmar este comportamento como regra geral, pois muitos fatores estão envolvidos, tais como a própria otimização dos códigos computacionais. Pode-se dizer que nos casos estudados, a maior fração do tempo é utilizada na busca unidimensional, e no esquema “sa” esta etapa é mais custosa devido às várias análises estáticas efetuadas.
- observou-se que o algoritmo “sa” requer um menor número de iterações do Lagrangeano Aumentado do que o algoritmo “sc”. Este fato decorre de que no algoritmo “sa” a busca unidimensional é feita mais rigorosamente devido à atualização do estado de equilíbrio.
- é possível observar que o número de avaliações da função objetivo no algoritmo “sa” é menor do que no algoritmo “sc” também devido ao fato de que a atualização do estado de equilíbrio é uma postura mais rigorosa e precisa.

- verifica-se o significativo aumento do esforço computacional ao se utilizar um critério de parada mais estreito.
- observa-se que um maior valor de *dist* (consequentemente de *maxalpha*) leva mais facilmente à solução nos casos em que ocorre o sucesso do método. Isto é decorrência direta de que o valor ideal para o máximo passo permissível é infinito, e que o efetivo passo é determinado na busca unidimensional. Sabe-se porém que o risco de uma falha por excessiva distorção de elementos é maior quando maiores valores de *dist* são usados.
- o efeito dos parâmetros de penalidade já foram discutidos no Capítulo 2.

5.2.2 Exemplo que ilustra uma variação no ponto de partida

Este exemplo apresenta também uma malha representando o mesmo problema da malha da figura 5.2, com as mesmas duas variáveis de otimização, onde o nó número 5 sofreu uma perturbação em relação à malha da figura 5.2.

As coordenadas iniciais do nó 5 são (2.4, 3.2871) representando a malha da figura 5.3, que possui uma energia potencial total inicial $\Pi_0 = -265.3 J$. Um círculo de raio unitário com centro na posição inicial do nó 5 é usado. Observa-se que a solução esperada, devido à simetria do problema, é que o nó 5 mova-se para o ponto (2.2929, 2.2929). Os resultados obtidos são apresentados na tabela 5.2.

met.	ϵ	<i>dist</i>	<i>tempo</i>	<i>nila</i>	<i>nobj</i>	<i>nest</i>	Π	Solução
sc	0.01	0.5	16:20	11	963	16	-265.8	2.283,2.303
sa	0.01	0.5	19:20	4	151	151	-265.8	2.282,2.303

Tabela 5.2: Resultados de malha com perturbação inicial.

É interessante salientar que,

- a solução ótima esperada foi encontrada (dentro dos respectivos critérios de parada).

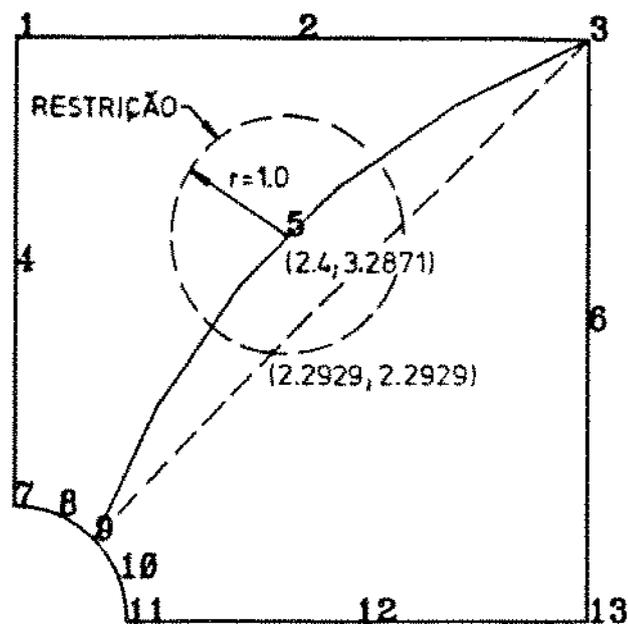


Figura 5.3: Malha inicial perturbada, carregamento biaxial.

- devido ao ponto inicial representar uma situação não simétrica, relativamente menos favorável do que a situação simétrica, o custo computacional aumentou em relação ao caso simétrico (tabelas 5.1 e 5.2).

5.2.3 Exemplos para comparação com os resultados da referência [16]

Nesta seção são apresentados dois exemplos de malhas otimizadas, obtidas através da metodologia estudada neste trabalho, e é feita uma comparação com os resultados da referência [16]. Como a solução obtida dos algoritmos “sc” e “sa” é a mesma, preferiu-se utilizar o algoritmo “sc” por ser o mais rápido. Os resultados são apresentados na forma gráfica, e comentados em termos de energia potencial total, Π , tensão na direção y no ponto A da placa (figura 5.1), σ_y , e em termos do fator de concentração de tensão no ponto A . O valor analítico para este fator, assumindo que a placa é infinita na direção y é $K_t = 3.135$, [16,96]. Este fator é definido pela relação entre a tensão na direção y no ponto A e a tensão aplicada distante do furo. No caso em estudo a tensão aplicada é de $1000 Pa$ (tração uniaxial em y). Portanto espera-se que a tensão

em y calculada no ponto A seja o mais próxima de $3135 Pa$. Para comparação dos resultados o erro percentual, E_e , em relação ao valor esperado da tensão é calculado. Observa-se que este erro é o mesmo erro que afeta o fator de concentração de tensão. As características do material da placa são $E = 2.07 \times 10^{11} Pa$ e $\nu = 0.0$.

Resultados comparativos são apresentados na tabela 5.3, onde o subíndice “[16]” refere-se aos resultados da referência [16] e o subíndice “obtido” refere-se aos resultados obtidos neste trabalho.

exemplo	malha	$\Pi_{[16]} [J]$	$\Pi_{obtido} [J]$	$K_{t,[16]}$	$K_{t,obtido}$
5.2.3-A	inicial	-6.5467E-5	-6.5546E-5	2.700	2.755
5.2.3-A	otimizada	-6.6229E-5	-6.6177E-5	3.055	2.957
5.2.3-B	inicial	-6.6138E-5	-6.6157E-5	2.891	2.904
5.2.3-B	otimizada	-6.6599E-5	-6.6363E-5	3.146	3.131

Tabela 5.3: Comparação com a referência [16], placa com furo.

Os nós fixos e número de variáveis de otimização destes exemplos são:

- 5.2.3-A: 1, 2, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 13 (8 variáveis de otimização).
- 5.2.3-B: 1, 2, 3, 12, 14, 15, 16, 17, 21 (24 variáveis de otimização).

Exemplo 5.2.3-A: Malha com 2 elementos

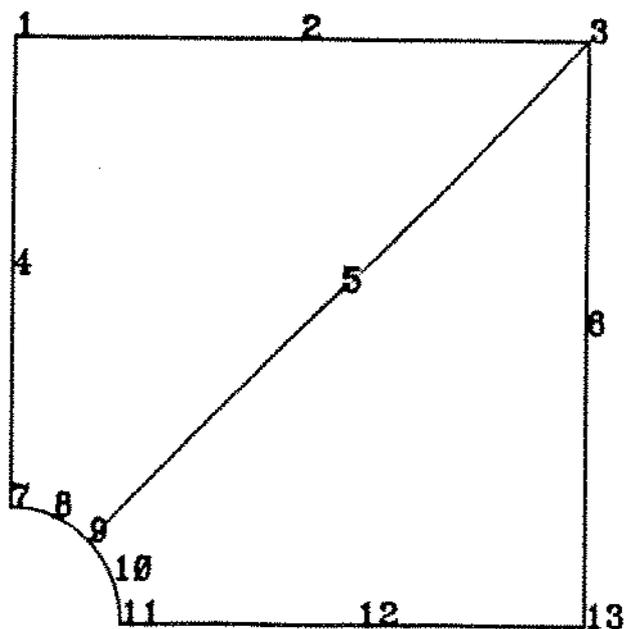


Figura 5.4: Malha inicial: $\Pi = -6.5546E - 5 J$, $\sigma_y = 2755.91 Pa$, $E_\sigma = 12.09\%$

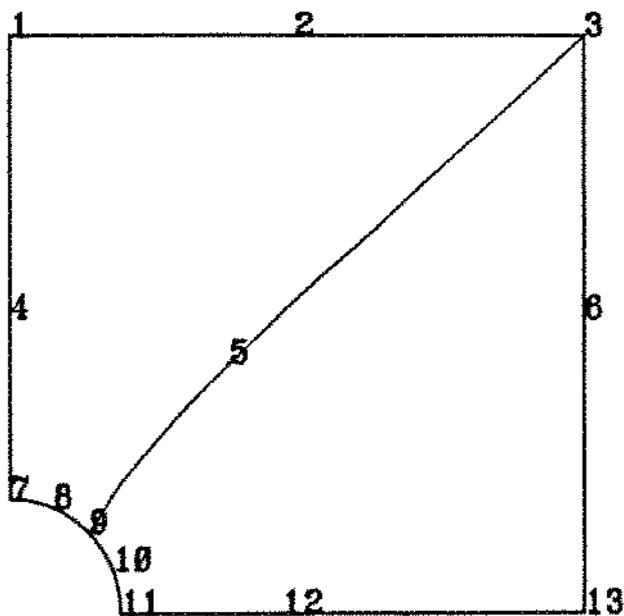


Figura 5.5: Malha otimizada: $\Pi = -6.6177E - 5 J$, $\sigma_y = 2957.28 Pa$, $E_\sigma = 5.67\%$

Exemplo 5.2.3-B: Malha com 4 elementos

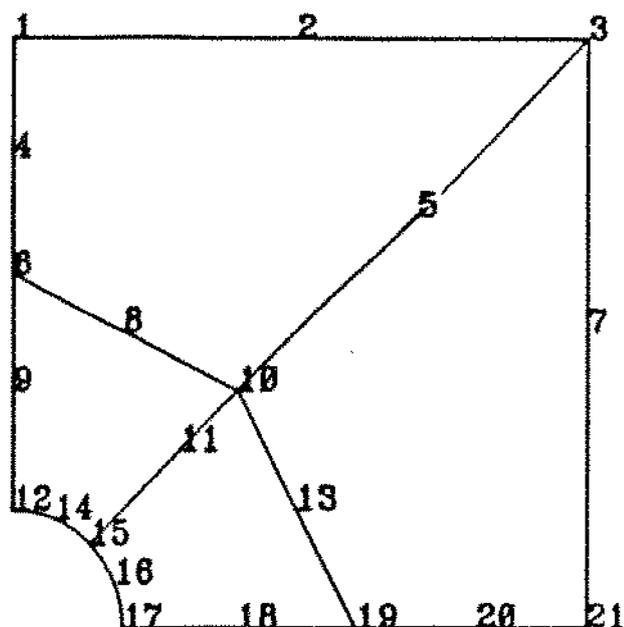


Figura 5.6: Malha inicial: $\Pi = -6.6157E - 5 J$, $\sigma_y = 2903.67 Pa$, $E_\sigma = 7.34\%$

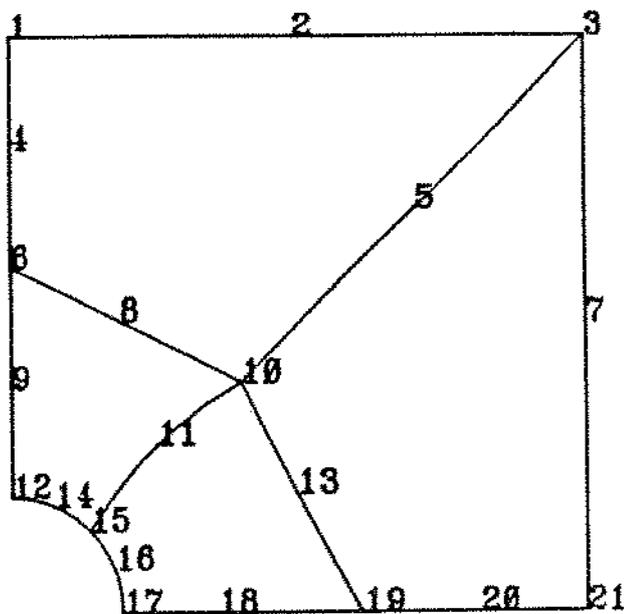


Figura 5.7: Malha otimizada: $\Pi = -6.6363E - 5 J$, $\sigma_y = 3131.16 Pa$, $E_\sigma = 0.12\%$

5.2.4 Exemplo de falha por excessiva distorção dos elementos

No sentido de ilustrar o tipo de falha mais frequente nos algoritmos estudados, apresenta-se uma malha onde ocorreu a excessiva distorção dos elementos, figura 5.8.

Nesta malha, os nós fixos são 1, 2, 3, 12, 14, 15, 16, 17, 21, caracterizando um problema de otimização com 24 variáveis.

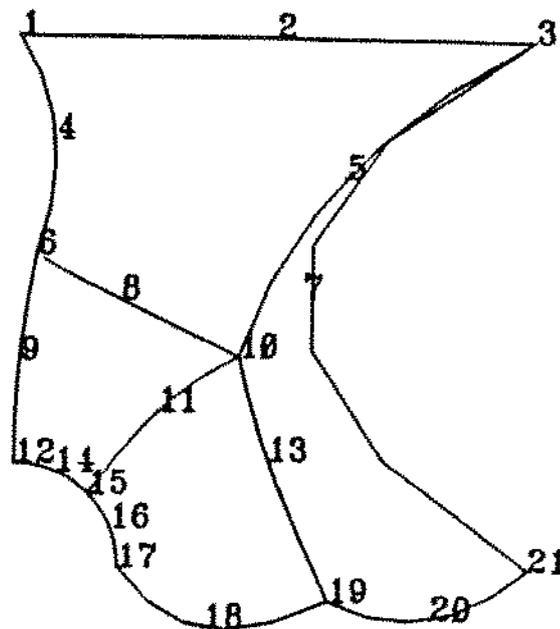


Figura 5.8: Malha com excessiva distorção de elementos.

5.2.5 Exemplos adicionais baseados na placa com furo

São apresentados outros quatro exemplos também baseados no problema da placa com furo sujeita a um carregamento uniaxial (direção y) de $1000 Pa$. As propriedades do material da placa são $E = 100000 Pa$ e $\nu = 0.3$.

No caso de uma placa de dimensões infinitas, sabe-se que no ponto A (figura 5.1) tem-se unicamente tensão em y ($\sigma_y \neq 0, \sigma_x = \sigma_{xy} = 0$). Nesta situação a tensão equivalente de Von Mises, σ_{eq} , no ponto A é igual ao próprio valor de σ_y ($\sigma_{eq} = \sigma_y$ no ponto A).

Os resultados práticos das análises por elementos finitos são apresentados geralmente em termos das tensões equivalentes nos pontos de integração dos elementos, valores estes que são usados como parâmetros de falha.

Face a estas considerações, nos quatro exemplos seguintes são feitas comparações em termos da tensão equivalente máxima obtida na malha (no ponto de integração mais crítico), σ_{max} , com relação ao valor de referência de $3135 Pa$. Define-se o indicador percentual, I_σ , da tensão equivalente máxima com relação ao valor de referência. Este indicador representa uma medida da capacidade da malha em fornecer resultados melhores sob o ponto de uma análise prática.

Exemplo 5.2.5-A: Malha com 2 elementos

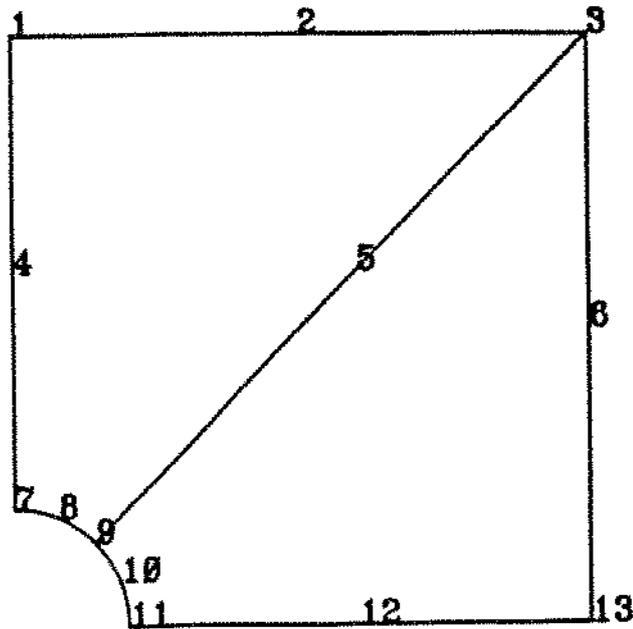


Figura 5.9: Malha inicial: $\Pi = -135.653 J$, $\sigma_{max} = 1733.65 Pa$, $I_{\sigma} = 44.70\%$

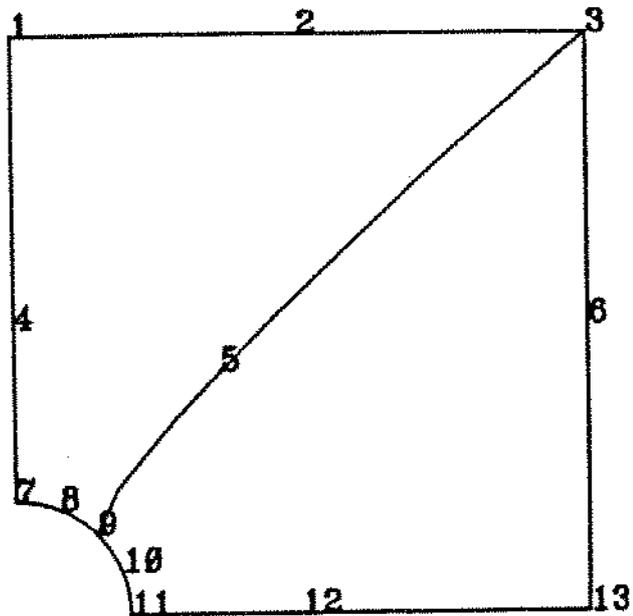


Figura 5.10: Malha otimizada: $\Pi = -136.927 J$, $\sigma_{max} = 2004.60 Pa$, $I_{\sigma} = 36.06\%$

Exemplo 5.2.5-B: Malha com 4 elementos

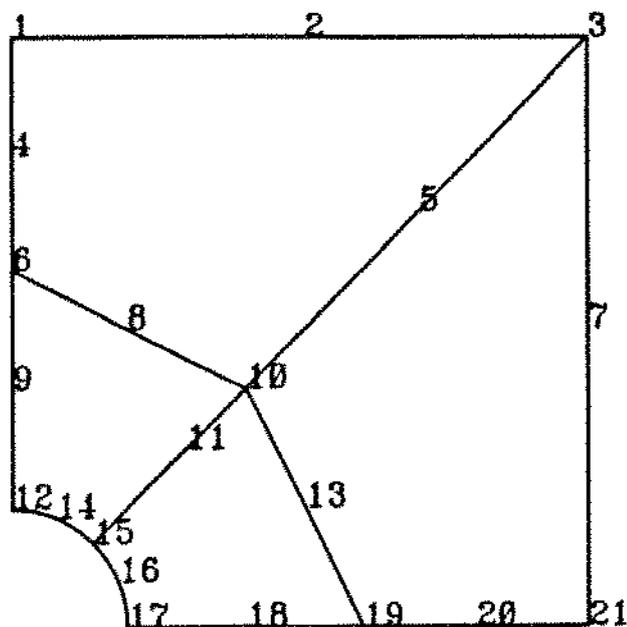


Figura 5.11: Malha inicial: $\Pi = -136.857 J$, $\sigma_{max} = 2110.87 Pa$, $I_\sigma = 32.67\%$

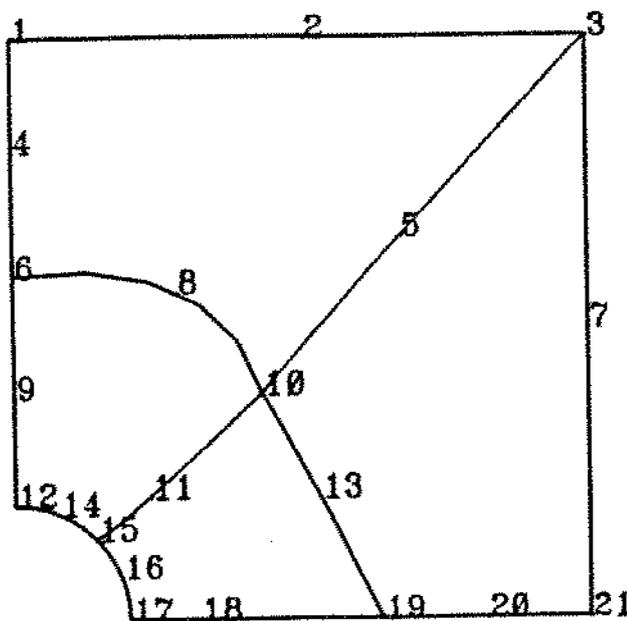


Figura 5.12: Malha otimizada: $\Pi = -137.698 J$, $\sigma_{max} = 2701.30 Pa$, $I_\sigma = 13.83\%$

Exemplo 5.2.5-C: Malha com 6 elementos

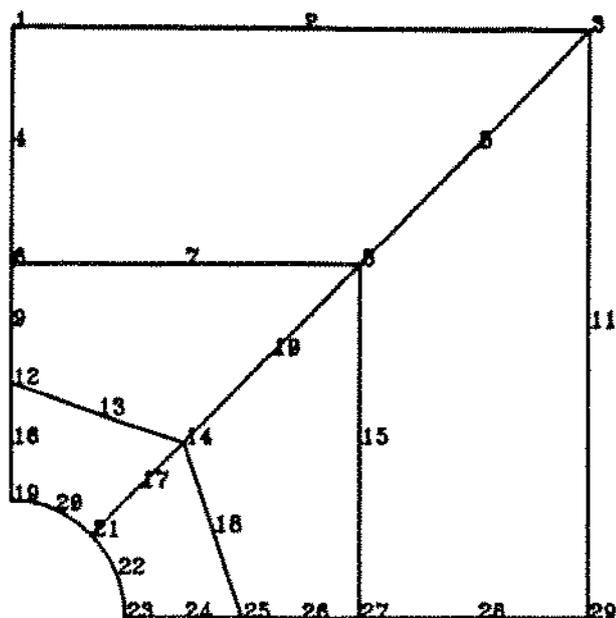


Figura 5.13: Malha inicial: $\Pi = -137.488 J$, $\sigma_{max} = 2523.54 Pa$, $I_\sigma = 19.50\%$

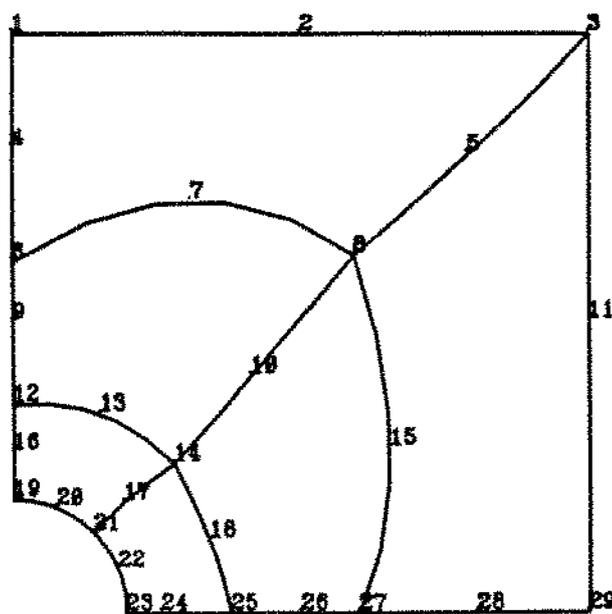


Figura 5.14: Malha otimizada: $\Pi = -137.887 J$, $\sigma_{max} = 2887.60 Pa$, $I_\sigma = 7.89\%$

Exemplo 5.2.5-D: Malha com 12 elementos

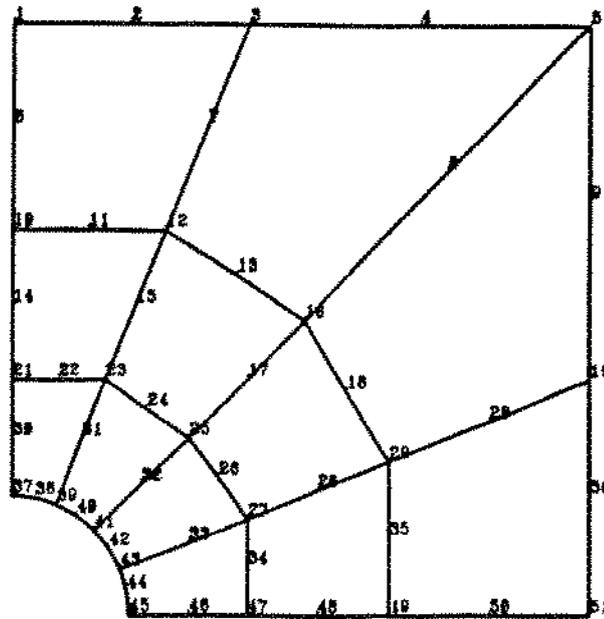


Figura 5.15: Malha inicial: $\Pi = -137.874 J$, $\sigma_{max} = 2592.30 Pa$, $I_\sigma = 17.31\%$

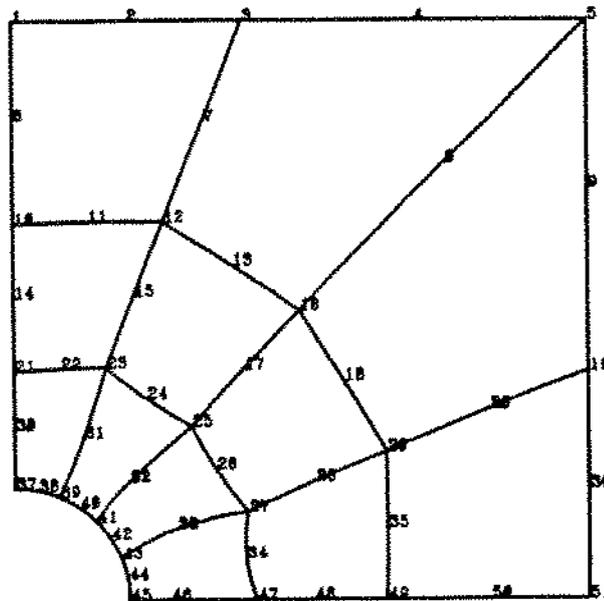


Figura 5.16: Malha otimizada: $\Pi = -138.108 J$, $\sigma_{max} = 2974.00 Pa$, $I_\sigma = 5.13\%$

5.3 Exemplo de aplicação na mecânica de fratura, estado plano de deformações

Apresenta-se um exemplo de placa com trinca na lateral, no caso de estado plano de deformações como mostrado na figura 5.17. As propriedades do material da placa são $\nu = 0.29$ e $E = 2.07 \times 10^{11} Pa$. A placa possui espessura unitária. Para fins de modelamento de elementos finitos, apenas a parte superior é considerada devido à simetria, figura 5.18. Um carregamento distribuído uniaxial $Q = 1000 Pa$ é utilizado.

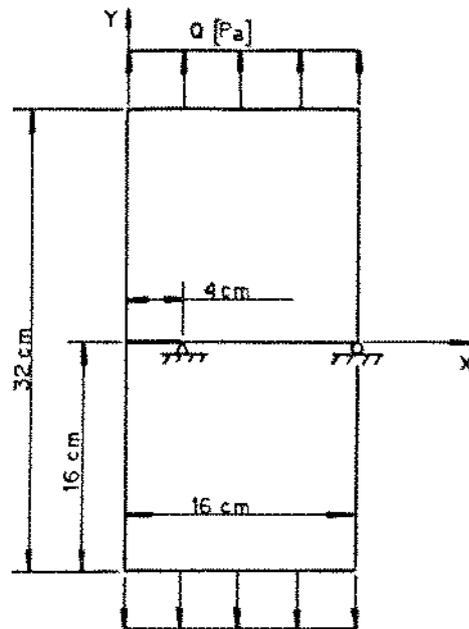


Figura 5.17: Placa com trinca na lateral.

Para efeito de comparação é calculado o fator de intensificação de tensão (modo I) da trinca, que é um parâmetro de importância na mecânica da fratura. O valor analítico esperado para este fator no caso da placa estudada é $K_I = 532 N/m^{1.5}$ (com 1 % de precisão, [16,115]). Os resultados obtidos neste trabalho podem ser comparados com os resultados apresentados em [115]. A taxa de relaxação da energia (“energy release rate”), $G [J/m]$, é calculada por,

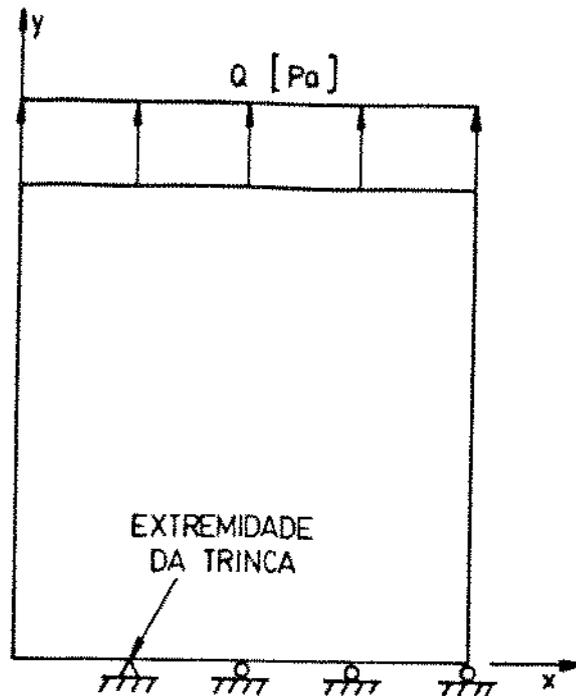


Figura 5.18: Representação de 1/2 placa simétrica, carregamento uniaxial.

$$G = \frac{\partial \Pi}{\partial x_i^c} \cdot \frac{\partial x_i^c}{\partial A} \quad (\text{sem somatório em } c) \quad (5.1)$$

onde c indica o nó que representa a extremidade da trinca.

No caso de uma placa, escreve-se que,

$$\frac{\partial x_i}{\partial A} = \frac{a_i}{t} \quad (5.2)$$

onde a_i são as componentes do vetor unitário na direção de propagação da trinca e t é a espessura da placa. Neste caso, G é calculado como sendo o negativo da projeção do gradiente da energia potencial total na direção de propagação da trinca, dividido pela espessura da placa.

Pode-se mostrar também, que para o caso linear elástico, $J = G$, onde J é a integral J introduzida por Rice, [106].

No caso deste exemplo, G , será determinado pela componente em x do gradiente no nó que representa a extremidade da trinca (no caso nó número 19).

O fator de intensificação de tensão é calculado pela expressão, [16,115],

$$K_I = \left[\frac{E}{1 - \nu^2} G \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.3)$$

Na tabela 5.4 é feita uma comparação dos resultados obtidos neste trabalho e aqueles obtidos na referência [115] (os valores são dados em unidades SI). Define-se também o erro relativo, E_k , do fator de intensificação obtido em relação ao valor esperado.

exemplo	$\Pi_{[16]}$	Π_{obtido}	$G_{[16]} J/m$	G_{obtido}	$K_{I,[16]}$	$K_{I,obtido}$
inicial	-6.2375E-8	-6.2384E-8	7.8318E-7	7.778E-7	432	419
otimizada	-6.5768E-8	-6.5945E-8	1.2119E-6	1.1038E-6	523	499

Tabela 5.4: Comparação com a referência [114], placa com trinca.

Exemplo 5.3.1: Malha com 4 elementos

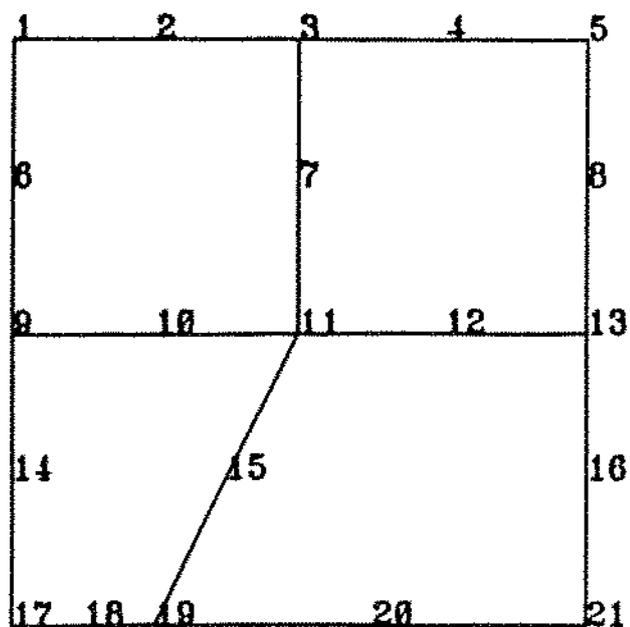


Figura 5.19: Malha inicial: $\Pi = -6.2364E - 8 J$, $K_I = 419.27 N/m^{1.5}$, $E_K = 21.20\%$

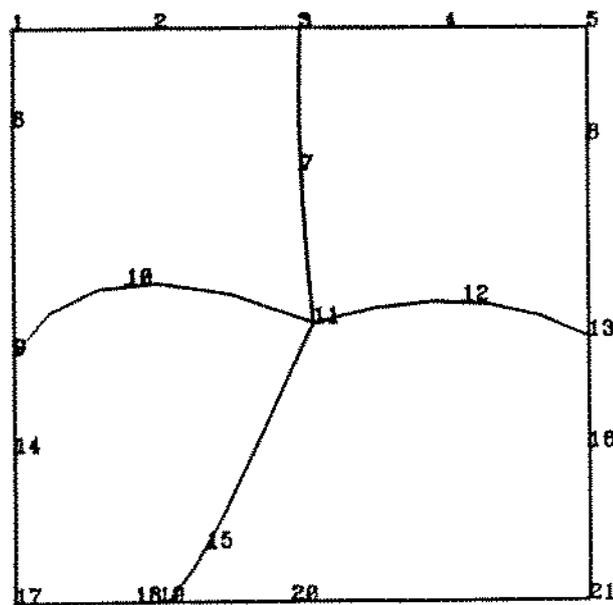


Figura 5.20: Malha final: $\Pi = -6.5945E - 8 J$, $K_I = 499.47 N/m^{1.5}$, $E_K = 6.11\%$

5.4 Comentários

Observa-se que o valor da energia potencial total apresenta uma variação pequena com a relocação dos nós. Contudo, a variação nos valores das tensões é bastante significativa, representando importantes reduções nos respectivos erros.

Salienta-se que uma malha composta de poucos elementos pode levar a resultados melhores do que uma malha mais refinada. Este é o caso de vários exemplos apresentados.

Mostrou-se um exemplo de malha onde houve a falha do método devido à excessiva distorção do elemento. Este tipo de problema ocorre com maior frequência devido a uma tendência muito grande dos nós do contorno se moverem, pois os gradientes dos nós do contorno possuem ordem de grandeza diferente dos gradientes dos nós do interior da malha. Uma possibilidade de contornar este problema é trabalhar com blocos de variáveis que possuem gradientes de mesma ordem de grandeza, como por exemplo sucessivas otimizações do interior e do contorno.

As comparações feitas com os resultados das referências [16,115] mostram a concordância dos resultados obtidos. Salienta-se que a metodologia seguida neste trabalho é diferente daquela seguida nas referências [16,115]. O algoritmo de otimização usado em [16] utiliza conceitos distintos dos usados neste trabalho. Em [16,115] os nós do contorno que possuem carregamentos têm a possibilidade de mover-se, enquanto que neste trabalho estes nós são mantidos fixos. Uma outra diferença está na ordem de integração de Gauss, onde é utilizada ordem 4 nos trabalhos [16,115] e ordem 3 neste trabalho.

Capítulo 6

Conclusões

Estudou-se neste trabalho de mestrado o método r para otimização de malhas de elementos finitos, através da minimização da energia potencial total, na elasticidade linear bidimensional. Esta minimização é feita em dois passos (deslocamentos, através da resolução das equações de equilíbrio, e coordenadas) de maneira iterativa, pois os deslocamentos dependem das coordenadas. O problema foi abordado segundo o enfoque da programação matemática, empregando-se o método do Lagrangeano Aumentado, método este que resolve o problema de otimização com restrições através da resolução de sucessivos problemas de otimização irrestrita que foram solucionados aqui utilizando-se o método Quase-Newton.

Dois esquemas para o método r foram estudados: o esquema “sc” no qual o estado de equilíbrio é mantido fixo (congelado) durante a busca unidimensional, e o esquema “sa” onde o estado de equilíbrio é atualizado a cada avaliação da função objetivo. Estes esquemas são muito semelhantes e conduzem à mesma solução. Um estudo comparativo destes esquemas foi feito no Capítulo 5.

Muitos comentários já foram feitos no decorrer desta dissertação, e apresenta-se a seguir as principais conclusões que podem ser obtidas deste estudo:

- O método do Lagrangeano Aumentado é bastante geral na solução de problemas de programação não-linear. Contudo, é um método que durante seu processo

de solução gera tanto pontos factíveis como pontos infactíveis. Sob o ponto de vista do método da relocação dos nós, os pontos infactíveis causam alguns problemas, como a excessiva distorção dos elementos, levando à falha do método, e os nós do contorno quando infactíveis deixam de representar o problema físico em estudo. Estes problemas são mais acentuados nas primeiras iterações, onde as penalizações não são ainda adequadas. No sentido de resolver estes problemas, foi necessária a implantação de um mecanismo de máximo passo, que evitasse a excessiva movimentação dos nós durante as primeiras iterações.

Em função dos parâmetros de penalidade e do máximo passo, o método r , da maneira como abordado neste trabalho torna-se um método semi-empírico, onde a escolha adequada destes parâmetros é obtida por meio de tentativas, que pode levar à falha ou ao sucesso do método.

- Utilizou-se o elemento finito isoparamétrico quadrático de 8 nós. Este elemento possui a característica de por si só já levar a boas soluções. Deste modo, a energia potencial total quase não varia com a movimentação dos nós. Assim, a aplicação do método r com elementos menos sofisticados (elementos lineares) seria mais facilmente visualizada e com melhorias mais significativas. Salienta-se contudo que o elemento quadrático é um dos mais utilizados na prática, pois permite representar com grande facilidade geometrias mais complexas, e devido à particularidade do nó do lado, na posição $1/4$ do lado, simular a singularidade $r^{1/2}$ existente em problemas de fratura linear. O elemento isoparamétrico quadrático é o elemento mais utilizado para estimar o fator de intensificação de tensões, K_I .
- Salienta-se que o método r segundo o enfoque apresentado conduz a uma malha melhor que a inicial em termos de energia potencial total e atendendo a restrições pré-definidas. A especificação de diferentes restrições ou critérios de otimalidade conduzirá a outros resultados. Neste sentido, prefere-se dizer que as malhas obtidas aqui são malhas “quase-ótimas”.

- Os resultados apresentados no Capítulo 5 mostram que, embora a diminuição no valor da energia potencial total não seja expressiva, a melhoria nos valores das tensões é bastante significativa. Contudo, não é possível afirmar que o processo de otimização de malhas é mais vantajoso do que refinar-se a malha aumentando-se o número de elementos diretamente. Sabe-se contudo que os recursos computacionais são limitados, e que em análises não-lineares a diminuição no número de graus de liberdade é um importante fator. É possível dizer que uma maior aplicabilidade do método r estaria nas análises não-lineares ou em métodos mistos ($r - p$, $r - h$).
- A metodologia estudada é geral podendo ser utilizada nas mais variadas aplicações do MEF, sendo uma delas a aplicação na mecânica da fratura linear elástica.

As principais sugestões para estudos futuros, dando continuidade ao trabalho, decorrem diretamente das conclusões apresentadas, e são:

- Verificar o comportamento de outros métodos de otimização, principalmente métodos que utilizam apenas sequências de pontos factíveis, evitando problemas de distorção excessiva dos elementos, e não utilizem parâmetros empíricos que dependam de testes anteriores.
- Utilizar elementos lineares (quadrangular de 4 nós ou triangular de 3 nós) onde as variações na energia potencial total devem ser mais significativas, permitindo uma melhor visualização do método r .
- Utilizar o método r combinado com outros esquemas de refinamento de malhas, e verificar o comportamento em análises não-lineares e outros tipos de aplicações do MEF.
- Otimizar os algoritmos implementados, refinando o próprio algoritmo do Lagrangeano Aumentado, estudando outros esquemas para definição dos multiplicadores de Lagrange e parâmetros de penalidade.

- É provável que uma variante do método possa ser utilizada no problema de otimização da geometria de componentes mecânicos.

Bibliografia

- [1] Adjerid S., Flaherty J. E., "A Moving-Mesh Finite Element Method with Local Refinement for Parabolic Partial Differential Equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 3-26, (1986).
- [2] Babuska I., Dorr M. R., "Error Estimates for the Combined h and p Versions of the Finite Element Method", *Numerische Mathematik*, Vol. 37, 257-277, (1981).
- [3] Babuska I., Gui W., "Basic Principles of Feedback and Adaptive Approaches in the Finite Element Method", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 27-42, (1986).
- [4] Babuska I., Guo B. Q., "The $h - p$ Version of the Finite Element Method for Problems with Nonhomogeneous Essential Boundary Condition", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 74, 1-28, (1989).
- [5] Babuska I., Kellogg R. B., "Nonuniform Error Estimates for the Finite Element Method", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 12, No. 6, 869-875, (1975).
- [6] Babuska I., Kellogg R. B., Pitkäranta J., "Direct and Inverse Error Estimates for the Finite Elements with Mesh Refinements", *Numerische Mathematik*, Vol. 33, 447-471, (1979).
- [7] Babuska I., Szabo B., "On the Rates of Convergence of the Finite Element Method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 18, 323-341, (1982).

- [8] Babuska I., Miller A., "The Post-Processing Approach in the Finite Element Method - Part 3: A Posteriori Error Estimates and Adaptive Mesh Selection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, 2311-2324, (1984).
- [9] Babuska I., Rheinboldt W. C., "Adaptive Approaches and Reliability Estimations in Finite Element Analysis", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 17/18, 519-540, (1979).
- [10] Babuska I., Rheinboldt W. C., "A-Posteriori Error Estimates for the Finite Element Method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 12, 1597-1615, (1978).
- [11] Babuska I., Rheinboldt W. C., "Error Estimates for Adaptive Finite Element Computations", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 15, No. 4, 736-754, (1978).
- [12] Babuska I., Zienkiewicz O. C., Arantes e Oliveira E. R., Gago J. R. and Morgan K., "Accuracy Estimates and Adaptivity for Finite Element", John & Wiley, London, (1986).
- [13] Bachrach W. E., Liu W. K., Uras R. A., "A Consolidation of Various Approaches in Developing Naturally Based Quadrilaterals", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 43-62, (1986).
- [14] Baehmann P. L., Shephard M. S., Ashley R. A., Jay A. "Automated Metalforming Modeling Utilizing Adaptive Remeshing and Evolving Geometry", *Computer & Structures*, Vol. 30, No. 1/2, 319-325, (1988).
- [15] Bathe K.-J., Cimento A. P., "Some Practical Procedures for Solution of Nonlinear Finite Element Equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 22, 59-85, (1980).
- [16] Bathe K. -J., Sussman T. D., "An Algorithm for the Construction of Optimal Finite Element Meshes in Linear Elasticity", *Computing Methods for Nonlinear*

- Solid Structures Mechanics, ASME Meeting, Univ. of Houston, Texas, (1983).
- [17] Bathe, K. -J., Wilson E., "Numerical Methods in Finite Element Analysis", Prentice Hall, (1976).
 - [18] Bazaraa M. S., Shetty C. M., "Nonlinear Programming - Theory and Algorithms", John Willey & Sons, (1979).
 - [19] Bertsekas D. P., "Multiplier Method: A Survey", *Automatica*, Vol. 12, 133-145, (1976).
 - [20] Carcaillet R., Dulikravich G., Kennon S. R., "Generation of Solution-Adaptive Computational Grids Using Optimization", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 57, 279-295, (1986).
 - [21] Carey G. F., "A Mesh-Refinement Scheme for Finite Element Computations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 7, 93-105, (1976).
 - [22] Carey G. F., "Adaptive Refinement and Nonlinear Fluid Problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 17/18, 541-560, (1979).
 - [23] Carey G. F., Humphrey D. L., "Mesh Refinement and Iterative Solution Methods for Finite Element Computations", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 17, 1717-1734, (1981).
 - [24] Carey G. F., Kennon S., "Adaptive Mesh Redistribution for a Boundary Element (Panel) Method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 2315-2325 (1987).
 - [25] Carey G. F., Sharma M., Wang K. C., "A Class of Data Structures for 2-D and 3-D Adaptive Mesh Refinement", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 26, 2607-2622, (1988).
 - [26] Carey G. F., Sharma M., Wang K. C., Pardhanani A., "Some Aspects of Adaptive Grid Computations", *Computers & Structures*, Vol. 30, No. 1/2, 297-302,

(1988).

- [27] Carey G. F., Seager M., "Projection and Iteration in Adaptive Finite Element Refinement", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 21, 1681-1695, (1985).
- [28] Carpenter W. C., Zendegui S., "Optimum Nodal Locations for a Finite Element Idealization", *Engineering Optimization*, Vol. 5, 215-221, (1982).
- [29] Carrow W. E., Barker R. M., "A Theorem for Optimum Finite Element Idealizations", *International Journal for Solids Structures*, Vol. 9, 883-895, (1973).
- [30] Chen W.-F., Saleeb A. F., "Constitutive Equations for Engineering Materials - Elasticity and Modeling", Vol. I, Part One, Wiley, (1982).
- [31] Chen C. N., Wellford, Jr. L. C., "Multi-Level Finite Element Solution Algorithms Based on Multiplicative and Additive Correction Procedures", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, 27-41, (1989).
- [32] Cheng J. H., "Automatic Adaptive Remeshing for Finite Element Simulation of Forming Processes", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 26, 1-18, (1988).
- [33] Cheng J. H., Kikuchi N., "A Mesh Re-zoning Technique for Finite Element Simulations of Metal Forming Processes", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 23, 219-228, (1986).
- [34] Crawford R. H., Anderson D. C., Waggenspack W. N., "Mesh Rezoning of 2D Isoparametric Elements by Inversion", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, 523-531, (1989).
- [35] Demkowicz L., Oden J. T., "An Adaptive Characteristic Petrov-Galerkin Finite Element Method for Convection-Dominated Linear and Nonlinear Parabolic Problems in Two Space Variables", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 63-87, (1986).

- [36] Devloo, P. R. B., "An $h - p$ Adaptive Finite Element Method for Steady Compressible Flow", Ph.D. Thesis, The University of Texas at Austin, August, (1987).
- [37] Devloo P., Oden J. T., Pattani P., "An $h - p$ Adaptive Finite Element Method for the Numerical Simulation of Compressible Flow", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 70, 203-235, (1988).
- [38] Devloo P., Oden J. T., Strouboulis T., "Implementation of an Adaptive Refinement Technique for the SUPG Algorithm", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 61, 339-358, (1987).
- [39] Desai C. S., "Elementary Finite Element Method", Prentice-Hall, (1979).
- [40] Diaz A. R., Kikuchi N., Papalambros P., Taylor J. E., "Design of an Optimal Grid for Finite Element Methods", Journal of Structural Mechanics, Vol. 11, No. 2, 215-230, (1983).
- [41] Diaz A. R., Kikuchi N., Taylor J. E., "A method of Grid Optimization for Finite Element Methods", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 41, 29-45, (1983).
- [42] Dunavant D. A., Szabo B. A., "A Posteriori Error Indicators for the p-Version of the Finite Element Method", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 19, 1851-1870, (1983).
- [43] Eisemam P. R., "Adaptive Grid Generation", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 64, 321-376, (1987).
- [44] Ewing R. E., "Efficient Adaptive Procedures for Fluid-Flow Applications", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 55, 89-103, (1986).
- [45] Febres-Cedillo H. E., Bhatti M. A., "A Simple Strain Energy Based Finite Element Mesh Refinement Scheme", Computers & Structures, Vol. 28, No. 4, 523-533, (1988).

- [46] Fellipa C. A., "Optimization of Finite Element Grids by Direct Energy Search", *Applied Mathematical Modeling*, Vol. 1, 93-96, (1976).
- [47] Fellipa C. A., "Numerical Experiments in Finite Element Grid Optimization by Direct Energy Search", *Applied Mathematical Modeling*, Vol. 1, 239-244, (1977).
- [48] Fernandes P., Girdinio P., Molfini P., Repetto M., "Local Error Estimates for Adaptive Mesh Refinement", *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 24, No. 1, 299-302, (1988).
- [49] Fortin M., Tanguy P., "A Non-Standard Mesh Refinement Procedure Through Node Labelling", *Short Communications, International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, No. 7, 1361-1364, (1984).
- [50] Frey, W. H., "Selective Refinement: A New Strategy for Automatic Node Placement in Graded Triangular Meshes", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 2183-2200, (1987).
- [51] Fujita M., Yamana M., "Two-Dimensional Automatically Adaptive Finite Element Mesh Generation", *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 24, No. 1, 303-306, (1988).
- [52] Gago J. P. de S. R., Kelly D. W., Zienkiewicz O. C., "A Posteriori Error Analysis in the Finite Element Method: Part II - Adaptive Mesh Refinement", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 19, 1621-1656, (1983).
- [53] Giannakopoulos A. E., "An Adaptive Meshing Scheme for the Steady State Convective-Diffusion Problems Using FEM", *Computers & Structures*, Vol. 31, No. 4, 545-551, (1989).
- [54] Gill P. E., Murray W., "The Computation of Lagrange-Multiplier Estimates for Constrained Minimization", *Mathematical Programming*, Vol. 17, 32-60, (1979).

- [55] Glad T., Polak E., "A Multiplier Method with Automatic Limitation of Penalty Growth", *Mathematical Programming*, Vol. 17, 140-155, (1979).
- [56] Han P. S., Olson M. D., "An Adaptive Boundary Element Method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 1187-1202, (1987).
- [57] Hansen J. A., Hassager O., "A New Moving Finite Element Method Based on Quadratic Approximation Functions", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, 415-430, (1989).
- [58] Hahn S., Calmels C., Meunier G., Coulomb J. L., "A Posteriori Error Estimates for Adaptive Finite Element Mesh Generation", *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 24, No. 1, 315-317, (1988).
- [59] Hoole S. Ratnajeevan H., Javakumaran S., Hoole N. Ratnasuneeran G., "Flux Density and Energy Perturbations in Adaptive Finite Element Mesh Generation", *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 24, No. 1, 322-325, (1988).
- [60] Hsu T. -S., Saxena S. K., "New Guidelines for Optimization of Finite Element Solutions", *Computers & Structures*, Vol. 31, No. 2, 203-210, (1989).
- [61] Ito K., Kunisch K., "The Augmented Lagrangian Method for Equality and Inequality Constraints in Hilbert Spaces", *Mathematical Programming*, Vol. 46, 341-360, (1990).
- [62] Jacquote O. -P., Oden J. T., "An Accurate and Efficient a Posteriori Control of Hourglass Instabilities Underintegrated Linear and Nonlinear Elasticity", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 105-128, (1986).
- [63] Jiang B. -N., Carey G. F., "Adaptive Refinement for Least-Squares Finite Elements with Element-by-Element Conjugate Gradient Solution", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 569-580, (1987).

- [64] Jirousek J., "Hybrid-Trefftz Plate Bending Elements with p -Method Capabilities", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 1367-1393, (1987).
- [65] Jirousek J., Venkatesh A., "Implementation of Curvilinear Geometry into p -Version HT Plate Elements", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, 431-443, (1987).
- [66] Jirousek J., Venkatesh A., "A Simple Stress Error Estimator for Hybrid-Trefftz p -Version Elements", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, 211-236, (1989).
- [67] Jittorntrum K., "Accelerated Convergence for the Powell/Hestenes Multiplier Method", *Mathematical Programming*, Vol. 18, 197-214, (1980).
- [68] Joo K. J., Wilson E. L., "An Adaptive Finite Element Technique for Structural Dynamic Analysis", *Computers & Structures*, Vol. 30, No. 6, 1319-1339, (1988).
- [69] Kelly D. W., "The Self-Equilibration of Residuals and Complementary a Posteriori Error Estimates in the Finite Element Method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, 1491-1506, (1984).
- [70] Kelly D. W., Gago J. P. de S. R., Zienkiewicz O. C., "A Posteriori Error Analysis and Adaptive Processes in the Finite Element Method: Part I - Error Analysis", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 19, 1593-1619, (1983).
- [71] Kelly D. W., Isles J. D., "A Procedure for a Posteriori Error Analysis for Finite Element Method which Contains a Bounding Measure", *Computers & Structures*, Vol. 31, No. 1, 63-71, (1989).
- [72] Kelly D. W., Mills R. J., Reizes J. A., Miller A. D., "A Posteriori Estimates of the Solution Error Caused by Discretization in the Finite Element, Finite Difference and Boundary Element Methods", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, 1921-1939, (1987).

- [73] Kikuchi, N., "Adaptive Grid-Design Methods for Finite Element Analysis", *Computers Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 129-160, (1986).
- [74] Kikuchi N., "Adaptive Grid Design for Finite Element Analysis in Optimization: Part 1, Review of Finite Element Error Analysis", *Computer Aided Optimal Design: Structural and Mechanical Systems - Edited by Carlos A. Mota Soares - Nato Asi Series - Series F: Computer and Systems Sciences*, Vol. 27, (1987).
- [75] Kikuchi N., "Adaptive Grid Design for Finite Element Analysis in Optimization: Part 2, Grid Optimization", *Computer Aided Optimal Design: Structural and Mechanical Systems - Edited by Carlos A. Mota Soares - Nato Asi Series - Series F: Computer and Systems Sciences*, Vol. 27, (1987).
- [76] Kikuchi N., "Adaptive Grid Design for Finite Element Analysis in Optimization: Part 3, Shape Optimization", *Computer Aided Optimal Design: Structural and Mechanical Systems - Edited by Carlos A. Mota Soares - Nato Asi Series - Series F: Computer and Systems Sciences*, Vol. 27, (1987).
- [77] Kikuchi N., Chung K. Y., Torigaki T., "Adaptive Finite Element Methods for Shape Optimization of Linear Elastic Structures", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 57, 67-89, (1986).
- [78] Kikuchi N., Torigaki T., "Adaptive Finite Element Methods in Computer Aided Engineering", *Anais do IX Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Florianópolis - SC*, 39-61, (1987).
- [79] Kulak R. F., "Adaptive Contact Elements for Three-Dimensional Explicit Transient Analysis", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 72, 125-151, (1989).
- [80] Lam H. L., Choi K. K., Haug E. J., "A Sparse Matrix Finite Element Technique for Iterative Structural Optimization", *Computers & Structures*, Vol. 16, No.

- 1-4, 289-295, (1983).
- [81] Lasdon L. S., "Optimization Theory for Large Systems", The MacMillan Company, (1970).
 - [82] Leal R. P., Mota Soares C. A., "Adaptive Boundary Element Method for Bidi-
mensional Elasticity", Computers & Structures, Vol. 30, No. 4, 841-844, (1988).
 - [83] Liniecki A., Yun J., "Finite Element Triangular Meshing Optimization for Pure
Torsion", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 19,
929-942, (1983).
 - [84] Löhner R., "An Adaptive Finite Element Solver for Transient Problems with
Moving Bodies", Computer & Structures, Vol. 30, No. 1/2, 303-317, (1988).
 - [85] Löhner R., "An Adaptive Finite Element Scheme for Transient Problems in
CFD", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 61,
323-338, (1987).
 - [86] Ludwig R. A., Flaherty J. E., Guerinoni F., Baehmann P. L., Shephard M.
S., "Adaptive Solutions of Euler Equations Using Finite Quadtree and Octree
Grids", Computer & Structures, Vol. 30, No. 1/2, 327-336, (1989).
 - [87] Luenberger D. G., "Linear and Non Linear Programming", Addison-Wesley
Publishing Company, Inc., (1984).
 - [88] Luomi J., Rouhiainen H., "Adaptive Mesh Refinement for Magnetic Field Pro-
blems Involving Saturable Ferromagnetic Parts", IEEE Transactions on Mag-
netics, Vol. 24, No. 1, 311-314, (1988).
 - [89] Masur E. F., "Some Remarks on the Optimal Choice of Finite Element Grids",
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 14, 237-248,
(1978).

- [90] McNeice G. M., Marcal P. V., "Optimization of Finite Element Grids Based on Minimum Potential Energy", Transactions of the ASME, Journal of Engineering for Industry, Vol. 95, 186-190, (1973).
- [91] Melosh R., "Inherited Error in Finite Element Analysis of Structures", Computers & Structures, Vol. 3, 1205-1217, (1973).
- [92] Melosh R. J., Marcal P. V., "An Energy Basis for Mesh Refinement of Structural Continua", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 11, 1083-1091, (1976).
- [93] Miller K., Miller R. N., "Moving Finite Elements I", SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 18, No. 6, 1019-1032, (1981).
- [94] Miller K., "Moving Finite Element II", SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 18, No. 6, 1033-1057, (1981).
- [95] Palmerio B., "A Two-Dimensional FEM Adaptive Moving-Node Method for Steady Euler Flow Simulations", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 71, 315-340, (1988).
- [96] Peterson R. E., "Stress Concentration Factors - Charts and Relations Useful in Making Strength Calculations for Machine Parts and Structural Elements", John Wiley & Sons, (1974).
- [97] Powell M. J. D., "Algorithms for Nonlinear Constraints that Use Lagrangian Functions", Mathematical Programming, Vol. 14, 224-248, (1978).
- [98] Prager W., "A Note on the Optimal Choice of Finite Element Grids", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 6, 363-366, (1975).
- [99] Ramey G. E., Krishnamurthy N., "Error Estimates for conforming Finite Element Solutions", Computers & Structures, Vol. 4, 1207- 1222, (1974).
- [100] Rank E., "Adaptive h , p and hp -Versions for Boundary Integral Element Methods", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.

28, 1335-1349, (1987).

- [101] Rank E., Babuska I., "An Expert System for the Optimal Mesh Design in the *hp*-Version of the Finite Element Method", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 24, 2087-2106, (1987).
- [102] Rank E., Werner H., "An Adaptive Finite Element Approach for the Free Surface Seepage Problem", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 23, 1217-1228, (1986).
- [103] Rheinboldt W. C., "Trends in Numerical Analysis and Parallel Algorithms - Error Estimates for Nonlinear Finite Element Computations", Computers & Structures, Vol. 20, No. 1-3, 91-98, (1985).
- [104] Rheinboldt W. C., "Adaptive Mesh Refinement Process for Finite Element Solutions", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 17, 649-662, (1982).
- [105] Rheinboldt W. C., "On a Theory of Mesh-Refinement Processes", SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 17, No. 6, 767-778, (1980).
- [106] Rice J. R., "A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentrations by Notches and Cracks", Journal of Applied Mechanics, Vol. 35, 379-386, (1968).
- [107] Roberti P., Melkanoff M. A., "Self-Adaptive Stress Analysis Based on Stress Convergence", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 24, 1973-1992, (1987).
- [108] Rockafellar R. T., "A Dual Approach to Solving Nonlinear Programming Problem by Unconstrained Optimization", Mathematical Programming, Vol. 5, 354-373, (1973).
- [109] Serpa A. L., Ferreira J. V., Iguti F., "ANAFIN, Programa de Elementos Finitos - Manual do Usuário", Publicação Interna, DMC-FEM-UNICAMP, (1988).

- [110] Shephard M. S., Gallagher R. H., Abel J. F., "The Synthesis of Near-Optimum Finite Element Meshes with Interactive Computer Graphics", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 15, 1021-1039, (1980).
- [111] Shephard M. S., Yerry M. A., Baehmann P. L., "Automatic Mesh Generator Allowing for Efficient a Priori and a Posteriori Mesh Refinement", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 161-180, (1986).
- [112] Sledge F. R., Rheinboldt W. C., "Trends in Numerical Analysis and Parallel Algorithms - A Program Design for an Adaptive Nonlinear Finite Element Solver", *Computer & Structures*, Vol. 20, No. 1-3, 85-90, (1985).
- [113] Steger J. L., Benek J. A., "On the Use of Composite Grid Schemes in Computational Aerodynamics", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 64, 301-320, (1987).
- [114] Sussman T., Bathe K. -J., "Studies of Finite Element Procedures - On Mesh Selection", *Computers & Structures*, Vol. 21, No. 1/2, 257-264, (1985).
- [115] Sussman T., Bathe K. -J., "The Gradient of The Finite Element Variational Indicator with Respect to Nodal Point Coordinates: An Explicit Calculation and Application in Fracture Mechanics and Mesh Optimization", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 21, 763-774, (1985).
- [116] Szabo B. A., "Mesh Design for the p -Version of the Finite Element Method", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 55, 181-197, (1986).
- [117] Taig I. C., "Implicit Modelling and Mesh Refinement for Complex Structures", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 22, 17-38, (1986).
- [118] Tamma K. K., Saw K. C., "Adaptive p -Version Based Finite Element Formulations for Thermal Modeling/Analysis of Structural Configurations", *Computers & Structures*, Vol. 28, No. 6, 771-780, (1988).

- [119] Tang J. W., Turcke D. J., "Characteristics of Optimal Grids", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 11, 31-37, (1977).
- [120] Tauchert T. R., "Energy Principles in Structural Mechanics", McGraw-Hill, (1974).
- [121] Thompson J. F., "A General Three-Dimensional Elliptic Grid Generation System an a Composite Block Structure", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 64, 377-411, (1987).
- [122] Turcke D., "On Optimum Finite Element Grid Configurations", *AIAA Journal*, Vol.14, 264-265, (1975).
- [123] Turcke D. J., McNeice G. M., "Guidelines for Selecting Finite Element Grids Based on Optimization Study", *Computers & Structures*, Vol. 4, 499-519, (1974).
- [124] Utku S., Melosh R. J., "Solution Errors in Finite Element Analysis", *Computers & Structures*, Vol. 18, 379-393, (1984).
- [125] Vanderplaats G. N., "Numerical Optimization Techniques", *Computer Aided Optimal Design: Structural and Mechanical Systems - Edited by Carlos A. Mota Soares - Nato Asi Series - Series F: Computer and Systems Sciences*, Vol. 27, (1987).
- [126] Wellford Jr J. C., Gorman M. R., "A Finite Element Transitional Mesh Generation Procedure Using Sweeping Functions", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 26, 2623-2643, (1988).
- [127] Wolfe M. A., "Numerical Methods for Unconstrained Optimization", Van Nostrand Reinhold Company LTD, (1978).
- [128] Yamashita H., "A Globally Convergent Constrained Quasi-Newton Method with an Augmented Lagrangian Type Penalty Function", *Mathematical Programming*, Vol. 23, 75-86, (1982).

- [129] Yang H. T. Y., Heistein M., Shih J. -M., "Adaptive 2D Finite Element Simulation of Metal Forming Processes", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 28, 1409-1428, (1987).
- [130] Yao T. -M., Choi K. K. "3-D Shape Optimal Design and Automatic Finite Element Regridding", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 28, 369-384, (1989).
- [131] Zienkiewics O. C., "The Finite Element Method",3rd Ed., McGraw-Hill, (1977).
- [132] Zienkiewicz O. C., Liu Y. C., Huang G. C., "Error Estimation and Adaptivity in Flow Formulation for Forming Problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 25, 23-42, (1988).
- [133] Zienkiewicz O. C., Zhu J. Z., Gong N. G., "Effective and Practical hp -Version Adaptive Analysis Procedures for the Finite Element Methods", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 28, 879-891, (1989).
- [134] Zienkiewicz O. C., Zhu J. Z., "A Simple Error Estimator and Adaptive Procedure for Practical Engineering Analysis", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 24, 337-357, (1987).

Apêndice A

Aspectos práticos do método Quase-Newton para otimização irrestrita

A.1 Introdução

O método Quase-Newton (Q.N.) é um método de otimização aplicado a problemas irrestritos. É um método intermediário entre o método do gradiente convencional e o método de Newton.

O método Q.N. tem seu maior campo de aplicação nos casos em que a avaliação da matriz hessiana da função objetivo é impraticável ou custosa. O princípio fundamental do método Q.N. é que uma aproximação para a inversa da matriz hessiana (ou para a hessiana) é feita, utilizando para isso informações da iteração anterior.

A.2 Equação básica do método Quase-Newton

Seja $f(x)$ a função a ser minimizada, onde x representa o vetor das variáveis do problema.

Uma aproximação quadrática para $f(x)$ é do tipo,

$$f(x) \approx q(x) = \frac{1}{2}x^tAx + b^tx + c \quad (\text{A.1})$$

O gradiente de $g(x)$ é dado por,

$$g(x) = Ax + b \quad (\text{A.2})$$

A condição de ponto crítico de (A.1) é representada por,

$$g(x) = 0 \Rightarrow Ax + b = 0 \Rightarrow x^* = -A^{-1}b \quad (\text{A.3})$$

A equação (A.2) pode ser reescrita na forma,

$$b = g(x) - Ax \quad (\text{A.4})$$

e substituindo (A.4) em (A.3) tem-se,

$$x^* = -A^{-1}[g(x) - Ax] = x - A^{-1}g(x) \quad (\text{A.5})$$

Tomando-se um ponto $x^{(0)}$ suficientemente próximo a x , obtém-se a sequência característica do método de Newton que converge para x^* ,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - A^{-1}g(x^{(k)}) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.6})$$

No caso de uma função qualquer não quadrática, a matriz A representa a matriz hessiana ($G(x)$).

Definindo-se a matriz $H(x)$ como sendo a inversa da matriz hessiana ($H(x) = G^{-1}(x)$), reescreve-se a equação (A.6),

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H(x^{(k)})g(x^{(k)}) \quad (\text{A.7})$$

Observando a equação (A.6) nota-se que,

- É necessário montar a matriz $H(x^{(k)})$, implicando em se calcular as derivadas parciais analiticamente.
- A cada iteração é necessário avaliar $H(x^{(k)})$ numericamente, ou alternativamente resolver um sistema de equações lineares em $G(x^{(k)})$.

- A matriz $G(x^{(k)})$ pode ser singular ou não positivo definida causando a falha do método.
- A convergência só é garantida para $x^{(0)} \approx x^*$.

Face a estas considerações o método de Newton não se torna muito atraente.

Neste sentido, uma maneira alternativa seria estimar a matriz $H(x)$ diretamente, buscando manter-se uma taxa de convergência superlinear.

Consideremos o caso em que a função $f(x)$ seja convexa como primeiro caso em estudo. A matriz $G^{-1}(x)$ é simétrica, conseqüentemente a matriz $H(x)$ deve manter esta propriedade de simetria. A matriz $G^{-1}(x)$ é positivo definida de forma que $H(x)$ deve também ser positivo definida.

Usando o teorema de Taylor escreve-se que,

$$g^{(k+1)} \approx g^{(k)} + G(x^{(k+1)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \quad (\text{A.8})$$

ou alternativamente,

$$g^{(k+1)} - g^{(k)} \approx G(x^{(k+1)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \quad (\text{A.9})$$

Definindo-se,

$$\begin{aligned} s^{(k)} &= x^{(k+1)} - x^{(k)} \\ y^{(k)} &= g^{(k+1)} - g^{(k)} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

É possível reescrever (A.9) na forma,

$$y^{(k)} \approx G^{(k+1)} s^{(k)} \quad (\text{A.11})$$

ou ainda,

$$H^{(k+1)} y^{(k)} \approx s^{(k)} \quad (\text{A.12})$$

A equação (A.11) ou (A.12) é conhecida como equação “Quase-Newton”.

A estimativa da matriz $H^{(k+1)}$ deve ser feita de uma maneira simples e fácil, e de preferência usando parâmetros da iteração anterior tais como $H^{(k)}$, $y^{(k)}$ e $s^{(k)}$. Logo uma matriz $C^{(k)}$ de correção que é calculada unicamente em função de $H^{(k)}$, $s^{(k)}$ e $y^{(k)}$ pode ser adicionada a $H^{(k)}$, gerando $H^{(k+1)}$,

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + C^{(k)} \quad (\text{A.13})$$

Esta matriz $C^{(k)}$ deve preservar as características da matriz $H^{(k)}$ (simétrica e positivo definida).

A.3 O algoritmo Quase-Newton

Sendo a função $f(x)$ convexa, a matriz H deve ser positivo definida, podendo-se escrever que,

$$g^t H g > 0 \Rightarrow -g^t H g < 0 \quad (\text{A.14})$$

Chamando $p = -Hg$ a direção de busca, e observando (A.14),

$$g^t p < 0 \quad (\text{A.15})$$

donde conclui-se que p é uma direção de descida. Logo se $g^{(k)} \neq 0$ e $H^{(k)} > 0$ (positivo definida), existe $\alpha^{(k)}$ tal que,

$$f(x^{(k)} - \alpha^{(k)} H^{(k)} g^{(k)}) < f(x^{(k)}) \quad (\text{A.16})$$

levando à sequência básica do algoritmo Q.N.,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} H^{(k)} g^{(k)} \quad (\text{A.17})$$

que contorna as observações desfavoráveis associadas ao método de Newton.

Tendo em vista as considerações anteriores, o algoritmo padrão Q.N. é do tipo,

1. Assume-se que $x^{(0)}$ e $H^{(0)}$ são dados (em geral $H=I$).
2. $k = 0$

3. Calcular $f^{(k)} = f(x^{(k)})$ e $g^{(k)} = g(x^{(k)})$
4. Calcular a direção de procura $p^{(k)} = -H^{(k)}g^{(k)}$
5. Busca unidimensional, obtendo $\alpha^{(k)}$ tal que,

$$f(x^{(k)} + \alpha^{(k)}p^{(k)}) \approx \min_{\alpha} f(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$$

ou no mínimo garantindo-se que,

$$f(x^{(k)} + \alpha^{(k)}p^{(k)}) < f(x^{(k)})$$

6. Calcular $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)}p^{(k)}$
7. Calcular

$$g^{(k+1)} = g(x^{(k+1)})$$

$$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

$$y^{(k)} = g^{(k+1)} - g^{(k)}$$

8. Computar $H^{(k+1)} = H^{(k)} + C^{(k)}$ onde $C^{(k)}$ é tal que $H^{(k+1)}$ seja positivo definida (função convexa) e satisfaça a equação Q.N. (A.12).
9. $k=k+1$, volte para 4

A.4 As fórmulas para a matriz $C^{(k)}$ de correção

Algumas fórmulas para a matriz $C^{(k)}$ de correção são encontradas em trabalhos envolvendo o método Q.N.. São apresentadas neste trabalho as duas formulações mais usuais e famosas conhecidas como fórmulas DFP e BFGS. Uma combinação destas também pode ser utilizada e é aqui apresentada, [127].

A.4.1 Fórmula DFP

A matriz $H^{(k+1)}$ que satisfaz a equação Quase-Newton não é única. Mostra-se facilmente que uma fórmula do tipo,

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + s^{(k)}u^{(k)t} - H^{(k)}y^{(k)}v^{(k)t} \quad (\text{A.18})$$

onde,

$$u^{(k)t}y^{(k)} = v^{(k)t}y^{(k)} = 1 \quad (\text{A.19})$$

satisfaz a equação (A.12) (basta pós-multiplicar (A.18) por $y^{(k)}$ e usar o resultado de (A.19)).

O resultado de (A.19) pode ser reescrito na forma,

$$u^{(k)} = \frac{s^{(k)}}{s^{(k)t}y^{(k)}} \quad (\text{A.20})$$

$$v^{(k)} = \frac{H^{(k)}y^{(k)}}{y^{(k)t}H^{(k)}y^{(k)}} \quad (\text{A.21})$$

Logo a equação (A.18) torna-se,

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + \frac{s^{(k)}s^{(k)t}}{s^{(k)t}y^{(k)}} - \frac{(H^{(k)}y^{(k)})(H^{(k)}y^{(k)})t}{y^{(k)t}H^{(k)}y^{(k)}} \quad (\text{A.22})$$

caracterizando a fórmula DFP.

A.4.2 Fórmula BFGS

A fórmula BFGS é do tipo,

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + \frac{s^{(k)}s^{(k)t}}{s^{(k)t}y^{(k)}} - \frac{H^{(k)}y^{(k)}y^{(k)t}H^{(k)}}{y^{(k)t}H^{(k)}y^{(k)}} + y^{(k)t}H^{(k)}y^{(k)}rrt \quad (\text{A.23})$$

onde

$$r = \frac{s^{(k)}}{s^{(k)t}y^{(k)}} - \frac{H^{(k)}y^{(k)}}{y^{(k)t}H^{(k)}y^{(k)}} \quad (\text{A.24})$$

Observa-se facilmente de (A.22) e (A.23) que,

$$H_{BFGS}^{(k+1)} = H_{DFP}^{(k+1)} + y^t H y r r^t \quad (\text{A.25})$$

Já foi verificado que $H_{DFP}^{(k+1)}$ satisfaz a equação Quase-Newton. Para que $H_{BFGS}^{(k+1)}$ faça o mesmo deve-se mostrar que,

$$y^t H y r r^t = 0 \quad (\text{A.26})$$

como é apresentado a seguir.

$$\begin{aligned} r r^t &= \left[\frac{s}{s^t y} - \frac{H y}{y^t H y} \right] \left[\frac{s}{s^t y} - \frac{H y}{y^t H y} \right]^t = \\ &= \frac{s s^t}{(s^t y)(s^t y)} - \frac{s y^t H}{(s^t)(y^t H y)} - \frac{H y s^t}{(y^t H y)(s^t y)} + \frac{H y y^t H}{(y^t H y)(y^t H y)} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Usando o resultado da equação Quase-Newton ($H y = s$) em (A.27) mostra-se que,

$$r r^t = \frac{s s^t}{(s^t y)(s^t y)} - \frac{s s^t}{(s^t y)(s^t y)} - \frac{s s^t}{(s^t y)(s^t y)} + \frac{s s^t}{(s^t y)(s^t y)} = 0 \quad (\text{A.28})$$

como se desejava mostrar (isto é, a equação (A.26) é satisfeita).

A.4.3 Combinação das fórmulas DFP e BFGS

A combinação sugerida para as fórmulas DFP e BFGS é da forma,

$$H = (1 - \theta) H_{DFP} + \theta H_{BFGS} \quad (\text{A.29})$$

onde θ é escolhido segundo algum critério, como o apresentado a seguir.

Supondo que f seja quadrática, com matriz hessiana A simétrica e positivo definida. Logo,

$$s = A^{-1} y \quad (\text{A.30})$$

ou ainda,

$$y^t A^{-1} y = s^t y \quad (\text{A.31})$$

No caso em que

$$y^t A^{-1} y \geq y^t H y \quad (\text{A.32})$$

é possível imaginar que H é “menor” que A^{-1} . É portanto razoável usar a fórmula (A.29) fazendo $\theta = 1$ (correspondendo à fórmula BFGS) pois neste caso estar-se-ia usando o “maior” valor de H , procurando aproximar melhor A^{-1} .

Por outro lado, se

$$y^t A^{-1} y < y^t H y \quad (\text{A.33})$$

é razoável usar $\theta = 0$ (correspondendo á fórmula DFP), pois $H_{\theta=0}$ seria o “menor” valor de H na equação (A.29). Os conceitos de “maior” e “menor” referindo-se a matrizes são relacionados aos seus autovalores.

Assim pode-se escolher θ como,

$$\theta = \begin{cases} 0 & \text{se } s^t y < y^t H y \\ 1 & \text{se } s^t y \geq y^t H y \end{cases} \quad (\text{A.34})$$

A.5 Comentários sobre aspectos computacionais do método Q.N.

O passo 5 do algoritmo apresentado, isto é, a busca unidimensional pode ser resolvida usando vários procedimentos tais como método da falsa posição (secante), aproximação cúbica, aproximação quadrática e outros.

Testes no algoritmo Q.N. foram feitos usando os métodos da falsa posição e da aproximação cúbica, e para os exemplos testados a aproximação cúbica apresentou melhor desempenho. De um modo geral nota-se que o método Q.N. não é muito sensível em relação à precisão da busca unidimensional.

Apresenta-se a seguir uma comparação de vários métodos de otimização aplicados ao seguinte problema exemplo,

$$\min f(x) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2 \quad (\text{A.35})$$

com ponto inicial $x^{(0)} = (0, 3)$.

Na tabela A.1 tem-se que: Grad. Conv.: método do gradiente convencional; Grad. Conj.: método do gradiente conjugado; Q.N.: método Quase-Newton usando combinação das fórmulas DFP e BFGS; ϵ : define critério de parada, isto é, o método assume ter encontrado a solução quando $\|\nabla f(x)\| < \epsilon$, e *niter* representa a número de iterações.

Método	ϵ	niter	Solução
Grad. Conv.	1.0E-3	221	(2.059,1.030)
Grad. Conj.	1.0E-3	18	(2.063,1.031)
Newton	1.0E-3	10	(1.948,0.974)
Q.N.	1.0E-3	11	(2.023,1.012)

Tabela A.1: Comparação de alguns métodos de otimização irrestrita

Note-se que para grandes sistemas o algoritmo apresentado é inferior aos métodos de gradiente conjugado e de Newton sob o aspecto de memória computacional requerida, pois a matriz $H(x^{(k)})$ nunca é esparsa. Nesses casos, se a hessiana for esparsa a equação (A.13) pode ser escrita na forma de produto,[15],

$$H^{(k+1)} = C^{(k)T} H^{(k)} C^{(k)} \quad (\text{A.36})$$

A.6 Conclusões sobre o método Quase-Newton

O método Q.N. apresenta uma boa taxa de convergência, é de fácil implementação computacional e utiliza apenas o valor da função objetivo e de seu gradiente no seu algoritmo.