

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

**Otimização de Forma Estrutural e Aerodinâmica
usando Análise IsoGeométrica e Elementos Finitos**

Luis Felipe da Rosa Espath

Porto Alegre

2013

Luis Felipe da Rosa Espath

Otimização de Forma Estrutural e Aerodinâmica usando Análise IsoGeométrica e Elementos Finitos

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Engenharia. Orientação: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch.

Porto Alegre

2013

Espath, Luis Felipe da Rosa
Otimização de Forma Estrutural e Aerodinâmica usando Análise IsoGeométrica e Elementos Finitos / Luis Felipe da Rosa Espath. – 2013.
324 f.

Orientador: Armando Miguel Awruch.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Escola de Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil. Porto Alegre, BR-RS, 2013.

1. Otimização matemática. 2. Análise Estrutural IsoGeométrica. 3. Análise Aerodinâmica por Elementos Finitos. 4. NURBS. 5. Diferenciação Automática. I. Awruch, Armando Miguel, orient. II. Título.

Luis Felipe da Rosa Espath

Otimização de Forma Estrutural e Aerodinâmica usando Análise
IsoGeométrica e Elementos Finitos

Esta tese de doutorado foi julgada adequada para a obtenção do título de DOUTOR EM ENGENHARIA, na Área de Concentração de ESTRUTURAS, e aprovada em sua forma final pelo professor orientador e pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Porto Alegre, 13 de setembro de 2013

Prof. Armando Miguel Awruch
Dr. COPPE/UFRJ
Orientador

Dr. Armando Miguel Awruch
Coordenador do PPGEC/UFRGS

Comissão Julgadora:

Ph.D. Julio Romano Meneghini
Dr. Imperial College London

Dr. Rogério José Marczak
Dr. PPGEC/UFRGS

Dr. Samir Maghous
Dr. Ecole Nationale Des Ponts et Chaussees

Dedico a Luca y Gise

Agradecimentos

Ao Prof. Armando Miguel Awruch, pela orientação, dedicação e incentivo durante a realização deste trabalho.

À minha família, Luca y Gisela. Aos meus Pais e meu Irmão.

À agradável amizade que formei com os colegas do PPGEC. Em particular, aos amigos Renato Vaz Linn, Sergio Daniel Cardozo, Felipe Schaedler de Almeida e Alexandre Luis Braun.

À Professor Maria Angela Vaz dos Santos pelo incentivo e apoio.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil – PPGEC/UFRGS. Em especial aos professores Inácio Benvegnu Morsch e Samir Maghous.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior – CAPES – e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq – pela bolsa de estudos.

Epígrafe

Somos lo que hacemos para
cambiar lo que somos

Eduardo Galeano

Resumo

Espath, L.F.R. **Otimização de Forma Estrutural e Aerodinâmica usando Análise IsoGeométrica e Elementos Finitos.** Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre, 2013.

Neste trabalho buscou-se consolidar aspectos referentes à otimização de problemas envolvidos na mecânica dos meios contínuos, envolvendo diferentes áreas do conhecimento, tais como: otimização matemática, diferenciação automática, análise estrutural, análise aerodinâmica, parametrização de curvas, superfícies e sólidos do tipo *B-spline* racionais não-uniformes (NURBS, acrônimo do inglês), análise IsoGeométrica (IGA, acrônimo do inglês) e análise por Elementos Finitos (FEA, acrônimo do inglês). Como objetivo final busca-se otimizar formas de cascas estruturais e formas de corpos aerodinâmicos imersos em escoamentos compressíveis. No que concerne à análise estrutural, esta é realizada via análise IsoGeométrica utilizando elementos sólidos para modelar cascas. Uma cinemática co-rotacional abrangente e precisa baseada na exata decomposição polar é desenvolvida, para lidar com problemas estáticos e dinâmicos altamente não lineares. Na análise estática foram implementados o método de Newton-Raphson e controle de deslocamentos generalizado, para problemas dinâmicos foram implementados o método α -generalizado ($G\alpha$) e o método energia momento generalizado (GEMM+ ξ). A análise aerodinâmica é realizada via análise por Elementos Finitos para modelar escoamentos compressíveis viscosos e não viscosos em regimes transônicos e supersônicos. Um esquema característico baseado na separação da equação de momento (CBS, acrônimo do inglês) é utilizado para obter uma adequada integração temporal. No que concerne à otimização matemática, é utilizado um método baseado em gradientes, conhecido por programação quadrática sequencial (SQP, acrônimo do inglês), onde a avaliação as derivadas de Fréchet são levadas a cabo via diferenciação automática (AD, acrônimo do inglês). No que concerne aos resultados finais é realizada a otimização estrutural de forma de cascas modeladas como sólidos são apresentados, evidenciando um desempenho ótimo com respeito à energia de deformação interna. Os resultados de otimização aerodinâmica bidimensionais apresentam perfis aerodinâmicos ótimos com respeito à relação arrasto/sustentação para uma ampla gama de número de Mach, enquanto um resultado tridimensional é apresentado evidenciando a robustez e eficiência da implementação proposta. Pretende-se estabelecer com este trabalho as bases para pesquisas em problemas de otimização aeroelástica.

Palavras-chave: Otimização Matemática, Análise Estrutural IsoGeométrica, Análise Aerodinâmica por Elementos Finitos, NURBS, Diferenciação Automática.

Abstract

Espath, L.F.R. **Structural and Aerodynamic Shape Optimization using IsoGeometric and Finite Element Analysis**. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre, 2013.

Consolidation of the link among optimization problems in continuum mechanics, involving different fields, such as mathematical optimization, automatic differentiation, structural analysis, aerodynamic analysis, curves, surfaces and solids parameterization using Non Uniform Rational B-spline (NURBS), IsoGeometric Analysis (IGA), Finite Element Analysis (FEA) is looked for. Structural shape optimization of shell structures and aerodynamic shape optimization of immersed bodies in compressible flows are the main goals of this work. Concerning structural analysis, the so-called IsoGeometric analysis is employed. An accurate and comprehensive corotational kinematic based on the exact polar decomposition is developed in order to study highly nonlinear static and dynamic problems. Static analysis is carried out with Newton-Raphson and Generalized Displacement Control Method, while dynamic analysis is carried out with Generalized- α ($G\alpha$) and Generalized Energy-Momentum Method (GEMM+ ξ). Aerodynamic analysis is carried out via Finite Element Analysis (FEA) in order to solve compressible flows in transonic and supersonic regimes. A Characteristic Based Split (CBS) method is employed to obtain an accurate time integration, which is based on the splitting of the momentum equation. Concerning mathematical optimization, the so-called Sequential Quadratic Programming (SQP) is employed, which is a gradient-based method, where the Fréchet derivatives are evaluated using Automatic Differentiation (AD). Final results consisting in structural optimization shown an optimal behaviour with respect to internal strain energy. While, results concerning aerodynamic bi-dimensional shape optimization exhibit a optimal behaviour with respect drag/lift ratio, for a large range of Mach number, and a simple result for tri-dimensional case is presented in order to show the efficiency and robustness of the implementation. Bases for future research in aeroelastic optimization problems are established in this work.

Keywords: Mathematical Optimization, Structural IsoGeometric Analysis, Aerodynamic Finite Element Analysis, NURBS, Automatic Differentiation.

Sumário

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xix
Nomenclatura	xxi
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	1
1.2 Motivação	2
1.3 Estado da arte – otimização de forma estrutural	5
1.4 Estado da arte – otimização de forma aerodinâmica	7
1.5 Descrição da tese	12
2 Otimização Numérica e Diferenciação Automática – NO e AD	15
2.1 Introdução à otimização	15
2.2 Teoria de otimização sem restrições	16
2.2.1 Mínimo local	16
2.2.2 Condições do ponto de ótimo sem restrições	16
2.2.3 Problemas não suaves	17
2.2.4 Estratégias: busca linear e região confiável	18
2.2.5 Fator de escala	23
2.2.6 Razão de convergência	24
2.2.7 Razão de convergência R	25
2.3 Teoria de otimização com restrições	26
2.3.1 Condições do ponto de ótimo de primeira ordem	27
2.3.2 Derivação das condições de primeira ordem	28
2.3.3 Caracterizando as direções limitantes: qualificação das restrições	30
2.3.4 Multiplicadores de Lagrange	31
2.3.5 Demonstração do Teorema 2.6	32
2.3.6 Condições do ponto de ótimo de segunda ordem	33
2.3.7 Problemas não suaves	35
2.3.8 Sensibilidade	35
2.4 Programação quadrática	37
2.5 Programação quadrática sequencial – SQP –	37
2.6 Algoritmo de otimização – SQP –	39
2.7 Introdução à avaliação de derivadas	40
2.8 Diferenças finitas ou divididas	40
2.9 Diferenciação de algoritmos	41

2.9.1	Modo reverso adjunto – função escalar	43
2.10	Convexidade e unicidade	44
3	B-spline Racionais Não-Uniformes – NURBS	47
3.1	Introdução à parametrização NURBS	47
3.2	Funções paramétricas	47
3.3	Bézier	49
3.4	Coordenadas homogêneas	51
3.5	Bézier racional	52
3.6	Vetor de nós	54
3.7	Funções de base B-spline	55
3.7.1	Definição e propriedades das funções de base B-spline	59
3.7.2	Derivadas das funções de base B-spline	64
3.7.3	Propriedades do espaço vetorial das funções de base B-spline	66
3.8	B-spline	68
3.8.1	Definição e propriedades das curvas B-spline	68
3.8.2	Derivadas das curvas B-spline	70
3.8.3	Definição e propriedades das superfícies B-spline	71
3.8.4	Derivadas das superfícies B-spline	74
3.8.5	Definição e propriedades dos sólidos B-spline	74
3.8.6	Derivadas dos sólidos B-spline	77
3.9	B-spline racionais não-uniformes – NURBS –	77
3.9.1	Definição e propriedades das curvas NURBS	78
3.9.2	Derivadas das curvas NURBS	83
3.9.3	Definição e propriedades das superfícies NURBS	86
3.9.4	Derivadas das superfícies NURBS	89
3.9.5	Definição e propriedades dos sólidos NURBS	89
3.9.6	Derivadas dos sólidos NURBS	93
4	Análise IsoGeométrica – IGA	95
4.1	Introdução à análise IsoGeométrica	95
4.2	Introdução à análise dinâmica IsoGeométrica	100
4.3	Formulação do tipo da taxa da equação elástica de estado	103
4.4	Conceitos fundamentais acerca da cinemática co-rotacional para análise IsoGeométrica não linear	107
4.5	Modelo numérico para análise IsoGeométrica não linear – estática e dinâmica	112
4.5.1	Discretização espacial para análise IsoGeométrica não linear – estática e dinâmica	115
4.5.2	Integração espacial na análise IsoGeométrica e outras considerações	119
4.5.3	Integração temporal não linear para análise IsoGeométrica não linear – estática	121
4.5.4	Integração temporal não linear para análise IsoGeométrica não linear – dinâmica	122
4.5.5	Energia total, momento linear e angular	128
4.5.6	Análise da convergência	128
4.6	Código numérico	129
4.7	Aplicações numéricas – estática	129
4.7.1	Descrição geral das aplicações numéricas	129
4.7.2	Problema elástico linear: (<i>pinched cylindrical shell with free ends</i>)	132

4.7.3	Viga enrolada: (<i>Rolled beam</i>)	134
4.7.4	Viga torcida: (<i>Twisted beam</i>)	134
4.7.5	Casca semi-cilíndrica comprimida: (<i>Pinched semi-cylindrical shell</i>)	137
4.7.6	Casca cilíndrica tracionada com extremidades livres: (<i>Stretched cylindrical shell with free ends</i>)	137
4.7.7	Casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos: (<i>Pinched cylindrical shell mounted over rigid diaphragms</i>)	140
4.7.8	Compilação dos resultados dos exemplos com comportamento geometricamente linear e não linear	142
4.8	Aplicações numéricas – dinâmica	145
4.8.1	Descrição geral das aplicações numéricas	145
4.8.2	Viga engastada-livre <i>Bathe</i> : (<i>Bathe cantilever beam</i>)	146
4.8.3	Régua voando: (<i>Flying toss rule</i>)	164
4.8.4	Casca sujeita à flambagem dinâmica: (<i>“Snap-Through” of cylindrical shell</i>)	182
4.8.5	Análise das dissipações por transformadas rápidas - Fourier e ondaletas (<i>FFT-CWT</i>)	197
4.8.6	Compilação dos resultados dos exemplos de dinâmica com comportamento geometricamente não linear	198
5	Equações de conservação e método característico com separação da equação de momento para dinâmica de fluidos – CBS	205
5.1	Introdução	205
5.2	Equações de conservação	206
5.2.1	Condições iniciais e de contorno	208
5.2.2	Forma adimensional	209
5.3	Solução numérica das equações de conservação	211
5.3.1	Método característico	211
5.3.2	Método CBS aplicado à mecânica de fluidos	214
5.3.3	Discretização espacial	217
5.3.4	Tratamento de problemas de escoamentos compressíveis	219
5.3.5	Incremento de tempo	221
5.3.6	Simulações estacionárias e transientes	222
5.4	Coefficientes aerodinâmicos	222
5.5	Código numérico	223
5.6	Aplicações numéricas	223
5.6.1	Descrição geral das aplicações numéricas	223
5.6.2	Aerofólio NACA 0012 em escoamento viscoso transônico - 2D	224
5.6.3	Asa Onera M6 em escoamento não viscoso transônico - 3D	227
5.6.4	Compilação dos resultados dos exemplos de aerodinâmica	231
6	Otimização de forma estrutural	233
6.1	Introdução	233
6.2	Definição do problema de otimização estrutural	235
6.3	Aplicações numéricas	237
6.4	Placa apoiada lateralmente	237
6.5	Placa apoiada em quatro pontos	245

6.5.1	Compilação dos resultados dos exemplos de otimização de forma estrutural	254
7	Otimização de forma aerodinâmica	257
7.1	Introdução	257
7.2	Definição do problema de otimização aerodinâmico	259
7.3	Estudo da convergência das derivadas em esquemas explícitos	261
7.4	Aplicações numéricas	265
7.5	NACA0012	266
7.5.1	NACA0012-01 - $M = 0.8$	268
7.5.2	NACA0012-02 - $M = 1.2$	270
7.5.3	NACA0012-03 - $M = 2.0$	273
7.5.4	Resultados	275
7.5.5	Esféra em escoamento não viscoso supersônico - 3D	276
7.5.6	Compilação dos resultados dos exemplos de otimização de forma aerodinâmica	281
8	Conclusões e Sugestões	283
8.1	Introdução	283
8.2	Quanto à análise estrutural	283
8.3	Quanto à análise de escoamentos	284
8.4	Quanto à otimização de formas estruturais	284
8.5	Quanto à otimização de formas aerodinâmicas	285
8.6	Contribuições da tese	286
8.7	Sugestões à trabalhos futuros	287
	Referências Bibliográficas	289

Lista de Figuras

2.1	Fator de escala	24
2.2	Função filtro radial	46
3.1	Curvas Bézier	50
3.2	Funções de base Bernstein	51
3.3	Mapeamento	52
3.4	Três polinômios por partes de grau três	56
3.5	Curva da Figura 3.4 na forma Bézier	57
3.6	Funções de base não-nulas de zero grau	61
3.7	Funções de base não-nulas de primeiro grau	61
3.8	Funções de base não-nulas de segundo grau	61
3.9	Funções de base B- <i>spline</i> de grau três	65
3.10	Derivadas das funções de base B- <i>spline</i> da Figura 3.9	65
3.11	Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(a)i}$	80
3.12	Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(b)i}$	80
3.13	Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(c)i}$	80
3.14	Curvas NURBS com diferentes pesos	82
3.15	Curvas NURBS sobrepostas com diferentes pesos	82
3.16	Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.11	84
3.17	Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.12	85
3.18	Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.13	85
4.1	Conceitos gerais que envolvem a análise IsoGeométrica	98
4.2	Decomposição polar do gradiente de deformações	105
4.3	Transformação dos tensores para o caso isotrópico elástico em deformações infinitesimais	105
4.4	Quadratura-anexada à base	111
4.5	Decomposição polar e base co-rotacional	111
4.6	Vista esquemática da aplicação numérica proposta para a análise linear	133
4.7	Análise da viga enrolada	135
4.8	História de carregamento-deslocamento para a análise da viga enrolada	135
4.9	Análise da viga torcida	136
4.10	História de carregamento-deslocamento para a análise da viga torcida	137
4.11	Análise da casca semi-cilíndrica comprimida	138
4.12	História de carregamento-deslocamento para a análise da casca semi-cilíndrica comprimida	138
4.13	Análise da casca cilíndrica tracionada com extremidades livres	139
4.14	História de carregamento-deslocamento para a análise da casca cilíndrica tracionada com extremidades livres	140

4.15	Análise da casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos	141
4.16	História de carregamento-deslocamento para a análise da casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos	141
4.17	Geometria e condições de contorno: viga <i>Bathe</i>	147
4.18	Sucessivas configurações: problema 4.8.2	147
4.19	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	150
4.20	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	150
4.21	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	151
4.22	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.95$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	151
4.23	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	152
4.24	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	152
4.25	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.95$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	153
4.26	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	153
4.27	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	154
4.28	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	154
4.29	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	155
4.30	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	155
4.31	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	156
4.32	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa diagonalizada	156
4.33	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	157
4.34	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa diagonalizada	157
4.35	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente	158
4.36	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente	158
4.37	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente	159
4.38	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente	159
4.39	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente	160
4.40	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente	160
4.41	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente	161
4.42	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente	161
4.43	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa diagonalizada	162
4.44	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa diagonalizada	162
4.45	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa diagonalizada	163
4.46	Viga <i>Bathe</i> ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa diagonalizada	163
4.47	Geometria e condições de contorno: Régua voando	164
4.48	Sucessivas configurações	165
4.49	Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	168
4.50	Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	168
4.51	Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	169
4.52	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	169
4.53	Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	170
4.54	Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	170
4.55	Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	171
4.56	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente	171
4.57	Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	172
4.58	Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	172
4.59	Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	173
4.60	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente	173
4.61	Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	174

4.62	Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	174
4.63	Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	175
4.64	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	175
4.65	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa diagonalizada	176
4.66	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa diagonalizada	176
4.67	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa diagonalizada	177
4.68	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa diagonalizada	177
4.69	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente	178
4.70	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente	178
4.71	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente	179
4.72	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente	179
4.73	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa diagonalizada	180
4.74	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa diagonalizada	180
4.75	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa diagonalizada	181
4.76	Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa diagonalizada	181
4.77	Geometria e condições de contorno	183
4.78	Sucessivas configurações: $G\alpha$	183
4.79	Sucessivas configurações: GEMM+ ξ	184
4.80	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.50$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	185
4.81	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	186
4.82	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente	187
4.83	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.50$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	188
4.84	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	189
4.85	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente	190
4.86	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente	191
4.87	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente	192
4.88	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente	193
4.89	Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente	194
4.90	$G\alpha$ ($\rho_\infty = 0.50, C^4$) vs GEMM+ ξ ($\rho_\infty = 0.95, C^4$)	195
4.91	Dissipação $G\alpha$ vs Dissipação GEMM+ ξ	196
4.92	Espectros de potência FFT $G\alpha$	199
4.93	Espectros de potência FFT GEMM+ ξ	200
4.94	Espectros de potência CWT $G\alpha$	201
4.95	Espectros de potência CWT GEMM+ ξ	202
5.1	Domínio e regiões do contorno	210
5.2	Natureza do comportamento em forma de onda	212
5.3	Convecção linear. Características	213
5.4	Malha inicial para o aerofólio NACA 0012	225
5.5	Malha final para o aerofólio NACA 0012	225
5.6	Linhas de correntes	225
5.7	Campos $\rho, \rho E, \rho v_1, \rho v_2, p, M$	226
5.8	Coeficiente de pressão $-C_p$	227
5.9	Geometria da asa Onera M6	227

5.10	Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , ρv_3 , p , M , $-C_p$	228
5.11	Isocontornos de ρ e M	229
5.12	Curvas de $-C_p$	230
6.1	Variáveis de otimização dos casos 1 e 2	239
6.2	Variáveis de otimização dos casos 3	239
6.3	condições de contorno	240
6.4	Problema inicial (problema 6.4)	240
6.5	deslocamentos finais (problema 6.4 caso 1)	240
6.6	Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 1)	240
6.7	perspectiva das seções (problema 6.4 caso 1)	241
6.8	Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 1)	241
6.9	deslocamentos finais (problema 6.4 caso 2)	241
6.10	Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 2)	242
6.11	perspectiva das seções (problema 6.4 caso 2)	242
6.12	Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 2)	242
6.13	deslocamentos finais (problema 6.4 caso 3)	243
6.14	Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 3)	243
6.15	perspectiva das seções (problema 6.4 caso 3)	243
6.16	Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 3)	244
6.17	Variáveis de otimização dos casos 4 e 5	246
6.18	Variáveis de otimização dos casos 6	246
6.19	condições de contorno	247
6.20	Problema inicial (problema 6.5)	247
6.21	deslocamentos finais (problema 6.5 caso 4)	248
6.22	Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 4)	248
6.23	perspectiva das seções (problema 6.5 caso 4)	248
6.24	Seções laterais da casca ótima (problema 6.5 caso 4)	249
6.25	Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 4)	249
6.26	deslocamentos finais (problema 6.5 caso 5)	250
6.27	Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 5)	250
6.28	perspectiva das seções (problema 6.5 caso 5)	250
6.29	Seções laterais da casca ótima (problema 6.5 caso 5)	251
6.30	Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 5)	251
6.31	deslocamentos finais (problema 6.5 caso 6)	252
6.32	Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 6)	252
6.33	perspectiva das seções (problema 6.5 caso 6)	252
6.34	Seções da casca ótima (problema 6.5 caso 6)	253
6.35	Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 6)	253
7.1	Variáveis de otimização - NACA0012	262
7.2	Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.05	262
7.3	Convergência das derivadas - FD - CFL = 0.05	263
7.4	Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.10	263
7.5	Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.15	264
7.6	Gradiente - AD - FD - CFL = 0.05, 0.10, 0.15	264
7.7	Limites superior e inferior das variáveis de otimização	267
7.8	Malha final para o aerofólio ótimo - M = 0.8	268
7.9	Coefficiente de pressão $-C_p$ - M = 0.8	268

7.10	Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 0.8$	269
7.11	Geometria ótima e perfil de referência - $M = 0.8$	269
7.12	Geometria ótima e rede de controle - $M = 0.8$	270
7.13	Malha final para o aerofólio ótimo - $M = 1.2$	270
7.14	Coefficiente de pressão $-C_p$ - $M = 1.2$	271
7.15	Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 1.2$	271
7.16	Geometria ótima e perfil de referência - $M = 1.2$	272
7.17	Geometria ótima e rede de controle - $M = 1.2$	272
7.18	Malha final para o aerofólio ótimo - $M = 2.0$	273
7.19	Coefficiente de pressão $-C_p$ - $M = 2.0$	273
7.20	Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 2.0$	274
7.21	Geometria ótima e perfil de referência - $M = 2.0$	274
7.22	Geometria ótima e rede de controle - $M = 2.0$	275
7.23	Variáveis do problema de otimização	276
7.24	Geometrias e redes de controle inicial e final	277
7.25	Campos de pressão e isosuperfícies de ρ e M	277
7.26	Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2	278
7.27	Campos ρv_3 , p , M	279
7.28	Isosuperfícies $\rho = 1.01, 2.0, 3.0$	280

Lista de Tabelas

3.1	Tabela triangular truncada das $N_{i,p}(\xi)$	60
3.2	Suporte local	62
3.3	Funções não-nulas sobre $\xi \in [\xi_3, \xi_4)$	63
4.1	IGA vs FEA	99
4.2	Análise geometricamente linear: comparação realizada para graus diferentes através da espessura	133
4.3	Análise geometricamente linear: comparação realizada para graus diferentes sobre a superfície	134
4.4	Análise geometricamente não linear: deslocamento radial do ponto carregado	143
4.5	Análise geometricamente não linear: resumo das malhas NURBS adotadas na investigação numérica	143
4.6	Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha.	148
4.7	Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.	148
4.8	Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha ($t_f \cdot 10^{-1}$).	166
4.9	Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.	166
4.10	Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha.	184
4.11	Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.	184
5.1	Compilação das características do escoamento analisado	224
5.2	Compilação das características do escoamento analisado. Onera M6	227
6.1	descrição dos problemas de otimização de formas de casca	237
6.2	Número de avaliações da função objetivo e de iterações	254
7.1	Compilação das características dos escoamentos analisados na otimização	266
7.2	Compilação dos resultados	275
7.3	Compilação das características do escoamento analisado	276
7.4	Número de avaliações da função objetivo e de iterações	281

Nomenclatura

AD	<i>Automatic Differentiation</i>	GDCM	<i>Generalized Displacement Control Method</i>
CAD	<i>Computer Aided Design</i>	GEMM+ ξ	<i>Generalized Energy-Momentum Method</i>
CAGD	<i>Computer Aided Geometry Design</i>	IGA	<i>IsoGeometric Analysis</i>
CBS	<i>Characteristic Based Split</i>	IPNP	<i>Interior Points for Nonlinear Programming</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamic</i>	LICQ	<i>Linear Independence Constraint Qualification</i>
CWT	<i>Continuous Wavelet Transform</i>	NO	<i>Numerical Optimization</i>
DD	<i>Divide Difference</i>	NURBS	<i>Non-Uniform Rational B-spline</i>
FCT	<i>Flux Corrected Transport</i>	RSM	<i>Response-Surface Method</i>
FD	<i>Finite Difference</i>	SA	<i>Structural Analysis</i>
FEA	<i>Finite Element Analysis</i>	SLP	<i>Sequential Linear Programming</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>	SQP	<i>Sequential Quadratic Programming</i>
FFT	<i>Fast Fourier Transform</i>	SR1	<i>Symmetric-Rank-One</i>
FPGA	<i>Floating-Point Genetic Algorithm</i>		
G α	<i>Generalized-α</i>		

Capítulo 1

Introdução

1.1 Objetivos

O objetivo principal da tese é consolidar a união de quatro áreas do conhecimento referentes à otimização de problemas de contorno envolvidos na mecânica dos meios contínuos. Estas áreas são: otimização matemática, NURBS, diferenciação automática e análise isogeométrica/elementos finitos. No que concerne à mecânica de meios contínuos, este será restrito à mecânica dos sólidos elásticos e à mecânica de fluidos compressível newtonianos.

Pretende-se, no âmbito da mecânica de sólidos, realizar a otimização de formas de cascas, modeladas matematicamente com a teoria de sólidos elásticos, com respeito à energia de deformação interna, sujeitas à restrição de volume constante.

Já no âmbito da mecânica de fluidos, pretende-se realizar a otimização de formas de perfis aerodinâmicos e corpos tridimensionais imersos em escoamentos compressíveis newtonianos, com respeito à relação entre os coeficientes de arrasto e sustentação ou somente ao coeficiente de arrasto, sujeitos à restrição de volume constante.

Para alcançar estes objetivos é necessário abranger outros objetivos preliminares. No que concerne ao código de otimização é utilizado o código desenvolvido por [Spellucci \(2001\)](#) de programação quadrática sequencial. Já o código de análise isogeométrica e NURBS foram desenvolvidos por completo nesta tese. O código de análise de escoamentos compressíveis foi obtido do trabalho de [Nithiarasu et al. \(2006\)](#), para escoamentos bidimensionais, em

conjunto com [Linn \(2013\)](#) o código foi feito para escoamentos tridimensionais. Com estas etapas concluídas, foi necessário criar o código adjunto da análise estrutural e aerodinâmica, com auxílio do aplicativo TAPENADE [INRIA \(2002\)](#) obteve-se o código adjunto discreto por meio da diferenciação automática.

Outros objetivos podem ser traçados, tais como: o estudo da influência da classe de continuidade dos elementos em diferentes integrações temporais e estudo da convergência de derivadas em esquemas explícitos.

Embora não seja realizada a otimização aeroelástica, as ferramentas necessárias foram desenvolvidas. Por restrições de custos computacionais o trabalho se limita a otimização de cada uma das partes, otimização estrutural e aerodinâmica.

1.2 Motivação

A busca pelo desempenho ótimo é algo que tem sido buscado pela engenharia incessantemente. Não basta aperfeiçoar o projeto, busca-se o projeto ótimo que atenda todas as necessidades demandadas e satisfaça todas as restrições impostas. Esta tarefa se afasta do trivial e diversos fenômenos físicos não possuem ainda um lugar na otimização, já que a dificuldade de compreender completamente um fenômeno físico de alta complexidade, traz intrínseco na otimização, dificuldades que ainda não conseguiram ser esquivadas. Naturalmente, o maior obstáculo enfrentado na otimização na Física e Engenharia são os fenômenos altamente transientes e multi-físicos.

No que concerne ao mecanismo motivador na engenharia, encontram-se os problemas de otimização em:

- estruturas e outros sistemas de interesse na mecânica dos sólidos;
- aerodinâmica e fenômenos de transporte.

Dentro do campo de otimização deste fenômenos, incluem-se o comportamento transiente e o acoplamento de diferentes fenômenos físicos. Na otimização estrutural ainda podem ser incluídos os fenômenos de instabilidade estática e dinâmica. E na otimização aerodinâmica

podem ser abordados problemas que envolvem ruído e fenômenos químicos.

O projeto de estruturas com comportamento ótimo, no que diz respeito a um critério específico, foi constantemente investigado e melhorado. Nos tempos antigos, os projetos foram melhorados pelos geniais engenheiros através das gerações. Os vários livros e enorme número de artigos publicados recentemente refletem o crescente interesse nesta área. O desenvolvimento da otimização estrutural pode ser rastreada até Galileu Galilei (1564-1642) e para o seu problema da viga engastada ([Galilei, 1638](#)). A viga em balanço sujeita a cisalhamento e flexão constante, tal como formulado por Galileu, foi um projeto ideal de peso mínimo com uma restrição de tensão uniforme. O problema de Galileu foi provavelmente um dos primeiros problemas de otimização estrutural. Joseph Louis Lagrange (1736-1813) também havia formulado um projeto ótimo de uma coluna à mais de 200 anos. No entanto, a maioria dos estudos modernos de otimização estrutural, eficientes e confiáveis, baseiam-se de análise estrutural, que se tornou possível somente após o advento dos computadores modernos e o método dos elementos finitos, entre outros. O desenvolvimento de técnicas de programação matemática e teorias de otimização estabeleceram uma base sólida para a otimização estrutural.

A definição das formas aerodinâmicas de aeronaves modernas dependem fortemente da simulação computacional para permitir a rápida avaliação de várias alternativas de projetos. Testes em túnel de vento são usados para confirmar o desempenho dos projetos que foram identificados por meio de simulação como promissores para atender as metas de desempenho. No caso do projeto de asas e a integração de sistemas de propulsão, vários ciclos completos de análise computacional seguidos de testes dos projetos promissores podem ser utilizados na evolução da configuração final. Testes em túnel de vento também desempenham um papel crucial no desenvolvimento das cargas detalhadas necessárias para completar o projeto estrutural, e na coleta de dados em todo o envelope de vôo para a concepção e verificação da estabilidade e do sistema de controle. O uso da simulação computacional para procurar várias alternativas de projeto revelou-se extremamente valiosa na prática, mas ainda sofre com a limitação de que ela não pode identificar o melhor projeto possível. Para garantir a realização do melhor projeto de verdade, o objetivo final dos métodos de simulação computacional não devem ser apenas a análise das formas prescritas, mas a determinação automática da verdadeira forma ótima para a

aplicação pretendida (Jameson, 2003b).

Atualmente a análise aerodinâmica, estrutural e aeroelástica é realizada com boa acurácia via método numéricos, devido a computação de alto desempenho. Entretanto, projetos mais sofisticados requerem não apenas uma análise, este devem ser projetos ótimos. A indústria aeronáutica, aeroespacial e automotiva demandam estas necessidades. Tendo em vista estas necessidades, este trabalho é desenvolvido. Esta é a motivação principal para integrar Análise Estrutural (SA do acrônimo em inglês *Structural Analysis*) via Análise IsoGeométrica (IGA do acrônimo em inglês *IsoGeometric Analysis*), Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD do acrônimo em inglês *Computational Fluid Dynamics*) via Método do Elementos Finitos (FEM do acrônimo em inglês *Finite Element Method*) com métodos de otimização numérica (NO do acrônimo em inglês *Numerical Optimization*) baseados em gradientes avaliados por Diferenciação Automática (AD do acrônimo em inglês *Automatic Differentiation*).

Visando uma abordagem de otimização numérica, alguns aspectos de mesma importância devem ser estudados na otimização de forma aerodinâmica, estrutural e aeroelástica. Este aspectos formam a consolidação entre várias áreas da ciência. Basicamente, este são:

- Otimização Matemática;
- Análise Estrutural e de Escoamentos;
- Avaliação de Gradientes;
- Descrição e Modificação de Geometria (forma).

Passos Gerais

Uma vez que o gradiente é avaliado, um método de otimização matemática pode ser usado para determinar uma mudança de forma que irá fazer uma melhoria no projeto. O gradiente pode ser recalculado, e todo o processo pode ser repetido até que o projeto alcance uma solução ótima. Geralmente o número de iterações depende do comportamento suave das restrições e do grau de não linearidade das mesmas. O cálculo rápido dos gradientes faz a otimização computacionalmente viável, mesmo para modelos em três dimensões de escoamentos viscosos. Existe a possibilidade de que o método de otimização

possa convergir para um mínimo local ao invés da solução ótima global. Na prática, isso não tem sido uma dificuldade, desde que seja tomado cuidado na escolha de uma função custo, e que reflita adequadamente as exigências do projeto.

1.3 Estado da arte – otimização de forma estrutural

A otimização de forma estrutural é, em geral, devotada a estruturas de cascas, e por esta razão o tipo de discretização espacial utilizada é, em geral, uma discretização baseada na teoria de cascas, i.e., na análise numérica são utilizados elementos de casca ([Ramm et al. \(1993\)](#); [Camprubí et al. \(2004\)](#); [Bletzinger et al. \(2008\)](#); [Espath \(2009\)](#); [Espath et al. \(2011\)](#)). [Ramm e Wall \(2004\)](#) apresentaram um estado da arte sobre otimização numérica de cascas e sensibilidade estrutural, apresentado os desafios e dificuldades que hoje se apresenta em termos de análise estrutural e avaliação da sensibilidade em problemas não lineares. Neste trabalho, o problema é abordado utilizando uma formulação baseada em elementos sólidos, de alta ordem com funções de base NURBS.

Estruturas de casca abordam uma grande variedade de estruturas, com uso intensivo, por exemplo, no projeto de fuselagens para aviões e submarinos, silos metálicos, hangares, estádios, ginásios, e componentes aeroespaciais e automotivas, entre outras. Grandes vãos, baixo peso, baixo custo, rigidez são algumas das vantagens que podem ser obtidas facilmente com otimização de cascas. A forma e a distribuição da espessura jogam um rol dominante na resposta estrutural de uma casca; entretanto, um desempenho estrutural ótimo só pode ser obtido com a otimização estrutural e material ([Espath et al. \(2011\)](#); [Linn et al. \(2013\)](#)).

O método de otimização matemática deve ser escolhido baseado no caso específico a ser analisado. Os procedimentos de otimização podem lidar facilmente com alguns problemas, de mesmo modo que podem ser insatisfatórios para outros ou simplesmente não se adaptam ao problema de otimização. Para otimização de cascas é importante salientar que as restrições são, em geral, altamente não lineares. Devido à este fato, o algoritmo SQP é escolhido neste trabalho. O algoritmo SQP é robusto para problemas não lineares e contínuos e o algoritmo DONLP2 desenvolvido por [Spellucci \(2001\)](#) é utilizado. O algoritmo necessita das avaliações funcionais e das restrições, assim como as derivadas

de Fréchet, na expectativa de guiar a busca unidimensional até que a solução “ótima” seja alcançada iterativamente.

A análise estrutural, nos trabalhos em geral, tais como os apresentados por [Ramm et al. \(1993\)](#) e [Bletzinger et al. \(2008\)](#) utilizam elementos para cascas espessas e finas, respectivamente, com um comportamento elástico linear. O elemento de casca espessa possui a vantagem de que os efeitos de corte são considerados; entretanto, este pode apresentar algumas instabilidades numéricas, como o fenômeno de travamento (*locking phenomenon*). A influência do travamento sobre a otimização estrutural de cascas foi discutido por [Camprubí et al. \(2004\)](#). Enquanto, a otimização de formas de casca contra à flambagem foi estudado por [Khosravi et al. \(2008\)](#); [Parente Jr. e Vaz \(2003\)](#) e [Aubert e Rousselet \(1998\)](#), e o mesmo problema, levando em consideração as imperfeições estruturais, foi estudado por [Reitinger e Ramm \(1995\)](#). A otimização de formas de materiais compósitos contra a flambagem não linear foi abordado por [Lindgaard e Lund \(2010\)](#).

A análise de sensibilidade pode ser executada por diferenças finitas (ver [Herskovits et al. \(2000\)](#); [Espath \(2009\)](#)). Entretanto, esta técnica não é precisa o suficiente, e precisa de excessivas avaliações funcionais (ver [Espath et al. \(2011\)](#)). A análise de sensibilidade analítica foi utilizada por [Ramm et al. \(1993\)](#). Este método é exato e barato computacionalmente, mas desafortunadamente uma representação explícita é muitas vezes difícil de ser obtida. A abordagem semi-analítica, a qual é um caso intermediário foi utilizado por [Ramm et al. \(1993\)](#); [Reitinger e Ramm \(1995\)](#); [Parente Jr. e Vaz \(2003\)](#); [Camprubí et al. \(2004\)](#); [Bletzinger et al. \(2008\)](#); [Khosravi et al. \(2008\)](#); [Lindgaard e Lund \(2010\)](#). Estes métodos possuem diversas desvantagens conforme discutidos por [Griewank e Walther \(2008\)](#). Outra abordagem pode ser obtida a partir da equação de estado adjunta, a qual é relativamente barata computacionalmente, visto que apenas leva o tempo de duas avaliações funcionais. Este método produz uma avaliação exata das derivadas se a equação adjunta é resolvida exatamente; Entretanto, em geral, a solução é aproximada (sendo mais precisas que as anteriores alternativas). Esta abordagem foi feita por [Aubert e Rousselet \(1998\)](#); [Firl \(2010\)](#). A diferenciação automática é uma boa alternativa em termos de tempo computacional e em termos de sua precisão. No modo reverso, AD é classificado como uma abordagem adjunta. Esta abordagem, na otimização

de formas de casca foi introduzida por [Espath et al. \(2011\)](#); [Linn et al. \(2013\)](#), onde foi utilizado a ferramenta de diferenciação TAPENADE AD [INRIA \(2002\)](#).

Em termos de algoritmos de otimização robustos, pode ser destacado o método de pontos interiores utilizado por [Herskovits et al. \(2000\)](#). Entretanto o algoritmo mais adotado na literatura é a programação quadrática sequencial, ver por exemplo [Ramm et al. \(1993\)](#); [Reitinger e Ramm \(1995\)](#).

No que concerne à descrição geométrica, uma descrição paramétrica é mais adequada para a modificação de forma do que uma representação explícita ou implícita. Remendos Bézier (*Bézier Patch*) é uma excelente alternativa visto que não só apresenta suavidade, mas também as derivadas da superfície podem ser controladas. Esta abordagem foi utilizada por [Ramm et al. \(1993\)](#). Existem os que preferem abandonar a parametrização e utilizar como descrição geométrica a própria malha de elementos finitos. Necessitando invariavelmente um suavizador, filtro, de modo a obter uma geometria suave, como realizado por [Firl \(2010\)](#). A descrição paramétrica de sólido é a mais geral possível para definir a forma de uma casca e sua espessura. Esta abordagem para elementos de cascas foi utilizada por [Kegl e Brank \(2006\)](#), utilizando a parametrização do tipo Bézier.

Na análise IsoGeométrica a otimização de forma já ganhou grande espaço quando comparado com o método de elementos finitos. [Qian \(2003\)](#) apresenta uma abordagem analítica para avaliação de geometrias parametrizadas via NURBS, no contexto da IsoGeometria. [Wall et al. \(2008\)](#); [Cho e Ha \(2009\)](#) abordam o problema de otimização de maneira simples, entretanto são os primeiros trabalhos acerca do tema. Otimização de problemas de vibrações livres, autovalores e autovetores, é investigado por [Nguyen et al. \(2012\)](#), enquanto [Nagy et al. \(2010\)](#) investiga a otimização de formas de vigas.

1.4 Estado da arte – otimização de forma aerodinâmica

O problema “Forma Aerodinâmica Ótima” pode ser abordado de diferentes maneiras, sob o ponto de vista matemático. Alguns dos primeiros estudos, utilizando a abordagem otimização numérica, foram feitos por [Pironneau \(1974\)](#); [Hicks et al. \(1974\)](#); [Hicks e](#)

[Henne \(1978\)](#). O principal obstáculo foi o grande custo computacional para determinar a sensibilidade da função objetivo para as variações dos parâmetros de projeto por repetidas análises (cálculos do escoamento). Outra forma de abordar o problema é formular o projeto de forma aerodinâmica, no âmbito da teoria matemática para o controle de sistemas governados por sistemas de equações diferenciais parciais ([Lions, 1971](#)). Mais tarde [Pironneau \(1984\)](#) desenvolveu esta teoria para sistemas de equações diferenciais parciais elípticas. Com esta perspectiva, a geometria é considerada como um dispositivo para produzir a sustentação por meio do controle do escoamento, e a forma da geometria é tratada em um problema de controle ótimo sobre as equações do escoamento, alterando a forma da fronteira. Se a forma de fronteira é considerada arbitrária dentro de alguns requisitos de suavidade, em seguida, a generalidade das formas não pode ser definida com um número finito de parâmetros, e deve-se utilizar o conceito de derivada Frechet do custo com respeito a uma função. É evidente que tais derivadas não pode ser determinadas diretamente pela variação individual de cada parâmetro de projeto, porque agora há um número infinito deles ([Jameson, 2003b](#)).

Os métodos numéricos de otimização de interesse são os que facilmente lidam com funções altamente não lineares, onde o comportamento da combinação destas funções torna-se altamente imprevisível. Pode-se encontrar na literatura abordagens do tipo heurísticas. Os algoritmos evolutivos foram introduzidos na forma aerodinâmica ótima por [Obayashi \(1997\)](#); atualmente são largamente usados e bons resultados foram obtidos, como a minimização do arrasto total de um avião a jato comercial por [Peigin e Epstein \(2008\)](#), inclusive satisfazendo requisitos de suavidade. O trabalho mais significativo visto recentemente é o que compara métodos de otimização, ([Epstein et al., 2009](#)), onde o primeiro método empregado é baseado em gradientes e o mesmo é avaliado pela equação adjunta contínua, sendo obtida a partir das equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds. Os dois outros métodos são heurísticos; sendo o primeiro destes um método de superfície de resposta (RSM do acrônimo em inglês *Response-Surface Method*) e o segundo é baseado em algoritmos genéticos de ponto flutuante (FPGA do acrônimo em inglês *Floating-Point Genetic Algorithm*). Todos os métodos chegaram perto do mínimo coeficiente de arrasto teórico. Os resultados obtidos não indicam uma melhor alternativa, apenas diferentes caminhos com diferente formalidade matemática.

Os métodos baseados em gradientes são a única alternativa para obter-se um ponto de ótimo real, em geral são classificados pela sua direção de busca. O método mais simples e natural é o “*Método de Maior Descida*” (*Steepest-Descent*), no qual a direção de busca do ótimo segue a direção oposta à do gradiente; este método foi usado por Jameson (2003b); Hicks et al. (1974); Verma (2009); Jameson e Martinelli (1998); Iollo et al. (2001); Dwight e Brezillon (2006); Reuther et al. (1996); Giles e Pierce (2000). O método “*Simplex Nelder-Mead*”, foi usado com sucesso por Désidéri e Janka (2004), trata-se um método versátil, os autores adotaram um estratégia inédita na otimização aerodinâmica. Para um dado perfil aerodinâmico parametrizado, a otimização foi dividida em duas etapas: na primeira etapa utiliza-se o algoritmo simplex (algumas poucas iterações); na segunda etapa utiliza-se o algoritmo genético para buscar o melhor grau da parametrização. Assim, continua-se até alcançar a convergência. Esta estratégia pode ser aprimorada utilizando um método baseado em gradientes mais geral.

Muitos autores focam seus estudos na avaliação do gradiente e/ou na análise do escoamento, de maneira que pouco desenvolvem a otimização numérica. Existem trabalhos desenvolvidos utilizando “*Programação Linear Sequencial*” (SLP do acrônimo em inglês *Sequential Linear Programming*), Lund et al. (2001); Carpentieri et al. (2007). Métodos mais sofisticados, que tratam adequadamente funções não lineares, tais como “*Programação Quadrática Sequencial*” (SQP do acrônimo em inglês *Sequential Quadratic Programming*) utilizado por diversos autores, tais como Tetsushi (2008); Brezillon e Gauger (2004); Hazra (2004); Anderson e Venkatakrishnan (1999); Carpentieri et al. (2007), onde neste último trabalho compara-se SPL e SPQ. Naturalmente nesta comparação SQP apresentou melhores resultados. Cabe salientar que comparar métodos que utilizam diferentes tipos de informação, i.e., informações de primeira e de segunda ordem, somente levam a conclusão de que métodos que utilizam informações de primeira e de segunda ordem são melhores do que os métodos que utilizam apenas informações de primeira ordem. Do ponto de vista científico busca-se um mínimo real; do ponto de vista de engenharia um melhor projeto pode ser suficiente. Um dos métodos mais sofisticados é o método “*Pontos Interiores para Programação Não-Linear*” (IPNP do acrônimo em inglês *Interior Points for Nonlinear Programming*), utilizado por Jameson et al. (1994); Leung e Zingg (2009).

Em geral, o problema de interesse é sempre definido para escoamentos compressíveis, e o problema ainda vem se devotando sobre escoamentos não viscoso, visto que o tempo computacional na otimização é rigorosamente superior ao tempo de análise. Diversos trabalhos vem sendo realizados sobre as equações de Euler (Stück et al., 2010). Contudo, diversos autores tem se dedicado a escoamento viscoso laminares e alguns se aventuram em escoamentos turbulentos. Tetsushi (2008) utiliza o modelo RANS $\kappa - \epsilon$ para a otimização, partindo da premissa que o escoamento, mesmo que turbulento, é estacionário em termo das médias. Stück et al. (2010) apresenta uma abordagem para problemas transientes, onde para cada passo de tempo o gradiente é calculado, utilizando as equações de Euler, e sem levar a cabo um problema de otimização, apenas abordando a metodologia necessária para abordar otimização de problemas transientes.

O gradiente pode ser determinado indiretamente através da solução de uma equação adjunta (teoria de controle) que tem coeficientes determinados pela solução das equações de conservação do escoamento. Esta abordagem teve a trajetória iniciada por Bryson e Ho (1975). O custo da solução da equação adjunta é comparável ao custo de solução das equações de conservação, com a consequência de que o gradiente com respeito a um número arbitrariamente grande de parâmetros pode ser calculado com aproximadamente o mesmo custo computacional de duas soluções do escoamento. Peter e Dwight (2010); Nadarajah e Jameson (2000) apresentam diversas abordagens para o computo das derivadas, tais como, diferenças finitas, método adjunto discreto e contínuo. Estes últimos estudos se concentram em avaliar a melhor alternativa entre o método adjunto discreto e contínuo. Já, Peter e Dwight (2010) avaliaram o impacto e a influência na acurácia dos gradientes, avaliado pelos métodos adjunto discreto, contínuo e diferenças finitas.

Conceitualmente, com esta abordagem, o problema é visto como infinitamente dimensional, com o controle sendo a forma da superfície limite. Eventualmente, as equações de conservação podem ser diferenciadas da implementação numérica do método. Para este efeito, as equações de conservação e suas equações adjuntas podem ser tanto separadamente diferenciadas de suas representações como equações diferenciais, ou, alternativamente, as equações de fluxo podem ser diferenciadas em primeiro lugar, e as equações adjuntas discreta, em seguida, derivada diretamente das equações discretas de conservação.

Löhner et al. (2003a,b, 2004) apresentam uma abordagem mista para o computo das derivadas, entre diferenças finitas e uma abordagem adjunta. Esta abordagem é justificada pelo fato de obter um código adjunto independente da parametrização adotada. Enquanto, Sherman et al. (1996) apresentam a avaliação de derivadas primeiras e segundas via diferenciação automática para métodos incrementais iterativos utilizando o aplicativo ADIFOR (*Automatic DIfferentiation FORtran*).

A modificação de forma na otimização joga um rol importante uma vez que se considera que a forma deve se transformar em um projeto, que a geometria ótima deve ser reproduzida para ensaios em tuneis de vento e que esta possa ser reproduzida para execução de um projeto real. Com este intuito, diversos autores buscam modificações de formas que estejam baseadas em algum tipo de parametrização, enquanto outros trabalham com operadores que suavizam a geometria, de modo a torna-la viável em termos de um projeto real.

Visto que, em termos gerais, existem duas abordagens, i.e., com geometrias parametrizadas (*CAD-based*) e com operadores de suavização da geometria (*CAD-free*), segundo Mohammadi e Pironneau (2009) ainda pode ser considerado mais uma alternativa, o conjunto de nível (*Level set method*). Este último, é uma técnica estabelecida para representar o movimento de interfaces. Fronteiras imersas, métodos de domínios fictícios, assim como métodos de penalização são métodos para impor condições de contorno sobre superfícies que não representam a união de lados ou faces de elementos (*nonbody fitted*) da malha computacional.

Löhner et al. (2003a,b, 2004) utilizaram uma parametrização definida sobre as normais e sobre a curvatura Gaussiana da superfície em cada nó da malha de elementos finitos. Esta abordagem, não deixa de ser baseada em CAD mas também não é independente da malha. Estes autores usaram como variáveis de projeto os nós da malha.

Samareh (2004) introduziram o conceito definido por Sederberg e Parry (1986) para deformar o domínio computacional. Esta abordagem não utiliza apenas uma superfície como variável de projeto mas utiliza o domínio inteiro ou parte do domínio. A ideia é embutir um sólido perfeitamente plástico, o qual é controlado pelo algoritmo de otimização. Uma vez que o algoritmo impõem uma deformação ao sólido, está será

transmitida ao domínio do fluido. Este método também é utilizado por outros autores como [Andreoli et al. \(2003\)](#); [Manzoni et al. \(2011\)](#). Neste método o tipo de sólido parametrizado varia entre Bézier ([Samareh, 2004](#)) a NURBS ([Andreoli et al., 2003](#); [Manzoni et al., 2011](#)). [Lamousin e Waggenspack \(1994\)](#) estenderam este conceito para entidades NURBS.

Outras abordagens, via parametrização de superfície foram desenvolvidas. [Leung e Zingg \(2009\)](#) utilizam superfícies *B-spline* para descrever a geometria, enquanto os nós internos do domínio são movimentados por uma equação algébrica função do deslocamento da superfície.

1.5 Descrição da tese

No Capítulo 2 é apresentada a teoria acerca da otimização numérica. A teoria de otimização sem restrições e alguns métodos consagrados são apresentados na primeira seção. A teoria de otimização com restrições é analisada detalhadamente e é apresentado o problema de otimização sob o enfoque da programação quadrática sequencial, assim como seu algoritmo em linhas gerais. A teoria acerca da diferenciação automática é explanada e são descritos os passos gerais para a realização da diferenciação de algoritmos.

No Capítulo 3 é apresentada a teoria acerca de *B-spline* Racionais Não-Uniformes, onde é apresentado em ordem cronológica, os tipos de parametrizações que surgiram nos últimos quarenta anos. É apresentada a teoria da parametrização que Bézier propôs como ferramenta de projeto. Esta abre uma gama imensa de novas pesquisas, como *B-spline*, uma extensão da proposta de Bézier é apresentada na sequência. Ainda, apresenta-se a teoria elementar da parametrização *B-spline* racional não-uniforme.

No Capítulo 4 é apresentada a teoria acerca da análise IsoGeométrica. Neste é abordada a cinemática co-rotacional baseada na exata decomposição polar, assim como a teoria sobre a análise estática não linear e a integração temporal não linear. Como validação, resultados preliminares para análise estática geometricamente linear e uma gama de resultados para problemas geometricamente não lineares são abordados. Resultados sobre problemas dinâmicos não lineares também são analisados.

No Capítulo 5 é apresentada a teoria acerca da dinâmica dos fluidos computacional e o método característico. Também é apresentada a forma como a equação de momento é separada a fim de melhorar a convergência na integração temporal. Na seção final são apresentados resultados da análise de um aerofólio NACA 0012 e da asa Onera M6 utilizando às equações do movimento viscoso e não viscoso, respectivamente.

No Capítulo 6 é apresentado o problema de otimização estrutural e como é realizada a transformação da otimização matemática para a otimização em termos mecânicos. Diversos exemplos são apresentados para dois casos distintos, em termos das condições de contorno. Na expectativa de apresentar a influência do filtro aplicado ao gradiente, duas geometrias NURBS são utilizadas.

No Capítulo 7 é apresentado o problema de otimização aerodinâmica e como é realizada a transformação da otimização matemática para a otimização em termos aerodinâmicos. Exemplos bidimensionais são apresentados para o caso viscoso, onde varia-se o número de Mach. Um exemplo tridimensional é levado a cabo apenas para a primeira iteração, a fim de limitar os esforços computacionais.

No Capítulo 8 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Otimização Numérica e Diferenciação Automática – NO e AD

2.1 Introdução à otimização

Os problemas que envolvem minimização ou maximização com ou sem restrições já são bem conhecidos na engenharia, estes talvez sejam os mais presentes devido ao fato de que sempre se busca uma solução ótima.

Em geral se busca minimizar uma função a várias variáveis na qual o seu domínio é restrito; entretanto, o problema não se restringe a funções, também o problema se apresenta para funcionais, no cálculo variacional.

Ao longo do capítulo 2, a notação será a seguinte: \mathbf{x}_0 para o ponto de partida, \mathbf{x}^* para o ponto de ótimo, e \mathbf{x}_k para o ponto da k -ésima iteração. Em geral todas as funções estão definidas no \mathbb{R}^n , são não-lineares e escritas na forma implícita. As demonstrações dos teoremas a seguir apresentados, podem ser encontrados em um dos seguintes textos: [Hiriart-Urruty e Lemaréchal \(1993\)](#); [Nocedal e Wright \(1999\)](#); [Espath \(2009\)](#).

2.2 Teoria de otimização sem restrições

Na otimização sem restrições, se minimiza uma *função objetivo* que depende de variáveis reais, sem restrições sobre qualquer variável. A formulação matemática é

$$\min_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ com $n \geq 1$ e $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbb{R}$ é uma função suave.

2.2.1 Mínimo local

Definição 2.1 (Mínimo global) *No problema de minimização sem restrições tem-se que \mathbf{x}^* é ponto de mínimo global $\Leftrightarrow \mathcal{F}(\mathbf{x}) \geq \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$, $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.*

Definição 2.2 (Mínimo local) *No problema de minimização sem restrições tem-se que \mathbf{x}^* é ponto de mínimo local $\Leftrightarrow \mathcal{F}(\mathbf{x}) \geq \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{N}(\mathbf{x}^*, \delta)$, sendo δ um vetor real arbitrário; onde $\mathcal{N}(\mathbf{x}^*, \delta)$ é um entorno de \mathbf{x}^* de raio δ .*

2.2.2 Condições do ponto de ótimo sem restrições

Analisando a definição 2.2, parece que a única maneira de se encontrar o ponto de ótimo, \mathbf{x}^* , é examinando seu entorno. A seguir são apresentados os teoremas para realizar o reconhecimento de um mínimo.

Teorema 2.1 (Taylor) *Supondo que $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbb{R}$ é diferencialmente contínua e que $\delta \in \mathbb{R}^n$; sendo $\nabla(\cdot)$ o operador gradiente, tem-se que*

$$\mathcal{F}(\mathbf{x} + \delta) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \nabla \mathcal{F}^t(\mathbf{x} + t\delta) \delta \quad (2.2)$$

para um $t \in (0,1)$. Além disso, se \mathcal{F} for duas vezes diferencialmente contínua, tem-se que

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x} + \delta) = \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \int_0^1 \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x} + t\delta) \delta dt \quad (2.3)$$

logo

$$\mathcal{F}(\mathbf{x} + \delta) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \nabla \mathcal{F}^t(\mathbf{x}) \delta + \frac{1}{2} \delta^t \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x} + t\delta) \delta \quad (2.4)$$

Teorema 2.2 (Condições necessárias de primeira ordem) *Se \mathbf{x}^* é um ponto de mínimo local de \mathcal{F} e \mathcal{F} é continuamente diferenciável em um entorno aberto de \mathbf{x}^* , logo $\nabla\mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.*

Teorema 2.3 (Condições necessárias de segunda ordem) *Se \mathbf{x}^* é um ponto de mínimo local de $\mathcal{F}(\mathbf{x})$ e $\nabla^2\mathcal{F}(\mathbf{x})$ (Hessiano) é contínua em um entorno aberto de \mathbf{x}^* , logo $\nabla\mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ e $\nabla^2\mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$ positivo semi-definido.*

Teorema 2.4 (Condições suficientes de segunda ordem) *Supondo que $\nabla^2\mathcal{F}(\mathbf{x})$ é contínuo em um entorno aberto de \mathbf{x}^* e que $\nabla\mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ e $\nabla^2\mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$ é positivo definido. Logo \mathbf{x}^* é um ponto de mínimo local de \mathcal{F} .*

Teorema 2.5 (Mínimo de função convexa) *Se \mathcal{F} for convexa, qualquer mínimo local \mathbf{x}^* é um mínimo global de \mathcal{F} . E ainda, se \mathcal{F} for diferencialmente contínua, então qualquer ponto, \mathbf{x}^* , estacionário é um mínimo global de \mathcal{F} .*

Estes resultados providenciam os fundamentos dos algoritmos para otimização sem restrições, algoritmos também necessários como parte dos algoritmos de otimização com restrições.

2.2.3 Problemas não suaves

O foco deste trabalho é realizado sobre funções suaves, onde as derivadas segundas existem e são contínuas. Cabe salientar que existem problemas interessantes nos quais as funções podem não ser suaves, como por exemplo, a função que relaciona a forma da estrutura com as frequências naturais.

A forma mais simples de contornar este problema é criar subdomínios (funções por partes), nas quais as fronteiras são as descontinuidades da função original. Ainda existem alternativas muito mais elegantes e eficientes discutidas por [Hiriart-Urruty e Lemaréchal \(1993\)](#) que não serão tratadas.

2.2.4 Estratégias: busca linear e região confiável

A partir de um ponto \mathbf{x}_0 , os algoritmos de otimização geram uma sequência de iterações $\{\mathbf{x}_k\}_{k=0}^{\infty}$ que termina quando nenhum progresso a mais pode ser realizado ou quando este ponto parece ser a solução aproximada com suficiente acurácia. Na decisão de como se mover de uma iteração \mathbf{x}_k para a próxima iteração, os algoritmos usam informações à cerca de \mathcal{F} sobre \mathbf{x}_k , e possivelmente também informações sobre iterações recente em $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}$. Estes usam estas informações para encontrar uma nova iteração \mathbf{x}_{k+1} com um valor de \mathcal{F} menor do que na iteração anterior. Existem algoritmos *não monótonos*, que não insistem no decrescimento de \mathcal{F} em todos os passos, mas estes requerem que \mathcal{F} decresça após um número m prescrito de iterações. Isto leva à $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k) < \mathcal{F}(\mathbf{x}_{k-m})$.

Existem duas estratégias fundamentais para se mover da iteração atual \mathbf{x}_k para a nova iteração \mathbf{x}_{k+1} .

Na estratégia da *busca linear*, o algoritmo escolhe uma direção δ_k e busca ao longo desta, a partir da iteração atual \mathbf{x}_k , uma nova posição com um menor valor funcional. A distância percorrida sobre a direção δ_k pode ser aproximada pela solução de uma minimização unidimensional; sendo α_k o comprimento deste passo tem-se

$$\min_{\alpha_k > 0} \mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \alpha_k \delta_k) \quad (2.5)$$

A solução de (2.5) resulta no máximo benefício na direção δ_k , mas uma minimização exata é cara e desnecessária. Em vez disto, o algoritmo de busca linear gera um número limitado de passos, até encontrar um ponto que aproxime o mínimo de (2.5). Sobre o novo ponto, uma nova direção e um novo comprimento do passo são computados, e o processo é repetido.

Na estratégia da *região confiável*, a informação coletada acerca de \mathcal{F} é usada para construir uma *função modelo* m_k tal que seu comportamento em um entorno do ponto atual \mathbf{x}_k seja similar ao da função objetivo \mathcal{F} . Como o modelo m_k é realizado em um entorno do ponto atual \mathbf{x}_k , se restringe a busca do mínimo neste entorno de \mathbf{x}_k , resolvendo o seguinte subproblema

$$\min_{\delta} m_k(\mathbf{x}_k + \delta), \quad (\mathbf{x}_k + \delta) \subset \text{região confiável} \quad (2.6)$$

Se o candidato à solução não produz um decrescimento suficiente de \mathcal{F} , se conclui que a

região é muito ampla. Usualmente, a região confiável é uma esfera definida por $\|\delta\|_2 \leq \Delta_k$, onde o escalar $\Delta_k > 0$ é chamado de raio da região confiável.

O modelo m_k em (2.6), é usualmente definido por uma função quadrática (expansão de Taylor) da forma

$$m_k(\mathbf{x}_k + \delta) = \mathcal{F}_k + \delta^t \nabla \mathcal{F}_k + \frac{1}{2} \delta^t \mathbf{B}_k \delta \quad (2.7)$$

onde \mathcal{F}_k , $\nabla \mathcal{F}_k$ e \mathbf{B}_k são um escalar, um vetor e uma matriz, respectivamente. $\nabla \mathcal{F}_k$ é o gradiente enquanto a matriz \mathbf{B}_k é o Hessiano $\nabla^2 \mathcal{F}_k$ ou alguma aproximação do mesmo.

A principal diferença entre as duas estratégias aqui apresentadas é que o tamanho da região confiável afeta a direção da próxima iteração, enquanto que na busca linear somente existe uma direção de busca. Outro aspecto que diferencia estas duas abordagens é a ordem de escolha entre a *direção* e a *distância* para se mover na próxima iteração. Na busca linear se parte de uma direção δ_k fixa e se identifica uma distância apropriada, chamada de α_k . Na região confiável, se escolhe uma distância máxima – raio da região confiável Δ_k – e logo se procura uma direção e um passo que atendam o melhor desempenho possível sujeitos à restrição imposta pelo raio. Se este passo resulta ser insatisfatório, se reduz o raio Δ_k e se re-computa o processo.

Direção na busca linear

A direção de decrescimento $-\nabla \mathcal{F}_k$ é a escolha mais óbvia para a direção de busca no método de busca linear. Esta direção é a de maior decrescimento de \mathcal{F} neste ponto; para justificar esta escolha se aplica o teorema de Taylor (teorema 2.1), o qual revela que para uma direção de busca δ e uma distância α tem-se

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \alpha\delta) = \mathcal{F}(\mathbf{x}_k) + \alpha\delta^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}_k) + \frac{1}{2} \alpha^2 \delta^t \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}_k + t\delta) \delta \quad t \in (0, \alpha)$$

desta maneira, para descobrir a direção de maior decrescimento se busca obter o menor valor possível do produto escalar $\delta^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}_k)$. Como $\delta^t \nabla \mathcal{F}_k = \|\delta\|_2 \cdot \|\nabla \mathcal{F}_k\|_2 \cdot \cos \theta$ e com $\|\delta\|_2 = 1$ o $\cos \theta$ deve resultar no menor número possível, ou seja, -1. E isto ocorre para o valor de $\theta = \pi \text{ rad}$, assim revelando que a direção de δ deve ser $-\nabla \mathcal{F}_k$, logo

$$\delta = -\frac{\nabla \mathcal{F}_k}{\|\nabla \mathcal{F}_k\|_2}$$

O método de maior declividade é uma busca linear que se move ao longo de $\delta_k = -\nabla\mathcal{F}_k$ a cada passo. Uma das vantagens deste método é que este requer o computo do gradiente mas não o das derivadas segunda.

Os métodos de busca linear podem usar direções de busca diferentes à direção de maior decréscimo de \mathcal{F} . Em geral, qualquer direção de decréscimo pode ser usada – qualquer direção que faça um ângulo estritamente menor que $\frac{\pi}{2}$ radianos com $-\nabla\mathcal{F}_k$ – se garante um decréscimo de \mathcal{F} , com um passo suficientemente pequeno. Isto pode ser verificado a partir do teorema de Taylor (teorema 2.1); a partir de (2.4) tem-se

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \epsilon\delta_k) = \mathcal{F}(\mathbf{x}_k) + \epsilon\delta_k^t \nabla\mathcal{F}_k + O(\epsilon^2)$$

Aqui se distingue entre $\mathcal{O}(\cdot)$ e $o(\cdot)$ ¹. Enquanto δ_k é uma direção de decréscimo de \mathcal{F} , o ângulo θ_k entre δ_k e $\nabla\mathcal{F}_k$ tem $\cos\theta_k < 0$, então

$$\delta_k^t \nabla\mathcal{F}_k = \|\delta_k\|_2 \|\nabla\mathcal{F}_k\|_2 \cos\theta_k$$

Deste segue que $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \epsilon\delta_k) < \mathcal{F}(\mathbf{x}_k)$ para todo valor de ϵ suficientemente pequeno.

Outra importante direção de busca – talvez a mais importante delas – é a direção de *Newton*. Esta deriva da série de Taylor de segunda ordem aproximando $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \delta)$, a qual resulta em

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \delta) \approx \mathcal{F}_k + \delta^t \nabla\mathcal{F}_k + \frac{1}{2} \delta^t \nabla^2 \mathcal{F}_k \delta \stackrel{\text{def}}{=} m_k(\delta) \quad (2.8)$$

Assumindo que $\nabla^2 \mathcal{F}_k$ é positivo definida, se obtém a direção de Newton achando o vetor δ que minimiza $m_k(\delta)$. Por simplicidade, se assume a derivada de $m_k(\delta)$ ser zero, então se obtém de forma explícita

$$\delta_k^N = -\nabla^2 \mathcal{F}_k^{-1} \nabla\mathcal{F}_k \quad (2.9)$$

A direção de Newton é confiável quando a diferença entre a função modelo e a função original não for grande. Comparando (2.8) com (2.4) tem-se que o terceiro termo da expansão de Taylor $\nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}_k + t\delta)$ foi substituído por $\nabla^2 \mathcal{F}_k = \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}_k)$. Se $\nabla^2 \mathcal{F}(\cdot)$ for suficientemente suave, esta diferença introduz uma perturbação de somente $\mathcal{O}(\|\delta\|_2^3)$, então quando $\|\delta\|_2$ for pequeno, a aproximação $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + t\delta) \approx m_k(\delta)$ é precisa, (Nocedal e Wright, 1999).

¹ $o(s)$ tem o significado usual da análise matemática. Enquanto $o(s)$ representa termos cuja ordem de grandeza é pequena, comparada com s , $\mathcal{O}(s)$ representa termos da ordem de grandeza de s , isto é, $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{o(s)}{s} = 0$ e $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{O}(s)}{s}$ é finito

A direção de Newton pode ser usada na busca linear quando $\nabla^2 \mathcal{F}_k$ for positivo definido. A maior parte das implementações de busca linear com a direção de Newton usa um passo de comprimento unitário $\alpha = 1$, o qual é possível ajustar caso a redução do valor de \mathcal{F} não seja relevante. Quando o Hessiano não for positivo definido, a direção de Newton não estará definida, já que $\nabla^2 \mathcal{F}_k^{-1}$ não está definido.

Métodos que usam a direção de Newton atendem uma rápida razão de convergência, tipicamente Q-quadrática. Quando se chega a um entorno da solução, a convergência com alta acurácia ocorre com apenas algumas iterações. O maior problema deste métodos é o computo do Hessiano, muitas vezes impreciso e caro.

A direção de busca *Quase-Newton* provê uma alternativa atrativa pelo fato de não precisar do computo do Hessiano e ainda atende uma razão de convergência Q-superlinear. Em vez de usar o “verdadeiro” Hessiano $\nabla^2 \mathcal{F}_k$, este usa uma aproximação \mathbf{B}_k , a qual é atualizada a cada passo, levando em conta o conhecimento adicional obtido durante a ultima iteração. A atualização é realizada pelo fato de que mudanças no gradiente ao longo da direção de busca provêm informações à cerca das derivadas segundas de \mathcal{F} ao longo da direção de busca. Usando (2.3) adicionando e subtraindo o termo $\nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}) \delta$ tem-se

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x} + \delta) = \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}) \delta + \int_0^1 [\nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x} + t\delta) - \nabla^2 \mathcal{F}(\mathbf{x})] \delta dt$$

Como $\nabla \mathcal{F}(\cdot)$ é contínua, o tamanho do último termo da integral é $o(\|\delta\|_2)$. Deixando $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$ e $\delta = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, tem-se que

$$\nabla \mathcal{F}_{k+1} = \nabla \mathcal{F}_k + \nabla^2 \mathcal{F}_k (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + o(\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|_2)$$

Quando \mathbf{x}_k e \mathbf{x}_{k+1} estão contidos em um entorno da solução \mathbf{x}^* , com $\nabla^2 \mathcal{F}$ positivo definido, o termo final desta expansão é dominado por $\nabla^2 \mathcal{F}_{k+1} (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)$; então pode-se escrever que

$$\nabla^2 \mathcal{F}_{k+1} (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) \approx \nabla \mathcal{F}_{k+1} - \nabla \mathcal{F}_k \quad (2.10)$$

Para a nova aproximação do Hessiano se escolhe um \mathbf{B}_{k+1} tal que satisfaça (2.10) do verdadeiro Hessiano. Esta condição é conhecida como *equação secante*:

$$\mathbf{B}_{k+1} \mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k \quad (2.11)$$

onde

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k, \quad \mathbf{y}_k = \nabla \mathcal{F}_{k+1} - \nabla \mathcal{F}_k$$

Normalmente são impostas outras condições sobre \mathbf{B}_{k+1} , tais como simetria (motivado pelo fato do verdadeiro Hessiano ser simétrico) e que a diferença entre sucessivas aproximações tenha baixo posto, para atender questões de convergência. A aproximação inicial \mathbf{B}_0 deve ser pré-definida, no ponto de partida, (Nocedal e Wright, 1999).

As duas formas mais populares de atualizar a aproximação \mathbf{B}_0 do Hessiano são: a fórmula *simétrica de posto um*, ou SR1 do acrônimo em inglês *Symmetric-Rank-One*, definida por

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{(\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k)(\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k)^t}{(\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k)^t \mathbf{s}_k} \quad (2.12)$$

e a fórmula *BFGS*, nomeada após seus inventores, Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno, a qual é denominada como fórmula *simétrica de posto dois* e definida por

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^t \mathbf{B}_k}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^t}{\mathbf{y}_k^t \mathbf{s}_k} \quad (2.13)$$

Ambas satisfazem a equação da secante e ambas mantêm a simetria. A fórmula BFGS (2.13) gera uma aproximação positivo definida sempre que a aproximação inicial \mathbf{B}_0 for positivo definida e $\mathbf{s}_k^t \mathbf{y}_k > 0$.

A direção de quase-Newton vem dada pelo uso de \mathbf{B}_k no lugar do Hessiano exato na equação

$$\delta_k = -\mathbf{B}_k^{-1} \nabla \mathcal{F}_k \quad (2.14)$$

Na prática, na implementação do método de quase-Newton não é preciso inverter \mathbf{B}_k , de fato é aplicado uma aproximação da inversa $\mathbf{H}_k \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{B}_k^{-1}$

$$\mathbf{H}_{k+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{c}_k \mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^t) \mathbf{H}_k (\mathbf{I} - \mathbf{c}_k \mathbf{s}_k^t \mathbf{y}_k) + \mathbf{c}_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^t, \quad \mathbf{c}_k = \frac{1}{\mathbf{y}_k^t \mathbf{s}_k} \quad (2.15)$$

A ultima classe de direção de busca é gerada pelo *método não linear de gradientes conjugados*. Esta toma a seguinte forma

$$\delta_k = -\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}_k) + \beta_k \delta_{k-1}$$

onde β_k é um escalar que assegura que δ_k e δ_{k-1} sejam conjugados em relação ao Hessiano. O método de gradientes conjugados teve origem na solução de sistemas de equações lineares do tipo $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, onde a matriz dos coeficientes \mathbf{A} é simétrica e positivo definida. O problema de resolver este sistema linear é equivalente ao problema de minimizar a função convexa quadrática definida por

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^t \mathbf{x}$$

Em geral, direções geradas por gradientes conjugados não lineares são muito mais eficientes do que as direções de maior decrescimento e são mais simples de computar. Este método não atende a uma rápida razão de convergência comparado com o método de Newton e quase-Newton, mas a vantagem é que este não precisa armazenar nenhuma matriz, (Nocedal e Wright, 1999).

Todas estas direções de busca podem ser usadas diretamente nos algoritmos de busca linear. Exceto os gradientes conjugados estes têm aplicação análoga na estrutura dos algoritmos de região confiável.

Modelos para região confiável

Considerando $\mathbf{B}_k = \mathbf{0}$ em (2.7) e definindo a região confiável com o uso da norma Euclideana, o subproblema da região confiável (2.6) se torna

$$\min_{\delta} \mathcal{F}_k + \delta^t \nabla \mathcal{F}_k \quad \text{sujeito a } \|\delta\|_2 \leq \Delta_k$$

Pode-se escrever a solução deste problema de forma fechada

$$\delta_k = \frac{\Delta_k \nabla \mathcal{F}_k}{\|\nabla \mathcal{F}_k\|_2}$$

Este caso simplesmente é o método de maior declividade com um comprimento de passo determinado pelo raio da região confiável; a abordagem por região confiável e busca linear são essencialmente as mesmas para este caso.

Algoritmos mais interessantes são obtido escolhendo \mathbf{B}_k sendo o Hessiano exato no modelo quadrático (2.7), pois não é preciso fazer nada quando $\nabla^2 \mathcal{F}_k$ não for positivo definido, já que o subproblema (2.6) garante uma solução δ_k . O método de região confiável com a direção de Newton, na prática, é altamente efetivo.

Se o Hessiano \mathbf{B}_k no modelo quadrático (2.7) é definido pela aproximação quase-Newton, tem-se o método de região confiável quase-Newton.

2.2.5 Fator de escala

A performance de um algoritmo depende crucialmente de como o problema foi formulado. Uma importante questão na formulação do problema é o *fator de escala*. Na otimização

sem restrições se diz que um problema é *pobremente escalado* se uma perturbação da variável \mathbf{x} , numa certa direção, produz uma variação muito maior do valor de \mathcal{F} , do que uma perturbação da variável \mathbf{x} em outra direção (Nocedal e Wright, 1999).

O fator de escala é alterado (muitas vezes intencionalmente) quando as unidades para representar as variáveis são trocadas. Também pode existir a necessidade de mudar o fator de escala durante o processo de otimização, o qual pode ser diferente para todas as variáveis. Alguns algoritmos são muito sensíveis ao fator de escala; estes algoritmos

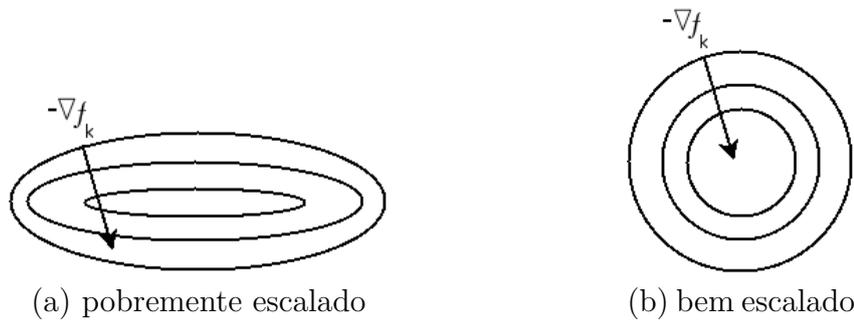


Figura 2.1: Fator de escala.

são os que seguem o sentido oposto do gradiente de \mathcal{F} . Na Figura 2.1 se percebe como o caso da esquerda (Figura 2.1a problema pobremente escalado) não produzirá uma grande redução de \mathcal{F} na seguinte iteração, enquanto o caso da direita (Figura 2.1b problema bem escalado) produzirá uma grande redução de \mathcal{F} na seguinte iteração.

2.2.6 Razão de convergência

Um modo de medir a performance de um algoritmo é pela sua razão de convergência. Neste são apresentados alguns tipos de avaliação da convergência.

Seja $\{\mathbf{x}_k\}$ uma sequência no \mathbb{R}^n que converge para \mathbf{x}^* . Se diz que a convergência é *Q-linear* se existe uma constante $r \in (0,1)$ tal que

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2} \leq r, \quad \forall k \text{ suficientemente grande} \quad (2.16)$$

O prefixo “Q” faz referência à “quociente”, pois este tipo de convergência é definido em termos do quociente de sucessivos erros.

A convergência é dita *Q-superlinear* se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2} = 0 \quad (2.17)$$

A convergência *Q-quadrática* é uma razão mais rápida que as anteriores, e é obtida se

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2} \leq M, \quad \forall k \text{ suficientemente grande} \quad (2.18)$$

A velocidade de convergência depende de r e (mais fracamente) de m , e estes valores não dependem apenas do algoritmo, mas também das propriedades particulares de cada problema.

Obviamente, qualquer sequência que converge *Q-quadraticamente* também converge *Q-superlinearmente*, e qualquer sequência que converge *Q-superlinearmente* também converge *Q-linearmente*. Em geral, é dito que a convergência *Q-ordem* é p (com $p > 1$) se existe uma constante positiva M tal que

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^p} \leq M, \quad \forall k \text{ suficientemente grande} \quad (2.19)$$

2.2.7 Razão de convergência R

Uma forma fraca de convergência, caracterizada pelo prefixo “R” (de raiz), é a que trata da total razão de decrescimento do erro, em vez do decrescimento de um simples passo do algoritmo. A convergência *R-linear* ocorre se existe uma sequência de escalares $\{\nu_k\}$ não negativos tais que

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2 \leq \nu_k, \quad \forall k \wedge \{\nu_k\} \text{ converge Q-linearmente para zero} \quad (2.20)$$

A sequência $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2\}$ é dita *dominada* por $\{\nu_k\}$. Sequências $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2\}$ dominadas por uma sequência Q-superlinear, Q-quadrática são convergências do tipo R-superlinear e R-quadrática, respectivamente.

A maior parte das análises de convergência, de algoritmos de otimização, são tratados com Q-convergência.

2.3 Teoria de otimização com restrições

Na otimização com restrições, se minimiza uma função objetivo que depende de variáveis reais, com restrições sobre qualquer variável. A formulação matemática é

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathcal{F}(\mathbf{x}) \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (2.21)$$

onde \mathcal{F} , \mathcal{C}_i estão definidas no \mathbb{R}^n ; e \mathcal{E} e \mathcal{I} são dois conjuntos finitos de índices. O vetor \mathbf{x} contém as chamadas *variáveis de projeto*, \mathcal{F} é a *função objetivo*, $\mathcal{C}_i, i \in \mathcal{E}$ são as *restrições de igualdade* e $\mathcal{C}_i, i \in \mathcal{I}$ são as *restrições de desigualdade*.

Um ponto \mathbf{x} que satisfaz todas as restrições de desigualdades e igualdades é chamado de *viável* ou *possível* e a região definida pela interseção de todas as funções é chamada de *região viável*. Uma restrição de desigualdade define dois subdomínios, pela sua fronteira, um subdomínio viável e outro inviável. Um ponto sobre esta fronteira define dita restrição como sendo *ativa*; um ponto contido no subdomínio viável define dita restrição como sendo *inativa*; finalmente, um ponto contido no subdomínio inviável define dita restrição como sendo *violada*. A restrição de igualdade satisfeita, define tal restrição como ativa.

Definição 2.3 (Região viável) *A região viável é definida como*

$$\Omega = \{\mathbf{x} \mid \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i \in \mathcal{E}; \quad \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}\} \quad (2.22)$$

De forma mais compacta se pode escrever (2.21) da seguinte forma

$$\min_{\mathbf{x} \in \Omega} \mathcal{F}(\mathbf{x}) \quad (2.23)$$

Na seção 2.2, foi caracterizado o ponto de mínimo de \mathbf{x}^* para o problema de otimização sem restrições. Nesta seção 2.3, se introduz uma outra definição à cerca do ponto de mínimo.

Definição 2.4 (Mínimo local estrito) *No problema de minimização tem-se que \mathbf{x}^* é ponto de mínimo local estrito $\Leftrightarrow \mathcal{F}(\mathbf{x}) > \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{N}(\mathbf{x}^*, \delta)$, sendo δ um vetor real arbitrário.*

2.3.1 Condições do ponto de ótimo de primeira ordem

Proposições das condições necessárias de primeira ordem

Em geral, o *Lagrangiano* ou *Função Lagrangiana* para o problema de otimização com restrições, é definido como

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \lambda) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) \quad (2.24)$$

onde λ_i são os multiplicadores de Lagrange.

Definição 2.5 (Conjunto ativo) *O conjunto ativo $\mathcal{A}(\mathbf{x})$ sobre todo \mathbf{x} viável é definido como a união do conjunto de índices \mathcal{E} com os índices das restrições de desigualdade ativas, isto produz*

$$\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} \mid \mathcal{C}_i(\mathbf{x}) = 0\} \quad (2.25)$$

O vetor $\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x})$ é usualmente chamado de *normal* à restrição \mathcal{C}_i em \mathbf{x} , pois este é perpendicular às curvas de contorno de \mathcal{C}_i em \mathbf{x} , e no caso da restrição de desigualdade, este vetor “aponta” na direção da região viável desta restrição. É possível, entretanto, que $\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x})$ desapareça devido à representação de $\mathcal{C}_i(\mathbf{x})$; logo o termo $\lambda_i \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x})$ será o vetor nulo para todos os valores de λ_i e portanto perderá o rol no gradiente do Lagrangiano $\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \lambda)$.

Usualmente se faz uma consideração chamada de *qualificação das restrições* para se assegurar de que não ocorra um comportamento degenerado no valor de \mathbf{x} em questão.

Definição 2.6 (LICQ) *Dado o ponto $\mathbf{x}^* \in \Omega$ e o conjunto ativo $\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$, se diz que a qualificação das restrições linearmente independente (LICQ do acrônimo em inglês Linear Independence Constraint Qualification) é assegurada se os gradientes das restrições do conjunto ativo $\{\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*), i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)\}$ forem linearmente independente.*

Observar que esta condição assegura que todos os gradientes das restrições ativas sejam diferentes do vetor nulo.

Teorema 2.6 (Condições necessárias de primeira ordem) *Supondo que $\mathbf{x}^* \in \Omega$ é um mínimo local de (2.21) e que é assegurado a LICQ em \mathbf{x}^* . Então existe um vetor multiplicador de Lagrange λ^* , com componentes λ_i^* , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, tal que as seguintes condições são satisfeitas em $(\mathbf{x}^*, \lambda^*)$*

$$\nabla_x \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \mathbf{0}, \quad (2.26a)$$

$$\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \quad (2.26b)$$

$$\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \quad (2.26c)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \quad (2.26d)$$

$$\lambda_i^* \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}. \quad (2.26e)$$

As condições (2.26a), (2.26b), (2.26c), (2.26d) e (2.26e) são conhecidas como as condições de *Karush–Kuhn–Tucker*, ou condições de *KKT*. Como os multiplicadores das restrições inativas vale zero, se pode reescrever

$$\mathbf{0} = \nabla_x \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_i^* \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \quad (2.27)$$

Um caso particular, complementar, merece sua definição:

Definição 2.7 (Complementário estrito) *Dado o ponto $\mathbf{x}^* \in \Omega$ e um vetor λ_i^* satisfazendo as condições de KKT, se diz que o complementar estrito é assegurado se exatamente um, entre λ_i^* e $\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)$, é zero para cada índice $i \in \mathcal{I}$. Em outras palavras, tem-se que $\lambda_i^* > 0$ para cada $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$.*

A definição 2.7 expressa que se um mínimo local for condicionado por um restrição de desigualdade, então dita restrição vale zero em \mathbf{x}^* (obviamente), mas o multiplicador de Lagrange deverá ser positivo. Entretanto, se um mínimo local não for condicionado por tal restrição de desigualdade, dita restrição será positiva, mas o multiplicador de Lagrange valerá zero. A condição (2.26e) é chamada de condição complementar.

2.3.2 Derivação das condições de primeira ordem

Sequência viável e direção limitante

A primeira definição introduzida é a *sequência viável* e sua associada *direção limitante*.

Definição 2.8 (Sequência viável e direção limitante)

- (i) Uma sequência $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}}$ com $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n \wedge k \in \mathbb{N}$ é definida como uma sequência viável em relação a um ponto viável $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, se existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que as seguintes propriedades são satisfeitas

$$\mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}^*, k \in \mathbb{N} \quad (2.28a)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_k = \mathbf{x}^* \quad (2.28b)$$

$$\mathbf{x}_k \in \Omega, k \geq k_0 \quad (2.28c)$$

O conjunto de todas as sequências viáveis em relação a um ponto viável $\mathbf{x}^* \in \Omega$ são denotadas por $\mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$.

- (ii) Um vetor $\delta \in \mathbb{R}^n$ é definido como uma direção limitante de uma sequência viável $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}} \subset \mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$, se existe uma subsequência $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}'}$, $\mathbb{N}' \subset \mathbb{N}$ tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2} = \delta, \quad \text{com } k \in \mathbb{N}' \quad (2.29)$$

Observar que uma direção limitante simplesmente expressa uma direção, a partir do ponto atual \mathbf{x}_k , na qual nenhuma restrição ativa será violada, i.e., direção pela qual se mantém a viabilidade. Outras definições podem ser encontradas, tal como, a interseção entre uma hipersfera de raio um, com centro em \mathbf{x}_k com a região viável.

Definição 2.9 (Solução local) Um ponto viável $\mathbf{x}^* \in \Omega$ é solução local de (2.21), se para toda sequência viável $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}} \subset \mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$ existe um $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_k) \geq \mathcal{F}(\mathbf{x}^*), k \geq k_0 \quad (2.30)$$

Teorema 2.7 (Caracterização da solução) Se $\mathbf{x}^* \in \Omega$ é solução local de (2.21), então toda sequência viável $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}} \subset \mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$ satisfaz

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)^t \delta \geq 0 \quad (2.31)$$

onde δ é qualquer direção limitante de uma sequência viável.

2.3.3 Caracterizando as direções limitantes: qualificação das restrições

O teorema 2.7 é bastante geral, entretanto este requer o conhecimento de todas as direções limitantes para todas as sequências viáveis $\mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$; então este não é muito útil como proposição. Nesta seção 2.3.3 é mostrado que as *qualificação das restrições* permitem caracterizar as propriedades sobressalentes de $\mathcal{T}(\mathbf{x}^*)$, e logo tornar a condição (2.31) fácil de verificar.

Uma qualificação das restrições usada frequentemente, aqui já definida, é a *qualificação das restrições linearmente independente* (LICQ) dada na definição (2.6). O seguinte lema mostra que quando a LICQ é assegurada, existe uma forma organizada para caracterizar o conjunto de todas as possíveis direções limitantes δ em termos dos gradientes $\nabla\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)$ das restrições ativas em \mathbf{x}^* .

Introduzindo a notação A , para representar a matriz na qual as linhas são os gradientes das restrições ativas no ponto de ótimo.

$$A = \left[\nabla\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \right]_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \quad (2.32)$$

Lema 2.1 (Caracterização das direções limitantes) *As duas seguintes proposições são verdadeiras.*

(i) *Se $\delta \in \mathbb{R}^n$ é uma direção limitante de uma sequência viável, logo*

$$\delta^t \nabla\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \quad \delta^t \nabla\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.33)$$

(ii) *Se (2.33) se mantém com $\|\delta\|_2 = 1$ e a condição LICQ é satisfeita, então $\delta \in \mathbb{R}^n$ é uma direção limitante de alguma sequência viável.*

O conjunto de direções definido por (2.33) possuem um rol central nas condições do ponto ótimo.

Definição 2.10 (Cone tangente e normal à região viável) *Um vetor \mathbf{w} é tangente à região viável Ω em $\mathbf{x} \in \Omega$, se para toda sequência $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}}$, $\mathbf{x}_k \in \Omega$, $k \in \mathbb{N}$, com*

$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_k = \mathbf{x}$ e $\{t_k\}_{\mathbb{N}}$ uma sequência de reais positivos tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = 0$, $k \in \mathbb{N}$, existe uma sequência $\{\mathbf{w}_k\}_{\mathbb{N}}$, $\mathbf{w}_k \in \mathbb{R}^n$, $k \in \mathbb{N}$, com $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{w}_k = \mathbf{w}$ tal que $\mathbf{x}_k + t_k \mathbf{w}_k \in \Omega$, $k \in \mathbb{N}$.

O conjunto $\mathcal{T}_{\Omega}(\mathbf{x})$ de todos os vetores tangentes à Ω em $\mathbf{x} \in \Omega$ é um cone, i.e., a seguinte propriedade é satisfeita

$$\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\Omega}(\mathbf{x}) \quad \Rightarrow \quad \alpha \mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\Omega}(\mathbf{x}), \quad \forall \alpha > 0$$

$\mathcal{T}_{\Omega}(\mathbf{x})$ é chamado de cone tangente à Ω em \mathbf{x} .

O cone normal $\mathcal{N}_{\Omega}(\mathbf{x})$ é o complemento ortogonal ao cone tangente, ou seja

$$\mathcal{N}_{\Omega}(\mathbf{x}) = \left\{ \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{v}^t \mathbf{w} \leq 0, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\Omega}(\mathbf{x}) \right\}$$

Definição 2.11 (Direção limitante e cone tangente) Dado um ponto \mathbf{x}^* e o conjunto dos índices das restrições ativas $\mathcal{A}(\mathbf{x})$, o conjunto F_1 é definido por

$$F_1 = \left\{ \alpha \delta \mid \alpha > 0, \quad \begin{array}{ll} \delta^t \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0, & \forall i \in \mathcal{E}, \\ \delta^t \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \geq 0, & \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \end{array} \right\}$$

O conjunto de vetores de direções limitantes a partir de \mathbf{x} viável é chamado de cone de direções limitantes, F_1 com $\alpha = 1$.

2.3.4 Multiplicadores de Lagrange

O lema 2.1 expressa que quando a LICQ é assegurada, o cone F_1 é o conjunto de todos os múltiplos positivos de todas as direções limitantes de todas as sequências viáveis. Ainda, a condição (2.31) do teorema 2.7, como já foi mencionado é inviável de ser verificada. O seguinte lema fornece uma alternativa prática de ser verificada, fazendo o uso dos multiplicadores de Lagrange.

Lema 2.2 (Inexistência da direção descendente) Não existe direção descendente $\delta \in F_1$ para a qual $\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)^t \delta < 0$, se e somente se existe um vetor $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_i \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = A(\mathbf{x}^*)^t \lambda, \quad \lambda_i \geq 0 \quad \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.34)$$

2.3.5 Demonstração do Teorema 2.6

Combinando os lemas 2.1 e 2.2 se consegue produzir as condições KKT descritas no teorema 2.6. Supondo que $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é um ponto viável sobre o qual a LICQ é assegurada. O teorema diz que se \mathbf{x}^* é uma solução local de (2.21), então existe um vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz as condições (2.26a), (2.26b), (2.26c), (2.26d), (2.26e) (KKT).

Primeiro foi mostrado que existem multiplicadores $\lambda_i, i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ tal que satisfazem (2.34). O teorema 2.7 expressa que $\delta^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) \geq 0$ para todos os vetores δ que são direções limitantes de sequências viáveis. Do lema 2.1, se a LICQ é assegurada, o conjunto de todas as possíveis direções limitantes é exatamente o conjunto de todos os vetores que satisfazem (2.33). Colocando estas duas proposições juntas, se encontram todas as direções δ que satisfaçam (2.33) e ainda $\delta^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) \geq 0$. Logo do lema 2.2, tem-se que existe um vetor λ que satisfaz (2.34), conforme proposto.

Definindo o vetor λ^* por

$$\lambda^* = \begin{cases} \lambda_i, & i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.35)$$

Esta escolha, juntamente com a solução local \mathbf{x}^* satisfaz as condições KKT. Com estas considerações, se verificam, uma a uma, as condições KKT.

- A condição (2.26a) vem dada por (2.34) e as definições (2.24) da função Lagrangiana e (2.35) de λ_i^* ;
- As condições (2.26b) e (2.26c) são satisfeitas desde que \mathbf{x}^* seja um ponto viável;
- A condição (2.26d) é satisfeita, já que de (2.34) tem-se $\lambda_i^* \geq 0$ para $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I}$, enquanto que de (2.35) tem-se $\lambda_i^* = 0$ para $i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$. Logo, $\lambda_i^* \geq 0$;
- A condição (2.26e) é satisfeita, já que para $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I}$ tem-se $\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0$, enquanto que para $i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ tem-se $\lambda_i^* = 0$.

Isto completa a demonstração.

2.3.6 Condições do ponto de ótimo de segunda ordem

Na descrição das condições do ponto de ótimo de primeira ordem – condições de KKT – foi relatado como devem resultar as derivadas primeiras de \mathcal{F} e das restrições ativas \mathcal{C}_i sobre \mathbf{x}^* . Uma vez satisfeitas tais condições, o “movimento” sobre qualquer vetor $\mathbf{w} \in F_1$ produz um acréscimo na aproximação de primeira ordem da função objetivo, i.e., $\mathbf{w}^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) > 0$, ou este valor é mantido, i.e., $\mathbf{w}^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = 0$.

A necessidade de usar derivadas de segunda ordem para verificar a existência um ponto de ótimo ocorre quando nada mais se pode saber, no que concerne, das derivadas de primeira ordem, i.e., quando $\mathbf{w}^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = 0$ nada se sabe sobre o crescimento ou decrescimento da função ao longo desta direção. Logo, para completar com a caracterização do ponto de ótimo falta saber quais as implicações das derivadas segundas da função objetivo e das restrições sobre ponto de ótimo.

Condições de segunda ordem são obtidas examinando os termos das derivadas segundas na expansão de Taylor da função objetivo e das restrições, esta informação adicional resolve o problema à cerca do crescimento de \mathcal{F} . Essencialmente, as condições de segunda ordem fornecem informações sobre a curvatura da função Lagrangiana nas direções “indecisas” – as direções $\mathbf{w} \in F_1$ tal que $\mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = 0$.

Como já mencionado, se assume que todas as funções envolvidas sejam suaves e pelo menos duas vezes diferenciáveis.

Dado F_1 pela definição 2.11 e algum vetor multiplicador de Lagrange λ^* satisfazendo as condições KKT, se define um subconjunto $F_2(\lambda^*)$ de F_1 por

$$F_2(\lambda^*) = \{\mathbf{w} \in F_1 \mid \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{w} = 0, \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \text{ com } \lambda^* > 0\} \quad (2.36)$$

De forma equivalente

$$\mathbf{w} \in F_2(\lambda^*) \Leftrightarrow \begin{cases} \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{w} = 0, & \forall i \in \mathcal{E} \\ \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{w} = 0, & \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \text{ com } \lambda^* > 0 \\ \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{w} \geq 0, & \forall i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \cap \mathcal{I} \text{ com } \lambda^* = 0 \end{cases} \quad (2.37)$$

O conjunto $F_2(\lambda^*)$ que contém os vetores \mathbf{w} tende a manter as restrições de desigualdade ativas, para as quais a componente λ_i^* é positiva, bem como para as restrições de igualdade.

Da definição (2.37) e do fato que $\lambda_i^* = 0$ para toda componente inativa $i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$, segue

$$\mathbf{w} \in F_2(\lambda^*) \quad \therefore \quad \lambda_i^* \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{w} = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \quad (2.38)$$

Logo, das condições KKT (2.26a) e pela definição da função Lagrangiana (2.24), tem-se

$$\mathbf{w} \in F_2(\lambda^*) \quad \therefore \quad \mathbf{w}^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \mathbf{w}^t \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (2.39)$$

Conforme o requerido, o conjunto $F_2(\lambda^*)$ contém direções de F_1 das quais não se sabe, por informações obtidas das derivadas primeiras, se a função objetivo \mathcal{F} irá crescer ou decrescer ao longo da mesma.

Teorema 2.8 (Condições necessárias de segunda ordem) *Supondo que $\mathbf{x}^* \in \Omega$ é um mínimo local de (2.21) e que é assegurado a LICQ em \mathbf{x}^* . Sendo $\lambda^* \in \mathbb{R}^n$ um vetor multiplicador de Lagrange tal que as condições KKT são satisfeitas, e sendo $F_2(\lambda^*)$ o conjunto definido em (2.36), então*

$$\mathbf{w}^t \nabla_{xx} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) \mathbf{w} \geq 0, \quad \forall \mathbf{w} \in F_2(\lambda^*) \quad (2.40)$$

Em outras palavras o Hessiano da função Lagrangiana deve ser positivo semi-definido.

Requerendo que o Hessiano da função Lagrangiana $\nabla_{xx} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \lambda^*)$ seja positivo definido sobre $F_2(\lambda^*)$, se constitui as condições do ponto de ótimo. Observar que a LICQ não é requerida.

Teorema 2.9 (Condições suficientes de segunda ordem) *Supondo que $\mathbf{x}^* \in \Omega$ é um ponto viável e que existe um vetor multiplicador de Lagrange $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que as condições KKT são satisfeitas. Ainda, supondo que*

$$\mathbf{w}^t \nabla_{xx} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \lambda^*) \mathbf{w} > 0, \quad \forall \mathbf{w} \in F_2(\lambda^*) \quad (2.41)$$

Então, \mathbf{x}^ é um mínimo local estrito.*

Finalmente, desde que \mathbf{x}_k , com $k \in \mathbb{N}$ pode ser designado por uma subsequência viável $\mathbb{N}' \subset \mathbb{N}$ tal que $\{\mathbf{x}_k\}_{\mathbb{N}'}$ converge com uma direção limitante δ , tem-se que $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k) > \mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$ para todo $k \geq k_0$.

2.3.7 Problemas não suaves

O fato da função objetivo e as restrições serem suaves é uma importante questão na caracterização da solução, assim como nos problemas de minimização sem restrições. Este assegura que a função objetivo e as restrições apresentem um comportamento razoavelmente previsível e permite que os algoritmos façam uma boa escolha na busca linear.

O problema da não suavidade das restrições pode ser facilmente contornado pela substituição da restrição não suave por várias restrições suaves. Assim como na otimização sem restrições de problemas não suaves se pode reformular o problema, de maneira tal que resulte um problema de otimização com restrições, onde todas as funções envolvidas sejam suaves (estes problemas ocorrem quando \mathcal{F} é um máximo de um conjunto de funções).

2.3.8 Sensibilidade

A conveniência de usar multiplicadores de Lagrange pode não ser clara, entretanto o rol destes tem um significado bastante intuitivo. Cada valor dos multiplicadores de Lagrange λ_i^* , expressa a *sensibilidade* do valor ótimo $\mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$ na presença das restrições \mathcal{C}_i . Em outras palavras, λ_i^* indica o quão forte \mathcal{F} está “empurrando” ou “puxando” contra a particular restrição \mathcal{C}_i .

Escolhendo uma restrição inativa $i \notin \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ tal que $\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) > 0$, a solução \mathbf{x}^* e o valor da função $\mathcal{F}(\mathbf{x}^*)$ são indiferentes à presença da restrição. Então da expressão (2.26e) tem-se que $\lambda_i^* = 0$, o multiplicador de Lagrange indica que tal restrição é insignificante. Perturbando esta restrição inativa, esta ainda continua inativa e \mathbf{x}^* continua sendo solução do problema de otimização.

Supondo agora que esta restrição i é ativa, $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$, e se perturba tal no sentido oposto do gradiente da restrição (isto significa que a perturbação desloca a fronteira da restrição para o lado da região inviável). Isto produz que $\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \geq -\epsilon \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2$ em vez de $\mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \geq 0$. Supondo que a perturbação ϵ seja suficientemente pequena para que a solução $\mathbf{x}^*(\epsilon)$ mantenha o mesmo conjunto de restrições ativas, e que os multiplicadores

de Lagrange não sejam muito afetados pela perturbação. Logo, tem-se que

$$\begin{aligned} -\epsilon \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2 &= \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*(\epsilon)) - \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \approx (\mathbf{x}^*(\epsilon) - \mathbf{x}^*)^t \nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*) \\ 0 &= \mathcal{C}_j(\mathbf{x}^*(\epsilon)) - \mathcal{C}_j(\mathbf{x}^*) \approx (\mathbf{x}^*(\epsilon) - \mathbf{x}^*)^t \nabla \mathcal{C}_j(\mathbf{x}^*) \\ &\quad \forall j \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \mid j \neq i \end{aligned}$$

De maneira análoga, o valor de $\mathcal{F}(\mathbf{x}^*(\epsilon))$ pode ser estimado pela expressão (2.26a). Logo

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{x}^*(\epsilon)) - \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) &\approx (\mathbf{x}^*(\epsilon) - \mathbf{x}^*)^t \nabla \mathcal{F}(\mathbf{x}^*) \\ &= \sum_{j \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_j^* (\mathbf{x}^*(\epsilon) - \mathbf{x}^*)^t \nabla \mathcal{C}_j(\mathbf{x}^*) \\ &\approx -\epsilon \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2 \lambda_i^* \end{aligned}$$

Tomando o limite em ϵ , a família de soluções, satisfaz

$$\frac{d\mathcal{F}(\mathbf{x}^*(\epsilon))}{d\epsilon} = -\lambda_i^* \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2 \quad (2.42)$$

Na análise de sensibilidade se pode concluir que se o valor $-\lambda_i^* \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2$ é grande, então o valor do ótimo é sensível ao deslocamento da i -ésima restrição. Caso $\lambda_i^* = 0$ para uma dada restrição i , a perturbação nesta, provavelmente não afetará o ótimo.

A análise de sensibilidade motiva a seguinte definição, a qual qualifica as restrições tendo ou não seu correspondente multiplicador de Lagrange igual a zero.

Definição 2.12 (Classificação das restrições de desigualdade) *Sendo \mathbf{x}^* a solução do problema (2.21), e supondo que as condições KKT são satisfeitas. Se diz que uma restrição de desigualdade \mathcal{C}_i é fortemente ativa se $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ e $\lambda_i^* > 0$. Se diz que uma restrição de desigualdade \mathcal{C}_i é fracamente ativa se $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ e $\lambda_i^* = 0$.*

Observar que a análise de sensibilidade independe do fator de escala da restrição individual, i.e., multiplicando \mathcal{C}_i por a , o novo problema será equivalente, já que o multiplicador de Lagrange resultará dividido por a e o gradiente da restrição resultará multiplicado por a , assim mantendo o produto $\lambda_i^* \|\nabla \mathcal{C}_i(\mathbf{x}^*)\|_2$ idêntico. Entretanto, o mesmo não ocorre se o fator de escala é aplicado à função objetivo, para um fator de escala a os multiplicadores de Lagrange resultarão multiplicados por a e a sensibilidade à perturbação será multiplicada por a .

2.4 Programação quadrática

O problema de programação quadrática é caracterizado por uma função objetivo quadrática e restrições lineares

$$\min_{\mathbf{x}} q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{G} \mathbf{x} + \mathbf{x}^t \delta \quad (2.43a)$$

$$\text{sujeito a } a_i^t \mathbf{x} = b_i, \quad i \in \mathcal{E} \quad (2.43b)$$

$$\text{e } a_i^t \mathbf{x} \geq b_i, \quad i \in \mathcal{I} \quad (2.43c)$$

onde \mathbf{G} é uma matriz simétrica $n \times n$, \mathcal{E} e \mathcal{I} são os conjuntos finitos de índices, e δ , \mathbf{x} e $\{a_i\}$, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ são vetores de n componentes, b_i são escalares. Se a matriz \mathbf{G} , for positiva semi-definida, então o problema (2.43a) é *convexo* e existe apenas um mínimo. Existem algoritmos para problemas convexos, muito eficientes, possuindo um número finito de iterações, e ainda detectam os casos sem solução.

Segundo Nocedal e Wright (1999), este algoritmo é entendido em três etapas

- As restrições de igualdade são eliminadas pela substituição destas na função objetivo (problema padrão), i.e., as restrições de igualdade simplesmente são uma dependência entre as variáveis;
- Por simples operações algébricas, se consegue reduzir o problema a um problema linear, ainda este é chamado de *problema de complementaridade linear*, já que a função objetivo toma a forma (2.26e);
- Recupera-se a solução para o espaço original com o computo das variáveis eliminadas.

2.5 Programação quadrática sequencial – SQP –

Os algoritmos de programação quadrática sequencial ainda são os algoritmos mais utilizados e mais robustos para problemas de programação não-linear. O algoritmo foi proposto por Wilson, e posteriormente o algoritmo foi abordado em uma forma quase-Newton. Han obteve um algoritmo convergente e Powell demonstrou que tal era superlinear.

O método *SQP* do acrônimo em inglês *sequential quadratic programming* surge da aplicação do método de Newton à função Lagrangiana, com $\delta_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ e $\Delta\lambda_k = \lambda_k - \lambda_{k-1}$, i.e.,

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) & \nabla_{\lambda x}\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) \\ \nabla_{x\lambda}\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) & \nabla_{\lambda\lambda}\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_k \\ \Delta\lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla_x\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) \\ \nabla_\lambda\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k) \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

Denotando por W a componente $\nabla_{xx}\mathcal{L}(\mathbf{x}_k, \lambda_k)$ e sendo A definida por (2.32), a expressão (2.44) resulta

$$\begin{bmatrix} W & A^t \\ A & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_k \\ \Delta\lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla\mathcal{F}(\mathbf{x}_k) \\ \mathcal{C}_i(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

Escrevendo as condições de Karush-Kuhn-Tucker, chega-se na seguinte expressão

$$\min_{\delta_k} \frac{1}{2} \delta_k^t \mathbf{W} \delta_k + \nabla\mathcal{F}^t(\mathbf{x}_k) \delta_k \quad (2.46a)$$

$$\text{sujeito a } \nabla\mathcal{C}_i^t(\mathbf{x}_k) \delta_k + \mathcal{C}_i(\mathbf{x}_k) = 0 \quad (2.46b)$$

Observar que (2.46a) e (2.46b) formam o problema de programação quadrática no ponto \mathbf{x}_k . Executando este problema sequencialmente, tem-se a programação quadrática sequencial. Em geral, este método é empregado com a abordagem quase-Newton. Obviamente, este problema foi apresentado apenas para restrições de igualdade. Se este for o caso, então o problema se resume na obtenção da solução de um sistema de equações lineares. Caso existam restrições de desigualdade, este resultaria em um sistema de inequações.

Para contornar este problema basta reescrever o problema da forma mais geral, conforme (2.21), e aproximar a função objetivo à uma forma quadrática e as restrições, tanto as de igualdade como as de desigualdade, à uma forma linear, e assim resolver o problema proposto na programação quadrática, i.e.,

$$\min_{\delta_k} \frac{1}{2} \delta_k^t \mathbf{W} \delta_k + \nabla\mathcal{F}^t(\mathbf{x}_k) \delta_k \quad (2.47a)$$

$$\text{sujeito a } \mathcal{C}_i(\mathbf{x}_k) + \nabla\mathcal{C}_i^t(\mathbf{x}_k) \delta_k = 0, \quad i \in \mathcal{E} \quad (2.47b)$$

$$\text{e } \mathcal{C}_i(\mathbf{x}_k) + \nabla\mathcal{C}_i^t(\mathbf{x}_k) \delta_k \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (2.47c)$$

Este subproblema, apenas resolve a obtenção da direção de busca. Logo, definida a direção de busca Wilson, Han e Powell sugeriram utilizar como função objetivo na busca linear, a função de *penalidade* exata, p . Esta função é definida por

$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} r_i \|\mathcal{C}_i(\mathbf{x})\|_2 \quad (2.48)$$

onde os r_i , fatores de penalidade, são definidos como $r_i \geq \lambda_i$. Esta função objetivo não tem apenas como finalidade diminuir o valor de \mathcal{F} , mas também diminuir o grau de violação das restrições. Isto se consegue por meio da penalização incluída na função objetivo. Os r_i indicam o grau de penalização sobre cada restrição, i.e., ao violar uma restrição a função objetivo é penalizada, e maior será a penalização quanto maior for o multiplicador de Lagrange para tal restrição. Observar que o uso da função de penalidade representa uma minimização sem restrições, i.e., o problema restrito se tornou um problema irrestrito.

2.6 Algoritmo de otimização – SQP –

O algoritmo necessita de um ponto de partida \mathbf{x}_0 e uma matriz \mathbf{B}_0 simétrica e positivo definida como aproximação do Hessiano da função Lagrangiana. Em linhas gerais o algoritmo desenvolve-se da seguinte maneira

- **Passo 1:** Obter os vetores δ e λ no ponto \mathbf{x}_0 , a partir da solução do subproblema de programação quadrática (2.47a, 2.47b, 2.47c);
- **Passo 2:** Verificar os critérios de parada;

$$\begin{cases} \|\nabla \mathcal{F}^t(\mathbf{x}_k) \delta_k\|_2 < tol_1 \\ \max C_i(\mathbf{x}_k) < tol_2 \\ \sum C_i(\mathbf{x}_k) < tol_3 \end{cases} \quad (2.49)$$

onde o primeiro critério verifica o decréscimo de \mathcal{F} na direção δ , o segundo critério verifica a restrição mais violada, e o terceiro critério verifica a soma das restrições violadas.

- **Passo 3:** Fazer a busca linear utilizando a função $p(\mathbf{x})$ definida em (2.48), sobre a direção δ , assim determinando o passo a ser efetuado;
- **Passo 4:** Atualizar a aproximação do Hessiano da função Lagrangiana, **BFGS**;
- **Passo 5:** Voltar ao **Passo 1** com o novo \mathbf{x}_k .

Em geral a aproximação do Hessiano da função Lagrangiana, começa com uma matriz com componentes proporcionais à matriz identidade, i.e.,

$$\mathbf{B}_0 = b_0 \mathbf{I} \quad (2.50)$$

onde b_0 é definida pelo usuário do programa; ainda a matriz \mathbf{B} deve ser reinicializada para não se ter influência de pontos muito distantes do ponto corrente. O reinício periódico é definido pelo usuário do programa.

Ainda, como dado de entrada é fornecido o vetor de fatores de escala para a variável. Este não pode ser modificado no andamento do código.

2.7 Introdução à avaliação de derivadas

As derivadas de funções tem sido obtidas de inúmeras maneiras, desde analíticas e semi-analíticas até numéricas. Na otimização ainda consegue-se obter expressões analíticas e semi-analíticas para avaliar as derivadas. Entretanto isto limita-se a casos muito particulares.

Modelos adjuntos são ferramentas desenvolvidas para modelagem inversa de sistemas físicos. A modelagem inversa é utilizada em diversas áreas da Ciência como a geofísica, a física molecular e otimização estrutural, aerodinâmica e aeroelástica. As aplicações de modelos adjuntos podem ser encontradas em ajuste de funções, análise de sensibilidade, determinação de vetores singulares e adaptação de malhas. Este trabalho é concentrado em formulações adjuntas, entretanto são revisados diferentes métodos para avaliar a sensibilidade.

2.8 Diferenças finitas ou divididas

O modelo largamente usado na análise de sensibilidade é também o mais intuitivo e de mais fácil implementação. Este modelo, Diferenças Finitas (FD do acrônimo em inglês *Finite Difference*) ou Diferenças Divididas (DD do acrônimo em inglês *Divide Difference*), tem sido usando em três formas: avante (*forward*), retrógradas (*backward*) e diferenças

centradas (*centered differences*). Logo

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_i} \approx \frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}_i + \delta \mathbf{x}_i) - \mathcal{F}(\mathbf{x}_i)}{\delta \mathbf{x}_i} \quad (2.51a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_i} \approx \frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{F}(\mathbf{x}_i - \delta \mathbf{x}_i)}{\delta \mathbf{x}_i} \quad (2.51b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_i} \approx \frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}_i + \delta \mathbf{x}_i) - \mathcal{F}(\mathbf{x}_i - \delta \mathbf{x}_i)}{2\delta \mathbf{x}_i} \quad (2.51c)$$

onde \mathcal{F} é uma função, \mathbf{x} é o vetor de variáveis independentes, $\delta \mathbf{x}_i$ é uma pequena variação da i -ésima variável independente e o índice i varia de 1 até o número de variáveis independentes, n . A expressão (2.51a) e (2.51b) corresponde a uma diferença avante e retrógradas, respectivamente, enquanto a expressão (2.51c) corresponde a uma diferença centrada.

Em geral, os valores das perturbações $\delta \mathbf{x}_i$ variam de 10^{-5} a 10^{-8} . Nas propostas de diferenças avante e retrógradas a aproximação é da ordem $\delta \mathbf{x}_i$, enquanto nas diferenças centradas a aproximação é da ordem $\delta \mathbf{x}_i^2$. Entretanto, a avaliação do gradiente via diferenças avante ou retrógradas requer $n + 1$ avaliações da função; enquanto a avaliação do gradiente via diferenças centradas requer $2n$ avaliações da função.

2.9 Diferenciação de algoritmos

No que concerne à diferenciação automática, algumas poucas proposições são apresentadas no sentido de explicar esta abordagem. É simples entender um algoritmo numérico como a composição de funções, onde cada passo do algoritmo é uma simples função. A composição destas funções deve ser diferenciada no intuito de obter um novo algoritmo. O algoritmo diferenciado deve, adequadamente, avaliar as derivadas das variáveis de saída (*output*) em relação às variáveis de entrada (*input*). Usando o *Teorema da Derivada da Função Composta*, i.e., regra da cadeia, o algoritmo diferenciado resulta em uma múltipla multiplicação de matrizes, onde cada produto pertence à um passo particular do algoritmo numérico.

Sendo \mathcal{F} uma função, definida por um algoritmo numérico.

$$\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$$

onde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ é o domínio em um espaço n -dimensional real e $Y \in \mathbb{R}^m$ é o codomínio em um espaço m -dimensional real.

Ao contrário do algoritmo inteiro (como uma unidade de estrutura única), é possível encontrar uma representação explícita para cada passo do algoritmo numérico. Desta maneira, este é decomposto em $k \in \mathbb{N}$ passos, onde \mathbb{N} é o conjunto dos números naturais.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^l : \mathbb{R}^{n_{l-1}} &\rightarrow \mathbb{R}^{n_l} & 1 \leq l \leq k \\ \mathbf{z}^{l-1} &\rightarrow \mathbf{z}^l \end{aligned}$$

onde \mathbf{z}^l são as variáveis intermediárias, sendo $\mathbf{z}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{x}$ e $\mathbf{z}^k \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{y}$, onde $\stackrel{\text{def}}{=}$ é a proposição definição.

Usando o operador composição de funções, $\odot(\cdot)$, a composição \mathcal{F} é estabelecida por

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = \odot_{l=1}^k \mathcal{F}^l(\mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} (\mathcal{F}^k \circ \dots \circ \mathcal{F}^1)(\mathbf{x}) \quad (2.52)$$

sendo \mathcal{F}^l uma função diferenciável.

Assim é possível avaliar seu Jacobiano no ponto \mathbf{x}_0 com

$$A_{ij}(\mathbf{x}_0) \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \mathcal{F}_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_j} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad 1 \leq i \leq m \quad \wedge \quad 1 \leq j \leq n \quad (2.53)$$

Aplicando a regra da cadeia, a seguinte expressão é obtida

$$A(\mathbf{x}_0) = \left. \frac{\partial \mathcal{F}^k}{\partial \mathbf{z}^{k-1}} \right|_{\mathbf{z}^{k-1} = \odot_{l=1}^{k-1} \mathcal{F}^l(\mathbf{x}_0)} \cdots \frac{\partial \mathcal{F}^1}{\partial \mathbf{z}^0} \quad (2.54)$$

As diferentes estratégias de diferenciação são baseadas na propriedade associativa da multiplicação de matrizes. Computacionalmente, as duas estratégias mais comuns que surgem neste contexto são: multiplicação avante *forward multiplication* e retro-multiplicação *backward multiplication*. De acordo com [Giering e Kaminski \(1996\)](#) estratégias mais eficientes podem ser obtidas quando a esparsidade do Jacobiano é trabalhada (compressão do Jacobiano).

No modo avante, a multiplicação de matrizes é avaliada na mesma ordem da composição, i.e.,

$$\left(\frac{\partial \mathcal{F}^k}{\partial \mathbf{z}^{k-1}} \cdot \left(\cdots \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{F}^3}{\partial \mathbf{z}^2} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{F}^2}{\partial \mathbf{z}^1} \cdot \frac{\partial \mathcal{F}^1}{\partial \mathbf{z}^0} \right) \right) \right) \right) \quad (2.55)$$

e todos os resultados intermediários possuem n colunas. No modo reverso, a multiplicação de matrizes é avaliada para trás (na ordem reversa), i.e.,

$$\left(\left(\left(\left(\frac{\partial \mathcal{F}^k}{\partial \mathbf{z}^{k-1}} \cdot \frac{\partial \mathcal{F}^{k-1}}{\partial \mathbf{z}^{k-2}} \right) \cdot \frac{\partial \mathcal{F}^{k-2}}{\partial \mathbf{z}^{k-3}} \right) \cdots \right) \cdot \frac{\partial \mathcal{F}^1}{\partial \mathbf{z}^0} \right) \quad (2.56)$$

e todos os resultados intermediários possuem m linhas.

2.9.1 Modo reverso adjunto – função escalar

Na otimização numérica, geralmente, $n > m$ e $m = 1$, e o modo reverso é preferível devido ao fato de que menos tempo computacional é necessário. Entretanto, para cada caso, o tempo computacional e o requerimento de memória devem ser analisados em justaposição.

Tomando a seguinte definição para um resultado intermediário de uma função escalar

$$\mathbf{z}_0^l \stackrel{\text{def}}{=} \bigodot_{i=1}^l \mathcal{F}^i(\mathbf{x}_0) \quad 1 \leq l \leq k \quad (2.57)$$

se conclui que a variação $\delta \mathbf{z}^l$ é função da variação da variável independente (ou variável de controle) $\delta \mathbf{x}$, e esta pode ser estabelecida por

$$\delta \mathbf{z}^l = \left. \frac{\partial \left(\bigodot_{i=1}^l \mathcal{F}^i(\mathbf{x}) \right)}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \cdot \delta \mathbf{x} \quad (2.58)$$

deste mesmo modo, a variação da variável intermediária é função da variação da variável intermediária anterior, e com $\delta \mathbf{z}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \delta \mathbf{x}$, a proposição fica definida por

$$\delta \mathbf{z}^l = \left. \frac{\partial \mathcal{F}^l(\mathbf{z}^{l-1})}{\partial \mathbf{z}^{l-1}} \right|_{\mathbf{z}^{l-1}=\mathbf{z}_0^{l-1}} \cdot \delta \mathbf{z}^{l-1} \quad (2.59)$$

O operador adjunto definido sobre um apropriado produto interno, (\cdot, \cdot) , é definido na álgebra linear como $(v, T(u)) = (T^*(v), u)$, onde $u, v \in \mathcal{V}$ e T^* é a transformação adjunta de $T : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$; sendo \mathcal{V} um espaço normado. Para o produto interno Euclidiano o operador adjunto é a matriz transposta.

O adjunto de um resultado intermediário é expresso como o gradiente de \mathcal{F} em relação ao resultado intermediário

$$\delta^* \mathbf{z}^l \stackrel{\text{def}}{=} \nabla_{\mathbf{z}^l} \bigodot_{i=l+1}^k \mathcal{F}^i(\mathbf{z}^l) \Big|_{\mathbf{z}^l=\mathbf{z}_0^l} \quad (2.60)$$

Denotando o produto interno em um espaço Euclidiano por $\langle \cdot, \cdot \rangle$, e com a definição de gradiente expressa por $\delta\mathcal{F} \stackrel{\text{def}}{=} (\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{F}(\mathbf{x}_0), \delta\mathbf{x})$, pode-se obter

$$\delta\mathcal{F} = \langle \delta^*\mathbf{z}^l, \delta\mathbf{z}^l \rangle \quad (2.61)$$

onde é natural que a Equação (2.61) se mantenha para todo l e

$$\begin{aligned} \langle \delta^*\mathbf{z}^{l-1}, \delta\mathbf{z}^{l-1} \rangle &= \langle \delta^*\mathbf{z}^l, \delta\mathbf{z}^l \rangle \\ &= \left\langle \delta^*\mathbf{z}^l, \left(\frac{\partial\mathcal{F}^l(\mathbf{z}^{l-1})}{\partial\mathbf{z}^{l-1}} \right) \Big|_{\mathbf{z}^{l-1}=\mathbf{z}_0^{l-1}} \cdot \delta\mathbf{z}^{l-1} \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{\partial\mathcal{F}^l(\mathbf{z}^{l-1})}{\partial\mathbf{z}^{l-1}} \right)^* \Big|_{\mathbf{z}^{l-1}=\mathbf{z}_0^{l-1}} \cdot \delta^*\mathbf{z}^l, \delta\mathbf{z}^{l-1} \right\rangle \\ \delta^*\mathbf{z}^{l-1} &= \left(\frac{\partial\mathcal{F}^l(\mathbf{z}^{l-1})}{\partial\mathbf{z}^{l-1}} \right)^* \Big|_{\mathbf{z}^{l-1}=\mathbf{z}_0^{l-1}} \cdot \delta^*\mathbf{z}^l \end{aligned} \quad (2.62a)$$

De acordo com a definição do operador adjunto como uma matriz transposta, a Equação (2.62) pode ser escrita como

$$\delta^*\mathbf{z}_i^{l-1} = \sum_{j=1}^{n_l} \frac{\partial\mathcal{F}_j^l(\mathbf{z}^{l-1})}{\partial\mathbf{z}_i^{l-1}} \Big|_{\mathbf{z}^{l-1}=\mathbf{z}_0^{l-1}} \cdot \delta^*\mathbf{z}_j^l \quad (2.63)$$

e esta Equação (2.63) exemplifica um simples passo do algoritmo adjunto.

O gradiente de \mathcal{F} é avaliado no ultimo passo do algoritmo adjunto, logo

$$\delta^*\mathbf{z}^0 = \delta^*\mathbf{x} = \nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{F} \quad (2.64)$$

A construção do código adjunto foi apresentada por [Giering e Kaminski \(1996\)](#). Outra maneira de obter o mesmo resultado pode ser obtido com a teoria de grafos orientados ([Griewank e Walther, 2008](#)).

2.10 Convexidade e unicidade

A falta de convexidade da função objetivo pode tornar o problema de otimização extremamente complexo e provavelmente os algoritmos clássico de otimização não poderão atingir o ponto de mínimo. Ainda, é mais preocupante o fato de que o problema pode não possuir unicidade da solução. Tornando-o um problema irrelevante sob o enfoque

físico, uma vez que pode ser obtido um mínimo que não seja de interesse. Naturalmente, a falta de unicidade invariavelmente leva a não-convexidade, embora o recíproco não seja verdadeiro. Conforme já mencionado uma função é convexa se e somente se o Hessiano desta for positivo semi-definido.

Em geral, as funções de resposta de problemas de otimização de forma são altamente não-convexos, especialmente para estruturas finas e leves. A não-convexidade é causada por grandes diferenças na eficiência de mecanismos de transporte de carga, por exemplo, transferência de carga através de uma ação de flexão ou membrana. Outra fonte de não-convexidade é a interação de diferentes modificações locais do projeto. Um exemplo famoso são problemas de otimização de enrijecedores estruturais, onde um grande número de possíveis projetos de enrijecedores apresentam propriedades estruturais quase equivalentes (Firl, 2010).

A convexidade de uma função de resposta na otimização estrutural e aerodinâmica depende do tipo de função e os tipos de variáveis empregadas para descrever a geometria ótima. A convexidade de funções de resposta e a unicidade da solução são temas em aberto. Estritamente, não há nenhuma garantia de que a otimização de algoritmos baseados em gradiente irá obter o ótimo global. Este fato motiva o desenvolvimento de métodos ordem zero ou métodos não diferenciáveis. Estas são as estratégias Evolucionárias, em particular os algoritmos genéticos, e também métodos Estocásticos. Entretanto este métodos apresentaram-se extremamente ineficientes para problemas de otimização em grande escala.

Existem vários métodos para reduzir a não convexidade de uma função de resposta. Antes de tudo, é a própria definição de função. Em muitos casos, as formulações integrais são muito mais suaves do que parâmetros discretos locais. Assim, a propriedade estrutural desejada deve ser quantificada numa formulação integral, se possível. Além disso, o tipo de parametrização da forma e o número de variáveis de concepção tem uma grande influência sobre a convexidade da função de resposta. Em geral, o número de variáveis deve ser razoável para o problema real, mas que não devem ser desnecessariamente aumentados. Os métodos de regularização também são bem adequados para reduzir os efeitos negativos das funções de resposta não-convexos (Firl, 2010).

Uma estratégia simples para evitar os problemas intrínsecos à falta de convexidade é a filtragem do gradiente. Neste trabalho será empregada a convolução do gradiente como filtro. A convolução integral é definida por

$$(f * g)(x) = \int_{\Omega} f(\tau) \cdot g(x - \tau) d\tau \quad (2.65)$$

e pelas propriedades intrínsecas à convolução, tem-se para o gradiente da função objetivo

$$\frac{\partial \mathcal{F}^b}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{x}} * g \right)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\tau}) \cdot g(\mathbf{x}) d\boldsymbol{\tau} \quad (2.66)$$

onde $\frac{\partial \mathcal{F}^b}{\partial \mathbf{x}}$ e Ω representam o gradiente filtrado e o domínio onde é aplicado o filtro.

A função empregada como filtro neste trabalho é a exponencial, i.e., $g(x) = \exp^{-n_f \cdot x}$, onde x e n_f representam a distância espacial entre as variáveis de projeto e um coeficiente constante. O coeficiente n_f representa o nível de influência entre as variáveis que se deseja, quanto menor, maior será a dependência entre as variáveis.

Na Figura 2.2 é apresentada a função filtro $g(x)$.

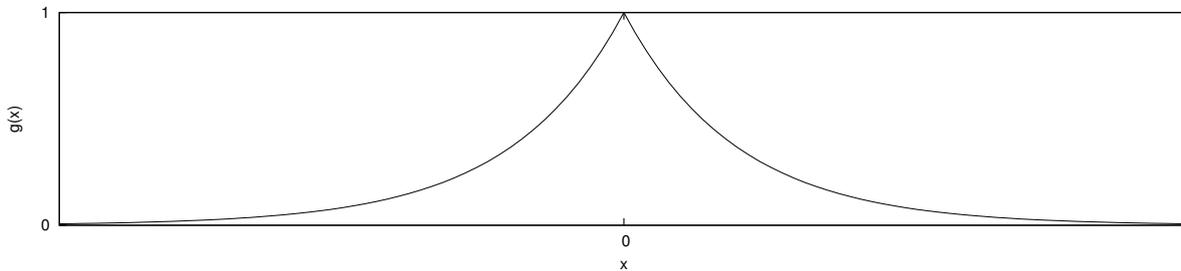


Figura 2.2: Função filtro radial.

Capítulo 3

B-*spline* Racionais Não-Uniformes – NURBS

3.1 Introdução à parametrização NURBS

A tecnologia CAD (do acrônimo em inglês, *Computer Aided Design*) esta intimamente relacionada ao trabalho desenvolvido por DeCasteljau (1959) e Bézier (1966, 1967, 1972), estes criaram a representação paramétrica de entidades geométricas usando *splines*. Splines foram introduzidas por Schoenberg (1946) como representação polinomial suave definidas por partes, onde uma curva pode ser definida em termos de pontos de controle e funções polinomiais apresentando uma forma simples e local, entretanto flexível e globalmente suave. A formulação de Bézier adota funções de base baseadas nos polinômios de Bernstein (Bernstein, 1912). DeCasteljau contribuiu ao trabalho de Bézier a traves do desenvolvimento de algoritmos eficientes para computar pontos sobre curvas Bézier. Os conceitos envolvendo funções *spline*, formulação paramétrica para curvas Bézier e algoritmos de DeCasteljau foram apresentados contemporaneamente por deBoor (1972) e Cox (1972), onde procedimentos de parametrização para B-*spline* (*basis spline*) foram desenvolvidas.

3.2 Funções paramétricas

As três formas, de se representar analiticamente curvas, superfícies e sólidos (largamente usadas na modelagem geométrica computacional ou CAGD, do acrônimo em inglês,

Computer Aided Geometry Design) são funções explícitas, implícitas e paramétricas. A forma explícita é um caso particular da forma implícita, a qual descreve uma relação implícita entre as quantidade envolvidas. Na forma paramétrica, cada quantidade é explicitada e independentemente descrita em função de um, dois ou três parâmetros independentes, para curvas, superfícies e sólidos, respectivamente.

Talvez a diferença mais relevante entre as formas implícita e paramétrica é que na implícita existe uma única função que descreve analiticamente certa entidade (curva, superfície ou sólido) já na forma paramétrica existem infinitas parametrizações que descrevem analiticamente a mesma entidade.

Na expectativa de descrever curvas, superfícies e sólidos complexos, representações paramétricas são utilizadas. E neste contexto, parametrizações NURBS (do acrônimo em inglês, *Non-Uniform Rational B-spline*) são utilizadas para descrever domínios físicos, e campos de solução. Assim, para estruturas de vigas, cascas e sólidos; uma representação para curvas na forma

$$\mathbf{C}(\xi) = (x(\xi), y(\xi), z(\xi)) \quad \forall(\xi) \in [a, b] \quad (3.1)$$

uma representação para superfícies na forma

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = (x(\xi, \eta), y(\xi, \eta), z(\xi, \eta)) \quad \forall(\xi, \eta) \in [a, b] \times [c, d] \quad (3.2)$$

e uma representação para sólidos na forma

$$\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = (x(\xi, \eta, \zeta), y(\xi, \eta, \zeta), z(\xi, \eta, \zeta)) \quad \forall(\xi, \eta, \zeta) \in [a, b] \times [c, d] \times [e, f] \quad (3.3)$$

é buscada, respectivamente.

Em relação ao campo de variação dos parâmetros, os intervalos $[a, b]$, $[c, d]$ e $[e, f]$ são arbitrados, mas comumente usa-se o intervalo $[0, 1]$, $[0, 1]^2$ e $[0, 1]^3$, respectivamente.

Naturalmente, a representação de entidades geométricas complexas não pode ser realizada apenas com uma função polinomial. Deste modo, polinômios paramétricos por partes e polinômios paramétricos racionais por partes serão empregados para descrever as entidades e os campos na classe de diferenciabilidade desejada.

3.3 Bézier

Curvas e superfícies Bézier foram nomeadas após seu inventor, Dr. Pierre Bézier, um engenheiro da corporação Renault na década de 60, desenvolver uma formulação paramétrica para o uso em modelagem geométrica, publicado em 1972, [Bézier \(1972\)](#). A formulação é bastante intuitiva para que projetistas e artistas possam usar sem requerer o conhecimento matemático de geometria analítica e diferencial.

Geometrias do tipo Bézier usam funções polinomiais explícitas para descrever suas coordenadas. Uma curva Bézier de n -ésimo grau toma a seguinte forma

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n B_{i,n}(\xi) \mathbf{P}_i \quad \xi \in [0, 1] \quad (3.4)$$

onde as funções de base (*blending*), $\{B_{i,n}\}$, são os clássicos polinômios de *Bernstein* de n -ésimo grau, divulgados por [Bernstein \(1912\)](#), que vem dados por

$$B_{i,n}(\xi) = \binom{n}{i} \xi^i (1 - \xi)^{n-i} \quad (3.5)$$

onde $\binom{n}{i}$ é o número ou coeficiente binomial dado por

$$\binom{n}{i} = C_i^n = \frac{n!}{i!(n-i)!} \quad (3.6)$$

e os coeficientes geométricos, $\{\mathbf{P}_i\}$, são chamados de *pontos de controle*, já que estes definem ou controlam a geometria parametrizada. O polígono formado pelos pontos de controles é chamado de *polígono de controle*. Algumas propriedades importantes são listadas a seguir.

Na Figura 3.1 são apresentadas algumas curvas Bézier com seus respectivos polígonos de controle. Nestas Figuras pode-se observar que os polígonos de controle definem a geometria de uma maneira bastante intuitiva. Por esta razão o método ainda hoje é muito usado, e a maior parte dos programas comerciais tem implementado curvas Bézier.

Nas Figuras 3.2a e 3.2b são apresentados alguns polinômios de Bernstein.

Propriedades ([Piegl e Tiller, 1997](#)):

P.Bézier. 1 *Função positiva semi-definida;*

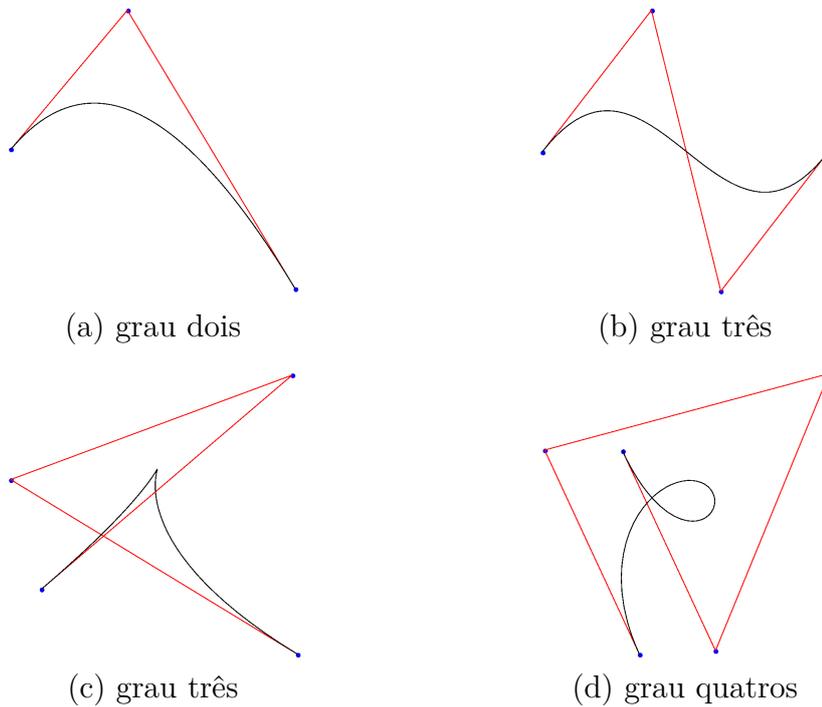


Figura 3.1: Curvas Bézier.

P.Bézier. 2 *Partição da unidade:* $\sum_{i=0}^n B_{i,n} = 1 \quad \forall \xi \in [0,1];$

P.Bézier. 3 $B_{0,n}(0) = B_{n,n}(1) = 1;$

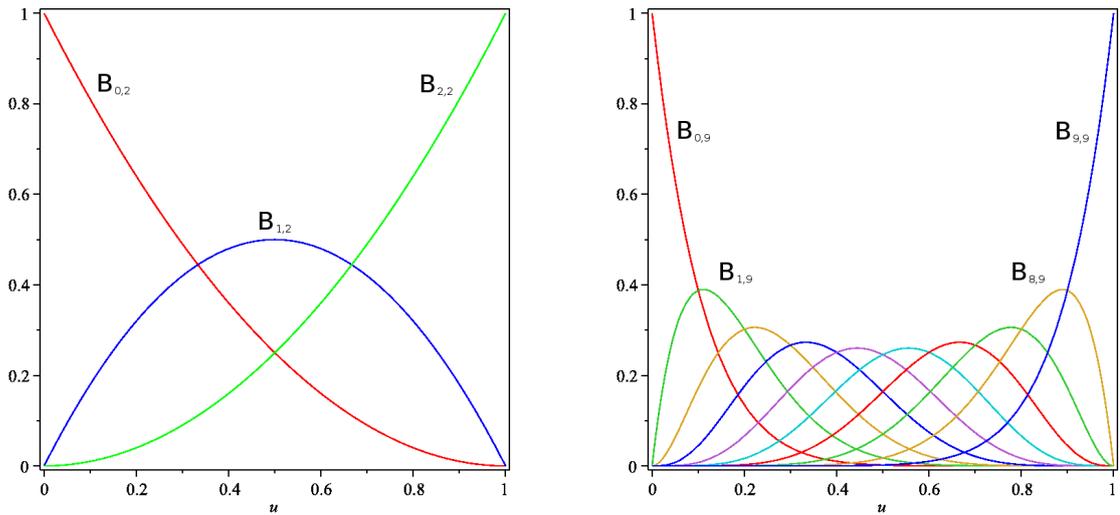
P.Bézier. 4 $B_{i,n}(\xi)$ possui um e somente um máximo no intervalo $[0,1]$ e este ocorre em $\xi = \frac{i}{n};$

P.Bézier. 5 *Simetria:* $\forall n$ o conjunto $\{B_{i,n}\}$ é simétrico em relação à $\xi = \frac{1}{2};$

P.Bézier. 6 *Definição recursiva:* $B_{i,n}(\xi) = (1 - \xi) B_{i,n-1}(\xi) + \xi B_{i-1,n-1}(\xi),$ tendo definido $B_{i,n}(\xi) \equiv 0 \Leftrightarrow i < 0 \vee i > n;$

P.Bézier. 7 *Derivadas:* $B'_{i,n}(\xi) = \frac{dB_{i,n}(\xi)}{d\xi} = n(B_{i-1,n-1}(\xi) - B_{i,n-1}(\xi))$ com $B_{-1,n-1}(\xi) \equiv B_{n,n-1}(\xi) \equiv 0.$

deCasteljau, engenheiro contemporâneo a Bézier da corporação Citroën, a partir das definições de Bézier desenvolveu um algoritmo eficiente para avaliação de curvas Bézier.



(a) Polinômios de Bernstein de grau dois (b) Polinômios de Bernstein de grau nove

Figura 3.2: Funções de base Bernstein.

3.4 Coordenadas homogêneas

O conceito de infinito na computação somente pode ser definido com a introdução do conceito de coordenadas homogêneas. Considere a quantidade a e um número real w , onde a quantidade a pode ser um ponto no \mathbb{R}^1 , \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 . Fixando a e variando w , a relação $v = \frac{a}{w}$ pode tomar uma gama de variação de menos a mais infinito. Computacionalmente pode-se definir v como o par ordenado (a, w) , ou seja, para todo w diferente de zero, $v = (a, w)$ em coordenadas homogêneas ou $v = \frac{a}{w}$ em coordenadas cartesianas; se $w = 0$ então o ponto $(a, 0)$ representa um ponto no infinito.

Tomando o conceito de infinito para o sistema de coordenadas cartesianas, pode-se substituir a tríade ordenada (x, y, z) por $(\frac{x}{w}, \frac{y}{w}, \frac{z}{w})$; neste caso a função $f(x, y, z)$ torná-se $f(\frac{x}{w}, \frac{y}{w}, \frac{z}{w})$. Sendo f uma função de n -ésimo grau, multiplicando f por w^n se eliminará todos os denominadores e ainda todas as condições (termos dos polinômios) serão de grau n . Como consequência estes polinômios são chamados de polinômios homogêneos e as coordenadas (xw, yw, zw, w) são chamadas de coordenadas homogêneas.

Sabe-se da matemática clássica que todas as cônicas, curvas e superfícies, podem ser representadas através de polinômios racionais, apresentado por Roberts (1965), Riesenfeld (1981) e Patterson (1985). A ideia das coordenadas homogêneas é representar uma curva polinomial racional no espaço n -dimensional como uma curva polinomial no espaço

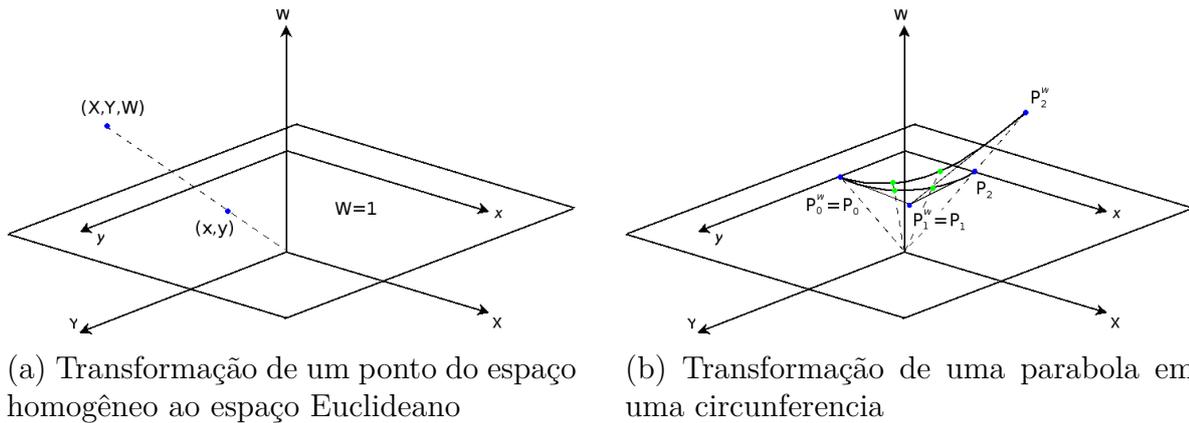


Figura 3.3: Mapeamento.

$(n + 1)$ -dimensional. Os pontos $\mathbf{P} = (x, y, z)$ no espaço homogêneo resultam ser $\mathbf{P}^w = (xw, yw, zw, w) = (X, Y, Z, W)$ no espaço de quarta dimensão. \mathbf{P} é obtido de \mathbf{P}^w dividindo todas as coordenadas pela quarta coordenada, W , i.e., quando se faz o mapeamento de \mathbf{P}^w desde a origem ao hiperplano $W = 1$. Este mapeamento, denotado por \mathcal{H} , é uma perspectiva com ponto de fuga na origem sobre o hiperplano $W = 1$

$$\mathbf{P} = \mathcal{M} \{ \mathbf{P}^w \} = \mathcal{M} \{ (X, Y, Z, W) \} = \begin{cases} \left(\frac{X}{W}, \frac{Y}{W}, \frac{Z}{W} \right) & \text{se } W \neq 0 \\ \text{direção } (X, Y, Z) & \text{se } W = 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

A Figura 3.3 exemplifica para duas dimensões este conceito.

Obviamente, para mapear um ponto do espaço paramétrico ao espaço Euclidiano, para representações paramétricas, se faz o mapeamento do espaço paramétrico para o espaço homogêneo e do espaço homogêneo ao espaço Euclidiano.

3.5 Bézier racional

Unindo os conceitos apresentados nas seções 3.3 e 3.4, têm-se funções racionais que podem ser escritas na forma

$$x(\xi) = \frac{X(\xi)}{W(\xi)} \quad y(\xi) = \frac{Y(\xi)}{W(\xi)} \quad z(\xi) = \frac{Z(\xi)}{W(\xi)} \quad (3.8)$$

onde $X(\xi)$, $Y(\xi)$, $Z(\xi)$ e $W(\xi)$ são polinômios, e ainda, cada coordenada tem o denominador comum. Definindo uma curva Bézier racional de n -ésimo grau por

$$\mathbf{C}(\xi) = \frac{\sum_{i=0}^n B_{i,n}(\xi) w_i \mathbf{P}_i}{\sum_{i=0}^n B_{i,n}(\xi) w_i} \quad \xi \in [0, 1] \quad (3.9)$$

\mathbf{P}_i e $B_{i,n}$ foram definidos anteriormente na seção 3.3, os w_i são escalares, chamados de pesos. Então, $W(\xi) = \sum_{i=0}^n B_{i,n}(\xi) w_i$ é o denominador comum da função. Exceto quando explícito, $w_i > 0$, assim $W(\xi) > 0$ para todo $\xi \in [0, 1]$. Pode-se escrever (3.9) da seguinte maneira

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n R_{i,n}(\xi) \mathbf{P}_i \quad \xi \in [0, 1] \quad (3.10)$$

onde

$$R_{i,n}(\xi) = \frac{B_{i,n}(\xi) w_i}{\sum_{j=0}^n B_{j,n}(\xi) w_j} \quad (3.11)$$

As $R_{i,n}(\xi)$ são as funções de base racionais.

As propriedades de $R_{i,n}$ são derivadas da expressão (3.10) e das propriedades de $B_{i,n}$.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.Bézier. 8 Função positiva semi-definida;

P.Bézier. 9 Partição da unidade: $\sum_{i=0}^n R_{i,n} = 1 \quad \forall \xi \in [0, 1]$;

P.Bézier. 10 $R_{0,n}(0) = R_{n,n}(1) = 1$;

P.Bézier. 11 $R_{i,n}(\xi)$ possui um e somente um máximo no intervalo $[0, 1]$;

P.Bézier. 12 se $w_i = 1 \quad \forall i$; então $R_{i,n}(\xi) = B_{i,n}(\xi) \quad \forall i$; i.e., $B_{i,n}(\xi)$ é um caso particular de $R_{i,n}(\xi)$;

Estas produzem propriedades geométricas das curvas racionais Bézier;

P.Bézier. 13 Região convexa: a curva está contida na região convexa formada pelo polígono de controle;

P.Bézier. 14 Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados à curva são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;

P.Bézier. 15 *Nenhuma reta ou plano contém mais interseções com uma curva Bézier do que esta reta ou plano contém com o polígono de controle da curva;*

P.Bézier. 16 *Interpolação dos pontos finais: $\mathbf{C}(0) = \mathbf{P}_0$ e $\mathbf{C}(1) = \mathbf{P}_n$;*

P.Bézier. 17 *A k -ésima derivada em $\xi = 0$ e $\xi = 1$ depende dos primeiros e últimos $k + 1$ pontos de controle e pesos; em particular $\mathbf{C}'(0)$ e $\mathbf{C}'(1)$, são paralelos à $\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_0$ e $\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_{n-1}$, respectivamente;*

P.Bézier. 18 *Curvas Bézier são um caso particular de curvas racionais Bézier.*

Para um dado conjunto de pontos de controle, \mathbf{P}_i , e pesos, w_i , os pontos de controle em coordenadas homogêneas resultam ser $\mathbf{P}_i^w = (w_i x_i, w_i y_i, w_i z_i, w_i)$, e assim se pode definir a curva Bézier *não-racional* no espaço de quarta dimensão (em coordenadas homogêneas) como

$$\mathbf{C}^w(\xi) = \sum_{i=0}^n B_{i,n}(\xi) \mathbf{P}_i^w \quad (3.12)$$

3.6 Vetor de nós

O vetor de nós (*knot vector*) é um conjunto de valores reais que descrevem as coordenadas dos nós no espaço paramétrico, onde uma sucessão não-monótona crescente de valores pode ser adotado, a qual definirá a extensão do domínio onde as funções de base são definidas. O nó divide o espaço paramétrico em vãos entre nós (período de nós), ou elementos (dentro do conceito do método dos elementos finitos) onde as funções de base são suaves (C^∞), observando que o contorno do elemento é representado por pontos, curvas ou superfícies no espaço físico, dependendo da topologia geométrica associada ao problema físico. Após a definição das coordenadas dos nós, o vão entre nós resulta definido, assim como a extensão de controle das funções de base e dos pontos de controle. O vetor de nós define o domínio das funções de base, assim resultando as funções de base definidas por partes, i.e., suporte local das funções de base.

Os vãos entre nós é sempre limitado por dois nós consecutivos, que constitui a entidade básica da análise IsoGeométrica, da mesma maneira que elementos são a entidade básica

de análise por elementos finitos (FEA do acrônimo do inglês *finite element analysis*). Quando dois nós consecutivos apresentam o mesmo valor no vetor de nós, o vão entre nós é nulo definindo assim a multiplicidade deste nó. O vetor de nós com valores de nós repetidos implica na redução da classe de continuidades correspondentes funções de base e na multiplicidade do nó, a qual é limitada pela ordem das funções de base, quando as funções de base se tornam interpoladoras, i.e., quando um valor de nó possui multiplicidade $p+1$ uma subdivisão é obtida. É possível observar que o número de derivadas contínuas das funções de base no nó com multiplicidade k decresce na quantidade $k - 1$. Ainda, é importante observar que o suporte de cada função de base sobre o vão entre nós é de $p + 1$.

O vetor de nós é classificado como uniforme se os nós são igualmente espaçados no espaço paramétrico. Caso contrário, este é definido como não-uniforme. Um vetor de nós é também classificado como não-periódico, ou aberto, se o primeiro e último nó possui multiplicidade $p + 1$ no vetor de nós, quando as funções de base se tornam interpoladoras no começo e no fim do espaço paramétrico, implicando em que os pontos de controle das esquinas interpolam a geometria. No interior dos nós, as bases, em geral, não são interpoladoras, a menos que uma redução da continuidade seja necessária. A utilização de vetores de nós não-periódicos é usual em CAD, o que permite a montagem de elementos na análise IsoGeométrica.

O vão entre nós pode ser manipulado de maneira que regiões de grande curvatura e/ou grandes gradientes nos campos de solução possam ser corretamente representados. Se o nível de refinamento é insuficiente, as funções de base podem ser refinadas também, considerando que o procedimento de refinamento do tipo h e p preservam a geometria e a parametrização. A grande diferença entre FEM e IGA é que as operações de refinamento h e p não comutam em IGA, já em FEM é indiferente a ordem em que h e p são aplicados.

3.7 Funções de base B-spline

Curvas, superfícies e sólidos que consistem de apenas um polinômio ou um polinômio racional são inadequadas em geral para representar geometrias complexas, já que

- um alto grau é necessário para satisfazer um grande número de restrições; dados $(n + 1)$ pontos se precisa de um polinômio de grau (n) . Ainda, polinômios de alto grau são ineficientes para processar e são numericamente instáveis;
- curvas, superfícies e sólidos de alto grau são necessárias para ajustar formas complexas;
- curvas, superfícies e sólidos que consistem de apenas um segmento são difíceis de manipular, i.e., o controle não é suficientemente local.

A solução é usar curvas e superfícies que são descritas por polinômios por partes, ou polinômios racionais por partes. A Figura 3.4 mostra uma curva, $\mathbf{C}(\xi)$, que consiste de

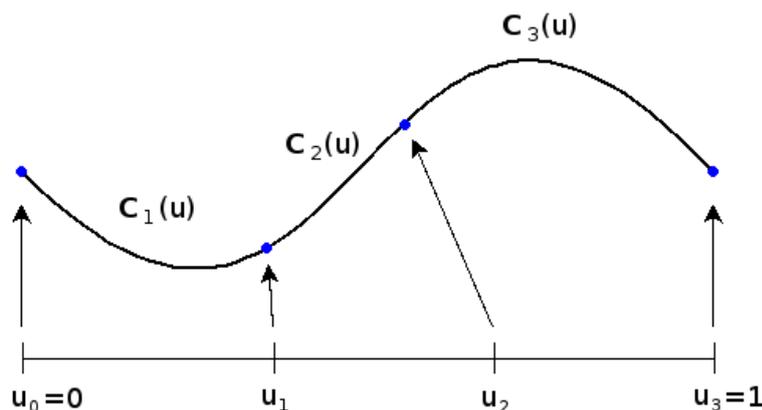


Figura 3.4: Três polinômios por partes de grau três.

três ($s_p = 3$) polinômios de grau três. $\mathbf{C}(\xi)$ está definida em $\xi \in [0, 1]$. Os valores dos parâmetros $\xi_0 = 0 < \xi_1 < \xi_2 < \xi_3 = 1$ são chamados de *pontos de parada* (*breakpoints*). Eles são os pontos dos extremos de cada segmento de polinômio. Denota-se por $\mathbf{C}_i(\xi)$ com $i \in [1, s_p]$ os segmentos da curva. Os segmentos são construídos de maneira que na união se tenha algum nível de continuidade, não necessariamente o mesmo para cada ponto de parada. Sendo $\mathbf{C}_i^{(j)}(\xi)$ a j -ésima derivada de $\mathbf{C}_i(\xi)$, $\mathbf{C}(\xi)$ possui continuidade paramétrica C^k no ponto de parada ξ_i se $\mathbf{C}_i^{(j)}(\xi_i) = \mathbf{C}_{i+1}^{(j)}(\xi_i)$ para todo $j \in [0, k]$.

Obviamente, os polinômios aqui usados serão os polinômios na forma Bézier. A Figura 3.5 apresenta três segmentos na forma cúbica de Bézier. \mathbf{P}_i^j denota o i -ésimo ponto de controle do j -ésimo segmento.

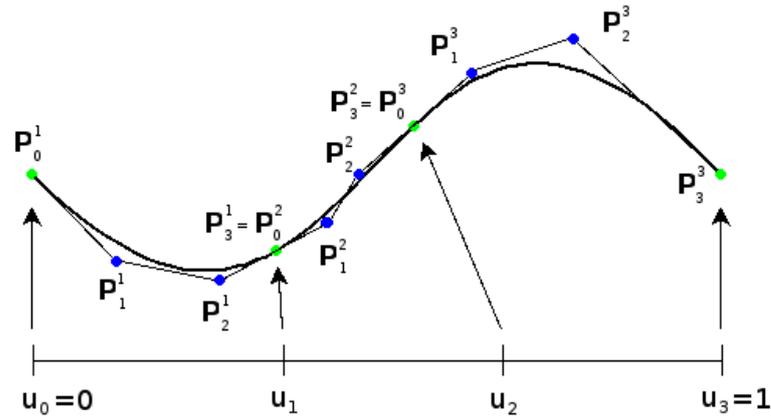


Figura 3.5: Curva da Figura 3.4 na forma Bézier.

Se o grau três, for mantido, e os pontos de parada $\Xi = \{\xi_0, \xi_1, \xi_2, \xi_3\}$ forem fixados, permitindo os doze pontos de controle, \mathbf{P}_i^j , variarem arbitrariamente, se obtém um espaço vetorial, \mathcal{S} , contendo todas as curvas polinomiais por partes de grau três sobre Ξ .

\mathcal{S} tem dimensão doze, e uma curva em \mathcal{S} pode ser descontínua em ξ_1 ou ξ_2 . Supondo que se especifica (como na Figura 3.5) $\mathbf{P}_3^1 = \mathbf{P}_0^2$ e $\mathbf{P}_3^2 = \mathbf{P}_0^3$, isto produz um espaço vetorial \mathcal{S}^0 , i.e., todas as curvas polinomiais por partes de grau três sobre Ξ são, pelo menos, de continuidade C^0 em qualquer ponto. \mathcal{S}^0 tem dimensão dez e $\mathcal{S}^0 \subset \mathcal{S}$.

Impondo continuidade C^1 (já considerando $\mathbf{P}_3^1 = \mathbf{P}_0^2$), usando a expressão P.Bézier.7 e avaliando em zero e em um, tem-se

$$\mathbf{C}'(0) = n(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_0) \quad \mathbf{C}'(1) = n(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_{n-1}) \quad (3.13)$$

Se faz uma mudança de variável do tipo

$$v = \frac{\xi - \xi_0}{\xi_1 - \xi_0} \quad w = \frac{\xi - \xi_1}{\xi_2 - \xi_1}$$

sendo v e w parâmetros locais nos intervalos $[\xi_0, \xi_1]$ e $[\xi_1, \xi_2]$, respectivamente. Então, $(v, w) \in [0, 1] \times [0, 1]$. Continuidade C^1 em ξ_1 implica

$$\frac{1}{\xi_1 - \xi_0} \mathbf{C}_1^{(1)}(v=1) = \mathbf{C}_1^{(1)}(\xi_1) = \mathbf{C}_2^{(1)}(\xi_1) = \frac{1}{\xi_2 - \xi_1} \mathbf{C}_2^{(1)}(w=0)$$

e a partir das expressões de (3.13), tem-se que

$$\frac{3}{\xi_1 - \xi_0} (\mathbf{P}_3^1 - \mathbf{P}_2^1) = \frac{3}{\xi_2 - \xi_1} (\mathbf{P}_1^2 - \mathbf{P}_0^2)$$

logo

$$\mathbf{P}_3^1 = \frac{(\xi_2 - \xi_1) \mathbf{P}_2^1 + (\xi_1 - \xi_0) \mathbf{P}_1^2}{\xi_2 - \xi_0} \quad (3.14)$$

A expressão (3.14) mostra a dependência de \mathbf{P}_3^1 e \mathbf{P}_3^2 , já que podem ser escritos em função de \mathbf{P}_2^1 , \mathbf{P}_1^2 e \mathbf{P}_2^3 , \mathbf{P}_1^3 , respectivamente.

Logo, isto produz um espaço vetorial \mathcal{S}^1 , i.e., todas as curvas polinomiais por partes de grau três sobre Ξ são, pelo menos, de continuidade C^1 em qualquer ponto. \mathcal{S}^1 tem dimensão oito e $\mathcal{S}^1 \subset \mathcal{S}^0 \subset \mathcal{S}$. A continuidade C^2 é obtida com o espaço vetorial \mathcal{S}^2 de dimensão seis.

Observar que o que se procura é uma representação para uma curva do tipo

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n f_i(\xi) \mathbf{P}_i \quad (3.15)$$

onde \mathbf{P}_i são os *pontos de controle*, e as $\{f_i(\xi), i = 0, \dots, n\}$ são *funções polinomiais por partes* formando uma base do espaço vetorial de todas as funções polinomiais por partes que satisfaçam as expectativas prescritas, tais como grau e continuidade, (para uma sequência de pontos de parada fixa $\Xi = \{\xi_i\}, i \in [0, s_p]$). A continuidade vem dada pelas funções de base, já que os pontos de controle podem ser manipulados sem alterar a continuidade da curva e a parametrização. Ainda, $\{f_i\}$ podem ser as apresentadas na seção 3.3; isto assegura que as curvas definidas por (3.15) possuem propriedades similares às propriedades das curvas Bézier. Outra propriedade importante destas novas funções de base é o *suporte local*; isto implica que cada $f_i(\xi)$ é não nula somente em um número limitado de subintervalos, não no domínio inteiro, $[\xi_0, \xi_{s_p}]$. Já que \mathbf{P}_i é multiplicado por $f_i(\xi)$, movendo \mathbf{P}_i somente é afetada a forma da curva no subintervalo onde $f_i(\xi)$ for não nula.

Finalmente, dado um polinômio por partes adequado, podem-se construir curvas por partes homogênea não racional.

$$\mathbf{C}^w(\xi) = \sum_{i=0}^n f_i(\xi) \mathbf{P}_i^w \quad (3.16)$$

Uma superfície e sólido não-racional (3.17) e homogênea não-racional (3.18) por produto tensorial, são dadas respectivamente

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\xi, \eta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m f_i(\xi) g_j(\eta) \mathbf{P}_{i,j} \\ \mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l f_i(\xi) g_j(\eta) h_k(\zeta) \mathbf{P}_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^w(\xi, \eta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m f_i(\xi) g_j(\eta) \mathbf{P}_{i,j}^w \\
\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l f_i(\xi) g_j(\eta) h_k(\zeta) \mathbf{P}_{i,j,k}^w
\end{aligned} \tag{3.18}$$

3.7.1 Definição e propriedades das funções de base B-spline

Existem diversas maneiras na literatura para definir as funções de base B-spline, a mais aceita e conhecida foi dada por deBoor (1972) e por Cox (1972), a definição recursiva Cox-deBoor.

Sendo $\Xi = \{\xi_0, \dots, \xi_{s_p}\}$ uma sequência de números reais crescentes (não necessariamente monótona crescente), i.e., $\xi_i \leq \xi_{i+1}$, $i = 0, \dots, s_p - 1$. Os ξ_i são os nós (*knots*), e Ξ é o vetor de nós (*knots vector*). A i -ésima função de base B-spline de grau p (ordem $p + 1$), denotada por $N_{i,p}(\xi)$, é definida como

$$\begin{aligned}
N_{i,0}(\xi) &= \begin{cases} 1 & \text{if } \xi_i \leq \xi < \xi_{i+1}, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \\
N_{i,p}(\xi) &= \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi)
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Observar que

- $N_{i,0}(\xi)$ é a função de *Heaviside* (degrau unitário), igual à zero em todo o domínio exceto no intervalo semi-aberto $\xi \in [\xi_i, \xi_{i+1})$;
- para $p > 0$, $N_{i,p}(\xi)$ é uma combinação linear de duas funções de base de grau $(p - 1)$;
- o computo de um conjunto de funções de base requer a especificação do vetor de nós, Ξ , e do grau, p ;
- a expressão (3.19) pode produzir uma forma indefinida (relação por zero) ou uma forma indeterminada (quociente zero sobre zero); estes são definidos iguais à zero;
- as $N_{i,p}(\xi)$ funções polinomiais por partes estão definidas no conjunto dos reais; em geral somente interessam no intervalo semi-aberto $[\xi_0, \xi_m)$;

- o intervalo semi-aberto $[\xi_i, \xi_{i+1})$, é chamado de período do i -ésimo nó; este pode ter comprimento zero já que os nós podem não ser distintos;
- o computo das funções de base geram uma Tabela triangular truncada, Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Tabela triangular truncada das $N_{i,p}(\xi)$.

$N_{0,0}$			
$N_{1,0}$	$N_{0,1}$		
$N_{2,0}$	$N_{1,1}$	$N_{0,2}$	
$N_{3,0}$	$N_{2,1}$	$N_{1,2}$	$N_{0,3}$
$N_{4,0}$	$N_{3,1}$	$N_{2,2}$	$N_{1,3}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Por simplificação $N_{i,p}(\xi)$ pode ser escrito como $N_{i,p}$.

Em relação à nomenclatura, o termo pontos de parada (*breakpoints*) é usado sempre que $\xi_i < \xi_{i+1}$, i.e., sequência monótona crescente; o termo vetor de nós (*knots vector*) é usado sempre que $\xi_i \leq \xi_{i+1}$, i.e., sequência crescente. O termo B-*spline* significa que se está fazendo uso de funções de Bernstein (B) por partes (*spline*).

Logo, um caso particular das curvas e superfícies B-*spline* devem ser as curvas e superfícies Bézier. Esta particularização vem dada sempre que o vetor de nós vier dado na forma

$$\Xi = \{\underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1}\}$$

Sendo

$\Xi = \{\xi_0 = 0, \xi_1 = 0, \xi_2 = 0, \xi_3 = 1, \xi_4 = 2, \xi_5 = 3, \xi_6 = 4, \xi_7 = 4, \xi_8 = 5, \xi_9 = 5, \xi_{10} = 5\}$ e $p = 2$. As funções de base, não nulas, de grau zero, um e dois são apresentadas nas Figuras 3.6, 3.7 e 3.8, respectivamente.

Algumas propriedades importantes das funções de base B-*spline* são listadas, as quais

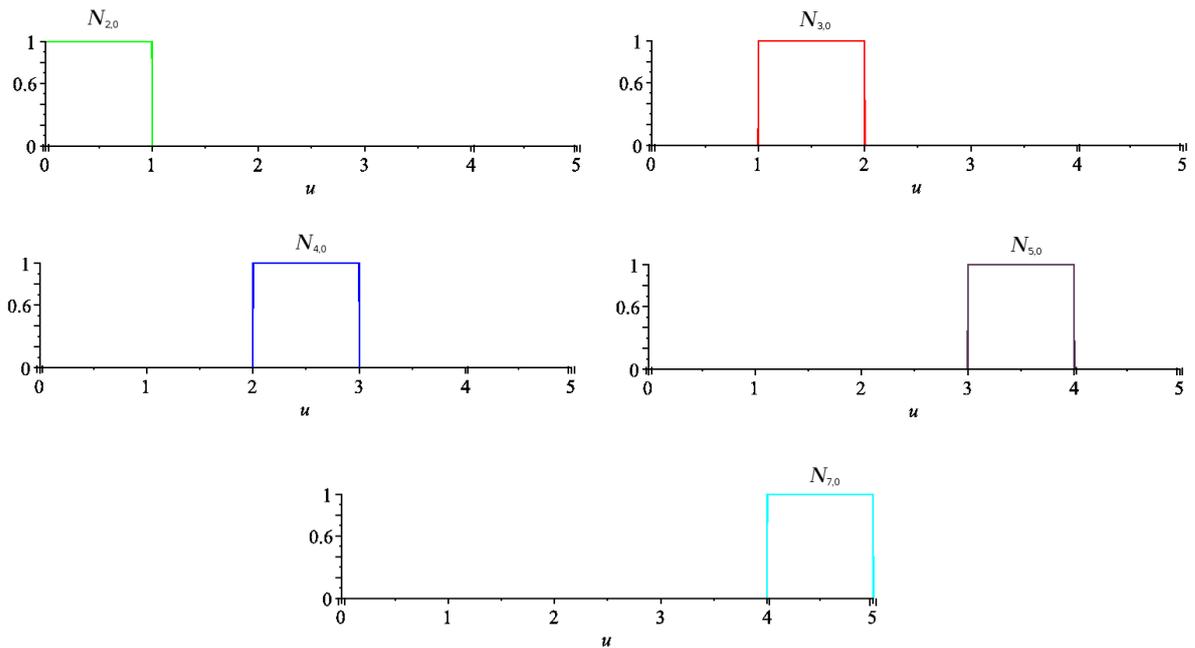


Figura 3.6: Funções de base não-nulas de zero grau.

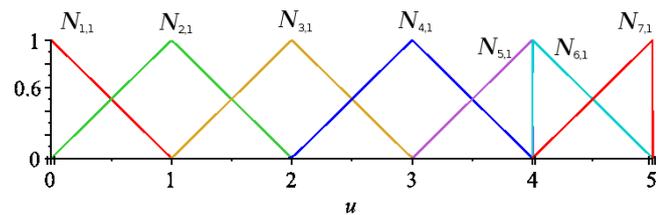


Figura 3.7: Funções de base não-nulas de primeiro grau.

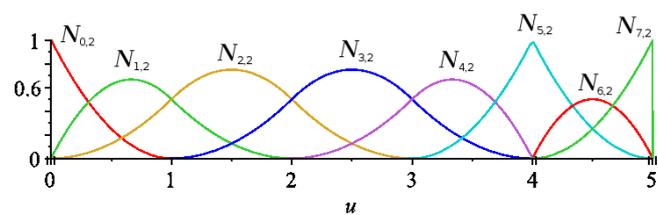


Figura 3.8: Funções de base não-nulas de segundo grau.

forneem características geométricas desejáveis na modelagem e na manipulação de curvas e superfícies.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.B-spline. 1 Função positiva semi-definida (demonstrado por indução sobre p);

P.B-spline. 2 Suporte local: $N_{i,p}(\xi) = 0$ se ξ estiver fora do intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1})$ (local

support property);

Este esquema é ilustrado na Tabela triangular 3.2. Observar que $N_{1,3}$ é uma combinação de $N_{1,0}$, $N_{2,0}$, $N_{3,0}$ e $N_{4,0}$. Logo, $N_{1,3}$ é não-nula somente no intervalo para $\xi \in [\xi_1, \xi_5)$

Tabela 3.2: Suporte local.

$N_{1,0}$		$N_{0,2}$		
	↙			
		$N_{1,1}$		$N_{0,3}$
	↙		↙	
$N_{2,0}$			$N_{1,2}$	
	↙		↙	↙
		$N_{2,1}$		$N_{1,3}$
	↙		↙	↙
$N_{3,0}$			$N_{2,2}$	
	↙		↙	
		$N_{3,1}$		$N_{2,3}$
	↙			
$N_{4,0}$		$N_{3,2}$		

P.B-spline. 3 Em um dado período (knot span) $[\xi_j, \xi_{j+1})$, no máximo $p + 1$ das $N_{i,p}(\xi)$ são não-nulas, e são chamadas de $N_{j-p,p}, \dots, N_{j,p}$;

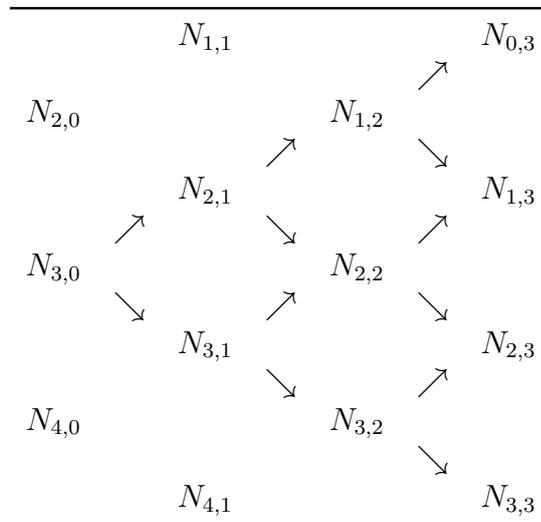
Sobre $\xi \in [\xi_3, \xi_4)$ a única função não-nula de grau zero é $N_{3,0}$, e as únicas funções não-nulas de grau três são $N_{0,3}, \dots, N_{3,3}$. Esta propriedade é ilustrada na Tabela triangular 3.3.

P.B-spline. 4 Partição da unidade: dado um período arbitrário, $[\xi_i, \xi_{i+1})$,

$$\sum_{j=i-p}^i N_{j,p}(\xi) = 1 \quad \forall \xi \in [\xi_i, \xi_{i+1});$$

P.B-spline. 5 Todas as derivadas de $N_{i,p}(\xi)$ existem no interior do período. Sobre o nó, $N_{i,p}(\xi)$ é C^{p-o} contínuo, onde o é a multiplicidade do nó;

P.B-spline. 6 Exceto para $p = 0$, $N_{i,p}(\xi)$ possui um e somente um máximo.

Tabela 3.3: Funções não-nulas sobre $\xi \in [\xi_3, \xi_4)$.

O efeito da multiplicidade dos nós deve ser entendido em dois diferentes aspectos. Supondo um vetor de nós dados por $\Xi = \{0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 5\}$ e o grau $p = 2$, pela propriedade P.B-*spline*.2 tem-se que as funções base são computadas nos seguintes períodos, pois valem zero nos demais

$$N_{0,2} : \{0, 0, 0, 1\}$$

$$N_{1,2} : \{0, 0, 1, 2\}$$

$$N_{2,2} : \{0, 1, 2, 3\}$$

$$N_{3,2} : \{1, 2, 3, 4\}$$

$$N_{4,2} : \{2, 3, 4, 4\}$$

$$N_{5,2} : \{3, 4, 4, 5\}$$

$$N_{6,2} : \{4, 4, 5, 5\}$$

$$N_{7,2} : \{4, 5, 5, 5\}$$

Os dois diferentes aspectos da multiplicidade dos nós são:

- a multiplicidade do nó em relação ao vetor de nós;
- a multiplicidade do nó em relação às funções de base.

Para este dado vetor de nós, em $\xi = 0$ tem-se multiplicidade três, mas em relação às funções de base $N_{0,2}$, $N_{1,2}$ e $N_{2,2}$, em $\xi = 0$ tem-se multiplicidade três, dois e um,

respectivamente. Logo, da propriedade P.B-*spline*.5, tem-se que a continuidade das funções de base em $\xi = 0$ é:

- $N_{0,2}$ é descontínua;
- $N_{1,2}$ é C^0 contínua;
- $N_{2,2}$ é C^1 contínua;
- $N_{3,2}, N_{4,2}, N_{5,2}, N_{6,2}$ e $N_{7,2}$ não são afetadas.

Este fato mostra como as funções de base “percebem” os nós, i.e., $N_{0,2}$ percebe uma multiplicidade três enquanto $N_{0,2}$ percebe uma multiplicidade dois em $\xi = 0$. Assim como $N_{6,2}$ é C^0 contínua em $\xi = 4$ e $\xi = 5$.

3.7.2 Derivadas das funções de base B-*spline*

As derivadas das funções de base, vem dadas por

$$N'_{i,p}(\xi) = \frac{p}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) - \frac{p}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \quad (3.20)$$

A expressão (3.20) é demonstrada por indução sobre p (Piegl e Tiller, 1997). Agora, denotando por $N_{i,p}^{(k)}(\xi)$ a k -ésima derivada de $N_{i,p}(\xi)$, diferenciar repetidamente produz

$$N_{i,p}^{(k)}(\xi) = p \left(\frac{N_{i,p-1}^{(k-1)}}{\xi_{i+p} - \xi_i} - \frac{N_{i+1,p-1}^{(k-1)}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \right) \quad (3.21)$$

A expressão (3.22), dada a seguir, é uma outra generalização de (3.21). Esta computa a derivada $N_{i,p}^{(k)}(\xi)$ em termos das funções $N_{i,p-k}, \dots, N_{i+k,p-k}$

$$\begin{aligned} N_{i,p}^{(k)}(\xi) &= \frac{p!}{(p-k)!} \sum_{j=0}^k a_{k,j} N_{i+j,p-k} \\ a_{0,0} &= 1 \\ a_{k,0} &= \frac{a_{k-1,0}}{\xi_{i+p-k+1} - \xi_i} \\ a_{k,j} &= \frac{a_{k-1,j} - a_{k-1,j-1}}{\xi_{i+p+j-k+1} - \xi_{i+j}} \quad j = 1, \dots, k-1 \\ a_{k,k} &= \frac{-a_{k-1,k-1}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+k}} \end{aligned}$$

Ainda, [Butterfield \(1976\)](#) fornece uma equação para o computo das derivadas das funções de base B-spline, dada por

$$N_{i,p}^{(k)}(\xi) = \frac{p}{p-k} \left(\frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}^{(k)} + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}^{(k)} \right)$$

$$k = 0, \dots, p-1$$

Sobre um vetor de nós $\Xi = \{0, 0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 5, 5\}$ são definidas as nove funções de base B-spline de grau três, na Figura 3.9, e suas respectivas derivadas na Figura 3.10.

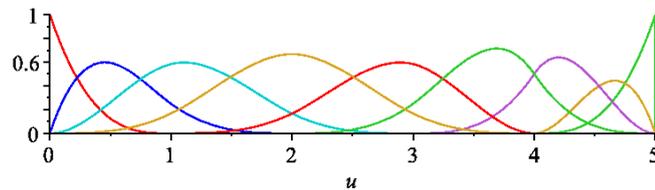


Figura 3.9: Funções de base B-spline de grau três.

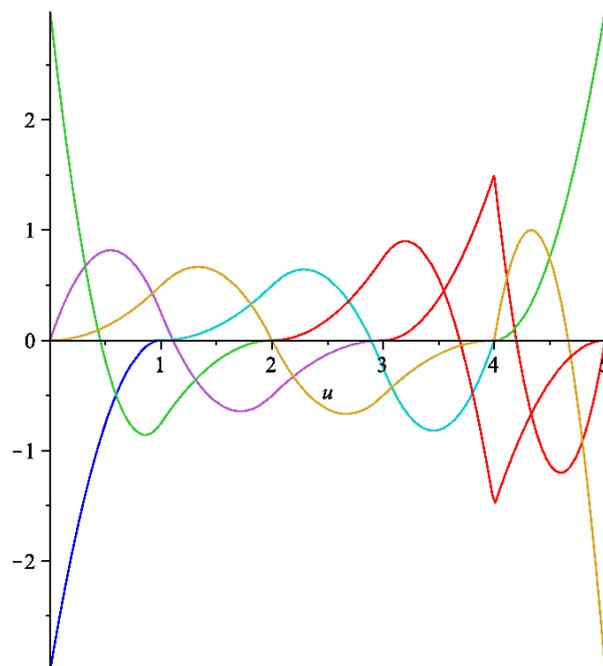


Figura 3.10: Derivadas das funções de base B-spline da Figura 3.9.

3.7.3 Propriedades do espaço vetorial das funções de base B-spline

Seja $\{\xi_j\}$, $0 \leq j \leq k$, um conjunto de pontos de parada. O conjunto de todas as funções de base polinomiais por partes de grau p sobre $\{\xi_j\}$, as quais são C^{r_j} contínuas em $\xi = \xi_j$, formam um espaço vetorial, \mathcal{S} ($-1 \leq r_j \leq p$). Se nenhuma restrição de continuidade for imposta ($r_j = -1 \forall j$), a dimensão de \mathcal{S} (denotada por $\dim(\mathcal{S})$) é igual à $k(p+1)$. Cada restrição de continuidade que for imposta, reduz a dimensão em uma unidade, logo

$$\dim(\mathcal{S}) = k(p+1) - \sum_{j=0}^k (r_j + 1) \quad (3.22)$$

Pela propriedade P.B-spline.5, conseguem-se as funções de base B-spline de grau p sobre $\{\xi_j\}$, com a continuidade desejada, pela apropriada escolha da multiplicidade dos nós s_j , onde $s_j = p - r_j$. Logo, o vetor de nós toma a seguinte forma

$$\Xi = \underbrace{\{\xi_0, \dots, \xi_0\}}_{s_0}, \underbrace{\{\xi_1, \dots, \xi_1\}}_{s_1}, \dots, \underbrace{\{\xi_k, \dots, \xi_k\}}_{s_k}$$

Logo

$$m = \left(\sum_{j=0}^k s_j \right) - 1$$

Observar que existem s_p funções de grau zero, $N_{i,0}$, $s_p - 1$ funções de primeiro grau, $N_{i,1}$, e em geral, $s_p - p$ funções de grau p , $N_{i,p}$, as quais devem ter a continuidade desejada, $r_j = p - s_j$. Logo, $N_{i,p} \subset \mathcal{S}$. Substituindo $s_j = p - r_j$ em (3.22) produz

$$\begin{aligned} \dim(\mathcal{S}) &= k(p+1) - \sum_{j=0}^k (p - s_j + 1) \\ &= k(p+1) - (k+1)p + \sum_{j=0}^k s_j - (k+1) \\ &= -p - 1 + \sum_{j=0}^k s_j \\ &= s_p - p \end{aligned}$$

Então, o número de funções de base de grau p sobre Ξ é igual a $\dim(\mathcal{S})$. Para justificar o termo funções de ‘base’ se demonstra que $N_{i,p}(\xi)$ são linearmente independentes (indução sobre p), i.e., estas formam uma base do espaço vetorial, \mathcal{S} . Claramente, as funções de grau zero, são linearmente independentes.

Assume-se que para o grau $(p - 1)$, com $p > 0$, as funções são linearmente independentes. Sendo $n = s_p - p - 1$, assume-se que

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i N_{i,p}(\xi) = 0$$

Pela expressão (3.20) tem-se que

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\sum_{i=0}^n \alpha_i N_{i,p} \right)' = \sum_{i=0}^n \alpha_i N'_{i,p} \\ &= p \sum_{i=0}^n \alpha_i \left(\frac{N_{i,p-1}}{\xi_{i+p} - \xi_i} - \frac{N_{i+1,p-1}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \right) \end{aligned}$$

implicando em

$$0 = \sum_{i=0}^n \alpha_i \frac{N_{i,p-1}}{\xi_{i+p} - \xi_i} - \sum_{i=0}^n \alpha_i \frac{N_{i+1,p-1}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}}$$

$N_{0,p-1} = N_{n+1,p-1} = 0$; logo, a expressão (3.23) resulta

$$0 = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i - \alpha_{i-1}}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}$$

isto implica que $\alpha_i - \alpha_{i-1} = 0$, e como foi assumido que funções de grau $(p - 1)$ são linearmente independentes para $p > 0$, tem-se que $\alpha_i = 0 \forall i$. Isto completa a demonstração.

Obviamente, uma vez fixado o grau, o vetor de nós determina completamente as funções $N_{i,p}(\xi)$. Neste trabalho apenas são considerados os vetores de nós *não-periódicos* (ou abertos), que tem a forma

$$\Xi = \left\{ \underbrace{a, \dots, a}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{b, \dots, b}_{p+1} \right\} \quad (3.23)$$

O primeiro e último nó possuem multiplicidade $p + 1$. Para vetores de nós não-periódicos, existem propriedades adicionais.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.B-spline. 7 Um vetor de nós que possuem a forma

$$\Xi = \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1} \right\}$$

produzem os polinômios de Bernstein de grau p ;

P.B-spline. 8 Se o número de nós $s_p + 1$, o grau das funções base p , e o número da funções base de grau p é $n + 1$, então $s_p = n + p + 1$.

Seja $N_{n,p}(\xi)$ a última função de base de grau p , e não-nula em $[\xi_n, \xi_{n+p+1})$. Então o último nó é $\xi_{n+p+1} = \xi_{s_p}$, propriedade P.B-spline.8. Ainda, existe a classificação do vetor de nós quanto à uniformidade, i.e., um vetor de nós uniforme é aquele que possui a mesma distância entre os nós. Caso contrário este vetor de nós é não-uniforme.

3.8 B-spline

Entidades B-spline são descritas em termos das funções de base e da parametrização do tipo Bézier.

3.8.1 Definição e propriedades das curvas B-spline

Uma curva B-spline de grau p é definida por

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i \quad \xi \in [a, b] \quad (3.24)$$

onde $\{\mathbf{P}_i\}$ são os *pontos de controle*, e $\{N_{i,p}(\xi)\}$ são as funções base B-spline de grau p definidas sobre um vetor de nós não-periódicos e não-uniformes

$$\Xi = \left\{ \underbrace{a, \dots, a}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{b, \dots, b}_{p+1} \right\} \quad (3.25)$$

de $(s_p + 1)$ nós.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.B-spline. 9 Se $n = p$ e $\Xi = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, então $\mathbf{C}(\xi)$ é uma curva Bézier;

P.B-spline. 10 $\mathbf{C}(\xi)$ é uma curva polinomial por partes (desde que as $N_{i,p}(\xi)$ sejam polinomiais por partes); o grau, p , o número de pontos de controle, $n + 1$, e o número de nós, $s_p + 1$, estão relacionados por

$$s_p = n + p + 1 \quad (3.26)$$

P.B-spline. 11 *Interpolação dos pontos de controle extremos: $\mathbf{C}(a) = \mathbf{P}_0$ e $\mathbf{C}(b) = \mathbf{P}_n$*

P.B-spline. 12 *Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados à curva são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle; Considerando a transformação*

$$\Phi(\mathbf{r}) = A\mathbf{r} + \mathbf{v} \quad (3.27)$$

onde A é uma matriz 3×3 , \mathbf{r} um ponto no espaço Euclidiano, e \mathbf{v} um vetor, tem-se baseado na propriedade P.B-spline.4 a partição da unidade, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}) &= \Phi\left(\sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i\right) = A\left(\sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i\right) + \mathbf{v} \\ &= \sum_{i=0}^n AN_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i + \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{v} \\ &= \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) (A\mathbf{P}_i + \mathbf{v}) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \Phi(\mathbf{P}_i) \end{aligned}$$

P.B-spline. 13 *Região convexa: a curva está contida na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $\xi \in [\xi_i, \xi_{i+1})$, $p \leq i \leq s_p - p - 1$, então $\mathbf{C}(\xi)$ estará contida no polígono de controle $\mathbf{P}_{i-p}, \dots, \mathbf{P}_i$. Esta vem dada pelas propriedades P.B-spline.1, P.B-spline.2 e P.B-spline.4;*

P.B-spline. 14 *Esquema de modificação local: movendo \mathbf{P}_i a curva $\mathbf{C}(\xi)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1})$, esta resulta da propriedade P.B-spline.2;*

P.B-spline. 15 *O polígono de controle representa a aproximação linear da curva;*

P.B-spline. 16 *Movendo o parâmetro ξ , ao longo da curva, i.e., de $\xi = a$ até $\xi = b$, as funções $N_{i,p}(\xi)$ vão sendo “desligadas” e “ligadas”, resulta da propriedade P.B-spline.3; ou seja, quando ξ passa por um nó j , é “desligada” a função $N_{j-p-1,p}$ e “ligada” a função $N_{j,p}$;*

P.B-spline. 17 *Nenhuma reta ou plano contém mais interseções com uma curva B-spline do que esta reta ou plano contém com o polígono de controle da curva;*

P.B-spline. 18 A continuidade e a diferenciabilidade da curva $\mathbf{C}(\xi)$ seguem das funções de base $N_{i,p}(\xi)$, já que $\mathbf{C}(\xi)$ é uma combinação linear das $N_{i,p}(\xi)$. Logo, $\mathbf{C}(\xi)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-k} contínua sobre o nó de multiplicidade k ;

P.B-spline. 19 É possível e às vezes vantajoso usar múltiplos (coincidentes) pontos de controle; pela propriedade P.B-spline.13, a curva $\mathbf{C}(\xi)$ inevitavelmente irá passar pelos pontos de controle coincidentes, assim gerando uma descontinuidade visual, já que as funções de base permanecem com a mesma continuidade.

3.8.2 Derivadas das curvas B-spline

Denotando por $\mathbf{C}^{(k)}(\xi)$ a k -ésima derivada da curva $\mathbf{C}(\xi)$, fixando ξ , tem-se $\mathbf{C}^{(k)}(\xi)$ pelo computo das k -ésimas derivadas das funções de base.

$$\mathbf{C}^{(k)}(\xi) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}^{(k)}(\xi) \mathbf{P}_i \quad (3.28)$$

Observar que para $k > p$ as derivadas valem zero; o mesmo não acontece para curvas e superfícies racionais. Diferenciando a curva B-spline de grau p ,

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i$$

definida sobre um vetor de nós

$$\Xi = \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1} \right\}$$

das expressões (3.28) e (3.20) tem-se que

$$\begin{aligned} \mathbf{C}'(\xi) &= \sum_{i=0}^n N'_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i \\ &= \sum_{i=0}^n \left(\frac{p}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) - \frac{p}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \right) \mathbf{P}_i \\ &= \left(p \sum_{i=-1}^{n-1} N_{i+1,p-1}(\xi) \frac{\mathbf{P}_{i+1}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \right) - \left(p \sum_{i=0}^n N_{i+1,p-1}(\xi) \frac{\mathbf{P}_i}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \right) \\ &= p \frac{N_{0,p-1}(\xi) \mathbf{P}_0}{\xi_p - \xi_0} + p \sum_{i=0}^{n-1} N_{i+1,p-1}(\xi) \frac{\mathbf{P}_{i+1} - \mathbf{P}_i}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} - p \frac{N_{n+1,p-1}(\xi) \mathbf{P}_n}{\xi_{n+p+1} - \xi_{n+1}} \end{aligned}$$

O primeiro e último termo possuem denominador zero, por definição este quociente resulta zero. Logo

$$\mathbf{C}'(\xi) = p \sum_{i=0}^{n-1} N_{i+1,p-1}(\xi) \frac{\mathbf{P}_{i+1} - \mathbf{P}_i}{\xi_{i+p+1} - u_{i+1}} = \sum_{i=0}^{n-1} N_{i+1,p-1}(\xi) \mathbf{Q}_i$$

onde

$$\mathbf{Q}_i = p \frac{\mathbf{P}_{i+1} - \mathbf{P}_i}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \quad (3.29)$$

Agora, sendo Ξ' o vetor de nós obtido pela subtração do nó inicial e final de \mathcal{U} , tem-se

$$\Xi' = \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_p, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_p \right\} \quad (3.30)$$

Ξ' possui $s_p - 1$ nós. Observar que as funções $N_{i+1,p-1}(\xi)$ computadas sobre Ξ , produzem o mesmo resultado que as funções $N_{i,p-1}(\xi)$ computadas sobre Ξ' . Então

$$\mathbf{C}'(\xi) = \sum_{i=0}^{n-1} N_{i,p-1}(\xi) \mathbf{Q}_i \quad (3.31)$$

onde os \mathbf{Q}_i são definidos pela expressão (3.29), e as $N_{i,p-1}(\xi)$ são computadas sobre Ξ' . Logo, $\mathbf{C}'(\xi)$ é uma curva B-spline de grau $p - 1$. Já que $\mathbf{C}'(\xi)$ é uma curva B-spline, aplicando as expressões (3.31) e (3.29) recursivamente se obtém as derivadas de mais alta ordem. Deixando $\mathbf{P}_i^{(0)} = \mathbf{P}_i$, tem-se

$$\mathbf{C}(\xi) = \mathbf{C}^{(0)}(\xi) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i^{(0)}$$

Logo

$$\mathbf{C}^{(k)}(\xi) = \sum_{i=0}^{n-k} N_{i,p-k}(\xi) \mathbf{P}_i^{(k)} \quad (3.32)$$

onde

$$\mathbf{P}_i^{(k)} = \begin{cases} \mathbf{P}_i & k = 0 \\ \frac{p-k+1}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+k}} (\mathbf{P}_{i+1}^{(k-1)} - \mathbf{P}_i^{(k-1)}) & k > 0 \end{cases}$$

3.8.3 Definição e propriedades das superfícies B-spline

Uma superfície B-spline é obtida a partir de uma rede bidirecional de pontos de controle, dois vetores de nós, e o produto das funções de base B-spline univariantes. Assim sendo, tem-se

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) \mathbf{P}_{i,j} \quad (\xi, \eta) \in [a, b] \times [c, d] \quad (3.33)$$

com

$$\begin{aligned}\Xi &= \{\underbrace{a, \dots, a}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{b, \dots, b}_{p+1}\} \\ \mathcal{H} &= \{\underbrace{c, \dots, c}_{q+1}, \eta_{q+1}, \dots, \eta_{s_q-q-1}, \underbrace{d, \dots, d}_{q+1}\}\end{aligned}$$

Ξ possui $s_p + 1$ nós, \mathcal{H} possui $s_q + 1$ nós. A expressão (3.26), toma a seguinte forma

$$s_p = n + p + 1 \quad \wedge \quad s_q = m + q + 1 \quad (3.34)$$

Ainda, a expressão (3.33) pode ser escrita na forma matricial

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = [N_{k,p}(\xi)]^t [\mathbf{P}_{k,l}] [N_{l,q}(\eta)] \quad k \in [i-p, i], l \in [j-q, j] \quad (3.35)$$

Observar que $[N_{k,p}(\xi)]^t$ é um vetor de dimensão $(p+1)$, $[\mathbf{P}_{k,l}]$ é uma matriz de dimensão $(p+1) \times (q+1)$, e $[N_{l,q}(\eta)]$ é um vetor de dimensão $(q+1)$. As propriedades do produto tensorial das funções de base seguem das correspondentes propriedades univariantes das funções de base.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.B-spline. 20 *Função positiva semi-definida:* $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) \geq 0, \forall i, j, p, q, \xi, \eta;$

P.B-spline. 21 *Partição da unidade:* $\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) = 1, \forall (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1];$

P.B-spline. 22 *Se $n = p$ e $m = q$, $\Xi = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$ e $\mathcal{H} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, logo $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) = B_{i,n}(\xi) B_{j,m}(\eta), \forall i, j;$ i.e., este produto de B-spline se degenera no produto dos polinômios de Bernstein;*

P.B-spline. 23 $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) = 0$ se (ξ, η) não pertence ao subdomínio $[\xi_i, \xi_{i+p+1}) \times [\eta_j, \eta_{j+q+1});$

P.B-spline. 24 *Em um dado período $[\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}) \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1})$, no máximo $(p+1)(q+1)$ funções de base são não-nulas, em particular $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta), \forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0];$*

P.B-spline. 25 Se $p > 0$ e $q > 0$, logo $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta)$ possui um e somente um máximo;

P.B-spline. 26 No domínio retangular formado pela linha de nós ξ e η , onde a função é um polinômio bivariante, todas as derivadas parciais de $N_{i,p}(\xi)$ e $N_{j,q}(\eta)$ existem; sobre o nó ξ e η a função é C^{p-o} e C^{q-o} contínua na direção ξ e η , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó;

Superfícies B-spline possuem as seguintes propriedades:

P.B-spline. 27 Se $n = p$ e $m = q$, $\Xi = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$ e $\mathcal{H} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, logo $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ é uma superfície Bézier;

P.B-spline. 28 Interpolação dos pontos de controle extremos: $\mathbf{S}(0, 0) = \mathbf{P}_{0,0}$, $\mathbf{S}(1, 0) = \mathbf{P}_{1,0}$, $\mathbf{S}(0, 1) = \mathbf{P}_{0,1}$ e $\mathbf{S}(1, 1) = \mathbf{P}_{1,1}$;

P.B-spline. 29 Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados à superfície são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;

P.B-spline. 30 Região convexa: a superfície está contida na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $(\xi, \eta) \in [\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}) \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1})$, então $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ estará contida na região formada pelos pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j}, \forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0]$; Esta vem dada pelas propriedades P.B-spline.20, P.B-spline.21 e P.B-spline.24;

P.B-spline. 31 Se triangularizado, a rede de controle forma uma aproximação plana da superfície;

P.B-spline. 32 Esquema de modificação local: movendo $\mathbf{P}_{i,j}$ a superfície $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1}) \times [\eta_j, \eta_{j+q+1})$, esta resulta da propriedade P.B-spline.2;

P.B-spline. 33 A continuidade e a diferenciabilidade da superfície $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ seguem das funções de base; em particular $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-o} e C^{q-o} contínua na direção ξ e η , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó;

3.8.4 Derivadas das superfícies B-spline

Fixando (ξ, η) , interessa computar todas as derivadas parciais de $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ até uma ordem d (incluindo d), dadas por

$$\frac{\partial^{d_1+d_2}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta} \mathbf{S}(\xi, \eta), \quad \forall (d_1 + d_2) \in [0, d] \quad (3.36)$$

Assim como para as curvas, estas derivadas são obtidas a partir das derivadas das funções de base. Logo

$$\frac{\partial^{d_1+d_2}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta} \mathbf{S}(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}^{(d_1)}(\xi) N_{j,q}^{(d_2)}(\eta) \mathbf{P}_{i,j} \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial^{d_1+d_2}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta} \mathbf{S}(\xi, \eta) = [N_{r,p}^{(d_1)}(\xi)]^t [\mathbf{P}_{r,s}] [N_{s,q}^{(d_2)}(\eta)] \quad r \in [i-p, i], s \in [j-q, j] \\ (d_1 + d_2) \in [0, d]$$

Assim como para curvas, se definiram recursivamente todas as derivadas em (3.32), de forma análoga tem-se para as superfícies

$$\frac{\partial^{d_1+d_2}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta} \mathbf{S}(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^{n-d_1} \sum_{j=0}^{m-d_2} N_{i,p-d_1}(\xi) N_{j,q-d_2}(\eta) \mathbf{P}_{i,j}^{(d_1,d_2)} \\ \mathbf{P}_{i,j}^{(d_1,d_2)} = (q-d_2+1) \frac{\mathbf{P}_{i,j+1}^{(d_1,d_2-1)} - \mathbf{P}_{i,j}^{(d_1,d_2-1)}}{\eta_{j+q+1} - \eta_{j+d_2}}$$

3.8.5 Definição e propriedades dos sólidos B-spline

Um sólido B-spline é obtido a partir de uma rede tridimensional de pontos de controle, três vetores de nós, e o produto das funções de base B-spline univariantes. Assim sendo, tem-se

$$\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) \mathbf{P}_{i,j,k} \quad (\xi, \eta, \zeta) \in [a, b] \times [c, d] \times [e, f] \quad (3.38)$$

com

$$\begin{aligned}\Xi &= \{\underbrace{a, \dots, a}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{b, \dots, b}_{p+1}\} \\ \mathcal{H} &= \{\underbrace{c, \dots, c}_{q+1}, \eta_{q+1}, \dots, \eta_{s_q-q-1}, \underbrace{d, \dots, d}_{q+1}\} \\ \mathcal{Z} &= \{\underbrace{e, \dots, e}_{r+1}, \zeta_{r+1}, \dots, \zeta_{s_r-r-1}, \underbrace{f, \dots, f}_{r+1}\}\end{aligned}$$

Ξ possui $s_p + 1$ nós, \mathcal{H} possui $s_q + 1$ nós, \mathcal{Z} possui $s_r + 1$ nós. A expressão (3.26), toma a seguinte forma

$$s_p = n + p + 1 \quad \wedge \quad s_q = m + q + 1 \quad \wedge \quad s_r = l + r + 1 \quad (3.39)$$

As propriedades do produto tensorial das funções de base seguem das correspondentes propriedades univariantes das funções de base.

Propriedades:

P.B-spline. 34 Função positiva semi-definida: $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) \geq 0$,

$\forall i, j, k, p, q, r, \xi, \eta, \zeta$;

P.B-spline. 35 Partição da unidade: $\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) = 1$,

$\forall (\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$;

P.B-spline. 36 Se $n = p$, $m = q$ e $l = r$, $\Xi = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, $\mathcal{H} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$ e $\mathcal{Z} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, logo

$N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) = B_{i,n}(\xi) B_{j,m}(\eta) B_{k,l}(\zeta)$, $\forall i, j, k$; i.e., este produto de B-spline se degenera no produto dos polinômios de Bernstein;

P.B-spline. 37 $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) = 0$ se (ξ, η) não pertence ao subdomínio

$[\xi_i, \xi_{i+p+1}) \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}) \times [\zeta_k, \zeta_{k+r+1})$;

P.B-spline. 38 Em um dado período $[\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}) \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1}) \times [\zeta_{k_0}, \zeta_{k_0+1})$, no máximo

$(p + 1)(q + 1)(r + 1)$ funções de base são não-nulas, em particular $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta)$, $\forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0] \wedge k \in [k_0 - r, k_0]$;

P.B-spline. 39 Se $p > 0$, $q > 0$ e $r > 0$, logo $N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta)$ possui um e somente um máximo;

P.B-spline. 40 No domínio retangular formado pela linha de nós ξ , η e ζ , onde a função é um polinômio trivariante, todas as derivadas parciais de $N_{i,p}(\xi)$, $N_{j,q}(\eta)$ e $N_{k,r}(\zeta)$ existem; sobre o nó ξ , η e ζ a função é C^{p-o} , C^{q-o} e C^{r-o} contínua na direção ξ , η e ζ , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó;

Sólidos B-spline possuem as seguintes propriedades:

P.B-spline. 41 Se $n = p$, $m = q$ e $l = r$, $\Xi = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, $\mathcal{H} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$ e $\mathcal{Z} = \{0, \dots, 0, 1, \dots, 1\}$, logo $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ é um sólido Bézier;

P.B-spline. 42 Interpolação dos pontos de controle extremos: $\mathbf{G}(0, 0, 0) = \mathbf{P}_{0,0,0}$, $\mathbf{G}(1, 0, 0) = \mathbf{P}_{1,0,0}$, $\mathbf{G}(0, 1, 0) = \mathbf{P}_{0,1,0}$, $\mathbf{G}(0, 0, 1) = \mathbf{P}_{0,0,1}$, $\mathbf{G}(1, 1, 0) = \mathbf{P}_{1,1,0}$, $\mathbf{G}(1, 0, 1) = \mathbf{P}_{1,0,1}$, $\mathbf{G}(0, 1, 1) = \mathbf{P}_{0,1,1}$ e $\mathbf{G}(1, 1, 1) = \mathbf{P}_{1,1,1}$;

P.B-spline. 43 Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados ao sólido são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;

P.B-spline. 44 Região convexa: o sólido está contido na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $(\xi, \eta, \zeta) \in [\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}] \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1}] \times [\zeta_{k_0}, \zeta_{k_0+1}]$, então $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ estará contida na região formada pelos pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j,k}, \forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0] \wedge k \in [k_0 - r, k_0]$; Esta vem dada pelas propriedades P.B-spline.20, P.B-spline.21 e P.B-spline.24;

P.B-spline. 45 Se triangularizado, a rede de controle forma uma aproximação linear do sólido;

P.B-spline. 46 Esquema de modificação local: movendo $\mathbf{P}_{i,j,k}$ o sólido $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}] \times [\zeta_k, \zeta_{k+r+1}]$, esta resulta da propriedade P.B-spline.2;

P.B-spline. 47 A continuidade e a diferenciabilidade do sólido $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ seguem das funções de base; em particular $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-o} , C^{q-o} e C^{r-o} contínua na direção ξ , η e ζ , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó;

3.8.6 Derivadas dos sólidos B-spline

Fixando (ξ, η, ζ) , interessa computar todas as derivadas parciais de $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ até uma ordem d (incluindo d), dadas por

$$\frac{\partial^{d_1+d_2+d_3}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta \partial^{d_3}\zeta} \mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta), \quad \forall (d_1 + d_2 + d_3) \in [0, d] \quad (3.40)$$

Assim como para as curvas, estas derivadas são obtidas a partir das derivadas das funções de base. Logo

$$\frac{\partial^{d_1+d_2+d_3}}{\partial^{d_1}\xi \partial^{d_2}\eta \partial^{d_3}\zeta} \mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l N_{i,p}^{(d_1)}(\xi) N_{j,q}^{(d_2)}(\eta) N_{k,r}^{(d_3)}(\zeta) \mathbf{P}_{i,j,k} \quad (3.41)$$

3.9 B-spline racionais não-uniformes – NURBS –

Nesta seção são combinados os conceitos das seções 3.4 e 3.8, i.e., criar curvas e superfícies B-spline no espaço homogêneo, para que estas duas entidades geométricas sejam mapeadas para o espaço Euclidiano e assim torná-las racionais. Deste modo, são criadas B-spline Não-Uniformes Racionais (e ainda não-periódicas), i.e., NURBS do acrônimo em inglês, *NonUniform Rational B-Spline*.

O fato de se optar por trabalhar com vetores de nós não-periódicos, é devido a que esta característica torna as entidades geométricas interpoladas nos pontos de controle extremos, i.e., tal entidade é “obrigada” a passar pelos pontos de controle extremos, P.B-spline.28 e P.B-spline.11.

Para o vetor de nós periódicos, os pontos de controle não representam de maneira intuitiva a entidade. A vantagem de trabalhar com nós não-periódicos é que tal torna as entidades mais “maleáveis”, já que pela posição dos pontos de controle, de maneira intuitiva, se sabe como tal entidade irá aparentar. Todos os algoritmos criados neste trabalho não

descriminam o vetor de nós, entre periódicos ou não, para que não se perda a generalidade, entretanto tais algoritmos só foram utilizados para vetor de nós não-periódicos.

Os pontos de controle para entidades NURBS são obtidos pela mesma transformação projetiva, i.e., $\mathbb{R}^{d+1} \xrightarrow{\text{map}} \mathbb{R}^d$, onde d é a dimensão do espaço euclideano.

A relação entre os conjuntos formados pelas funções de base de cada tipo de representação é:

- $\mathcal{S}_{\text{Bézier}} \subseteq \mathcal{S}_{\text{Bézier Racional}}$;
- $\mathcal{S}_{\text{Bézier}} \subseteq \mathcal{S}_{\text{B-spline}} \subseteq \mathcal{S}_{\text{NURBS}}$;
- $\mathcal{S}_{\text{Bézier Racional}} \not\subseteq \mathcal{S}_{\text{B-spline}}$;
- $\mathcal{S}_{\text{B-spline}} \not\subseteq \mathcal{S}_{\text{Bézier Racional}}$;
- $\mathcal{S}_{\text{B-spline}} \cap \mathcal{S}_{\text{Bézier Racional}} \neq \emptyset$

3.9.1 Definição e propriedades das curvas NURBS

Uma curva NURBS de grau p é definida por

$$\mathbf{C}(\xi) = \frac{\sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) w_i \mathbf{P}_i}{\sum_{\hat{i}=0}^n N_{\hat{i},p}(\xi) w_{\hat{i}}} \quad \xi \in [a, b] \quad (3.42)$$

onde $\{\mathbf{P}_i\}$ são os *pontos de controle*, $\{w_i\}$ são os *pesos* e as $\{N_{i,p}(\xi)\}$ são as funções base B-spline de grau p definidas sobre um vetor de nós não-periódicos e não-uniformes

$$\Xi = \left\{ \underbrace{a, \dots, a}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{b, \dots, b}_{p+1} \right\} \quad (3.43)$$

de $(s_p + 1)$ nós.

Assume-se, sem perder generalidade, que $a = 0$, $b = 1$, e $w_i > 0 \forall i$. Logo, fazendo

$$R_i^p(\xi) = \frac{N_{i,p}(\xi) w_i}{\sum_{\hat{i}=0}^n N_{\hat{i},p}(\xi) w_{\hat{i}}} \quad (\xi) \in [0, 1] \quad (3.44)$$

permite reescrever (3.42) na forma

$$\mathbf{C}(\xi) = \sum_{i=0}^n R_i^p(\xi) \mathbf{P}_i \quad (3.45)$$

As $\{R_i^p(\xi)\}$ são as *funções base racionais*; elas são funções racionais por partes sobre $\xi \in [0, 1]$. As propriedades das $R_i^p(\xi)$ são derivadas de (3.44) e das correspondentes propriedades das $N_{i,p}(\xi)$.

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.NURBS. 1 *Função positiva semi-definida:* $R_i^p(\xi) \geq 0, \forall i, p$ e $\xi \in [0, 1]$;

P.NURBS. 2 *Partição da unidade:* $\sum_{i=0}^n R_i^p(\xi) = 1, \forall \xi \in [0, 1]$;

P.NURBS. 3 $R_0^p(0) = R_n^p(1) = 1$;

P.NURBS. 4 *Toda função possui no mínimo dois pontos extremos, i.e., ao menos possui um mínimo e um máximo (teorema de Weierstrass); Toda função NURBS $R_i^p(\xi)$ para $p > 0$ possui um mínimo e um máximo no intervalo $\xi \in [0, 1]$;*

P.NURBS. 5 *Suporte local:* $R_i^p(\xi) = 0$ para $\xi \notin [\xi_i, \xi_{i+p+1})$. Ainda, em um dado período $[\xi_i, \xi_{i+1})$ no máximo $p + 1$ das $R_i^p(\xi)$ são não-nulas, chamadas de $R_{i-p,p}, \dots, R_i^p$;

P.NURBS. 6 *Todas as derivadas de $R_i^p(\xi)$ existem no interior do período, estas são funções racionais de denominador não-nulo. Sobre o nó, $R_i^p(\xi)$ é C^{p-o} contínuo, onde o é a multiplicidade do nó;*

P.NURBS. 7 *Se $w_i = 1$ para todo i , então $R_i^p(\xi) = N_{i,p}(\xi)$ para todo i ; i.e., $N_{i,p}(\xi)$ é um caso particular de $R_i^p(\xi)$;*

Sobre um vetor de nós $\Xi = \{0, 0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 5, 5\}$, definido na seção 3.7 e nas Figuras 3.9 e 3.10, são definidas as funções de base NURBS de grau três, com o vetor de pesos definidos por $w_{(a)i} = \{1, 1, 1, 1, 10, 1, 1, 1, 1\}$ na Figura 3.11, com vetor de pesos

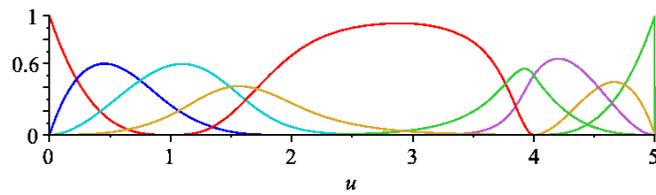


Figura 3.11: Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(a)i}$.

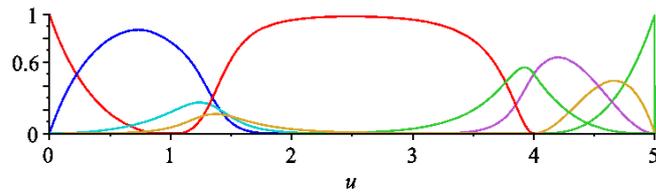


Figura 3.12: Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(b)i}$.

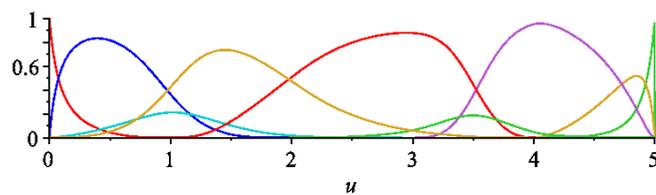


Figura 3.13: Funções de base NURBS, $p = 3$, para os $w_{(c)i}$.

definidos por $w_{(b)i} = \{1, 1, 0.1, 0.1, 10, 1, 1, 1, 1\}$ na Figura 3.12, e com vetor de pesos definidos por $w_{(c)i} = \{0.1, 0.4, 0.1, 0.7, 3, 0.5, 10, 4, 1\}$ na Figura 3.13. Nestas Figuras claramente percebe-se o rol dos pesos.

As propriedades de P.NURBS.1 a P.NURBS.7, constituem importantes características geométricas de curvas NURBS.

P.NURBS. 8 $C(0) = \mathbf{P}_0$ e $C(1) = \mathbf{P}_1$ de P.NURBS.3;

P.NURBS. 9 *Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados à curva são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;*

P.NURBS. 10 *Região convexa: a curva está contida na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $\xi \in [\xi_i, \xi_{i+1})$, $p \leq i \leq s_p - p - 1$, então $C(\xi)$ estará contida no polígono de controle $\mathbf{P}_{i-p}, \dots, \mathbf{P}_i$;*

P.NURBS. 11 $\mathbf{C}(\xi)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-o} contínua sobre o nó de multiplicidade o ;

P.NURBS. 12 Nenhuma reta ou plano contém mais interseções com uma curva NURBS do que esta reta ou plano contém com o polígono de controle da curva;

P.NURBS. 13 Uma curva NURBS sem nós internos é uma curva Bézier racional, já que as $N_{i,p}(\xi)$ se convertem nas $B_{i,n}(\xi)$;

P.NURBS. 14 Esquema de modificação local: modificando \mathbf{P}_i ou w_i a curva $\mathbf{C}(u)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1})$, esta resulta da propriedade P.NURBS.5;

Resumidamente a propriedade P.NURBS.14, gera a motivação para todos os tipos de algoritmos de modificação de forma baseada em NURBS. Já que a partir desta se pode modificar o conjunto \mathbf{P}_i e w_i sem alterar toda a entidade, mas apenas um subdomínio. De mesmo modo, esta propriedade é desejada nos métodos numéricos de solução de equações diferenciais parciais.

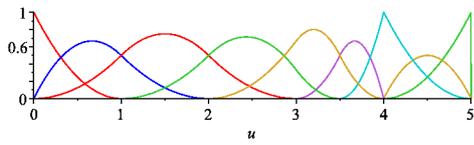
As curvas das Figuras 3.14 estão baseada no vetor de nós $\Xi = \{0, 0, 0, 1, 2, 3, 3.5, 4, 4, 5, 5, 5\}$ e são de grau dois. Entretanto estas diferem por possuir pesos distintos. Para a curva da Figura 3.14c, tem-se $w_i = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}$, i.e., esta é uma B-spline. Já para a curva da Figura 3.14d, tem-se $w_i = \{1, 1, 0.1, 1, 2, 1, 1, 5, 1\}$.

Assim como para o caso das curvas Bézier, as coordenadas homogêneas oferecem um método eficiente para representar curvas NURBS. Sendo \mathcal{M} o mapeamento dado por (3.7), se consegue construir, a partir do conjunto de pontos de controle, $\{\mathbf{P}_i\}$, e pesos, $\{w_i\}$, os pontos de controle no espaço homogêneo, $\mathbf{P}_i^w = (w_i x_i, w_i y_i, w_i z_i, w_i)$. Logo, definindo os polinômios por partes B-spline não-rationais no espaço homogêneo como

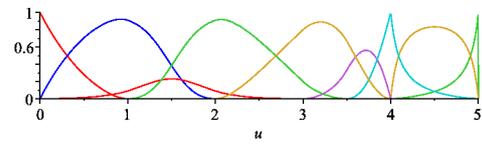
$$\mathbf{C}^w(\xi) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i^w \quad (3.46)$$

Aplicando o mapeamento, \mathcal{M} , à curva $\mathbf{C}^w(\xi)$ produz a correspondente curva B-spline racional no espaço Euclidiano.

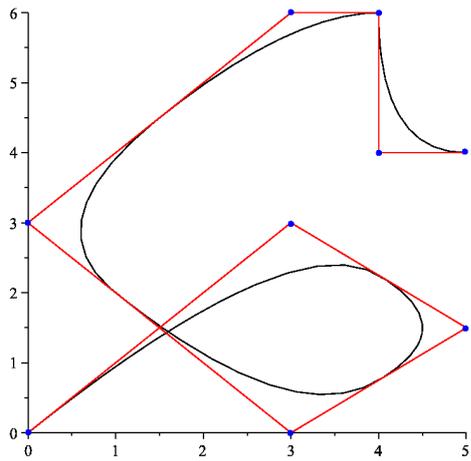
$$\mathbf{C}(\xi) = \mathcal{M} \{ \mathbf{C}^w(\xi) \} = \mathcal{M} \left\{ \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) \mathbf{P}_i^w \right\} \quad (3.47)$$



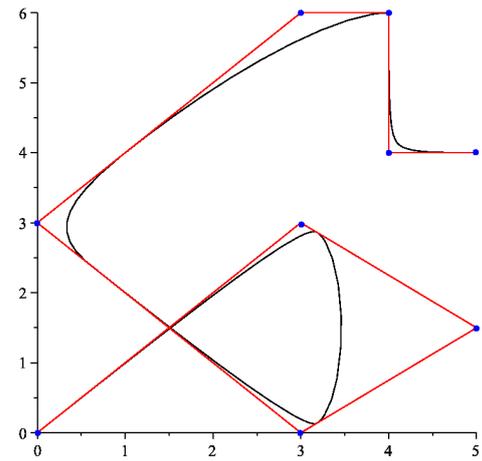
(a) funções de base NURBS (1)



(b) funções de base NURBS (2)



(c) curva NURBS (1)



(d) curva NURBS (2)

Figura 3.14: Curvas NURBS com diferentes pesos.

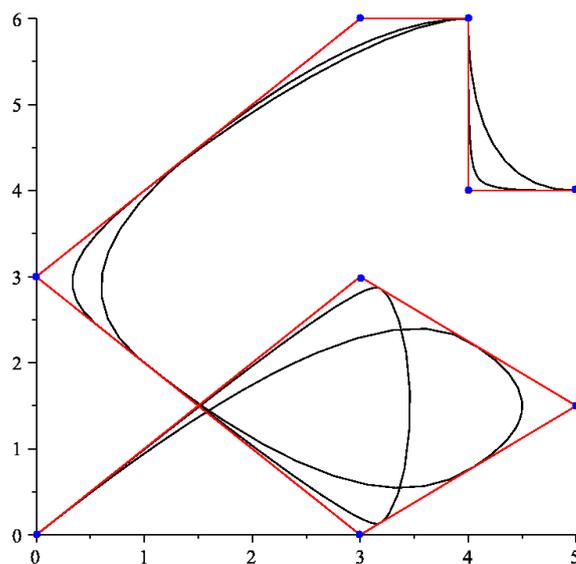


Figura 3.15: Curvas NURBS sobrepostas com diferentes pesos.

Os pontos de controle para curvas NURBS são obtidos pelo mapeamento $\mathbf{P}^w \xrightarrow{\text{map}} \mathbf{P}$, utilizando a seguinte expressão

$$(\mathbf{P}_i)_c = \frac{(\mathbf{P}_i^w)_c}{w_i} \quad 1 \leq c \leq d; \quad w_i = (\mathbf{P}_i^w)_{d+1} \quad (3.48)$$

onde $(\mathbf{P}_i)_c$ é a c -ésima componente do vetor de pontos de controle \mathbf{P}_i , w_i é o i -ésimo peso e \mathbf{P}_i^w é o associado ponto de controle projetivo. Dividindo o ponto de controle projetivo pelo peso é equivalente à aplicar a transformação projetiva à ele.

Uma curva $\mathbf{C}(\xi)$ é relacionada com sua curva projetada $\mathbf{C}^w(\xi)$ pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}(\xi))_j &= \frac{(\mathbf{C}^w(\xi))_j}{W(\xi)} \quad 1 \leq j \leq d; \\ W(\xi) &= \sum_{i=0}^n N_{i,p}(\xi) w_i \end{aligned} \quad (3.49)$$

onde $W(\xi)$ é a função peso e $N_{i,p}$ são as funções de base B-spline padrão.

3.9.2 Derivadas das curvas NURBS

Derivadas de funções racionais são mais trabalhosas de serem obtidas, envolvendo denominadores de altas potências, devido ao teorema da derivada do quociente. Os algoritmos desenvolvidos para as curvas B-spline não-rationais, podem ser aplicados, obviamente, às curvas $\mathbf{C}^w(\xi)$, já que estas são não-rationais no espaço homogêneo. Agora, a partir das derivadas de $\mathbf{C}^w(\xi)$ são obtidas as derivadas de $\mathbf{C}(\xi)$. Seja

$$\mathbf{C}(\xi) = \frac{w(\xi) \mathbf{C}^w(\xi)}{w(\xi)} = \frac{\mathbf{A}(\xi)}{w(\xi)}$$

onde $\mathbf{A}(\xi)$ é um vetor contendo as três primeiras coordenadas de $\mathbf{C}^w(\xi)$ ($\mathbf{A}(\xi)$ é o numerador de (3.42)). Logo

$$\begin{aligned} \mathbf{C}'(\xi) &= \frac{w(\xi) \mathbf{A}'(\xi) - w'(\xi) \mathbf{A}(\xi)}{w(\xi)^2} \\ &= \frac{w(\xi) \mathbf{A}'(\xi) - w'(\xi) w(\xi) \mathbf{C}(\xi)}{w(\xi)^2} = \frac{\mathbf{A}'(\xi) - w'(\xi) \mathbf{C}(\xi)}{w(\xi)} \end{aligned}$$

Já que $\mathbf{A}(\xi)$ e $w(\xi)$ representam as coordenadas de $\mathbf{C}^w(\xi)$, as derivadas de primeira ordem são obtidas usando (3.29) e (3.31). O computo de derivadas de alta ordem são

obtidas diferenciando $\mathbf{A}(\xi)$ usando o teorema de Leibnitz

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(k)}(\xi) &= (w(\xi) \mathbf{C}(\xi))^{(k)} = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} w^{(i)}(\xi) \mathbf{C}^{(k-i)}(\xi) \\ &= w(\xi) \mathbf{C}^{(k)}(\xi) + \sum_{i=1}^k \binom{k}{i} w^{(i)}(\xi) \mathbf{C}^{(k-i)}(\xi) \end{aligned}$$

desta tem-se

$$\mathbf{C}^{(k)}(\xi) = \frac{\mathbf{A}^{(k)}(\xi) - \sum_{i=1}^k \binom{k}{i} w^{(i)}(\xi) \mathbf{C}^{(k-i)}(\xi)}{w(\xi)} \quad (3.50)$$

Esta expressão (3.50) fornece a k -ésima derivada de $\mathbf{C}(\xi)$ em termos da k -ésima derivada de $\mathbf{A}(\xi)$ e das $(k-1)$ derivadas anteriores de $\mathbf{C}(\xi)$ e $w(\xi)$. As derivadas $\mathbf{A}^{(k)}(\xi)$ e $w^{(i)}(\xi)$ são obtidas usando (3.28) ou (3.32).

As derivadas das funções de base das Figuras 3.11, 3.12 e 3.13 são apresentadas nas Figuras 3.16, 3.17 e 3.18.

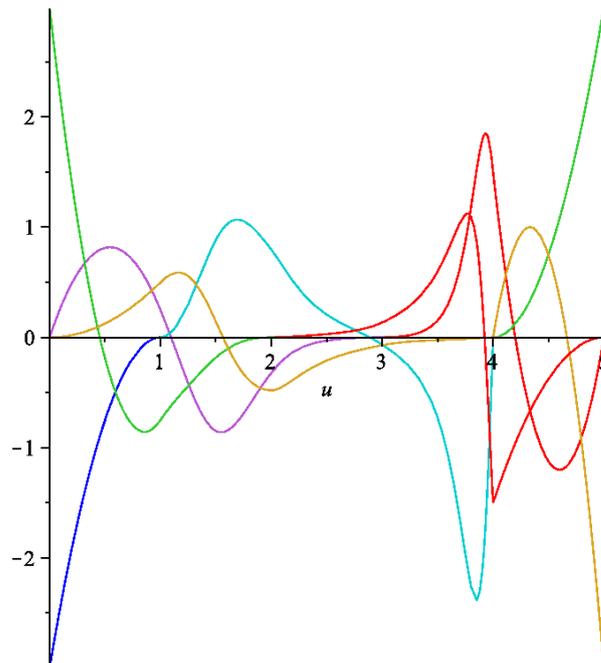


Figura 3.16: Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.11.

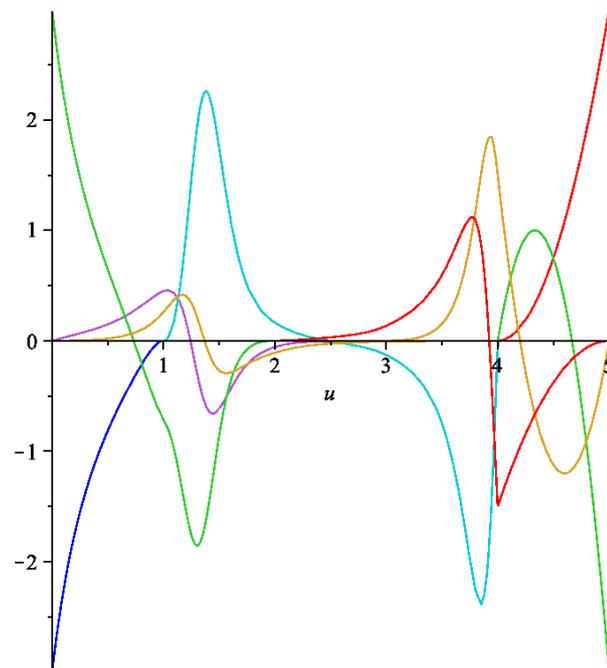


Figura 3.17: Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.12.

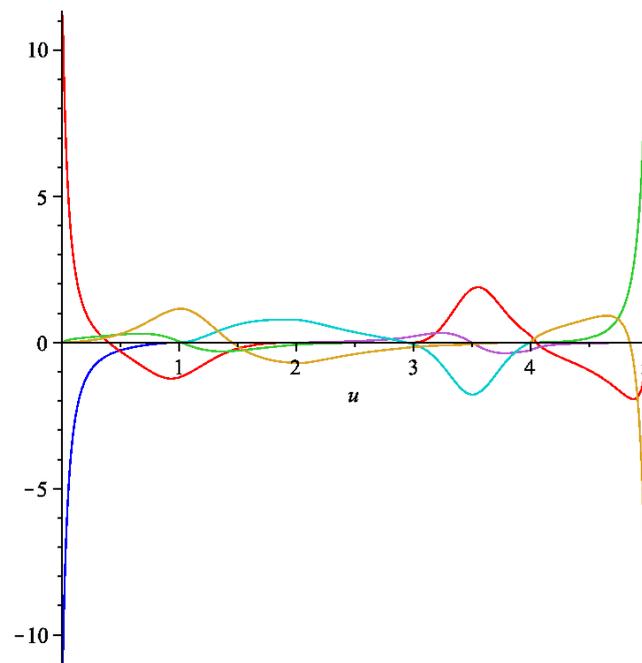


Figura 3.18: Derivadas das funções de base NURBS Figura 3.13.

3.9.3 Definição e propriedades das superfícies NURBS

Uma superfície NURBS de grau p na direção ξ e de grau q na direção η é uma função vetorial bivariante racional por partes da forma

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = \frac{\sum_{i,j=0}^{n,m} N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) w_{i,j} \mathbf{P}_{i,j}}{\sum_{\hat{i},\hat{j}=0}^{n,m} N_{\hat{i},p}(\xi) N_{\hat{j},q}(\eta) w_{\hat{i},\hat{j}}} \quad (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1] \quad (3.51)$$

Os $\{\mathbf{P}_{i,j}\}$ formam uma rede de controle bidirecional, os $\{w_{i,j}\}$ são os pesos e as $\{N_{i,p}(\xi)\}$ e $\{N_{j,q}(\eta)\}$ são as funções de base B-spline não-rationais definidas sobre o vetor de nós

$$\Xi = \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1} \right\}$$

$$\mathcal{H} = \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_{q+1}, \eta_{q+1}, \dots, \eta_{s_q-q-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{q+1} \right\}$$

onde $s_p = n + p + 1$ e $s_q = m + q + 1$.

Introduzindo as funções de base racionais

$$R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) = \frac{N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) w_{i,j}}{\sum_{\hat{i},\hat{j}=0}^{n,m} N_{\hat{i},p}(\xi) N_{\hat{j},q}(\eta) w_{\hat{i},\hat{j}}} \quad (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1] \quad (3.52)$$

a superfície (3.51) pode ser reescrita como

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) \mathbf{P}_{i,j} \quad (3.53)$$

Propriedades (Piegl e Tiller, 1997):

P.NURBS. 15 *Função positiva semi-definida:* $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) \geq 0$, $\forall i, j, \xi, \eta$ e $\forall (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1]$;

P.NURBS. 16 *Partição da unidade:* $\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) = 1$, $\forall (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1]$;

P.NURBS. 17 *Suporte local:* $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) = 0$ para $(\xi, \eta) \notin [\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}]$;

P.NURBS. 18 *Em um dado período $[\xi_{i_0}, \xi_{i_0+p+1}] \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+q+1}]$, no máximo $(p+1)(q+1)$ funções de base são não-nulas, em particular $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta)$ para $(i, j) \in [i_0 - p, i_0] \times [j_0 - q, j_0]$;*

P.NURBS. 19 *Toda função possui no mínimo dois pontos extremos, i.e., ao menos possui um mínimo e um máximo (teorema de Weierstrass); Toda função NURBS $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta)$ para $p > 0$ e $q > 0$ possui um mínimo e um máximo no intervalo $(\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1]$;*

P.NURBS. 20 $R_{0,0}^{p,q} = R_{n,0}^{p,q} = R_{0,m}^{p,q} = R_{n,m}^{p,q} = 1$;

P.NURBS. 21 *Todas as derivadas parciais de $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta)$ existem no interior do período, estas são funções racionais de denominador não-nulo. Sobre o nó, $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta)$ é C^{p-o} e C^{q-o} contínuo, na direção ξ e η , respectivamente, onde o é a multiplicidade do nó;*

P.NURBS. 22 *Se $w_{i,j} = a$ para todo (i, j) , então $R_{i,j}^{p,q}(\xi, \eta) = N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta)$ para todo (i, j) ;*

As propriedades de P.NURBS.15 a P.NURBS.22, constituem importantes características geométricas de superfícies NURBS.

P.NURBS. 23 *Interpolação dos pontos de controle extremos: $\mathbf{S}(0, 0) = \mathbf{P}_{0,0}$, $\mathbf{S}(1, 0) = \mathbf{P}_{1,0}$, $\mathbf{S}(0, 1) = \mathbf{P}_{0,1}$ e $\mathbf{S}(1, 1) = \mathbf{P}_{1,1}$;*

P.NURBS. 24 *Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados à superfície são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;*

P.NURBS. 25 *Região convexa: se $w_{i,j} \geq 0$ para todo (i, j) , a superfície está contida na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $(\xi, \eta) \in [\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}] \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1}]$, então $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ estará contida na região formada pelos pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j}, \forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0]$;*

P.NURBS. 26 *Esquema de modificação local: movendo $\mathbf{P}_{i,j}$ ou $w_{i,j}$ a superfície $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}]$*

P.NURBS. 27 *Bézier, B-spline não-rationais e Bézier racionais são um caso particular de superfícies NURBS;*

P.NURBS. 28 *A continuidade e a diferenciabilidade da superfície $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ seguem das funções de base; em particular $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-o} e C^{q-o} contínua na direção ξ e η , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó.*

Para as superfícies também resulta vantajoso fazer a representação no espaço homogêneo. Assim, a superfície toma a forma

$$\mathbf{S}^w(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) \mathbf{P}_{i,j}^w \quad (3.54)$$

onde $\mathbf{P}_{i,j}^w = (w_{i,j}x_{i,j}, w_{i,j}y_{i,j}, w_{i,j}z_{i,j}, w_{i,j})$. Logo $\mathbf{S}(\xi, \eta) = \mathcal{M}\{\mathbf{S}^w(\xi, \eta)\}$. $\mathbf{S}^w(\xi, \eta)$ é formada por produto tensorial, sendo um polinômio por partes não-razional no espaço homogêneo. Enquanto, $\mathbf{S}(\xi, \eta)$ não é formada por produto tensorial, sendo um polinômio por partes racional no espaço Euclideano.

Os pontos de controle para curvas NURBS são obtidos pelo mapeamento $\mathbf{P}^w \xrightarrow{\text{map}} \mathbf{P}$, utilizando a seguinte expressão

$$(\mathbf{P}_{i,j})_s = \frac{(\mathbf{P}_{i,j}^w)_k}{w_{i,j}} \quad 1 \leq s \leq d; \quad w_{i,j} = (\mathbf{P}_{i,j}^w)_{d+1} \quad (3.55)$$

onde $(\mathbf{P}_{i,j})_s$ é a s -ésima componente do vetor de pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j}$, $w_{i,j}$ é o i,j -ésimo peso e $\mathbf{P}_{i,j}^w$ é o associado ponto de controle projetivo. Dividindo o ponto de controle projetivo pelo peso é equivalente à aplicar a transformação projetiva à ele.

Uma curva $\mathbf{G}(\xi, \eta)$ é relacionada com sua curva projetada $\mathbf{S}^w(\xi, \eta)$ pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}(\xi, \eta))_s &= \frac{(\mathbf{C}^w(\xi, \eta))_s}{W(\xi, \eta)} \quad 1 \leq s \leq d; \\ W(\xi, \eta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p} N_{j,q}(\xi, \eta) w_{i,j} \end{aligned} \quad (3.56)$$

onde $W(\xi, \eta)$ é a função peso e $N_{i,p}$ são as funções de base B-spline padrão.

3.9.4 Derivadas das superfícies NURBS

As derivadas de $\mathbf{S}^w(\xi, \eta)$ são computadas usando as expressões (3.36) a (3.38) aplicadas no espaço homogêneo. A partir das derivadas parciais de $\mathbf{S}^w(\xi, \eta)$ são obtidas as derivadas parciais $\mathbf{S}(\xi, \eta)$. Sendo

$$\mathbf{S}(\xi, \eta) = \frac{w(\xi, \eta) \mathbf{S}^w(\xi, \eta)}{w(\xi, \eta)} = \frac{\mathbf{A}(\xi, \eta)}{w(\xi, \eta)} \quad (3.57)$$

tem-se

$$\mathbf{S}_\alpha(\xi, \eta) = \frac{\mathbf{A}_\alpha(\xi, \eta) - w_\alpha(\xi, \eta) \mathbf{S}(\xi, \eta)}{w(\xi, \eta)} \quad (3.58)$$

onde α denota a derivada em relação ξ ou η .

Em geral

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(d_1, d_2)} &= [(w\mathbf{S})^{d_1}]^{d_2} = \left(\sum_{i=0}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0)} \mathbf{S}^{(d_1-i,0)} \right)^{d_2} \\ &= \sum_{i=0}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=0}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(i,j)} \mathbf{S}^{(d_1-i, d_2-j)} \\ &= w^{(0,0)} \mathbf{S}^{(d_1, d_2)} + \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0)} \mathbf{S}^{(d_1-i, d_2)} + \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(0,j)} \mathbf{S}^{(d_1, d_2-j)} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(i,j)} \mathbf{S}^{(d_1-i, d_2-j)} \end{aligned}$$

Desta segue que

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{(d_1, d_2)} &= \frac{1}{w} \left(\mathbf{A}^{(d_1, d_2)} - \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0)} \mathbf{S}^{(d_1-i, d_2)} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(0,j)} \mathbf{S}^{(d_1, d_2-j)} - \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(i,j)} \mathbf{S}^{(d_1-i, d_2-j)} \right) \end{aligned}$$

3.9.5 Definição e propriedades dos sólidos NURBS

Um sólidos NURBS de grau p na direção ξ , de grau q na direção η e de grau r na direção ζ é uma função vetorial trivariante racional por partes da forma

$$\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\sum_{i,j,k=0}^{n,m,l} N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) w_{i,j,k} \mathbf{P}_{i,j,k}}{\sum_{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}=0}^{n,m,l} N_{\hat{i},p}(\xi) N_{\hat{j},q}(\eta) N_{\hat{k},r}(\zeta) w_{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}}} \quad (\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1] \quad (3.59)$$

Os $\{\mathbf{P}_{i,j,k}\}$ formam uma rede de controle tridirecional, os $\{w_{i,j,k}\}$ são os pesos e as $\{N_{i,p}(\xi)\}$, $\{N_{j,q}(\eta)\}$ e $\{N_{k,r}(\zeta)\}$ são as funções de base B-spline não-rationais definidas sobre o vetor de nós

$$\begin{aligned}\Xi &= \{\underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \xi_{p+1}, \dots, \xi_{s_p-p-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1}\} \\ \mathcal{H} &= \{\underbrace{0, \dots, 0}_{q+1}, \eta_{q+1}, \dots, \eta_{s_q-q-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{q+1}\} \\ \mathcal{Z} &= \{\underbrace{0, \dots, 0}_{r+1}, \zeta_{r+1}, \dots, \zeta_{s_r-r-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{r+1}\}\end{aligned}$$

onde $s_p = n + p + 1$, $s_q = m + q + 1$ e $s_r = l + r + 1$.

Introduzindo as funções de base racionais

$$R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) w_{i,j,k}}{\sum_{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}=0}^{n,m,l} N_{\hat{i},p}(\xi) N_{\hat{j},q}(\eta) N_{\hat{k},r}(\zeta) w_{\hat{i},\hat{j},\hat{k}}} \quad (\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1] \quad (3.60)$$

o sólido (3.59) pode ser reescrito como

$$\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{P}_{i,j,k} \quad (3.61)$$

Propriedades:

P.NURBS. 29 *Função positiva semi-definida:* $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) \geq 0$, $\forall i, j, k, \xi, \eta, \zeta$ e $\forall (\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$;

P.NURBS. 30 *Partição da unidade:* $\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) = 1$, $\forall (\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$;

P.NURBS. 31 *Suporte local:* $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) = 0$ para $(\xi, \eta) \notin [\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}] \times [\zeta_k, \zeta_{k+r+1}]$;

P.NURBS. 32 *Em um dado período* $[\xi_{i_0}, \xi_{i_0+p+1}] \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+q+1}] \times [\zeta_{k_0}, \zeta_{k_0+r+1}]$, *no máximo* $(p+1)(q+1)(r+1)$ *funções de base são não-nulas, em particular* $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta)$ *para* $(i, j, k) \in [i_0 - p, i_0] \times [j_0 - q, j_0] \times [k_0 - r, k_0]$;

P.NURBS. 33 *Toda função possui no mínimo dois pontos extremos, i.e., ao menos possui um mínimo e um máximo (teorema de Weierstrass); Toda função NURBS $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta)$ para $p > 0$, $q > 0$ e $r > 0$ possui um mínimo e um máximo no intervalo $(\xi, \eta, \zeta) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$;*

P.NURBS. 34 $R_{0,0,0}^{p,q,r} = R_{n,0,0}^{p,q,r} = R_{0,m,0}^{p,q,r} = R_{0,0,l}^{p,q,r} = R_{n,m,0}^{p,q,r} = R_{n,0,l}^{p,q,r} = R_{0,m,l}^{p,q,r} = R_{n,m,l}^{p,q,r} = 1$;

P.NURBS. 35 *Todas as derivadas parciais de $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, zeta)$ existem no interior do período, estas são funções racionais de denominador não-nulo. Sobre o nó, $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, zeta)$ é C^{p-o} , C^{q-o} e C^{r-o} contínuo, na direção ξ e η , respectivamente, onde o é a multiplicidade do nó;*

P.NURBS. 36 *Se $w_{i,j,k} = a$ para todo (i, j, k) , então $R_{i,j,k}^{p,q,r}(\xi, \eta, \zeta) = N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta)$ para todo (i, j, k) ;*

As propriedades de P.NURBS.29 a P.NURBS.36, constituem importantes características geométricas de superfícies NURBS.

P.NURBS. 37 *Interpolação dos pontos de controle extremos: $\mathbf{G}(0, 0, 0) = \mathbf{P}_{0,0,0}$, $\mathbf{G}(1, 0, 0) = \mathbf{P}_{1,0,0}$, $\mathbf{S}(0, 1, 0) = \mathbf{P}_{0,1,0}$, $\mathbf{G}(0, 0, 1) = \mathbf{P}_{0,0,1}$, $\mathbf{G}(1, 1, 0) = \mathbf{P}_{1,1,0}$, $\mathbf{G}(1, 0, 1) = \mathbf{P}_{1,0,1}$, $\mathbf{G}(0, 1, 1) = \mathbf{P}_{0,1,1}$ e $\mathbf{G}(1, 1, 1) = \mathbf{P}_{1,1,1}$;*

P.NURBS. 38 *Transformações lineares: transformações tais como rotação, translação, escala e cisalhamento aplicados ao sólido são realizadas aplicando tal transformação ao polígono de controle;*

P.NURBS. 39 *Região convexa: se $w_{i,j,k} \geq 0$ para todo (i, j, k) , o sólido está contido na região convexa formada pelo polígono de controle; De fato, se $(\xi, \eta, \zeta) \in [\xi_{i_0}, \xi_{i_0+1}] \times [\eta_{j_0}, \eta_{j_0+1}] \times [\zeta_{k_0}, \zeta_{k_0+1}]$, então $\mathbf{S}(\xi, \eta, \zeta)$ estará contida na região formada pelos pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j,k}$, $\forall i \in [i_0 - p, i_0] \wedge j \in [j_0 - q, j_0] \wedge k \in [k_0 - r, k_0]$;*

P.NURBS. 40 *Esquema de modificação local: movendo $\mathbf{P}_{i,j,k}$ ou $w_{i,j,k}$ o sólido $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ modifica sua forma somente no intervalo $[\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}] \times [\zeta_k, \zeta_{k+r+1}]$*

P.NURBS. 41 *Bézier, B-spline não-rationais e Bézier racionais são um caso particular de superfícies NURBS;*

P.NURBS. 42 *A continuidade e a diferenciabilidade da superfície $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ seguem das funções de base; em particular $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ é infinitamente diferenciável no interior do intervalo de nós, e é C^{p-o} , C^{q-o} e C^{r-o} contínua na direção ξ , η e ζ , respectivamente; onde o é a multiplicidade do nó.*

Para os sólidos também resulta vantajoso fazer a representação no espaço homogêneo. Assim, o sólido toma a forma

$$\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l N_{i,p}(\xi) N_{j,q}(\eta) N_{k,r}(\zeta) \mathbf{P}_{i,j,k}^w \quad (3.62)$$

onde $\mathbf{P}_{i,j,k}^w = (w_{i,j,k}x_{i,j,k}, w_{i,j,k}y_{i,j,k}, w_{i,j,k}z_{i,j,k}, w_{i,j,k})$. Logo $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \mathcal{M}\{\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)\}$. $\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)$ é formado por produto tensorial, sendo um polinômio por partes não-razional no espaço homogêneo. Enquanto, $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ não é formado por produto tensorial, sendo um polinômio por partes racional no espaço Euclidiano.

Os pontos de controle para curvas NURBS são obtidos pelo mapeamento $\mathbf{P}^w \xrightarrow{\text{map}} \mathbf{P}$, utilizando a seguinte expressão

$$(\mathbf{P}_{i,j,k})_g = \frac{(\mathbf{P}_{i,j,k}^w)_g}{w_{i,j,k}} \quad 1 \leq g \leq d; \quad w_{i,j,k} = (\mathbf{P}_{i,j,k}^w)_{d+1} \quad (3.63)$$

onde $(\mathbf{P}_{i,j,k})_g$ é a g -ésima componente do vetor de pontos de controle $\mathbf{P}_{i,j,k}$, $w_{i,j,k}$ é o i,j,k -ésimo peso e $\mathbf{P}_{i,j,k}^w$ é o associado ponto de controle projetivo. Dividindo o ponto de controle projetivo pelo peso é equivalente à aplicar a transformação projetiva à ele.

Uma curva $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$ é relacionada com sua curva projetada $\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)$ pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} (\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta))_g &= \frac{(\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta))_g}{W(\xi, \eta, \zeta)} \quad 1 \leq g \leq d; \\ W(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^l N_{i,p} N_{j,q} N_{k,r}(\xi, \eta, \zeta) w_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.64)$$

onde $W(\xi, \eta, \zeta)$ é a função peso e $N_{i,p}$ são as funções de base B-spline padrão.

3.9.6 Derivadas dos sólidos NURBS

As derivadas de $\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)$ são computadas usando as expressões (3.36) a (3.38) aplicadas no espaço homogêneo. A partir das derivadas parciais de $\mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)$ são obtidas as derivadas parciais $\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)$. Sendo

$$\mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{w(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{G}^w(\xi, \eta, \zeta)}{w(\xi, \eta, \zeta)} = \frac{\mathbf{A}(\xi, \eta, \zeta)}{w(\xi, \eta, \zeta)} \quad (3.65)$$

tem-se

$$\mathbf{G}_\alpha(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\mathbf{A}_\alpha(\xi, \eta, \zeta) - w_\alpha(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{G}(\xi, \eta, \zeta)}{w(\xi, \eta, \zeta)} \quad (3.66)$$

onde α denota a derivada em relação ξ , η ou ζ .

Em geral

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(d_1, d_2, d_3)} &= \left\{ \left[(w\mathbf{S})^{d_1} \right]^{d_2} \right\}^{d_3} = \left\{ \left(\sum_{i=0}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0,0)} \mathbf{G}^{(d_1-i,0,0)} \right)^{d_2} \right\}^{d_3} \\ &= \sum_{i=0}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=0}^{d_2} \binom{d_2}{j} \sum_{k=0}^{d_3} \binom{d_3}{k} w^{(i,j,k)} \mathbf{G}^{(d_1-i, d_2-j, d_3-k)} \\ &= w^{(0,0,0)} \mathbf{G}^{(d_1, d_2, d_3)} + \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0,0)} \mathbf{G}^{(d_1-i, d_2, d_3)} + \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(0,j,0)} \mathbf{G}^{(d_1, d_2-j, d_3)} \\ &\quad + \sum_{k=1}^{d_3} \binom{d_3}{k} w^{(0,0,k)} \mathbf{G}^{(d_1, d_2, d_3-k)} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} \sum_{k=1}^{d_3} \binom{d_3}{k} w^{(i,j,k)} \mathbf{G}^{(d_1-i, d_2-j, d_3-k)} \end{aligned}$$

Desta segue que

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{(d_1, d_2, d_3)} &= \frac{1}{w} \left(\mathbf{A}^{(d_1, d_2, d_3)} - \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} w^{(i,0,0)} \mathbf{G}^{(d_1-i, d_2, d_3)} \right. \\ &\quad - \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} w^{(0,j,0)} \mathbf{G}^{(d_1, d_2-j, d_3)} \\ &\quad - \sum_{k=1}^{d_3} \binom{d_3}{k} w^{(0,0,k)} \mathbf{G}^{(d_1, d_2, d_3-k)} \\ &\quad \left. - \sum_{i=1}^{d_1} \binom{d_1}{i} \sum_{j=1}^{d_2} \binom{d_2}{j} \sum_{k=1}^{d_3} \binom{d_3}{k} w^{(i,j,k)} \mathbf{G}^{(d_1-i, d_2-j, d_3-k)} \right) \end{aligned}$$

Capítulo 4

Análise IsoGeométrica – IGA

4.1 Introdução à análise IsoGeométrica

Desde que os conceitos básicos sobre Análise IsoGeométrica (IGA) foram introduzidos recentemente por [Hughes et al. \(2005\)](#), diversas investigações tem sido levadas a cabo na expectativa de estender a aplicabilidade da formulação proposta para diferentes campos da mecânica computacional aplicada. Resultados preliminares tem demonstrado significativas melhorias nas simulações relacionadas a diferentes fenômenos físicos, tais como: camada limite turbulenta, análise não-linear de cascas e otimização topológica e de forma estrutural e aerodinâmica (ver [Bazilevs et al. \(2007\)](#); [Benson et al. \(2010\)](#); [Kiendl et al. \(2010\)](#); [Wall et al. \(2008\)](#); [Seo et al. \(2009\)](#); [Cho e Ha \(2009\)](#)), quando comparadas com as predições do métodos dos elementos finitos.

No campo da elasto-estática e -dinâmica, é de conhecimento que formulações sobre elementos finitos de baixa ordem, usualmente falham na representação correta do campo de deslocamentos para problemas de flexão dominante e na análise envolvendo materiais incompressíveis (ver [Belytschko et al. \(2000\)](#)). Por outro lado, elementos finitos de alta ordem são caros computacionalmente, especialmente quando uma análise não-linear é realizada. Por tanto, uma quadratura reduzida tem sido empregada em aplicações não-lineares na expectativa de reduzir o esforço computacional. Assim, instabilidades numéricas podem ser geradas se um esquema de estabilização robusta, para controle de modos espúrios, não for utilizada. Assim, é esperado que a análise IsoGeométrica possa lidar eficientemente com o fenômeno de travamento, devido as características matemáticas

das funções de base NURBS. Devido a alta continuidade das funções de base [Hughes et al. \(2010\)](#) desenvolveu uma quadratura mais eficiente e menos custosa, o que resulta atrativo quando comparado a elementos finitos clássicos. Ainda, um modelo numérico eficiente e de ótima acurácia pode ser utilizado pelo uso da cinemática co-rotacional na descrição do movimento de problemas não-lineares, o qual tem sido verificado para modelos de elementos finitos.

A ideia por trás da análise IsoGeométrica é unificar técnicas numéricas no projeto geométrico e na análise, o qual é obtido pelo uso de um único sistema onde as funções de base são utilizadas para os dois procedimentos. O projeto geométrico e a análise tem sido desenvolvidas independentemente com pré-processadores baseados em CAD e pacotes numéricos baseados no método dos elementos finitos. O pré-processamento inclui a representação geométrica do protótipo físico, onde um modelo virtual é obtido através da translação geométrica desde o modelo real. Somam-se a este processo o malhamento e a imposição da condições de contorno. Entretanto, neste processo é observado que a malha de elementos finitos deteriora a representação geométrica e aproximações grosseiras podem ser observadas dependendo do número de elementos e das funções de base adotadas durante a discretização espacial, sendo que a malha deveria representar a geometria do modelo real.

Um procedimento de análise baseado em uma formulação CAD é referida como análise IsoGeométrica. A Análise IsoGeométrica oferece a possibilidade de integrar procedimentos de análises via elementos finitos com técnicas numéricas de CAD, através do uso de parametrizações *B-spline* e NURBS. Um outro aspecto importante relacionado à análise IsoGeométrica é o conceito isoparamétrico, já que o espaço solução é representado pelas mesmas funções de base utilizadas para representar a geometria. Um estudo detalhado sobre Análise IsoGeométrica pode ser encontrado em um livro recentemente apresentado por [Cottrell et al. \(2009\)](#).

Diversas investigações sobre FEM tem sido dedicadas à tecnologia de elementos, na expectativa de desenvolver formulações de elementos eficientes, especialmente para análises de grande escala e não-lineares. Os esforços tem sido voltado aos elementos de baixa ordem com integração reduzida e um ponto de quadratura, onde técnicas de estabilização baseadas em deformações assumidas e abordagens co-rotacionais são

usualmente empregadas para evitar o fenômeno de travamento (*locking*) e modos espúrios (ver [Hu e Nagy \(1997\)](#); [Liu et al. \(1998\)](#); [Duarte Filho e Awruch \(2004\)](#); [Cardoso et al. \(2008\)](#)). Por outro lado, é possível observar que elementos de alta ordem são menos suscetíveis ao travamento devido aos termos de alta ordem, que aliviam a ação do travamento. Entretanto, o número de operações numéricas é significativamente maior quando comparado com elementos lineares.

Estes inconvenientes podem ser eficientemente contornados pelo uso da análise IsoGeométrica com funções de base NURBS, as quais apresentam continuidade C^{p-o} para um polinômio de grau p e uma multiplicidade de nós o , em vez de continuidade C^0 verificada nas funções de forma padrões adotadas na análise por elementos finitos. Um recente trabalho foi apresentado por [Echter e Bischoff \(2010\)](#), o qual investiga o fenômeno de travamento usando uma formulação de elementos finitos baseada em NURBS.

Uma eficiente forma de tratar a descrição cinemática de problemas não lineares na mecânica dos sólidos é obtida com a abordagem co-rotacional. A acurácia e a eficiência são significativamente melhoradas para problemas envolvendo grandes deslocamentos e grandes rotações, desde que o movimento de um meio contínuo pode ser decomposto em um movimento de corpo rígido e outro movimento de deformação através do uso de um referencial embutido à cada ponto da quadratura, o qual rota e translada com o corpo. A abordagem co-rotacional foi introduzida no modelo de elementos finitos por [Wempner \(1969\)](#); [Belytschko e Hsieh \(1973\)](#). Um extensivo trabalho sobre os conceitos fundamentais relacionados à cinemática co-rotacional foi apresentada por [Belytschko e Hsieh \(1983\)](#), onde aspectos em relação à mecânica do contínuo são enfatizados. Formulações co-rotacionais recentes para elementos hexaédricos de oito pontos com um ponto de quadratura podem ser encontrados em [Liu et al. \(1998\)](#); [Duarte Filho e Awruch \(2004\)](#); [Braun e Awruch \(2008\)](#). Uma descrição detalhada sobre a abordagem cinemática também foi feita por [Felippa \(2000a,b\)](#); [Felippa e Haugen \(2005a,b\)](#).

No presente trabalho, um modelo numérico baseado na análise IsoGeométrica é desenvolvido para problemas não lineares na mecânica dos sólidos. A descrição cinemática do contínuo é levada a cabo usando uma abordagem co-rotacional no contexto da análise IsoGeométrica. Um modelo constitutivo hipo-elástico é adotado utilizando tensores de deformação infinitesimal e de tensão de Cauchy co-rotacionais, onde a hipótese de

grandes deslocamentos e grandes rotações são considerados. Um algoritmo numérico para elasto-estática e -dinâmica não linear é obtido aplicando o método de resíduos ponderados de Bubnov-Galerkin e a geometria e o campo de solução são aproximados pelas funções de base NURBS de acordo com o conceito isoparamétrico. A equação de equilíbrio é linearizada usando o esquema de Newton-Raphson (controle de carregamento) e um esquema numérico (controle de deslocamento) baseado no método de Controle de Deslocamento Generalizado (GDCM do acrônimo do inglês *Generalized Displacement Control Method*; apresentador por [Yang e Shieh \(1990\)](#)) é adotado para problemas que envolvem pontos limites.

Na Figura 4.1 são apresentados os conceitos que envolvem a análise IsoGeométrica e o conceito isoparamétrico.

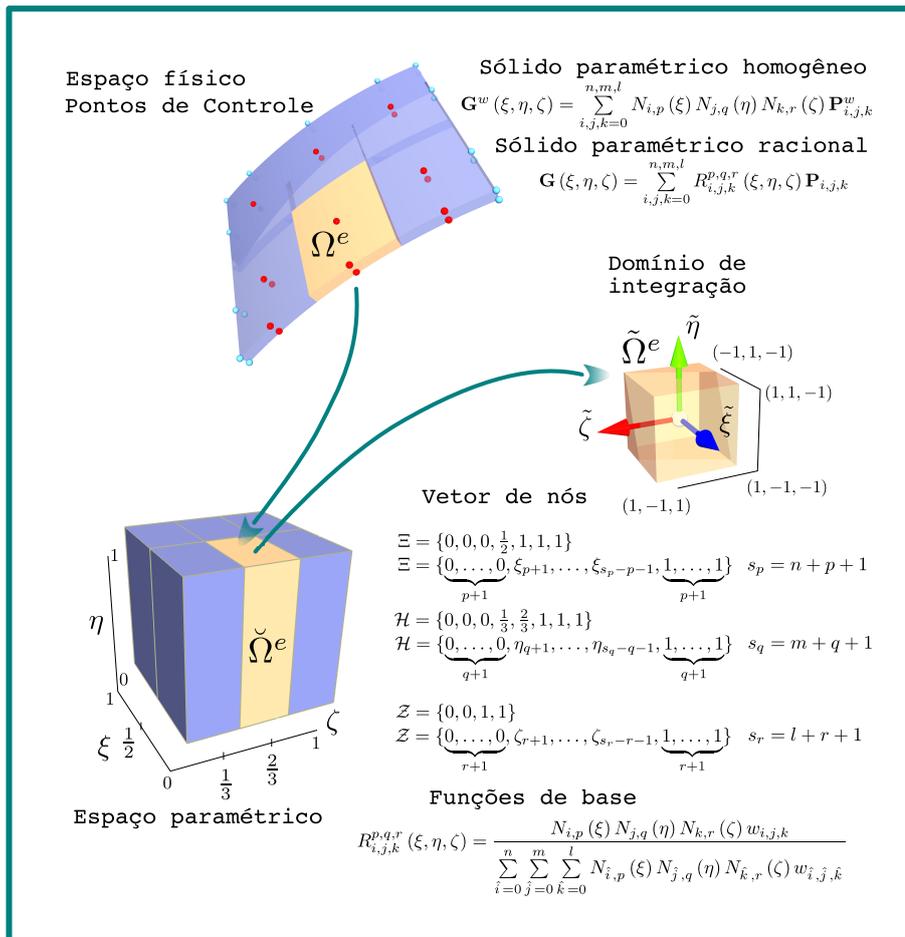


Figura 4.1: Conceitos gerais que envolvem a análise IsoGeométrica.

Na Tabela 4.1 são apresentadas as diferenças entre os métodos IGA e FEA.

Tabela 4.1: IGA vs FEA

Cottrell et al. (2009)

Análise IsoGeométrica	Análise por Elementos Finitos
Geometria exata Pontos de Controle Variáveis de controle As funções de base não interpolam os pontos de controle nem as variáveis Funções de base NURBS Alta continuidade e facilmente controlada Espaço de refinamento hp/k Funções de base positiva semi-definida Propriedade região convexa Pouca oscilação na presença de descontinuidades	Geometria aproximada Pontos nodais Variáveis nodais As funções de base interpolam os nós e as variáveis Funções de base polinomiais Continuidade C^0 , sempre fixa Espaço de refinamento hp Funções de base não necessariamente positiva Não apresenta esta propriedade Grande oscilação na presença de descontinuidades

4.2 Introdução à análise dinâmica IsoGeométrica

O desenvolvimento de algoritmos numéricos para simular a resposta dinâmica linear e não linear de corpos elásticos é um dos tópicos mais presentes na elasto-dinâmica. Tradicionalmente esquemas de avanço temporal, os quais apresentam excelente estabilidade no âmbito linear, frequentemente estão sujeitos à instabilidades numéricas quando são aplicados à problemas não lineares utilizando modelos numéricos baseados no método dos elementos finitos. Desta maneira, investigações acerca da elasto-dinâmica com a utilização da análise IsoGeométrica devem ser realizados na expectativa de estudar a influência da formulação IsoGeométrica sobre questões numéricas, tais como a estabilidade e a acurácia, onde os aspectos relacionados ao processo de integração no tempo também são extremamente importantes.

Conforme já observado na seção 4.1, no método dos elementos finitos é frequentemente observado que o modelo obtido após a geração de malhas não coincide com a forma geométrica de modelos complexos reproduzido com ferramentas de CAD. Estendendo esta observação ao campo da análise dinâmica não linear, sabe-se que modos de vibração de alta frequência de uma resposta dinâmica não podem ser reproduzidos com devida acurácia. Isto ocorre devido a erros introduzidos na modelagem quando a discretização espacial é levada a cabo sobre um sistema contínuo infinito-dimensional, o qual pode levar à instabilidades numéricas se uma dissipação numérica não for adequadamente empregada.

A necessidade de uma dissipação numérica foi logo reconhecida quando esquemas incondicionalmente estáveis de integração temporal foram introduzidos no método de elementos finitos na expectativa de resolver problemas de dinâmica não linear com algoritmos implícitos. Sabe-se que grandes erros são introduzidos pela discretização espacial associados às altas frequências devido à deficiências que elementos de baixa ordem possuem em reproduzir adequadamente modos de alta frequência com boa acurácia. Desta maneira, uma formulação com dissipação numérica controlável foi proposta por [Newmark \(1959\)](#). Após este trabalho, o método de Newmark e outros algoritmos recentes com dissipação numérica, tais como os métodos de Wilson e Houbolt foram investigados por [Goudreau e Taylor \(1973\)](#), onde é recomendada a introdução de um controle do nível de dissipação para reduzir a ação espúria de modos de alta frequência.

Entretanto, algoritmos incondicionalmente estáveis produzem uma alongação do período e a acurácia de segunda ordem é perdida devido a introdução da dissipação numérica. Este inconveniente foi contornado com o método proposto por [Hilber et al. \(1977\)](#), o qual combina um algoritmo incondicionalmente estável, com resolução de segunda ordem e dissipação numérica dos modos de altas frequências. Uma abordagem similar foi obtida com a formulação introduzida por [Wood et al. \(1980\)](#) e uma generalização dos métodos apresentados por [Hilber et al. \(1977\)](#) e [Wood et al. \(1980\)](#), conhecido por α -generalizado, por [Chung e Hulbert \(1993\)](#). O método α -generalizado produz uma acurácia de segunda ordem e um ótimo comportamento é obtido para dissipação numérica quando problemas lineares são analisados, onde uma mínima dissipação é observada para baixas frequências, bem como uma máxima dissipação é verificada para altas frequências.

Os desenvolvimentos dos algoritmos de conservação de energia foram motivados pelo trabalho de [Belytschko e Schoeberle \(1975\)](#), onde foi concluído que um algoritmo numérico é estável em termos da energia se a soma da energia cinética e a energia interna dentro de um intervalo de tempo é limitada pelo trabalho externo e a energia cinética e energia interna avaliados no passo de tempo anterior. Ainda, foi verificado que algoritmos que apresentam estabilidade incondicional para aplicações na dinâmica linear estão frequentemente sujeitos à instabilidades numéricas quando um caso não linear é analisado. Seguindo o critério de energia introduzido por [Belytschko e Schoeberle \(1975\)](#), [Hughes et al. \(1978\)](#) propôs um esquema de conservação de energia para dinâmica não linear onde a regra do trapézio é estendida com a utilização de multiplicadores de Lagrange para forçar a conservação de energia. Não obstante, [Ortiz \(1986\)](#) demonstra que a conservação da energia não é suficiente para manter a estabilidade numérica no regime não linear. [Kuhl e Ramm \(1996\)](#) também observaram que o método de energia restringida (*Constraint Energy Method*) apresentado por [Hughes et al. \(1978\)](#) conserva perfeitamente a energia, entretanto leva à falha no procedimento iterativo relacionado à linearização de Newton-Raphson.

De fato, [Simo e Tarnow \(1992\)](#) também observaram a importância da conservação do momento, assim propondo o método de conservação de energia-momento (*Energy-Momentum Method*), o qual conserva a energia total assim como o momento linear e angular. Ainda, a acurácia de segunda ordem é preservada. O método energia-momento

foi desenvolvido considerando a regra do ponto-médio para avaliar às forças internas em cada passo de tempo do processo de integração temporal, na expectativa de alcançar a conservação algorítmica da energia, já que foi concluído que o processo de atualização das tensões é crucial para obter um algoritmo numérico como conservação da energia-momento. A formulação original foi introduzida utilizando uma relação constitutiva para materiais Saint Venant-Kirchoff, o qual foi estendida para materiais hiper-elásticos arbitrários por [Gonzalez \(2000\)](#), quem propôs uma avaliação modificada do tensor de tensões empregando uma derivada discreta para descrever a forma requerida para a atualização do segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff. Após, [Laursen e Meng \(2001\)](#) reformularam o esquema de atualização das tensões apresentado por [Simo e Tarnow \(1992\)](#) para lidar corretamente com modelos gerais hiper-elásticos, onde algumas restrições encontradas na formulação original foram contornadas. Um algoritmo de conservação energia-momento às relações constitutiva hipo-elásticas foi desenvolvido por [Noels et al. \(2004\)](#) pelo uso de uma nova expressão para avaliar as forças internas à nível de elemento. [Braun e Awruch \(2008\)](#) também utilizaram uma relação hipo-elástica para aplicações não lineares na elasto-dinâmica, utilizando elemento hexaédrico com um ponto de integração. De acordo com [Romero \(2012\)](#) existem infinitas maneiras de obter um algoritmo de acurácia de segunda ordem com conservação da energia-momento, considerando que a caracterização da conservação da tensão, como um problema de minimização, conduz a esta conclusão.

Embora a conservação da energia-momento é mandatória na expectativa de obter um algoritmo numérico estável, também é desejado que um controle dissipativo possa ser realizado sobre as contribuições espúrias às altas frequências. Por outro lado, sabe-se que os clássicos métodos dissipativos em geral falham quando aplicados à dinâmica não linear e uma perda de acurácia sobre as altas frequências é geralmente óbvia. Esta situação motiva o desenvolvimento de algoritmos de dissipação de energia e conservação de momento, onde o momento é conservado totalmente e e energia é controladamente dissipada no intuito de que a precisão seja mantida. [Kuhl e Ramm \(1996\)](#) propuseram o método de energia-momento restringida, uma integração temporal que combina conservação e propriedades dissipativas, onde a energia e o momento são forçados por multiplicadores de Lagrange à ser restringidos e assim conservados, metodologia que foi proposta por [Hughes et al. \(1978\)](#). O método α -generalizado, proposto por [Chung e Hulbert \(1993\)](#) é

utilizado para realizar uma dissipação controlada na integração temporal. Os parâmetros α de integração são otimizados afim de obter dissipação nula nas baixas frequências e uma dissipação controlada sobre as altas frequências. A ideia de um algoritmo com dissipação controlada juntamente com o método de energia-momento proposto por [Simo e Tarnow \(1992\)](#), foi introduzido por [Kuhl e Crisfield \(1999\)](#), o qual resulta em uma leve modificação do algoritmo α -generalizado, e é conhecido por método energia-momento generalizado. Este método foi aplicado para elementos de cascas por [Kuhl e Ramm \(1999\)](#). [Armero e Petocz \(1998\)](#) e [Crisfield et al. \(1997\)](#) modificaram o método energia-momento generalizado e incluirão uma dissipação numérica por meio de um parâmetro amortecedor que somente afeta o segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff. Por outro lado, o método energia-momento generalizado possui precisão somente de primeira ordem. No intuito de contornar este inconveniente, [Armero e Romero \(2001a\)](#) desenvolveram um algoritmo que preserva energia e também é de segunda ordem de acurácia. Uma revisão sobre a maior parte dos métodos semi-discretos existentes baseados no método energia-momento e métodos dissipativos é encontrada em [Kuhl e Ramm \(1999\)](#); [Armero e Romero \(2001b\)](#); [Erlicher et al. \(2002\)](#).

4.3 Formulação do tipo da taxa da equação elástica de estado

Adotando um raciocínio macroscópico, esta seção é dedicada a formular a relação entre a derivada temporal do tensor de tensões de Cauchy e a taxa de Euleriana de deformações.

Em uma escala macroscópica, o gradiente de deformações $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ da transformação da partícula material entre sua configuração inicial $d\Omega_0$ e a configuração atual $d\Omega$ é relacionado ao gradiente do campo de deslocamentos $\underline{\mathbf{u}}$ por

$$\underline{\underline{\mathbf{F}}} = \underline{\underline{\mathbf{1}}} + \nabla \underline{\mathbf{u}} \quad (4.1)$$

O tensor de deformações de Green-Lagrange $\underline{\underline{\Delta}}$ é definido por

$$\underline{\underline{\Delta}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\mathbf{F}}}^t \cdot \underline{\underline{\mathbf{F}}} - \underline{\underline{\mathbf{1}}}) \quad (4.2)$$

No que se segue, o quadro de deformações infinitesimal é adotado:

$$|\underline{\underline{\Delta}}| \ll 1 \quad (4.3)$$

Ainda, a análise é restrita à materiais elásticos lineares:

$$\underline{\underline{\mathbf{\Pi}}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\underline{\mathbf{\Delta}}}} \quad (4.4)$$

onde $\underline{\underline{\mathbf{\Pi}}}$ é o segundo tensor de tensões de Piola-kirchhoff e $\Psi = \Psi(\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}})$ se refere à função potencial elástico.

A assunção de deformações infinitesimais permite linearizar a equação de estado (4.4) na forma

$$\underline{\underline{\mathbf{\Pi}}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{mat} : \underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} \quad (4.5)$$

$\underline{\underline{\mathbf{C}}}^{mat}$ é o tensor elástico (o estado natural de tensões é considerado, i.e., $\underline{\underline{\mathbf{\Pi}}}(\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} = \underline{\underline{\mathbf{0}}}) = \underline{\underline{\mathbf{0}}}$).

Um pressuposto fundamental do raciocínio desenvolvido na sequência depende da isotropia das propriedades elásticas. A Equação (4.5) lê-se, por conseguinte:

$$\underline{\underline{\mathbf{\Pi}}} = \lambda \text{tr}(\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}}) \underline{\underline{\mathbf{1}}} + 2\mu \underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} \quad (4.6)$$

onde λ e μ são os coeficientes de Lamé.

De acordo com o teorema da decomposição polar do gradiente de deformações, $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ pode ser escrito como

$$\underline{\underline{\mathbf{F}}} = \underline{\underline{\mathbf{V}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \quad (4.7)$$

onde $\underline{\underline{\mathbf{Q}}}$ representa a rotação que transforma a tríade local (E_1, E_2, E_3) definida pelas direções principais de $\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}}$ na tríade definida pelas mesmas direções materiais na configuração atual (ver Figura 4.2), enquanto $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$ é um tensor simétrico de deformação pura. Uma maneira conveniente de expressar a condição (4.3) de deformações infinitesimais é assumir que

$$\underline{\underline{\mathbf{V}}} = \underline{\underline{\mathbf{1}}} + \underline{\underline{\mathbf{\delta}}} \quad \text{with} \quad |\underline{\underline{\mathbf{\delta}}}| \ll 1 \quad (4.8)$$

Logo, o tensor de deformações de Green-Lagrange lê-se:

$$\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} = \frac{1}{2} \left[\underline{\underline{\mathbf{Q}}}^t \cdot (\underline{\underline{\mathbf{1}}} + \underline{\underline{\mathbf{\delta}}})^2 \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} - \underline{\underline{\mathbf{1}}} \right] \simeq \underline{\underline{\mathbf{Q}}}^t \cdot \underline{\underline{\mathbf{\delta}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \quad (4.9)$$

ou, de forma equivalente: $\underline{\underline{\mathbf{\delta}}} = \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}}^t$.

Em vista da Equação (4.9), a equação de estado elástica (4.6) pode ser reescrita

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{\sigma}}} &= \frac{1}{\det(\underline{\underline{\mathbf{F}}})} \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{\Pi}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{F}}}^t \\ &= \frac{1}{\det(\underline{\underline{\mathbf{1}}} + \underline{\underline{\mathbf{\delta}}})} (\underline{\underline{\mathbf{1}}} + \underline{\underline{\mathbf{\delta}}}) \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \cdot \left[\lambda \text{tr}(\underline{\underline{\mathbf{\Delta}}}) \underline{\underline{\mathbf{1}}} + 2\mu \underline{\underline{\mathbf{\Delta}}} \right] \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}}^t \cdot (\underline{\underline{\mathbf{1}}} + \underline{\underline{\mathbf{\delta}}}) \end{aligned} \quad (4.10)$$

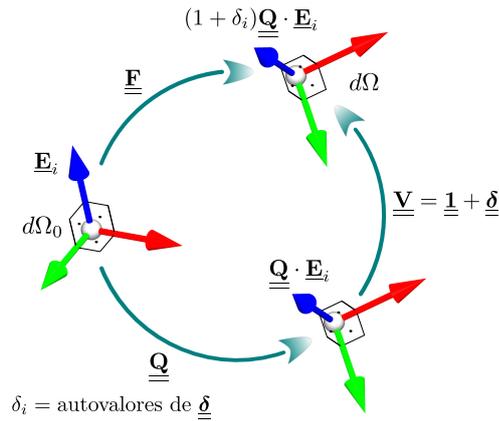


Figura 4.2: Decomposição polar do gradiente de deformações.

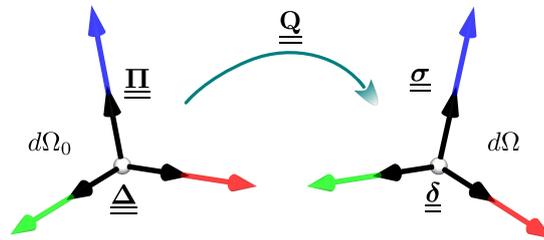


Figura 4.3: Transformação dos tensores para o caso isotrópico elástico em deformações infinitesimais.

e negligenciando os termos de segunda ordem em $\underline{\delta}$ ou $\underline{\Delta}$:

$$\underline{\sigma} = \lambda \text{tr}(\underline{\delta}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\delta} = \underline{\mathbf{Q}} \cdot \underline{\Pi} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t \quad (4.11)$$

Em particular, a seguinte identidade

$$\text{tr}(\underline{\Delta}) = (\underline{\mathbf{Q}}^t \cdot \underline{\delta}) : \underline{\mathbf{Q}} = \underbrace{(\underline{\mathbf{Q}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t)}_{\underline{\mathbf{1}}} : \underline{\delta} = \text{tr}(\underline{\delta}) \quad (4.12)$$

foi utilizada para estabelecer (4.11). Facilmente pode ser visto de (4.6) e (4.11) que (ver Figure 4.3)

- $\underline{\Pi}$ e $\underline{\Delta}$ admitem as mesmas direções principais na configuração inicial;
- $\underline{\sigma}$ e $\underline{\delta}$, os quais são respectivamente transformados por $\underline{\mathbf{Q}}$ de $\underline{\Pi}$ e $\underline{\Delta}$, também admitem as mesmas direções principais na configuração atual.

Será agora abordado a questão da equação de estado elástica em forma de taxa. O ponto de partida é a decomposição polar (4.7) de $\underline{\mathbf{F}}$. Adequadamente, o gradiente Euleriano de

velocidades escreve-se

$$\mathbf{grad} \underline{\mathbf{v}} = \underline{\dot{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} = \underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}} \cdot (\underline{\mathbf{1}} + \underline{\boldsymbol{\delta}})^{-1} + (\underline{\mathbf{1}} + \underline{\boldsymbol{\delta}}) \cdot \underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t \cdot (\underline{\mathbf{1}} + \underline{\boldsymbol{\delta}})^{-1} \quad (4.13)$$

Observando que $\underline{\boldsymbol{\delta}}$ é infinitesimal, é obtido que

$$\mathbf{grad} \underline{\mathbf{v}} \simeq \underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}} + \underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t + \underline{\boldsymbol{\delta}} \cdot \underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t - \underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t \cdot \underline{\boldsymbol{\delta}} \quad (4.14)$$

na qual as partes simétricas e anti-simétricas são:

$$\underline{\boldsymbol{\Omega}} = \frac{1}{2} (\mathbf{grad} \underline{\mathbf{v}} - \mathbf{grad}^t \underline{\mathbf{v}}) = \underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t \quad (4.15)$$

e

$$\underline{\mathbf{d}} = \frac{1}{2} (\mathbf{grad} \underline{\mathbf{v}} + \mathbf{grad}^t \underline{\mathbf{v}}) = \underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}} + \underline{\boldsymbol{\delta}} \cdot \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underline{\boldsymbol{\delta}} \quad (4.16)$$

desde que

$$\underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t + (\underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t)^t = \overbrace{\underline{\dot{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\mathbf{Q}}^t}^{\mathbf{0}} = \mathbf{0} \quad (4.17)$$

Tomando as derivadas particulares de ambos lados da igualdade que define a lei de estado (4.11) tem-se

$$\underline{\dot{\boldsymbol{\sigma}}} = \lambda \text{tr}(\underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}} \quad (4.18)$$

Considerando a Equação (4.16), segue-se que

$$\begin{aligned} \underline{\dot{\boldsymbol{\sigma}}} + \underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}} &= \lambda \text{tr}(\underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}} \\ &\quad + \lambda \text{tr}(\underline{\boldsymbol{\delta}}) \underbrace{(\underline{\mathbf{1}} \cdot \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{1}})}_{\mathbf{0}} \\ &\quad + 2\mu (\underline{\boldsymbol{\delta}} \cdot \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underline{\boldsymbol{\delta}}) \\ &= \lambda \text{tr}(\underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\mathbf{d}} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Observando que, finalmente,

$$\text{tr}(\underline{\mathbf{d}}) = \text{tr}(\underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}}) + \underline{\boldsymbol{\delta}} : \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} : \underline{\boldsymbol{\delta}} = \text{tr}(\underline{\dot{\boldsymbol{\delta}}}) \quad (4.20)$$

Obtém-se, deste modo a formulação da taxa da equação de estado elástica isotrópica no quadro das deformações infinitesimais

$$\underline{\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}}^J = \underline{\underline{\underline{\mathbf{C}}}}^{mat} : \underline{\mathbf{d}} = \lambda \text{tr}(\underline{\mathbf{d}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\mathbf{d}} \quad (4.21)$$

onde

$$\underline{\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}}^J = \underline{\dot{\boldsymbol{\sigma}}} + \underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{\Omega}} - \underline{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}} \quad (4.22)$$

é a derivada de Jaumann do tensor de tensões de Cauchy.

Por conseguinte, demonstrou-se que, no âmbito das deformações infinitesimais, juntamente com a assunção de isotropia, a derivada objetiva apropriada do tensor de tensões de Cauchy relacionada com a taxa de deformação Euleriana é a taxa de Jaumann.

$\underline{\underline{\sigma}}^{\circ J}$ pode ser entendida como a derivada temporal do tensor de tensões de Cauchy em relação à uma base que rotaciona a uma taxa de rotação igual à $\underline{\underline{\Omega}}$. A base que rotaciona é definida pela tríade material, que coincide em cada instante com as direções principais do tensor taxa de deformações $\underline{\underline{d}}$. Curiosamente, o termo corretivo $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}$ na equação de estado considera efeitos de rotações finitas.

4.4 Conceitos fundamentais acerca da cinemática co-rotacional para análise IsoGeométrica não linear

Uma questão básica relacionada à descrição co-rotacional do movimento de um meio contínuo é a decomposição do sistema referencial em um configuração base e uma configuração co-rotacionada (Felippa e Haugen, 2005a). A configuração base é usualmente relacionada com a configuração indeformada do corpo e a configuração co-rotacionada é obtida através de um movimento de corpo rígido a partir da configuração de base. O sistema de coordenadas da configuração co-rotacionada segue o movimento material, onde relações com o sistema global de coordenadas pode facilmente ser estabelecido a partir de transformações ortogonais.

No que concerne a análise IsoGeométrica, a integração das grandezas cinemáticas, estáticas, e dinâmicas, são avaliadas em cada ponto da quadratura, trazendo a necessidade de trabalhar com uma configuração co-rotacionada em cada ponto de avaliação. Classicamente, a cinemática co-rotacional é aplicada em cada elemento finito com uma configuração co-rotacionada para todo o elemento (independentemente do número de pontos de quadratura). Isto, porque em geral para descrever um campo com elementos finitos de baixa ordem é necessário trabalhar com milhares de elementos, assim o campo representado por cada elemento pode ser associado à apenas uma configuração co-rotacionada.

Em tese, o movimento de um meio contínuo pode ser decomposto em um movimento de corpo rígido e uma deformação pura. Esta decomposição de movimento de corpo rígido e movimento puramente deformacional é assegurada pelo teorema de decomposição polar, estabelecendo que qualquer tensor de segunda ordem positivo definido pode ser unicamente decomposto em uma parte simétrica e uma parte ortogonal.

Assumindo que todas as quantidades cinemáticas na configuração prévia t_n do sólido são conhecidas, o campo de deslocamento ao final do passo de carregamento atual pode ser obtido pela integração do tensor de taxa de deformação sobre o intervalo de tempo que define o atual incremento de carga $[t_n, t_{n+1}]$. Além disso, esta integração para obter o incremento de deformações deve ser computada no sistema de coordenadas co-rotacional (os campos co-rotacionais são identificados por $(\hat{\cdot})$), onde somente a parte deformacional do incremento do campo de deslocamentos é considerada. O tensor taxa de deformação no sistema co-rotacional é definido por

$$\underline{\hat{\mathbf{d}}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}^{def}}{\partial \hat{\mathbf{x}}} + \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}^{def}}{\partial \hat{\mathbf{x}}} \right)^t \right] \quad (4.23)$$

onde $\hat{\mathbf{v}}^{def}$ representa o campo de velocidades associado à parte deformacional do movimento no sistema co-rotacional. No intuito de obter o incremento de deformações, alguma metodologia deve ser adotada para integrar o tensor taxa de deformação sobre o intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$. No presente trabalho, a integração do ponto médio (*mid-point integration*) proposta por Hughes e Winget (1980) é utilizada, onde o campo de velocidades é assumido constante dentro do intervalo de tempo e a configuração de referência é anexada à configuração intermediária $t_{n+\frac{1}{2}}$ no sistema co-rotacional. Por razões de clareza, $\underline{\hat{\mathbf{e}}}$ vai se referir na sequência à deformação infinitesimal $\underline{\hat{\mathbf{d}}}$ no sistema co-rotacional. De acordo com a integração do ponto médio, o incremento de deformação na configuração co-rotacionada pode ser obtida pela expressão

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \underline{\hat{\mathbf{d}}} d\tau = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \Delta \hat{\mathbf{u}}^{def}}{\partial \hat{\mathbf{x}}_{n+\frac{1}{2}}} + \left(\frac{\partial \Delta \hat{\mathbf{u}}^{def}}{\partial \hat{\mathbf{x}}_{n+\frac{1}{2}}} \right)^t \right] = \underline{\Delta \hat{\mathbf{e}}} \quad (4.24)$$

onde $\Delta \hat{\mathbf{u}}^{def}$ é a parte deformacional do incremento de campo de deslocamentos no sistema co-rotacional e $\hat{\mathbf{x}}_{n+\frac{1}{2}}$ é a configuração intermediária do sólido definido no sistema co-rotacional, a qual pode ser determinada de acordo com a seguinte expressão

$$\hat{\mathbf{x}}_{n+\frac{1}{2}} = \underline{\mathbf{R}}_{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \underline{\mathbf{R}}_{n+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{x}_n + \mathbf{x}_{n+1}) \quad (4.25)$$

onde $\underline{\mathbf{R}}_{n+\frac{1}{2}}$ é o tensor ortogonal da transformação que rotaciona desde o sistema global para o sistema co-rotacionado, definido localmente na configuração intermediária $t_{n+\frac{1}{2}}$. O incremento do campo de deslocamentos relacionado ao presente intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$ pode ser decomposto como

$$\underline{\Delta \mathbf{u}} = \underline{\Delta \mathbf{u}}^{def} + \underline{\Delta \mathbf{u}}^{rot} \quad (4.26)$$

onde $\underline{\Delta \mathbf{u}}^{def}$ e $\underline{\Delta \mathbf{u}}^{rot}$ são, respectivamente, as partes deformacional e rotacional do incremento do campo de deslocamentos definido no sistema de coordenadas globais. É evidente que a decomposição descrita em (4.26) é computada localmente a nível de elemento, em cada ponto da quadratura. O incremento do campo de deslocamentos no sistema co-rotacional pode ser avaliado a partir da expressão

$$\underline{\Delta \hat{\mathbf{u}}}^{def} = \underline{\mathbf{R}}_{n+\frac{1}{2}} \cdot \underline{\Delta \mathbf{u}}^{def} = \hat{\mathbf{x}}_{n+1} - \hat{\mathbf{x}}_n \quad (4.27)$$

onde o tensor transformação é avaliado na configuração intermediária $t_{n+\frac{1}{2}}$ do intervalo de tempo corrente $[t_n, t_{n+1}]$, já que o tensor taxa de deformações deve ser relacionado à configuração do sólido em $t_{n+\frac{1}{2}}$. As coordenadas correspondentes às configurações prévia e atual do sólido no sistema co-rotacional são obtidas com a seguinte transformação

$$\hat{\mathbf{x}}_n = \underline{\mathbf{R}}_n \cdot \mathbf{x}_n; \quad \hat{\mathbf{x}}_{n+1} = \underline{\mathbf{R}}_{n+1} \cdot \mathbf{x}_{n+1} \quad (4.28)$$

onde $\underline{\mathbf{R}}_n$ e $\underline{\mathbf{R}}_{n+1}$ são tensores ortogonais que realizam transformações de rotação concatenando o sistema global ao sistema co-rotacional definido localmente em t_n e t_{n+1} , respectivamente.

Após a determinação do incremento de tensões no sistema co-rotacional, a atualização das deformações e tensões podem ser computadas com a expressão

$$\hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_{n+1} = \hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_n + \underline{\underline{\Delta \epsilon}} \quad (4.29a)$$

$$\hat{\underline{\underline{\sigma}}}_{n+1} = \hat{\underline{\underline{\sigma}}}_n + \underline{\underline{\Delta \sigma}} \quad (4.29b)$$

onde n e $n + 1$ denotam as configurações prévia e atual no sistema co-rotacional, respectivamente. Já é consolidado na literatura que o tensor de tensões de Cauchy no sistema co-rotacional é invariante, já que a medida de tensões não são afetadas pelo movimento de corpo rígido, mas a taxa do tensor de tensões de Cauchy não é. Desta

maneira, na expectativa de obter uma relação constitutiva incrementalmente objetiva, o tensor taxa de Jaumann é adotado no presente trabalho, o qual é descrito por

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^J = \underline{\underline{\dot{\sigma}}} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.30)$$

onde o tensor de giro (*spin tensor*) $\underline{\underline{\Omega}}$ é definido pela parte anti-simétrica do gradiente espacial de velocidades $\underline{\underline{\mathbf{L}}} = \mathbf{grad} \mathbf{v} = \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{F}}}^{-1}$ definido no sistema co-rotacional. O tensor de giro co-rotacional $\underline{\underline{\hat{\Omega}}}$ deve também ser integrado sobre o intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$ considerando a mesma regra do ponto médio adotada na expressão (4.24).

O tensor de transformação ortogonal $\underline{\underline{\mathbf{R}}}$ pode ser avaliado utilizando diversos métodos. No presente trabalho é adotado o clássico teorema da decomposição polar, onde uma decomposição espectral (*spectral decomposition*) ou uma auto-projeção (projeção própria) (*eigenprojection*) do tensor a direita de deformação de Cauchy-Green (*right Cauchy-Green deformation tensor*) $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$ é adotada para obter o tensor a direita de alongamento (*right stretch tensor*) $\underline{\underline{\mathbf{U}}}$.

Sendo o tensor gradiente de deformações definido por

$$\underline{\underline{\mathbf{F}}} = \frac{\partial \underline{\underline{\mathbf{x}}}}{\partial \underline{\underline{\mathbf{X}}}} \quad (4.31)$$

este pode ser decomposto unicamente (enquanto $\det(\underline{\underline{\mathbf{F}}}) > 0$) em uma parte simétrica e uma parte ortogonal

$$\underline{\underline{\mathbf{F}}} = \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{U}}} = \underline{\underline{\mathbf{V}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \quad (4.32)$$

onde $\underline{\underline{\mathbf{Q}}}$ é um tensor ortogonal e $\underline{\underline{\mathbf{U}}}$ e $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$ são tensores simétricos. Considerando que o tensor de deformação à direita de Cauchy-Green é definido por

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}} = \underline{\underline{\mathbf{F}}}^t \cdot \underline{\underline{\mathbf{F}}} \quad (4.33)$$

Logo, considerando a expressão (4.32) tem-se que

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}} = \underline{\underline{\mathbf{U}}}^t \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}}^t \cdot \underline{\underline{\mathbf{Q}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{U}}} = \underline{\underline{\mathbf{U}}}^2 \quad (4.34)$$

e a partir da decomposição espectral ou projeção própria de $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$, a seguinte expressão pode ser escrita como

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}} = \lambda_i^2 \underline{\underline{\mathbf{N}}}_i \otimes \underline{\underline{\mathbf{N}}}_i = \underline{\underline{\mathbf{U}}}^2 \quad (4.35)$$

onde λ_i^2 e $\underline{\mathbf{N}}_i$ são os auto-valores e auto-vetores de $\underline{\mathbf{C}}$, respectivamente. Assim, o tensor ortogonal é avaliado por

$$\underline{\mathbf{Q}} = \underline{\mathbf{F}} \cdot \underline{\mathbf{U}}^{-1} = \underline{\mathbf{F}} \cdot (\lambda_i^{-1} \underline{\mathbf{N}}_i \otimes \underline{\mathbf{N}}_i) \quad (4.36)$$

O tensor transformação utilizado na formulação co-rotacional é obtido considerando que $\underline{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{Q}}^t$. A Figura 4.4 mostra como uma base co-rotacional é anexada à quadratura em uma sequência de configurações equilibradas. Para cada ponto da quadratura existe

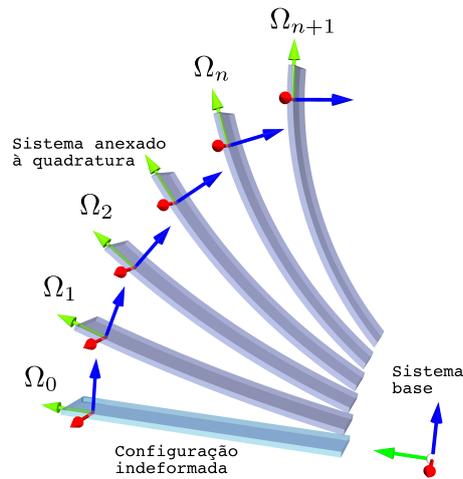


Figura 4.4: Quadratura-anexada à base.

uma configuração co-rotacionada onde as componentes de tensão-deformação são medidas como apresentado na Figura 4.5. A configuração co-rotacionada $\hat{\Omega}$ varia em cada ponto

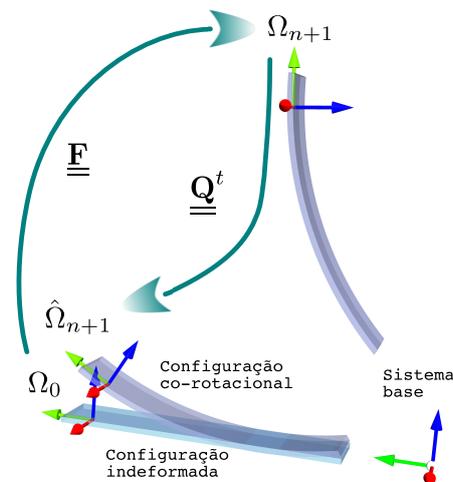


Figura 4.5: Decomposição polar e base co-rotacional.

da quadratura como mostrado nas Figuras 4.4 e 4.5. Para cada ponto individual da

quadratura, sua configuração co-rotacionada é obtida através de um movimento de corpo rígido da configuração do elemento base.

4.5 Modelo numérico para análise IsoGeométrica não linear – estática e dinâmica

Na análise por elementos finitos, elementos são representados nos domínios de integração (*parent*) e físico, onde a geometria e os graus de liberdade são definidos em termos dos seus valores nodais. Ainda, as funções de base empregadas no método dos elementos finitos são, usualmente, interpoladoras, as quais podem assumir valores positivos assim como valores negativos (ver, e.g. [Bathe \(1995\)](#)). Por outro lado, a análise IsoGeométrica baseada em NURBS utiliza funções de base NURBS, onde os pontos de controle são definidos na expectativa de controlar a geometria e o campo de solução. Dois conceitos acerca da malha numérica podem ser identificados: a malha (ou rede) de controle e a malha física, observando que a malha de controle é não conforme à geometria real em geral. A malha de controle se parece a uma malha de elementos finitos construída com elementos multilineares.

Duas definições adicionais são necessárias e deve ser observadas no que concerne à malha física: a malha de remendos (*patch mesh*) e a malha de nós (*knot mesh*). Os remendos podem ser entendidos como macro-elementos (união de várias entidades geométricas, e.g., dois sólidos NURBS) os quais possuem representação nos domínios de integração e físico. A malha de nós é caracterizada por um conjunto de nós que implica na definição do espaço de índices de um remendo, onde um período de nós não nulo e um nó com multiplicidade maior do que um podem ser identificados. Na malha de nós, onde a quadratura numérica toma lugar, o domínio resulta definido, e estão definidas as relações entre os domínios de integração e físico.

Problemas da Elasto-estática podem ser formulados com um caso especial da primeira lei de Cauchy do movimento, a qual é usualmente referida como a equação de equilíbrio. Ainda, a conservação de massa e de energia devem ser imposta sobre o domínio (ver [Malvern \(1969\)](#)). Considerando uma descrição cinemática Lagrangiana clássica em um sistema de coordenadas cartesianas e na ausência de mudanças de temperatura e forças de inércia,

as equações de conservação de massa e de momento são reduzidas às seguintes expressões

$$\int_{\Omega_0} \rho(\underline{\mathbf{X}}, t_0) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho(\underline{\mathbf{x}}, t) \, d\Omega \quad (4.37a)$$

$$\mathbf{div} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} + \underline{\mathbf{b}} = \underline{\mathbf{0}} \quad \text{em } \Omega \quad (4.37b)$$

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\bar{\mathbf{u}}} \quad \text{sobre } \Gamma_D \quad (4.37c)$$

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\bar{\mathbf{t}}} \quad \text{sobre } \Gamma_N \quad (4.37d)$$

e considerando as forças de inércia, a equação do movimento resulta

$$\int_{\Omega_0} \rho(\underline{\mathbf{X}}, t_0) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho(\underline{\mathbf{x}}, t) \, d\Omega \quad \forall t \in [t_0, t] \quad (4.38a)$$

$$\rho \ddot{\underline{\mathbf{u}}} - \mathbf{div} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} - \underline{\mathbf{b}} = \underline{\mathbf{0}} \quad \text{em } \Omega \times [t_0, t] \quad (4.38b)$$

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\bar{\mathbf{u}}} \quad \text{sobre } \Gamma_D \times [t_0, t] \quad (4.38c)$$

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\bar{\mathbf{t}}} \quad \text{sobre } \Gamma_N \times [t_0, t] \quad (4.38d)$$

$$\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}, t_0) = \underline{\bar{\mathbf{u}}}_0 \quad \text{em } \Omega \quad (4.38e)$$

$$\dot{\underline{\mathbf{u}}}(\underline{\mathbf{x}}, t_0) = \underline{\bar{\dot{\mathbf{u}}}}_0 \quad \text{em } \Omega \quad (4.38f)$$

onde $\underline{\mathbf{X}}$ e $\underline{\mathbf{x}}$ são tensores de ordem um, contendo as componentes das coordenadas materiais (X_i) e espaciais (x_i) no sistema cartesiano de coordenadas, respectivamente, t representando o tempo, ρ é a massa específica, $\underline{\mathbf{b}}$ é o tensor de ordem um contendo as forças de campo e $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$ contendo as componentes do tensor de tensões de Cauchy. Os tensores de ordem um $\underline{\bar{\mathbf{u}}}$ e $\underline{\bar{\mathbf{t}}}$ representam as condições de contorno de Dirichlet (variáveis primitivas prescritas - deslocamentos prescritos) e Neumann (derivadas espaciais das variáveis primitivas prescritas - tensão superficial prescrita), sobre os contornos Γ_D e Γ_N , respectivamente. Ainda, $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$ e $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$. As condições iniciais do problemas são dadas por $\underline{\bar{\mathbf{u}}}_0$ e $\underline{\bar{\dot{\mathbf{u}}}}_0$. O problema é definido sobre $\Omega \times [t_0, t]$. Observar que a equação de equilíbrio, a qual é derivada da equação de movimento de Cauchy, é definida considerando a configuração deformada atual do corpo (Ω).

Quando deslocamentos e rotações infinitesimais são observados, uma abordagem geométrica linear pode ser adotada, onde a configuração indeformada do corpo é tomada como referência através da análise. Ainda, o tensor de tensões de Cauchy $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$ e o tensor de deformações infinitesimais $\underline{\underline{\boldsymbol{\epsilon}}}$ são adotados na expectativa de descrever a relação tensão-deformação. Por outro lado, quando deslocamentos e rotações são grandes, um tratamento especial deve ser adotado no intuito de resolver com boa acurácia a análise do equilíbrio.

No presente modelo numérico, problemas geometricamente não lineares são analisados considerando uma abordagem co-rotacional apresentada na seção 4.4, onde tensão e deformação são descritos de acordo com o sistema local de coordenadas localmente anexado à cada ponto da quadratura do espaço físico. Um modelo constitutivo linear hipo-elástico é adotado no intuito de relacionar as medidas de deformação com as medidas de tensão, a qual pode ser escrita como

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{\hat{C}}}^{mat} : \underline{\underline{\hat{\epsilon}}} = \lambda tr(\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}) \underline{\underline{\mathbf{1}}} + 2\mu \underline{\underline{\hat{\epsilon}}} \quad (4.39)$$

onde $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$ e $\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}$ são o tensor de tensões de Cauchy e o tensor de deformações infinitesimais, ambos definidos no sistema co-rotacional. $\underline{\underline{\hat{C}}}^{mat}$ é o tensor elástico de quarta ordem, o qual pode ser descrito em termos das constantes de Lamé λ e μ .

Quando todas as quantidades cinemáticas são computadas, é possível atualizar o tensor de tensões de Cauchy utilizando a taxa de Jaumann, por meio de

$$\underline{\underline{\dot{\hat{\sigma}}}} = \underline{\underline{\hat{C}}}^{mat} : \underline{\underline{\dot{\hat{\epsilon}}}} - \underline{\underline{\hat{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\hat{\Omega}}} + \underline{\underline{\hat{\Omega}}} \cdot \underline{\underline{\hat{\sigma}}} \quad (4.40)$$

Caso as forças de inércia sejam negligenciadas, i.e., elasto-estática, aplicando o método de resíduos ponderados de Bubnov-Galerkin em soma com o teorema da Divergência de Green-Gauss sobre a equação de momento dada na expressão (4.37), a seguinte expressão é obtida

$$\int_{\Omega} \underline{\underline{\delta \epsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{\underline{\delta \mathbf{u}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{b}}} d\Omega + \int_{\Gamma} \underline{\underline{\delta \mathbf{u}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}} d\Gamma \quad (4.41)$$

onde $\underline{\underline{\mathbf{t}}}$ é um tensor de ordem um representando a tensão superficial Ω e Γ são, respectivamente, o domínio e a superfície que define o contorno do domínio.

Caso as forças de inércia sejam consideradas, i.e., elasto-dinâmica, aplicando o princípio de Hamilton (o qual é equivalente a considerar a forma fraca obtida por Bubnov-Galerkin aplicada às equações governantes 4.38 acrescida do amortecimento viscoso oriundo do material e/ou estrutural) a seguinte expressão é obtida

$$\int_{t_0}^t \left(\int_{\Omega} \rho \underline{\underline{\delta \dot{\mathbf{u}}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\mathbf{u}}}} d\Omega + \int_{\Omega} \underline{\underline{\delta \mathbf{u}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{d}}} d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\underline{\delta \epsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} d\Omega \right) dt = - \int_{t_0}^t \left(\int_{\Omega} \underline{\underline{\delta \mathbf{u}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{b}}} d\Omega + \int_{\Gamma} \underline{\underline{\delta \mathbf{u}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}} d\Gamma \right) dt \quad (4.42)$$

onde $\underline{\underline{\mathbf{d}}}$ é uma força não conservativa, ou o amortecimento viscoso $\underline{\underline{\mathbf{d}}} = \chi \underline{\underline{\dot{\mathbf{u}}}}$.

O sistema de equações de momento semi-discreto é obtido considerando que este é discreto no espaço mas contínuo no tempo. A discretização espacial é realizada pelo método de Bubnov-Galerkin aplicado no contexto da análise IsoGeométrica, onde as variações dos deslocamentos assumem o rol das funções ponderadoras. Por integração por partes do primeiro termo do lado esquerdo da expressão 4.42 (variação da energia cinética) obtém-se a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \left(\int_{\Omega} \rho \delta \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\dot{\mathbf{u}}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \delta \underline{\mathbf{u}} \cdot \chi \underline{\dot{\mathbf{u}}} \, d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\delta \boldsymbol{\epsilon}} : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, d\Omega \right) dt = \\ - \int_{t_0}^t \left(\int_{\Omega} \delta \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{b}} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \delta \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{t}} \, d\Gamma \right) dt \end{aligned} \quad (4.43)$$

onde χ é o coeficiente de amortecimento viscoso.

4.5.1 Discretização espacial para análise IsoGeométrica não linear – estática e dinâmica

Na expectativa de definir o conceito de elemento no contexto da análise isogeométrica, a geometria, bem como o campo de deslocamentos e a variação do campo de deslocamentos são representados com a seguinte expressão

$$\underline{\mathbf{x}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{x}_a; \quad (4.44a)$$

$$\underline{\mathbf{u}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{u}_a; \quad \delta \underline{\mathbf{u}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \delta \mathbf{u}_a \quad (4.44b)$$

$$\underline{\dot{\mathbf{u}}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \dot{\mathbf{u}}_a; \quad \delta \underline{\dot{\mathbf{u}}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \delta \dot{\mathbf{u}}_a \quad (4.44c)$$

$$\underline{\ddot{\mathbf{u}}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \ddot{\mathbf{u}}_a; \quad \delta \underline{\ddot{\mathbf{u}}}(\underline{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\underline{\boldsymbol{\xi}}) \delta \ddot{\mathbf{u}}_a \quad (4.44d)$$

onde R_a é a função de base NURBS relacionada com o ponto de controle a , a qual é definida em função do vetor de coordenadas paramétricas $\underline{\boldsymbol{\xi}} = \{\xi, \eta, \zeta\}$, e n_{np} é o número global de pontos de controle. Os vetores de nós correspondentes às diferentes direções no espaço paramétrico devem ser especificados definindo períodos de nós não nulos onde os elementos são identificados. Observar que ao contrário dos modelos de elementos finitos, onde a geometria e o campo de solução são aproximados a nível de elemento, as respectivas aproximações dadas em análise isogeométrica (ver Equações (4.44)) são não nulas em vários períodos de nós, embora funções de base NURBS apresentem suporte local. As

funções de base e seus respectivos pontos de controle possuem atuação em diferentes elementos simultaneamente, desde que as funções de base se estendem sobre $p+1$ períodos de nós, onde $p+1$ é o grau das funções de base (ver seção 3.7). Conseqüentemente, a equação de momento (para a estática) dada pela expressão (4.41) pode ser reescrita como

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega_e} \underline{\delta \boldsymbol{\epsilon}} : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, d\Omega_e = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \left(\int_{\Omega_e} \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{b}} \, d\Omega_e + \int_{\Gamma_e} \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{t}} \, d\Gamma_e \right) \quad (4.45)$$

e a equação de momento (para a dinâmica) dada pela expressão (4.43) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \left(\int_{\Omega} \rho \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \underline{\ddot{\mathbf{u}}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \chi \underline{\dot{\mathbf{u}}} \, d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\delta \boldsymbol{\epsilon}} : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, d\Omega \right) dt = \\ - \int_{t_0}^t \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \left(\int_{\Omega} \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{b}} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \underline{\delta \mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{t}} \, d\Gamma \right) dt \end{aligned} \quad (4.46)$$

onde Ω_e e Γ_e , são o domínio do elemento e e a superfície que define o contorno do domínio do elemento, respectivamente, na malha física. Considerando $n+1$, $m+1$ e $l+1$ como o número de funções de base correspondente às direções paramétricas ξ , η e ζ , respectivamente, e seus respectivos graus polinomiais definidos por p , q e r . O elemento e é definido pela determinação dos índices em que o período de nós correspondente não nulos começa no espaço de índices, i.e.,

$$e \in [\xi_i, \xi_{i+1}] \times [\eta_i, \eta_{i+1}] \times [\zeta_i, \zeta_{i+1}] \quad (4.47)$$

onde $p+1 \leq i \leq n$, $q+1 \leq j \leq m$ e $r+1 \leq k \leq l$. O número total de elementos n_{el} , no qual o campo espacial é discretizado no domínio paramétrico, é definido por

$$n_{el} = (n - p + 1) \cdot (m - q + 1) \cdot (l - r + 1) \quad (4.48)$$

O espaço de índices também determina as coordenadas NURBS, as quais são associadas aos índices de um nó que define um vértice de nó na malha física. Conseqüentemente, examinando o espaço de índices é possível determinar exatamente quais as funções de base que possuem suporte no elemento e , com a seguinte expressão

$$\begin{aligned} N_\alpha(\xi) \text{ possui suporte sobre } \Xi \quad \forall \alpha \in [i-p, i] \\ N_\beta(\eta) \text{ possui suporte sobre } \mathcal{H} \quad \forall \beta \in [j-q, j] \\ N_\gamma(\zeta) \text{ possui suporte sobre } \mathcal{Z} \quad \forall \gamma \in [k-r, k] \end{aligned} \quad (4.49)$$

As coordenadas NURBS também são utilizadas para especificar o nó em que uma determinada função de base começa a ter suporte. Considerando estas coordenadas NURBS, um esquema de numeração global para as funções de base trivariantes e os respectivos pontos de controle pode ser formulado por

$$\begin{aligned}\bar{N}_A(\xi, \eta, \zeta) &= N_i(\xi) N_j(\eta) N_k(\zeta) \\ \forall (i, j, k) &\in [0, n] \times [0, m] \times [0, l]\end{aligned}\quad (4.50)$$

onde

$$\begin{aligned}A &= (m + 1)(n + 1)k + (n + 1)j + i + 1 \\ \forall (\xi, \eta, \zeta) &\in [\xi_i, \xi_{i+p+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+q+1}] \times [\zeta_k, \zeta_{k+r+1}]\end{aligned}\quad (4.51)$$

Um esquema de numeração para atribuir números aos elementos pode ser definido com

$$\begin{aligned}e &= (k - r)(m - q + 1)(n - p + 1) + \\ &+ (j - q)(n - p + 1) + (i - p + 1)\end{aligned}\quad (4.52)$$

O número total de pontos de controle e suas respectivas funções de base NURBS resultam estabelecidas a partir do número de componentes do vetor de nós e o grau polinomial das funções de base adotado. Por isso, existem dois procedimentos de refinamento não comutativos a inserção de nós (*knot refinement*) e o aumento do grau das funções de base (*degree elevation*).

No intuito de estabelecer uma estrutura local para a assemblagem em uma estrutura global, de acordo com os procedimentos FEM, as dimensões locais das matrizes e vetores são primeiramente especificadas considerando que o número de funções de base n_{en} que atual localmente sobre um elemento é definido por

$$n_{en} = (p + 1)(q + 1)(r + 1)\quad (4.53)$$

Um esquema de numeração local para identificar as funções de base é formulado, o qual é baseado nas coordenadas NURBS utilizadas para determinar o local de um dado elemento. Com o número do elemento determinado, a função de base local número 1 é atribuída à função de base global com coordenadas NURBS (i, j, k) que define a posição do elemento no espaço de índices. As demais funções de base globais do presente elemento são enumeradas pela atribuição de números de 2 até n_{en} , onde uma sequência decrescente sobre as funções de base globais é considerada. Estes números locais são atribuídos em uma sequência decrescente na direção ξ , até que $A - p$ seja obtido, com A definido pela

expressão (4.51). Sobre as direções paramétricas η e ζ são definidos mesmos procedimentos descendentes. Uma vez que as funções de base se estendem sobre diferentes elementos, os correspondentes pontos de controle determinam as conectividade do elemento, estas são utilizadas para a montagem do sistema global das equações governantes na forma matricial.

Substituindo as aproximações NURBS relacionadas ao campo de deslocamentos, dado pela expressão (4.44), na relação constitutiva, uma aproximação a nível de elemento para relação tensão-deformação, utilizando a notação de Voigt, é obtida, onde as componentes de deformação vem dadas por

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{u} \quad (4.54)$$

Sendo \mathbf{B} um operador diferencial que tem por objetivo gerar a parte simétrica do tensor gradiente de deslocamentos e \mathbf{u} é o vetor de deslocamentos a nível de elemento (ver Equação (4.44b)). Para a análise geometricamente não linear, \mathbf{B} e \mathbf{u} deve ser avaliados considerando a atual configuração do corpo no sistema de coordenadas co-rotacional ($\hat{\mathbf{B}}$ e $\hat{\mathbf{u}}$, respectivamente).

Introduzindo as expansões das componentes dos deslocamentos e suas correspondentes variações, dadas pelas Equações (4.44), e uma relação dada pela Equação (4.54) na Equação (4.45) e na Equação (4.46), uma equação matricial representando um sistema linear algébrico de equações é obtido para a equação de equilíbrio estático e dinâmico, a qual pode ser expressa como

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{K}^e \mathbf{u} = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}^e \quad (4.55a)$$

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{M}^e \ddot{\mathbf{u}} + \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{C}^e \dot{\mathbf{u}} + \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{K}^e \mathbf{u} = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}^e \quad (4.55b)$$

onde \mathbf{M}^e , \mathbf{C}^e e \mathbf{K}^e são as matrizes de massa, de amortecimento e de rigidez do elementos, respectivamente, e \mathbf{f}^e é o vetor de forças a nível de elemento. As dimensões associadas às matrizes \mathbf{M}^e , \mathbf{C}^e e \mathbf{K}^e e ao vetor \mathbf{f}^e são definidas por $(n_{eq} \cdot n_{eq} \cdot n_{eq})$ e (n_{eq}) , respectivamente, onde $n_{eq} = n_{en} \cdot n_{dof}$, com n_{dof} denotando o número de graus de liberdade dos pontos de controle. O símbolo da união indica o processo de montagem para gerar o sistema global de equações, considerando as contribuições de cada elemento de acordo com a relação das conectividades estabelecidas anteriormente. As matrizes de massa, de amortecimento e de rigidez global são sempre esparsa devido o suporte local de cada função de base.

No regime geometricamente não linear, as equações de momento (Equação (4.55)) devem ser satisfeitas iterativamente utilizando uma abordagem incremental (ver Bathe (1995)), já que as forças internas são dadas como funções da configuração atual do corpo. O equilíbrio da equação não linear é obtido empregando um procedimento de linearização conhecido por método de Newton-Raphson onde o vetor resíduo é submetido à uma expansão em séries de Taylor dentro do incremento $[t, t + \Delta t]$. A Equação (4.55) é então reescrita como

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{K}_{tan}^e(\mathbf{u}^e) \Delta \mathbf{u} = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}_{ext}^e - \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}_{int}^e(\mathbf{u}^e) \quad (4.56a)$$

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{M}^e \ddot{\mathbf{u}} + \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{C}^e \dot{\mathbf{u}} + \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{K}_{tan}^e(\mathbf{u}^e) \Delta \mathbf{u} = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}_{ext}^e - \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{f}_{int}^e(\mathbf{u}^e) \quad (4.56b)$$

onde \mathbf{K}_{tan}^e é a matriz de rigidez tangente e $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u}_{t+\Delta t} - \mathbf{u}_t$. Em cada passo iterativo, as matrizes de massa, de amortecimento, de rigidez tangente e o vetor de forças internas são inicialmente avaliados no sistema de coordenadas co-rotacional de acordo com a seguinte expressão

$$\hat{\mathbf{K}}_{tan}^e = \int_{\hat{\Omega}^e} \hat{\mathbf{B}}^t (\hat{\mathbf{C}}^{mat} + \hat{\mathbf{C}}^{geo}) \hat{\mathbf{B}} d\hat{\Omega}^e; \quad \hat{\mathbf{f}}_{int}^e = \int_{\hat{\Omega}^e} \hat{\mathbf{B}}^t \hat{\boldsymbol{\sigma}} d\hat{\Omega}^e \quad (4.57)$$

onde $\hat{\Omega}^e$ faz referência à configuração atual do elemento e no sistema co-rotacional de coordenadas, $\hat{\mathbf{C}}^{geo}$ e $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ são os tensores relacionados ao tensor taxa de Jaumann e o tensor co-rotacional de tensões, respectivamente, com ambos avaliados no sistema de coordenadas co-rotacional. Na expectativa de resolver o sistema proveniente da equação de equilíbrio não linear, a matriz de rigidez tangente e o vetor de forças internas deve ser obtido no sistema global de coordenadas através de uma transformação objetiva desde o sistema co-rotacional, i.e.,

$$\mathbf{K}_{tan}^e = \mathbf{R}^t \hat{\mathbf{K}}_{tan}^e \mathbf{R}; \quad \mathbf{f}_{int}^e = \mathbf{R}^t \hat{\mathbf{f}}_{int}^e \quad (4.58)$$

onde \mathbf{R} é a matriz de rotação definida na seção 4.4

4.5.2 Integração espacial na análise IsoGeométrica e outras considerações

A integração numérica associada à avaliação da matriz de rigidez do elemento é levada a cabo utilizando a quadratura de Gauss. As integrais definindo os termos da matriz, os quais são inicialmente definidos no espaço físico, são transformada ao espaço paramétrico, e logo ao espaço de integração, onde a integração numérica é realmente levada a cabo.

Considerando que coordenadas no espaço físico, paramétrico e de integração são denotadas por \mathbf{x} , $\check{\xi}$ e $\check{\xi}$, respectivamente, os elementos também podem ser denotados de maneira similar como Ω^e , $\check{\Omega}^e$ e $\check{\Omega}^e$ no espaço físico, paramétrico e de integração. A transformação desde o espaço físico ao espaço de integração, onde a quadratura Gaussiana é realizada, é obtida pelo uso de uma composição de duas transformações consecutivas: o espaço físico é transferido ao espaço paramétrico (através de um mapeamento geométrico) e logo, este é transferido ao espaço de integração (através de um segundo mapeamento), os quais são transformações afins. As derivadas espaciais das funções de base em relação às coordenadas cartesianas são avaliadas pelo teorema da derivada da função composta em relação às coordenadas paramétricas, i.e.,

$$\frac{\partial R}{\partial x_i} = \frac{\partial R}{\partial \check{\xi}_j} \frac{\partial \check{\xi}_j}{\partial x_i} \quad (4.59)$$

onde $(\check{\xi}_1, \check{\xi}_2, \check{\xi}_3) = (\check{\xi}, \check{\eta}, \check{\zeta})$ e o segundo termo do lado direito da Equação (4.59) representa a inversa do jacobiano da transformação linear. Já que a integração é levada a cabo no domínio de integração, o determinante do jacobiano é avaliado por

$$J = \left| \frac{\partial x_i}{\partial \check{\xi}_j} \right| = \left| \frac{\partial x_i}{\partial \check{\xi}_k} \frac{\partial \check{\xi}_k}{\partial \check{\xi}_j} \right| \quad (4.60)$$

onde $(\check{\xi}_1, \check{\xi}_2, \check{\xi}_3) = (\check{\xi}, \check{\eta}, \check{\zeta})$. As coordenadas paramétricas $(\check{\xi}_1, \check{\eta}_2, \check{\zeta}_3)$ relacionadas à quadratura definida no domínio de integração $(\check{\xi}, \check{\eta}, \check{\zeta})$ podem ser obtidas considerando as coordenadas NURBS (i, j, k) associadas com o elemento $e \in [\xi_i, \xi_{i+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+1}] \times [\zeta_k, \zeta_{k+1}]$, sendo a transformação afim

$$\begin{aligned} \check{\xi} &= \xi_i + (\check{\xi} + 1) \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{2} \\ \check{\eta} &= \eta_i + (\check{\eta} + 1) \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{2} \\ \check{\zeta} &= \zeta_i + (\check{\zeta} + 1) \frac{\zeta_{i+1} - \zeta_i}{2} \end{aligned} \quad (4.61)$$

Observar que uma quadratura clássica, como a quadratura de Gauss, sobre funções racionais é uma aproximação.

Quando um modelo numérico baseado em Análise IsoGeométrica é desenvolvida com o método de Bubnov-Galerkin e funções de base NURBS, condições de contorno homogêneas são exatamente imposta pela definição das correspondentes variáveis de controle (funções de base) como zero. O procedimento trivial para impor condições de contorno essenciais é

então obtido, o qual é análogo ao utilizado por modelos de elementos finitos. No presente modelo, as funções de base NURBS são substituídas pelo delta de Kroenecker, aplicando as condições de contorno homogêneas ao campo de deslocamentos, i.e.,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_b) = \sum_{a=1}^{n_{np}} R_a(\boldsymbol{\xi}_b) \mathbf{u}_a = 0 \quad \text{com} \quad R_a(\mathbf{x}_b) = \delta_{ab} \quad (4.62)$$

onde \mathbf{x}_b é um vetor que especifica as coordenadas cartesianas dos pontos de controle com coordenadas paramétricas definidas por $\boldsymbol{\xi}_b$, as quais estão localizadas nos contornos dos nós com condições de contorno essenciais.

Desafortunadamente, para condições de contorno essenciais não homogêneas, erros significativo são obtido se estas condições são aplicadas diretamente às variáveis de controle. Ao contrário de FEA, onde os nós estão localizados nas superfícies da fronteira, na análise isogeométrica é de conhecimento que os pontos de controle não pertencem ao contorno físico do problema. Visto que as funções de base NURBS não são interpoladoras. Para informações adicionais relacionadas à condições de contorno não homogêneas, ver o recente trabalho apresentado por [Wang e Xuan \(2010\)](#).

4.5.3 Integração temporal não linear para análise IsoGeométrica não linear – estática

Para aplicações não lineares envolvendo pontos limites e/ou de bifurcação, uma estratégia diferente deve ser adotada para resolver o problema não linear iterativamente, desde que o método padrão de Newton-Raphson não “atravessa” pontos extremos na curva força-deslocamento. No presente trabalho, uma solução similar à proposta por [Yang e Shieh \(1990\)](#) é empregada, a qual é referida como Método de Controle de Deslocamentos Generalizado (GDCM do acrônimo do inglês *Generalized Displacement Control Method*).

Assumindo que os tensores de deformação e tensão e todas as quantidades cinemáticas são conhecidas ao final do último incremento de tempo $t = t_n$, a solução em $t = t_{n+1}$ pode ser computada com base na solução equilibrada do passo anterior. Um algoritmo descrevendo o cálculo de cada passo executado pelo presente modelo numérico para controle de carregamento é apresentado a seguir.

1. Resolver o sistema de equações lineares definido pela Equação (4.56) assim obtendo a correção do campo de deslocamentos, $\Delta \mathbf{u}^k$ para a k -ésima iteração. Os deslocamentos para o último passo de tempo vem dado por $\Delta \mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^k \Delta \mathbf{u}^\alpha$
2. Atualizar geometria NURBS
3. Laço sobre os elementos e sobre os pontos da quadratura
 - (a) avaliar o tensor ortogonal na configuração atual, Equação (4.36)
 - (b) avaliar o tensor ortogonal na configuração do ponto médio, Equação (4.36)
 - (c) avaliar o incremento de deslocamentos deformacionais no sistema co-rotacional, Equação (4.27)
 - (d) calcular o incremento de deformações relacionado à configuração do ponto médio, Equação (4.24) e atualizar as tensões, Equação (4.40)
 - (e) avaliar a matriz de rigidez do elemento e as forças internas e transforma-las ao sistema global, Equação (4.58)
 - (f) avaliar o vetor resíduo
4. Assemblagem da matriz de rigidez global e o vetor resíduo global
5. Checar a convergência. Se os critérios de convergência não são satisfeitos, retorna ao passo 1, com $k = k + 1$. Caso contrário, procede-se um novo passo de tempo.

4.5.4 Integração temporal não linear para análise IsoGeométrica não linear – dinâmica

Nesta seção é apresentada as integrações não lineares no tempo: α -generalizado ($G\alpha$ - *Generalized- α Method*), proposta por Chung e Hulbert (1993) e estendia à dinâmica dos fluidos por Jansen et al. (1999) e Energia-Momento Generalizado ($GEMM+\xi$ - *Generalized Energy-Momentum Method*) proposto por Kuhl e Crisfield (1999); Kuhl e Ramm (1999). Estes procedimentos podem ser utilizados em qualquer integração não linear no tempo.

Os dois métodos são desenvolvidos em paralelo, uma vez que o GEMM+ ξ é desenvolvido sobre o mesmo esquema que o $G\alpha$.

Definindo o tamanho do passo de tempo Δt , e o passo de tempo n definem-se as aproximações $\mathbf{d}_{n+1} \approx \mathbf{u}(t_{n+1})$, $\mathbf{v}_{n+1} \approx \dot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ e $\mathbf{a}_{n+1} \approx \ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$. No começo de cada passo de tempo, define-se a iteração $i = 0$ e entra-se na fase preditora (*predictor phase*), onde são inicializadas às aproximações.

$$\begin{aligned}\mathbf{d}_{n+1}^i &= \tilde{\mathbf{d}}_{n+1} \\ \mathbf{v}_{n+1}^i &= \tilde{\mathbf{v}}_{n+1} \\ \mathbf{a}_{n+1}^i &= \tilde{\mathbf{a}}_{n+1}\end{aligned}\tag{4.63}$$

onde $\tilde{\mathbf{d}}_{n+1}$, $\tilde{\mathbf{v}}_{n+1}$ e $\tilde{\mathbf{a}}_{n+1}$ podem ser escolhidos de diversas maneira, entretanto estas devem sempre ser consistentes com as Fórmulas de Newmark, i.e.,

$$\tilde{\mathbf{d}}_{n+1} = \mathbf{d}_n + \Delta t \mathbf{v}_n + \frac{(\Delta t)^2}{2} ((1 - 2\beta) \mathbf{a}_n + 2\beta \tilde{\mathbf{a}}_{n+1})\tag{4.64a}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t ((1 - \gamma) \mathbf{a}_n + \gamma \tilde{\mathbf{a}}_{n+1})\tag{4.64b}$$

onde β e γ são parâmetros. Tipicamente as escolhas na prática dos preditores utilizadas são

Preditor Deslocamento Constante

$$\tilde{\mathbf{d}}_{n+1} = \mathbf{d}_n\tag{4.65a}$$

$$\tilde{\mathbf{a}}_{n+1} = -\frac{1}{\beta \Delta t} \mathbf{v}_n - \frac{(1 - 2\beta)}{2\beta} \mathbf{a}_n\tag{4.65b}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} = \text{definido por 4.64b}\tag{4.65c}$$

Preditor Velocidade Constante

$$\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} = \mathbf{v}_n\tag{4.66a}$$

$$\tilde{\mathbf{a}}_{n+1} = -\frac{(1 - \gamma)}{\gamma} \mathbf{a}_n\tag{4.66b}$$

$$\tilde{\mathbf{d}}_{n+1} = \text{definido por 4.64a}\tag{4.66c}$$

Preditor Aceleração Zero

$$\tilde{\mathbf{a}}_{n+1} = \mathbf{0}\tag{4.67a}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t (1 - \gamma) \mathbf{a}_n\tag{4.67b}$$

$$\tilde{\mathbf{d}}_{n+1} = \mathbf{d}_n + \Delta t \mathbf{v}_n + \frac{(\Delta t)^2}{2} (1 - 2\beta) \mathbf{a}_n\tag{4.67c}$$

O preditor de deslocamento constante é o mais utilizado em problemas de contato e atrito, ou problemas que envolvem grandes deformações. O preditor de velocidade constante é usualmente empregado em problemas de interação fluido estrutura. Obviamente diversas outras alternativas podem ser atribuídas, entretanto no presente trabalho, estes três preditores foram implementados.

O algoritmo de integração temporal α -generalizado é definido da seguinte maneira: conhecendo $(\mathbf{d}_n, \mathbf{v}_n, \mathbf{a}_n)$ determinar $(\mathbf{d}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}, \mathbf{a}_{n+1}, \mathbf{d}_{n+\alpha_f}, \mathbf{v}_{n+\alpha_f}, \mathbf{a}_{n+\alpha_m})$, tal que

$$\mathbf{R}(\mathbf{d}_{n+\alpha_f}, \mathbf{v}_{n+\alpha_f}, \mathbf{a}_{n+\alpha_m}) = \mathbf{0} \quad (4.68a)$$

$$\mathbf{d}_{n+\alpha_f} = \mathbf{d}_n + \alpha_f (\mathbf{d}_{n+1} - \mathbf{d}_n) \quad (4.68b)$$

$$\mathbf{v}_{n+\alpha_f} = \mathbf{v}_n + \alpha_f (\mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{v}_n) \quad (4.68c)$$

$$\mathbf{a}_{n+\alpha_m} = \mathbf{a}_n + \alpha_m (\mathbf{a}_{n+1} - \mathbf{a}_n) \quad (4.68d)$$

$$\text{com } \mathbf{v}_{n+1} \text{ e } \mathbf{d}_{n+1} \text{ definidos por } 4.64 \quad (4.68e)$$

onde \mathbf{R} é o resíduo da Equação (4.56b), $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ é o incremento de tempo, α_f , α_m , γ e β são parâmetros reais que definem o método e são selecionados para assegurar uma acurácia de segunda ordem e uma estabilidade incondicional. Para sistemas de equações diferenciais lineares de segunda ordem com coeficientes constantes, Chung e Hulbert (1993) mostraram que o método possui acurácia de segunda ordem se é atendido

$$\gamma = \frac{1}{2} - \alpha_f + \alpha_m \quad (4.69a)$$

$$\beta = \frac{1}{4} (1 - \alpha_f + \alpha_m)^2 \quad (4.69b)$$

enquanto que a estabilidade incondicional requer

$$\alpha_m \geq \alpha_f \geq \frac{1}{2} \quad (4.70)$$

O mesmos resultados (4.69a) e (4.70) foram verificados por Jansen et al. (1999), onde se mantém verdadeira a tese da estabilidade incondicional para sistemas de equações diferenciais lineares de primeira ordem com coeficientes constantes. Na expectativa de obter um controle estrito sobre o amortecimento de altas frequências, α_m e α_f são parametrizados por ρ_∞ , o raio espectral da matriz de amplificação para um passo de tempo infinitamente grande. A dissipação ótima de altas frequências ocorre quando todos

os autovalores da matriz de amplificação assumem o mesmo valor, a saber ρ_∞ . Para o caso de sistemas de segunda ordem, [Chung e Hulbert \(1993\)](#) derivaram

$$\alpha_m^c = \frac{2 - \rho_\infty^c}{1 + \rho_\infty^c} \quad (4.71a)$$

$$\alpha_f^c = \frac{1}{1 + \rho_\infty^c} \quad (4.71b)$$

enquanto que para sistemas de primeira ordem, [Jansen et al. \(1999\)](#) obtiveram

$$\alpha_m^j = \frac{1}{2} \left(\frac{3 - \rho_\infty^j}{1 + \rho_\infty^j} \right) \quad (4.72a)$$

$$\alpha_f^j = \frac{1}{1 + \rho_\infty^j} \quad (4.72b)$$

onde os super-índices indicam quantidades vindas de dois diferentes métodos. As equações acima descritas mostram que para o mesmo valor de ρ_∞ (i.e., $\rho_\infty^c = \rho_\infty^j$) existe uma inconsistência entre α_m^c e α_m^j . Esta inconsistência pode ser eliminada atribuindo $\rho_\infty^c = \rho_\infty^j = 1$, o caso de zero dissipação de altas frequências correspondendo à regra do ponto médio, entretanto isto não é suficientemente robusto para análises não lineares.

Para o caso de uma equação diferencial linear ordinária de segunda ordem, [Chung e Hulbert \(1993\)](#) apresentam os autovalores da matriz de amplificação para um passo de tempo infinitamente grande

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \lambda = \left\{ \frac{-1 + \alpha_m - \alpha_f}{1 + \alpha_m - \alpha_f}, \frac{-1 + \alpha_m - \alpha_f}{1 + \alpha_m - \alpha_f}, 1 - \frac{1}{\alpha_f} \right\} \quad (4.73)$$

substituindo (4.71) em 4.73 obtém-se

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \lambda = \{-\rho_\infty, -\rho_\infty, -\rho_\infty\} \quad (4.74)$$

Isto implica em que o raio espectral da matriz de amplificação nunca deve exceder a magnitude da unidade. Naturalmente, todo este rigorismo não faz sentido nenhum na análise não linear, uma vez que a matriz de amplificação para o caso linear é diferente da matriz de amplificação para o caso não linear.

Para resolver as Equações (4.68a-4.68e) emprega-se o método de Newton-Raphson, o qual pode ser visto como um algoritmo de duas fases, preditor-multi-corretor. Como já comentado, diversas opções existem para a fase preditora. Assumindo que os tensores de deformação e tensão e todas as quantidades cinemáticas são conhecidas ao final do último incremento de tempo $t = t_n$, a solução em $t = t_{n+1}$ pode ser computada com base

na solução equilibrada do passo anterior. Assumindo um raio espectral ρ_∞ , calculam-se os parâmetros do método α_f e α_m . Um algoritmo descrevendo o cálculo de cada passo executado pelo presente modelo numérico é apresentado a seguir

1. **Fase preditora:**

opta-se por um preditor $\begin{cases} \text{Equações 4.65} \\ \text{Equações 4.66} \\ \text{Equações 4.67} \end{cases}$ estimando $(\mathbf{d}_{n+1}^0, \mathbf{v}_{n+1}^0, \mathbf{a}_{n+1}^0)$

2. **Fase multi-corretora:** repetir os seguintes passos para $i = 0, \dots, i_{max}$

(a) avaliar $(\mathbf{d}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i)$

$$\mathbf{d}_{n+\alpha_f}^i = (1 - \alpha_f) \mathbf{d}_n + \alpha_f \mathbf{d}_{n+1}^i \quad (4.75a)$$

$$\mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i = (1 - \alpha_f) \mathbf{v}_n + \alpha_f \mathbf{v}_{n+1}^i \quad (4.75b)$$

$$\mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i = (1 - \alpha_m) \mathbf{a}_n + \alpha_m \mathbf{a}_{n+1}^i \quad (4.75c)$$

(b) utilizar as soluções intermediárias para a montagem do resíduo e as equações de massa e momento e as correspondentes matrizes do sistema linear

$$\frac{d\mathbf{R}^i}{d\mathbf{d}_{n+1}} \Delta \mathbf{d} = -\mathbf{R}_{n+1}^i \quad (4.76)$$

onde

$$\mathbf{R}_{n+1}^i = \mathbf{R}(\mathbf{d}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i)$$

$$\mathbf{G}^\alpha \mathbf{R}_{n+1}^i = \mathbf{M} \mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i + \mathbf{C} \mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i + \mathbf{G}^\alpha \mathbf{N}_{n+\alpha_f}^i - \mathbf{f}_{n+\alpha_f}^{ext} \quad (4.77)$$

$$\mathbf{G}^{\text{EMM}+\xi} \mathbf{R}_{n+1}^i = \mathbf{M} \mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i + \mathbf{C} \mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i + \mathbf{G}^{\text{EMM}+\xi} \mathbf{N}_{n+\alpha_f+\xi}^i - \mathbf{f}_{n+\alpha_f}^{ext}$$

sendo \mathbf{N} o vetor de forças internas e $\mathbf{f}_{n+\alpha_f}^{ext} = (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_n^{ext} + \alpha_f \mathbf{f}_{n+1}^{ext}$ o vetor de forças externas avaliado no ponto generalizado intermediário.

$$\frac{d\mathbf{R}^i}{d\mathbf{d}_{n+1}} = \frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{d}_{n+1}}(\mathbf{d}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{v}_{n+\alpha_f}^i, \mathbf{a}_{n+\alpha_m}^i) \quad (4.78)$$

o cálculo da derivada total $\frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{d}_{n+1}}$ é descrito a seguir.

(c) com o sistema da Equação 4.76 resolvido, incrementam-se as variáveis

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{n+1}^{i+1} &= \mathbf{d}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{d} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{i+1} &= \mathbf{v}_{n+1}^i + \frac{\gamma}{\beta \Delta t} \Delta \mathbf{d} \\ \mathbf{a}_{n+1}^{i+1} &= \mathbf{a}_{n+1}^i + \frac{1}{\beta (\Delta t)^2} \Delta \mathbf{d} \end{aligned} \quad (4.79)$$

3. Checar a convergência. Se os critérios de convergência não são satisfeitos, retorna ao passo 1, com $i = i + 1$. Caso contrário, procede-se um novo passo de tempo.

A diferença entre os métodos $G\alpha$ e $GEMM+\xi$ é a forma em que se avaliam as forças internas, e as forças internas avaliadas de maneiras diferentes, levam a matrizes tangentes diferentes.

Realizando a derivada total da Equação (4.77), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{d}_{n+1}} &= \frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{d}_{n+\alpha_f}} \frac{d\mathbf{d}_{n+\alpha_f}}{d\mathbf{d}_{n+1}} \\ &+ \frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{v}_{n+\alpha_f}} \frac{d\mathbf{v}_{n+\alpha_f}}{d\mathbf{v}_{n+1}} \frac{d\mathbf{v}_{n+1}}{d\mathbf{d}_{n+1}} \\ &+ \frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{a}_{n+\alpha_m}} \frac{d\mathbf{a}_{n+\alpha_m}}{d\mathbf{a}_{n+1}} \frac{d\mathbf{a}_{n+1}}{d\mathbf{d}_{n+1}} \end{aligned} \quad (4.80)$$

e das Equações (4.68), facilmente obtém-se

$$\frac{d\mathbf{R}}{d\mathbf{d}_{n+1}} = \frac{\alpha_m}{\beta(\Delta t)^2} \mathbf{M} + \frac{\gamma\alpha_f}{\beta\Delta t} \mathbf{C} + \mathbf{K}_{tan} \quad (4.81)$$

No método $G\alpha$ as forças internas e a matriz de rigidez tangente no ponto intermediário generalizado são avaliadas de acordo com a seguinte expressão:

$${}^{G\alpha}\mathbf{N}_{n+\alpha_f}^i = (1 - \alpha_f) \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_n) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\mathbf{u}}_n) d\hat{\Omega} + \alpha_f \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) d\hat{\Omega} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} {}^{G\alpha}\mathbf{K}_{n+\alpha_f}^{tan} &= \alpha_f (K_m + K_g) \\ &= \alpha_f \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) (\hat{\mathbf{C}}^{mat} + \hat{\mathbf{C}}^{geo}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1})) \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) d\hat{\Omega} \end{aligned} \quad (4.83)$$

enquanto que no método $GEMM+\xi$ as forças internas e a matriz de rigidez tangente no ponto intermediário generalizado são avaliadas de acordo com a seguinte expressão:

$${}^{GEMM+\xi}\mathbf{N}_{n+\alpha_f+\xi}^i = \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) [(\alpha_f - \xi) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\mathbf{u}}_n) + (\alpha_f + \xi) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1})] d\hat{\Omega} \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} {}^{GEMM+\xi}\mathbf{K}_{n+\alpha_f+\xi}^{tan} &= (\alpha_f + \xi) K_m + \alpha_f K_g \\ &= (\alpha_f + \xi) \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{C}}^{mat} \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) d\hat{\Omega} \\ &+ \alpha_f \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{C}}^{geo}(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) d\hat{\Omega} \\ &\approx (\alpha_f + \xi) \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{C}}^{mat} \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) d\hat{\Omega} \\ &+ \alpha_f \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{B}}^t(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{C}}^{geo}(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}) d\hat{\Omega} \end{aligned} \quad (4.85)$$

onde, no GEMM+ ξ , um parâmetro de dissipação adicional é utilizado, de forma que as forças internas são deslocadas do ponto intermediário definido no $G\alpha$, de $t_{n+\alpha_f} \rightarrow t_{n+\alpha+\xi}$. Este parâmetro de Armero-Petocz [Armero e Petocz \(1998\)](#) melhora a estabilidade numérica.

$$\xi = \frac{1 - \rho_\infty}{2 + 2\rho_\infty} \quad (4.86)$$

Ainda cabe observar que o termo material da matriz de rigidez foi modificado afim de obter uma matriz simétrica.

4.5.5 Energia total, momento linear e angular

Adicionalmente às quantidades básicas do elemento, como forças internas, matriz de rigidez tangente e matriz de massa, a energia total e o momento são calculados em uma rotina de pós-processamento, no intuito de checar às propriedades de conservação do algoritmo investigado. Para julgamento da estabilidade do algoritmo precisa-se ter conhecimento da energia total ao final de cada passo de tempo. A energia total E é dada como a soma da energia cinética K e a energia interna de deformação U

$$E = K + U \quad (4.87a)$$

$$K = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, d\Omega \quad (4.87b)$$

$$U = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\boldsymbol{\epsilon}}} \, d\Omega \quad (4.87c)$$

Na expectativa de julgar a qualidade da integração temporal, o momento linear L e o momento angular J são avaliados para cada configuração intermediária que o corpo assume.

$$\underline{\mathbf{L}} = \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{u}} \, d\Omega \quad (4.88a)$$

$$\underline{\mathbf{J}} = \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \times \dot{\mathbf{u}} \, d\Omega \quad (4.88b)$$

4.5.6 Análise da convergência

A análise da convergência pode ser utilizada eficientemente para observar instabilidades numéricas assim como para qualificar a eficiência do algoritmo. Com esta premissa, define-se a razão de convergência ε_c de uma dada iteração a partir do erro em deslocamentos ε_u^k

para iteração k , ou para o erro em forças ε_f^k , como

$$\varepsilon_u \stackrel{\text{def}}{=} \|\Delta \underline{\mathbf{u}}\|_2 / \|\underline{\mathbf{u}}_{n+1}^{k+1} - \underline{\mathbf{u}}_{n+1}\|_2 \quad (4.89a)$$

$$\varepsilon_f \stackrel{\text{def}}{=} \|\underline{\mathbf{f}}_{ext}^{n+1} - \underline{\mathbf{f}}_{int}^{k+1}\|_2 / \|\underline{\mathbf{f}}_{ext}^{n+1} - \underline{\mathbf{f}}_{ext}^n\|_2 \quad (4.89b)$$

$$\varepsilon_u^c \stackrel{\text{def}}{=} \ln \varepsilon_u^{k+1} / \ln \varepsilon_u^k \quad (4.89c)$$

$$\varepsilon_f^c \stackrel{\text{def}}{=} \ln \varepsilon_f^{k+1} / \ln \varepsilon_f^k \quad (4.89d)$$

Nos exemplos da seção 4.8, ε_u^c e ε_f^c são analisados contra o número total de iterações, no intuito de, não só analisar a convergência, mas também para visualizar o número total de iterações que uma análise necessitou para ser finalizada.

4.6 Código numérico

Alguns exemplos são apresentados para apresentar o desempenho do código desenvolvido para este trabalho. O código GNUa11 foi desenvolvido em Fortran 2003, o qual é composto pelos seguintes módulos

- GNUiga - Biblioteca Fortran library acerca de Análise IsoGeométrica;
- GNUrbs - Biblioteca Fortran library acerca de NURBS;
- GNUsci - Biblioteca Fortran library acerca de Matemática;
- GNUdat - Variáveis globais do código principal;
- GNUio - Biblioteca Fortran library acerca de input/output de dados, baseado na biblioteca desenvolvida por Stefano Zaghi's GNU/GPL library (LIB_VTK_IO *Fortran library to write and read data according to the VTK standard*).

4.7 Aplicações numéricas – estática

4.7.1 Descrição geral das aplicações numéricas

Os exemplos aqui apresentados são populares problemas de referência para análises geometricamente lineares e geometricamente não lineares para vigas, placas e cascas.

Elementos sólidos são utilizadas neste trabalho para modelar estruturas de paredes finas. As propriedades geométricas e materiais, bem como as cargas são dados de acordo com o sistema SI.

Alguns casos foram gerados a partir de um sólido NURBS quadrático com um elementos, possuindo três pontos de controle em cada direção paramétrica. Existem duas maneiras de refinar este sólido inicial: via inserção de nós (*knot insertion*) e/ou aumento do grau (*degree elevation*). Estas duas alternativas não comutam. Devido às características dos operadores, duas estratégias são testadas. Na primeira abordagem: inicialmente, a geometria é refinada por elevação de grau (conhecido por *refinement p*) sobre a superfície da casca até atingir NURBS quinticas em cada direção paramétrica, enquanto através da espessura foi preservado NURBS quadrática. Finalmente, a inserção de nós (conhecido por *refinement h*) é levada a cabo. Esta sequência de operações produz um sólido com nós que possuem multiplicidade igual à um, i.e., $C^{p-1} \equiv C^4$ sobre os nós. Na segunda abordagem: a geometria é refinada pela inserção de nós seguida da elevação de grau sobre a superfície até atingir NURBS quinticas em cada direção paramétrica, enquanto através da espessura foi preservado NURBS quadrática. Esta sequência de operações produz um sólido com nós que possuem multiplicidade igual à quatro, i.e., $C^{p-1} \equiv C^1$ sobre os nós.

O exemplo da seção 4.7.2 (*a pinched cylindrical shell with free ends*) apresenta um caso linear elástico, onde um estudo paramétrico baseado no grau NURBS foi desenvolvido e os resultados comparados com a solução analítica. Nas Tabelas 4.2 e 4.3 comparações relacionadas ao grau polinomial através da espessura e sobre a superfície são apresentados.

O exemplo da seção 4.7.3 (*a rolled beam*) foi analisado com duas malhas uniformes: msh1 e msh2. A malha msh1 é composta de 16 elementos (com NURBS quinticas) em seu vão e 1 elemento (com NURBS lineares) através da largura e da espessura. A malha de controle é definida por 21 pontos de controle sobre o vão e 2 pontos de controle através da largura e espessura com multiplicidade de nós igual à um. A malha msh2 é composta de 36 elementos (com NURBS quinticas) em seu vão e 1 elemento (com NURBS lineares) através da largura e espessura. A malha de controle é definida por 41 pontos de controle sobre seu vão e 2 pontos de controle através da largura e espessura com multiplicidade de nós igual à um.

O exemplo da seção 4.7.4 (*a twisted beam*) foi analisado com duas malhas uniformes: msh1 e msh2. A malha msh1 é composta de 16 elementos (com NURBS quinticas) em seu vão e 1 elemento (com NURBS quinticas) através da largura e da espessura. A malha de controle é definida por 21 pontos de controle sobre o vão e 6 pontos de controle através da largura e espessura com multiplicidade de nós igual à um. A malha msh2 é composta de 36 elementos (com NURBS quinticas) em seu vão e 2 elemento (com NURBS quinticas) através da largura e espessura. A malha de controle é definida por 41 pontos de controle sobre seu vão e 7 pontos de controle através da largura e espessura com multiplicidade de nós igual à um.

Os exemplos das seções 4.7.5 e 4.7.6 (*a pinched semi-cylindrical shell and a stretched cylindrical shell*, respectivamente) foram analisados com três malhas uniformes: msh1, msh2 e msh3. Todas as malhas foram geradas a partir de um sólido NURBS quadrático possuindo a forma de um oitavo de cilindro com três pontos de controle em cada direção paramétrica. As malhas msh1 e msh2 foram obtidas pela elevação de grau seguido da inserção de nós. Em contra partida, a malha msh3 foi obtida pela inserção de nós seguido da elevação de grau.

A malha msh1 é composta de 16×16 elementos (com NURBS quinticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 21×21 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à um. A malha msh2 é composta de 32×32 elementos (com NURBS quinticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 37×37 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à um. A malha msh3 é composta de 10×10 elementos (com NURBS quinticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 42×42 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à quatro.

O exemplo da seção 4.7.7 (*a pinched cylindrical shell mounted over rigid diaphragms*) foi analisado com cinco malhas: msh1, msh2, msh3, msh4 e msh5. Todas as malhas foram geradas a partir de um sólido NURBS quadrático possuindo a forma de um oitavo de cilindro com três pontos de controle em cada direção paramétrica. As malhas msh1 e

msh2 foram obtidas pela elevação de grau seguido da inserção de nós (mesmas malhas utilizadas na seção 4.7.5 e 4.7.6). Em contra partida, as malhas msh3, msh4 e msh5 foram obtidas pela inserção de nós seguido da elevação de grau (as malhas msh3, msh4 e msh5 foram usadas exclusivamente no exemplo da seção 4.7.7).

A malha msh3 é composta de 16×16 elementos (com NURBS quínticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 66×66 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à quatro. A malha msh4 é composta de 20×20 elementos (com NURBS quínticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 82×82 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à quatro. A malha msh5 é composta de 25×25 elementos (com NURBS quínticas) sobre a superfície e 1 elemento (com NURBS quadráticas) através da espessura. A malha de controle é definida por 102×102 pontos de controle sobre a superfície e 3 pontos de controle através da espessura com multiplicidade de nós igual à quatro.

4.7.2 Problema elástico linear: (*pinched cylindrical shell with free ends*)

Uma investigação inicial é realizada sobre uma aplicação geometricamente linear, na expectativa de ressaltar a sensibilidade dos aspectos mais importantes dos parâmetros que definem a geometria NURBS, tais como o grau, a classe de continuidade e o número de elementos. O exemplo apresentado é um caso de referência (*pinched cylindrical shell with free ends*). Um esboço do exemplo numérico analisado é apresentado na Figura 4.6.

A espessura da casca e o vão são iguais à 0.094 e 10.35, respectivamente, enquanto que o raio interno e o externo são iguais à 4.906 e 5.000, respectivamente. As propriedades materiais são $E = 10.5 \times 10^6$ e $\nu = 0.3125$. Enquanto a carga é igual à 100.

Um resumo dos resultados obtidos aqui com o modelo proposto neste trabalho são apresentados na Tabela 4.2 e na Tabela 4.3, onde comparações são realizadas considerando a presente investigação e a resposta analítica da respectiva aplicação. A Tabela 4.2 apresenta investigações paramétricas realizadas sobre a espessura da casca, onde o número

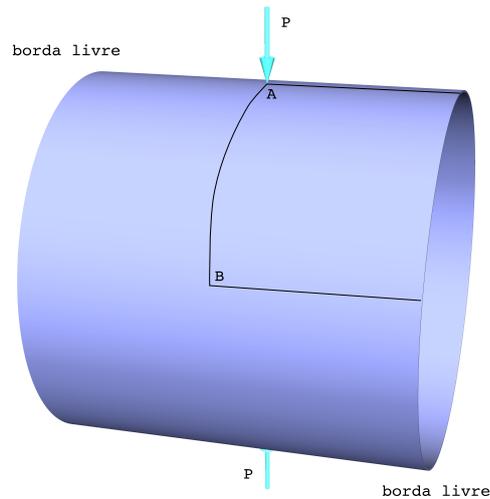


Figura 4.6: Vista esquemática da aplicação numérica proposta para a análise linear.

de elementos and o grau polinomial são alterados considerando dois níveis de refinamento para a discretização da superfície. Por outro lado, a Tabela 4.3 apresenta uma investigação paramétrica realizada sobre a superfície, onde somente o grau polinomial é alterado para uma mesma discretização. A resposta analítica para o problema analisado aqui é relacionado ao ponto 'A' (deslocamento de 0.1137), onde o máximo deslocamento é obtido.

Tabela 4.2: Análise geometricamente linear: comparação realizada para graus diferentes através da espessura

p espessura	t de assemblagem	t na solução	max. u	continuidade	P. Ctrl p/lado
1	0.86	0.20	0.1108	C^4	9
dois	14.80	13.31	0.1088	C^4	21
elementos	59.58	133.74	0.1088	C^4	37
	6.19	121.68	0.1088	C^1	42
2	3.14	0.47	0.1176	C^4	9
um	50.12	13.21	0.1155	C^4	21
elemento	203.36	131.97	0.1155	C^4	37
	20.16	121.92	0.1155	C^1	42
3	15.77	1.91	0.1137	C^4	9
dois	251.79	40.99	0.1154	C^4	21
elementos	1000.00	585.50	0.1154	C^4	37
	100.28	539.65	0.1154	C^1	42
4	15.01	2.39	0.1138	C^4	9
um	238.66	59.30	0.1155	C^4	21
elemento	956.95	587.07	0.1155	C^4	37
	94.43	536.50	0.1155	C^1	42

Tabela 4.3: Análise geometricamente linear: comparação realizada para graus diferentes sobre a superfície

p superfície	t de assemblagem	t na solução	max. u	continuidade	P. Ctrl p/lado
2	0.43	1.58	0.0617	C^1	9
3	1.48	1.66	0.1115	C^2	9
4	7.69	1.82	0.1146	C^3	9
5	15.77	1.91	0.1137	C^4	9

4.7.3 Viga enrolada: (*Rolled beam*)

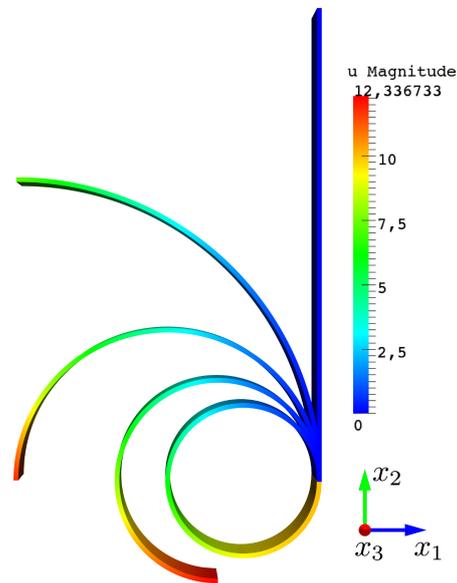
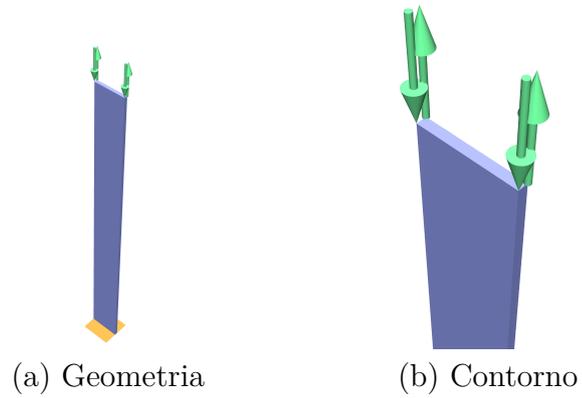
Uma rotação de 2π rad é esperada para uma viga engastada-livre (ver Figura 4.7a) sob um momento $M = \frac{2\pi EI}{L}$ aplicado na extremidade livre, onde E é o módulo de Young e I é o momento de inércia. Já que o modelo não possui graus de liberdade de rotação, o momento é aplicado por meio de um par de forças seguidoras (ver Figura 4.7b).

A espessura da viga, largura e comprimento são iguais à 0.1, 1.0 e 10, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 1.2 \times 10^5$ e $\nu = 0.0$.

Na Figura 4.7c os deslocamentos para os momentos fletores iguais à 25%, 50%, 75% e 100% do momento fletor total são apresentados. A história de carregamento-deslocamento é apresentada na Figura 4.8. Os resultados obtidos com as duas malhas empregadas são idênticos. As diferenças entre os resultados aqui obtidos e os apresentados por [Sze et al. \(2004\)](#) são indistinguíveis.

4.7.4 Viga torcida: (*Twisted beam*)

Assim como o exemplo da seção 4.7.4, este exemplo foi proposto para apresentar o comportamento de estruturas com grandes rotações, a qual para este caso é igual à 2π rad, devido à efeitos da torção. A viga é carregada por um par de forças seguidoras, i.e., a viga está sujeita à um momento puro de torção (ver Figura 4.9a). Se o empenamento não é permitido, i.e., considerando uma seção transversal rígida, o momento de torção deve ser igual à $M_t = \theta \frac{GI_t}{L}$ para obter uma rotação da extremidade livre igual à θ , onde G é o módulo de corte da seção transversal e L é o vão da viga. A constante de torção I_t é definida por $I_t = \frac{bt^3}{3}$, com b e t sendo a largura e a espessura da viga, respectivamente. Não obstante, para elementos sólidos, o empenamento e o encurtamento ocorrem na torção.



(c) Norma dos deslocamentos $\|u\|_2$

Figura 4.7: Análise da viga enrolada.

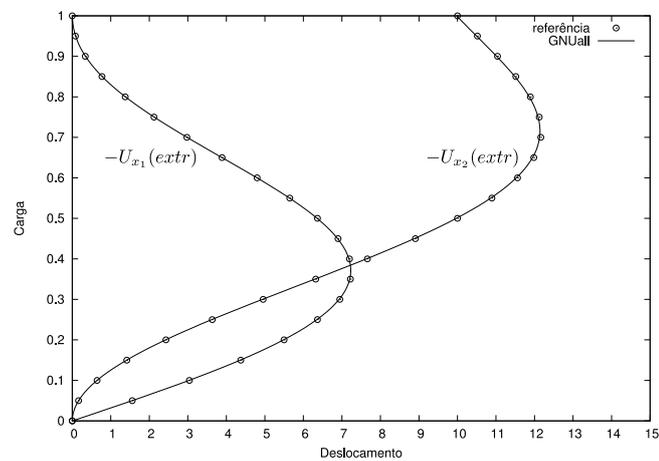


Figura 4.8: História de carregamento-deslocamento para a análise da viga enrolada.

Logo, um momento de torção, o qual gera uma rotação de $2\pi \text{ rad}$ da extremidade livre, é aplicado.

A espessura, a largura e o vão são iguais à 0.1, 0.7 e 40, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 1.2 \times 10^5$ e $\nu = 0.0$.

O momento torsor que gera uma rotação de $2\pi \text{ rad}$ na extremidade livre é igual à $1.227M_t$. A carga que gera este momento M_t é igual à π ; conseqüentemente, a carga aplicada é igual à 1.227π . Na Figura 4.9b uma rotação igual à $2\pi \text{ rad}$ na extremidade livre é apresentada e os resultados em termos dos deslocamentos são apresentados na Figura 4.9c. A história

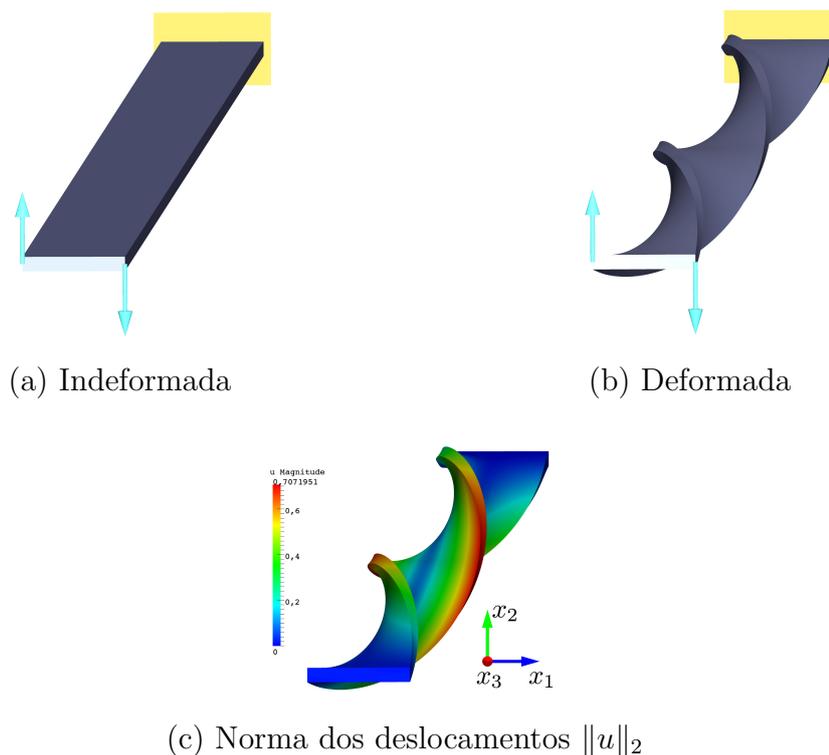


Figura 4.9: Análise da viga torcida.

de carregamento-deslocamento é apresentada na Figura 4.10. Os resultados obtidos com as duas malhas são idênticos.

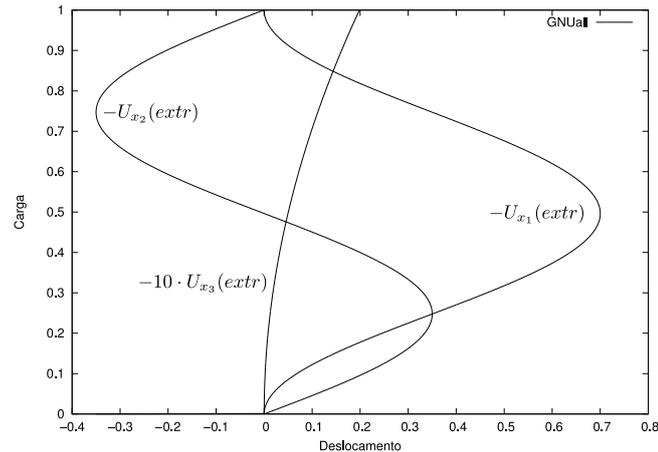


Figura 4.10: História de carregamento-deslocamento para a análise da viga torcida.

4.7.5 Casca semi-cilíndrica comprimida: (*Pinched semi-cylindrical shell*)

Uma casca semi-cilíndrica sujeita a uma força pontual no meio e ao final do bordo livre circunferencial é analisada. O bordo circunferencial oposto é engastado. Ao longo de suas bordas longitudinais, uma deflexão vertical é restringida. Devido à simetria, um meio da casca é modelado.

A espessura e o vão da casca são iguais à 3.0 e 304.8, respectivamente, enquanto que o raio interno e externo são iguais à 100.1 e 103.1, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 2.0685 \times 10^3$ e $\nu = 0.3$. Enquanto a carga é igual à 2000.

Na Figura 4.11a a configuração indeformada é apresentada, enquanto a configuração deformada final é apresentada na Figura 4.11b. Os deslocamentos radiais são dados na Figura 4.11c. A história de carregamento-deslocamento é apresentada na Figura 4.12. Os resultados obtidos com as três malhas relacionadas na seção 4.7.1 são idênticos. As diferenças entre os resultados aqui obtidos e os apresentados por Sze et al. (2004) não são significativas.

4.7.6 Casca cilíndrica tracionada com extremidades livres: (*Stretched cylindrical shell with free ends*)

Um cilindro com as extremidades livre sendo tracionado por um par de forças radiais é analisado. As bordas circunferenciais são livres. Devido à simetria, um oitavo da casca é

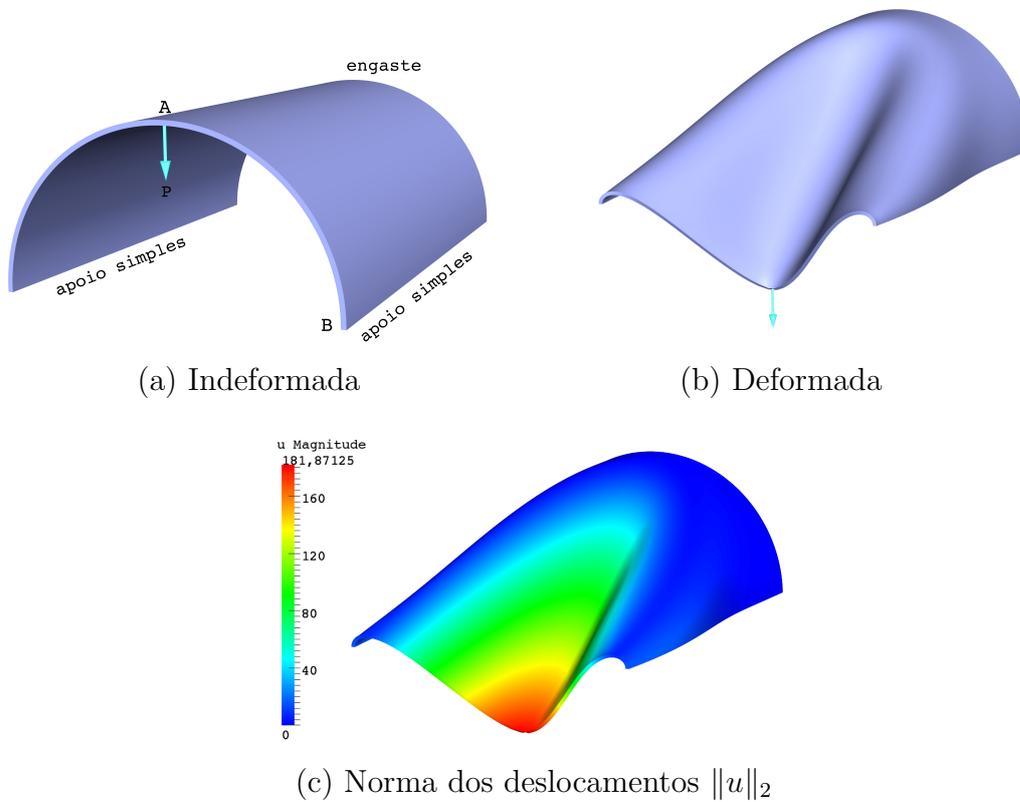


Figura 4.11: Análise da casca semi-cilíndrica comprimida.

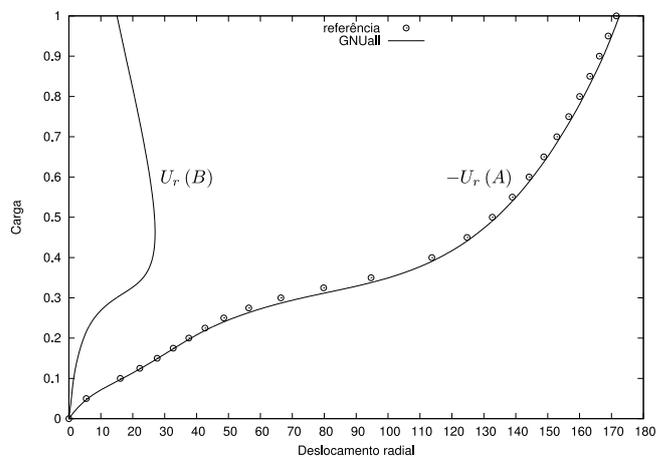


Figura 4.12: História de carregamento-deslocamento para a análise da casca semi-cilíndrica comprimida.

modelado.

A espessura e o vão da casca são iguais à 0.094 and 10.35, respectivamente, enquanto que o raio interno e externo são iguais à 4.906 and 5.000, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 10.5 \times 10^6$ e $\nu = 0.3125$. Enquanto a carga é igual à 40000.

Na Figura 4.13a a configuração indeformada é apresentada, enquanto a configuração deformada final é apresentada na Figura 4.13b. Os deslocamentos são dados na Figura 4.13c. A história de carregamento-deslocamento é apresentada na Figura 4.14. Os

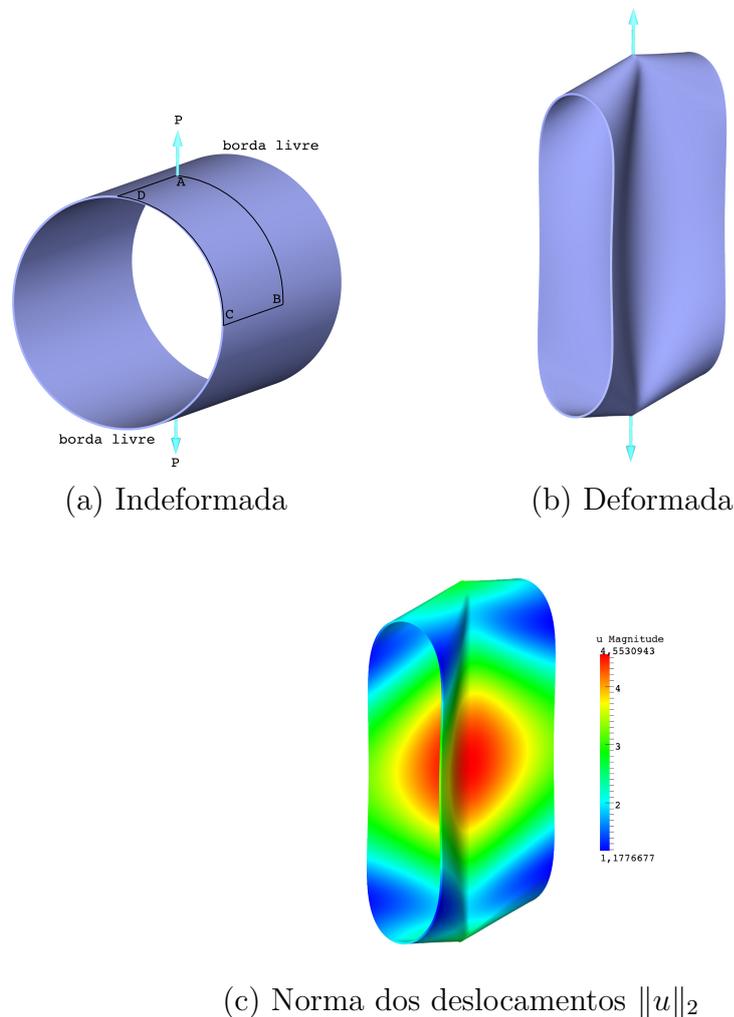


Figura 4.13: Análise da casca cilíndrica tracionada com extremidades livres.

resultados obtidos com as três malhas relacionadas na seção 4.7.1 são idênticas e as diferenças entre os resultados aqui obtidos e os resultados apresentados por Sze et al. (2004) não são significativas.

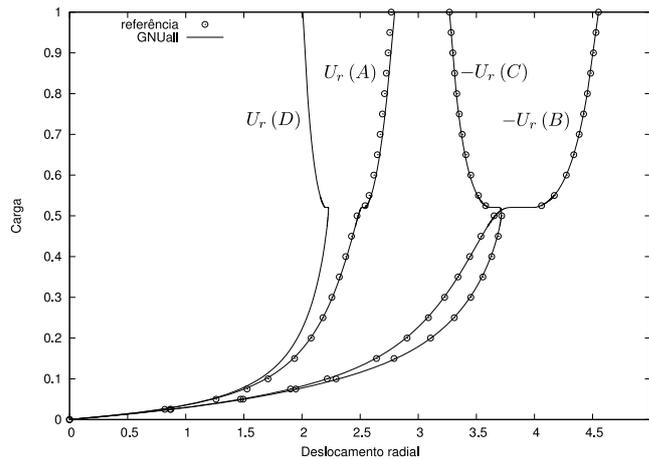


Figura 4.14: História de carregamento-deslocamento para a análise da casca cilíndrica tracionada com extremidades livres.

4.7.7 Casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos: (*Pinched cylindrical shell mounted over rigid diaphragms*)

Uma casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos é analisada. As bordas circunferenciais são restritas na direção radial. Devido à simetria, um oitavo da casca é modelado.

A espessura e o vão da casca são iguais à 1.0 and 200.0, respectivamente, enquanto que o raio interno e externo são iguais à 99.5 e 100.5, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 30.0 \times 10^3$ e $\nu = 0.3$. Enquanto a carga é igual à 12000. Cinco malhas foram testadas, como relatado na seção 4.7.1.

Na Figura 4.15a a configuração indeformada é apresentada, enquanto a configuração deformada final é apresentada na Figura 4.15b. Os deslocamentos são dados na Figura 4.15c. A história de carregamento-deslocamento é apresentada na Figura 4.16. A análise com a malha msh1 falha na adequada representação do campo de deslocamentos. Um comportamento oscilatório é observado com erros não aceitáveis (maiores do que 7.5% quando comparado com os resultados obtidos com as malhas msh4 e msh5). Os resultados apresentados para as análises levadas a cabo com as malhas msh2 e msh3 apresentaram um comportamento suavemente oscilatório (menores do que 2.0% quando comparados com os resultados obtidos com as malhas msh4 e msh5). Resultados obtidos com as malhas msh4 e msh5 são idênticos e as diferenças entre os resultados aqui obtidos e os

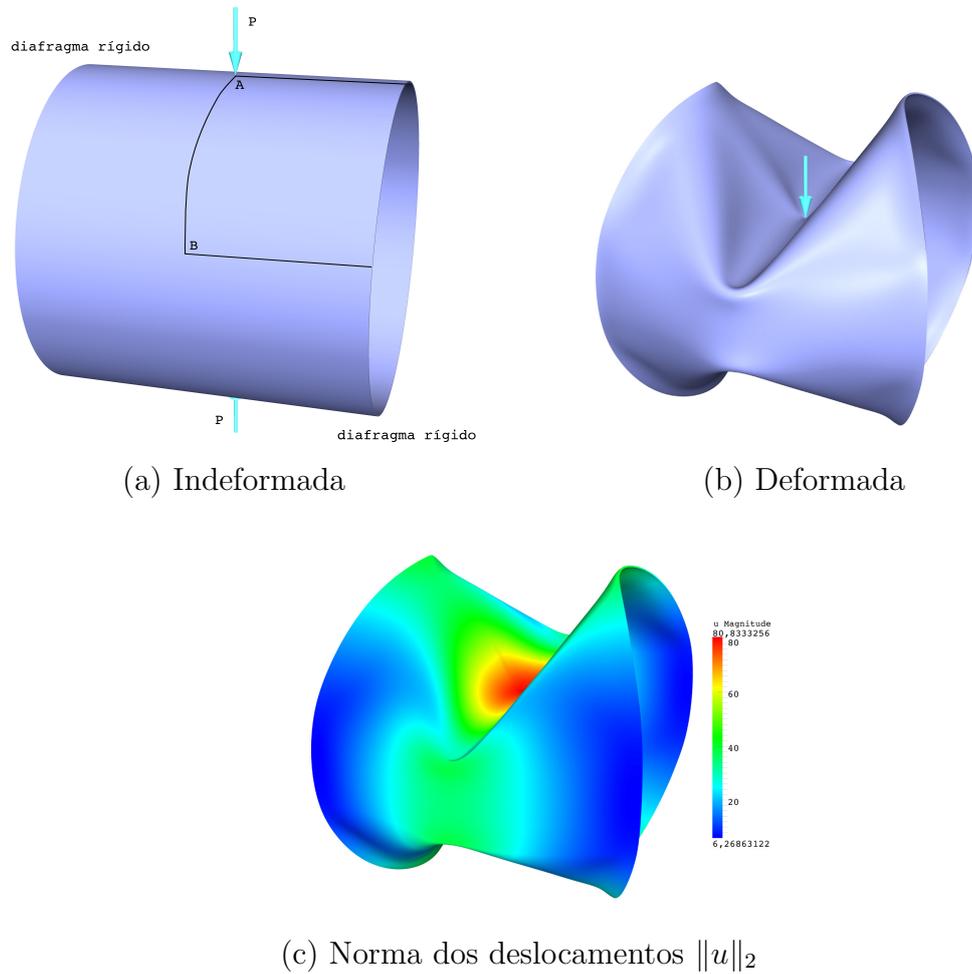


Figura 4.15: Análise da casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos.

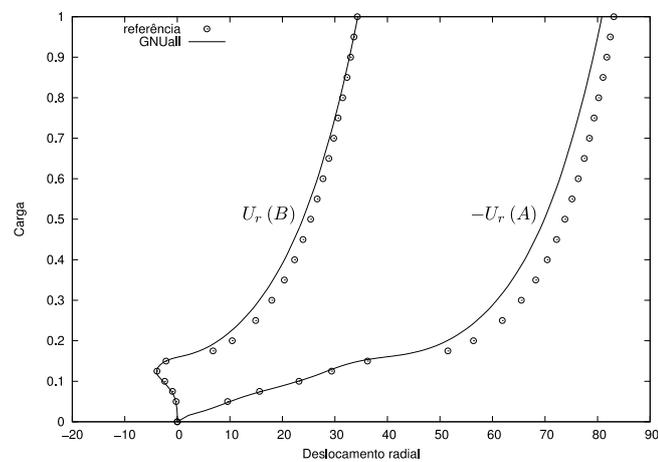


Figura 4.16: História de carregamento-deslocamento para a análise da casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos.

apresentados por [Sze et al. \(2004\)](#) são ligeiramente diferentes.

4.7.8 Compilação dos resultados dos exemplos com comportamento geometricamente linear e não linear

Os exemplos numéricos, com seus respectivos resultados, foram descritos nas seções anteriores. De acordo com a seção 4.7.2, onde previsões para o caso geometricamente linear foram condensadas nas Tabelas 4.2 e 4.3, um resumo dos estudos paramétricos realizados para os casos geometricamente não lineares são apresentados na Tabela 4.4 e na Tabela 4.5. Na Tabela 4.4 uma análise paramétrica acerca da classe de continuidade das funções de base é apresentada para os exemplos (Casca semi-cilíndrica comprimida da seção 4.7.5, Casca cilíndrica tracionada com extremidades livres da seção 4.7.6 e Casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos da seção 4.7.7), enquanto na Tabela 4.5 as malhas NURBS, considerando todos os exemplos geometricamente não lineares, são apresentadas. No estudo sobre o problema geometricamente linear, foi possível observar que quando o grau das funções de base através da espessura é igual a um ($p = 1$), as previsões obtidas com o presente modelo são ligeiramente diferentes da resposta analítica, independentemente do número de pontos de controle e da classe de continuidade utilizada. Por outro lado, melhores resultados foram obtidos para as análises levadas a cabo com grau $p = 2$, onde somente diferenças significativas são observadas quando a superfície da casca é discretizada com 9×9 pontos de controle sobre a superfície. O mesmo comportamento é observado na resposta estrutural quando polinômios de grau $p = 3$ e $p = 4$ são adotados. Observar que a solução analítica para a presente aplicação foi obtida utilizando a teoria de cascas finas.

Para todos os casos investigados aqui, considerando a mesma classe de continuidade (C^4), o tempo requerido pela montagem do sistema de equações e o tempo requerido para resolver o sistema de equações é aumentado com o aumento do número de elementos e o número de pontos de controle. Entretanto, quando a classe de continuidade é reduzida ($C^4 \rightarrow C^1$), o tempo de montagem e o tempo de solução são reduzidos, mesmo quando o número de pontos de controle é aumentado. Neste caso, uma significativa redução no tempo de montagem é observada, já que o número de elementos e o estêncil são reduzidos. O tempo de solução é também reduzido devido a redução do estêncil, o qual é

Tabela 4.4: Análise geometricamente não linear: deslocamento radial do ponto carregado

classe	Casca semi-cilíndrica comprimida (4.7.5)		Casca cilíndrica tracionada com extremidades livres (4.7.6)			Casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos (4.7.7)			
	Msh 1	Msh 2	Msh 3	Msh 1	Msh 2	Msh 3	Msh 4	Msh 5	
NURBS	172.649	172.612	-	2.797	2.798	-	fail (79.381)	79.406	-
C^4	-	-	172.439	-	-	2.800	-	80.180	80.496
C^1	-	-	-	-	-	-	-	-	80.833

Tabela 4.5: Análise geometricamente não linear: resumo das malhas NURBS adotadas na investigação numérica

malhas	Viga enrolada (4.7.3)		Viga torcida (4.7.4)			Casca semi-cilíndrica comprimida (4.7.5)			Casca cilíndrica tracionada com extremidades livres (4.7.6)			Casca cilíndrica comprimida construída sobre diafragmas rígidos (4.7.7)		
	Msh 1	Msh 2	Msh 1	Msh 2	Msh 3	Msh 1	Msh 2	Msh 3	Msh 1	Msh 2	Msh 3	Msh 4	Msh 5	
NURBS	16 × 1	36 × 1	16 × 1	36 × 2	16 × 16	16 × 16	32 × 32	10 × 10	16 × 16	32 × 32	10 × 10	16 × 16	20 × 20	25 × 25
elementos (superfície)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
elementos (espessura)	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
pontos de controle (superfície)	21 × 3	41 × 3	21 × 6	41 × 7	21 × 21	37 × 37	42 × 42	21 × 21	37 × 37	42 × 42	21 × 21	37 × 37	66 × 66	82 × 82
pontos de controle (espessura)	3	3	6	7	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
classe de continuidade	C^4	C^4	C^4	C^4	C^4	C^4	C^4	C^1	C^4	C^4	C^4	C^4	C^1	C^1

reduzido pela redução da classe. O tamanho estêncil é definido pela extensão das funções de base sobre o espaço paramétrico, o qual pode ser alterado de acordo com a classe de continuidade adotada.

Resultado obtido da investigação paramétrica sobre a superfície da casca indicam que polinômios de grau $p = 2$ são insuficientes para reproduzir a solução analítica para o número de pontos de controle utilizado. Talvez este seja reflexo do travamento, que tende a desaparecer a medida em que se aumenta o grau. Após esta análise, o grau é elevado, e uma ótima coerência é obtida com a solução analítica. Observar que o estêncil é aumento com o aumento do grau polinomial, assim o tempo de solução é sempre modificado com a mudança da classe de continuidade das funções de base. Um comportamento similar é observado para o tempo de montagem, o qual é influenciado pelo número de pontos da quadratura adotado para a integração numérica das integrais no elemento e pelo estêncil. Portanto, quando o grau polinomial é aumentado, o tempo de montagem aumenta devido o aumento observado no número de ponto da quadratura e do estêncil. Embora o número de elementos é reduzido quando o grau polinomial é aumentado e o número de pontos de controle é mantido fixo, o tempo de montagem é aumentado neste caso pelo fato de que o número de elementos é linearmente reduzido com o aumento do grau polinomial, enquanto o número de pontos da quadratura aumenta quadraticamente ou cubicamente. É esperado que as diferenças observadas nos tempos de montagem e de solução sejam notórios nas aplicações não lineares, desde que uma abordagem corrotacional requere uma avaliação da matriz de rotação e uma transformação objetiva em cada ponto da quadratura.

Nas investigações paramétricas realizadas sobre as aplicações não lineares é observado que resultados similares foram obtidos para os exemplos das seções 4.7.5-4.7.7 onde diferentes configurações de malhas foram adotadas. Entretanto, algumas instabilidades foram observadas no último exemplo para as configurações das malhas msh1 e msh2 (malhas grosseiras de classe C^4). Na expectativa de analisar este problema com pontos de controle adicionais, as configurações das malhas msh3, msh4 e msh5 foram utilizadas, onde a classe de continuidade original foi reduzida (C^1) para salvar o número de operações computacionais. Com estas novas três configurações, bons resultados foram obtidos em relação aos resultados da referência, onde uma formulação de elementos finitos de cascas

foi empregada. O exemplo da seção 4.7.6 apresentou alguns problemas na convergência, o qual pode ser atribuído a presença de pontos limites com alta rigidez de membrana. Para o exemplo da seção 4.7.7 malhas mais refinadas foram requeridas, o qual é perfeitamente justificável devido às complexas configurações que o corpo assume durante o processo de análise. As oscilações observadas neste exemplo podem ser associadas às deficiências da malha, de acordo com as análises por elementos finitos realizadas por [Hauptmann e Schweizerhof \(1998\)](#); [Sze et al. \(2002\)](#); [Valente \(2004\)](#), para o mesmo exemplo.

As diferenças entre os resultados obtidos com as três malhas são indistinguíveis nos exemplos da seções 4.7.5 e 4.7.6. Entretanto, as diferenças no tempo de CPU são muito significativas. Para as malhas msh1 e msh2 o número de elementos e de pontos da quadratura são maiores que os utilizados em msh3. Por esta razão, o processo de montagem para as malhas msh1 e msh2 custam mais caros que para a malha msh3. Em contra partida, o número de graus de liberdade (*DOF*) para malha msh3 é maior do que o número de graus de liberdade das malhas msh1 e msh2. Entretanto, o estêncil para esta classe C^4 é maior do que o estêncil para a classe C^1 .

4.8 Aplicações numéricas – dinâmica

4.8.1 Descrição geral das aplicações numéricas

Os exemplos aqui apresentados são populares problemas de referência para análises dinâmicas geometricamente não lineares para vigas, placas e cascas. Elementos sólidos são utilizadas neste trabalho para modelar estruturas de paredes finas. As propriedades geométricas e materiais, bem como as cargas são dados de acordo com o sistema SI.

Três exemplos clássicos são apresentados. Os exemplos foram selecionados para analisar a estabilidade e a conservação de energia-momento em função da classe de continuidade e do raio espectral. Estes exemplos podem ser encontrados nos trabalhos de [Kuhl e Ramm \(1996, 1999\)](#); [Bathe e Baig \(2005\)](#); [Balah e Al-Ghamedy \(2005\)](#); [Braun e Awruch \(2008\)](#); [Almeida e Awruch \(2011\)](#).

O exemplo da seção 4.8.2 e 4.8.3 foram utilizadas quatro malhas, de classes C^1 , C^2 , C^3

e C^4 . Todas as malhas possuem $66 \times 3 \times 2$ pontos de controle sobre o comprimento, a espessura e largura, respectivamente. O grau definido nas direções do comprimento, espessura e largura são 5, 2 e 1, respectivamente. As malhas para as classes C^1 , C^2 , C^3 e C^4 possuem $(16 \times 1 \times 1)$, $(21 \times 1 \times 1)$, $(31 \times 1 \times 1)$ e $(61 \times 1 \times 1)$ elementos, respectivamente. As malhas msh1, msh2, msh3 e msh4 são de classes C^1 , C^2 , C^3 e C^4 , respectivamente. Para cada malha foram feitas quatro análises com raios espectrais $\rho_\infty = 0.50, 0.90, 0.95, 1.00$

O exemplo da seção 4.8.4 foi analisado utilizando duas malhas, de classes C^1 e C^4 . A malha msh1 de classe C^4 possui 13×13 pontos de controle sobre a superfície da casca, enquanto sobre a espessura esta possui 5 pontos de controle. O grau definido na superfície é 5, enquanto na espessura é 2. O número de elementos sobre a superfície é (8×8) , enquanto na espessura são utilizados 2 elementos de classe C^0 . A malha msh2 de classe C^1 possui 18×18 pontos de controle sobre a superfície da casca, enquanto sobre a espessura esta possui 5 pontos de controle. O grau definido na superfície é 5, enquanto na espessura é 2. O número de elementos sobre a superfície é (4×4) , enquanto na espessura são utilizados 2 elementos de classe C^0 . Para cada malha foram feitas três análises com raios espectrais $\rho_\infty = 0.50, 0.90, 0.95$.

O exemplo da seção 4.8.4, devido às condições de contorno homogêneas de Dirichlet, as quais são aplicadas na superfície média do sólido de maneira a obter a mesma resposta à obtida com a teoria de cascas, dois elementos de classe C^0 são utilizados sobre a espessura de maneira que os pontos de controle da superfície média se tornam interpoladores. Caso contrário, os apoios da estrutura não coincidiriam com à geometria.

Os exemplos desenvolvidos a seguir foram realizados com os métodos $G\alpha$ e $GEMM+\xi$ para massa consistente e massa diagonalizada. O critério de convergência adotado é de 2×10^{-8} , para as aplicações 4.8.2 e 4.8.3, para aplicação 4.8.4 utilizou-se 2×10^{-8} para os casos $G\alpha$ com $\rho_\infty = 0.90, 0.95$, enquanto que para os casos $G\alpha$ com $\rho_\infty = 0.50$ e $GEMM+\xi$ com $\rho_\infty = 0.90, 0.95$ utilizou-se 5×10^{-8} .

4.8.2 Viga engastada-livre *Bathe*: (*Bathe cantilever beam*)

Apresenta-se a análise da viga engastada livre sob uma carga vertical uniformemente distribuída, apresentado na Figura 4.17a. Este problema foi proposto por [Bathe e Baig](#)

(2005) e foi analisado utilizando elementos de 9 nós para estado plano de deformações, onde o método de Newmark falha na integração temporal deste problema.

O incremento de tempo utilizado é $\Delta t = 0.004$ e a carga no tempo é um pulso triangular, apresentado também na Figura 4.17b. O comprimento, a largura e a espessura da viga são iguais à 0.4, 0.001 e 1.0, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 70.0 \times 10^9$, $\nu = 0.33$ e $\rho = 2700.0$. Quatro malhas foram testadas, para quatro valores de raios espectrais, como relatado na seção 4.8.1.

Os resultados obtidos, em termos de deslocamento e energia, são idênticos aos obtidos por Bathe e Baig (2005). Na Figura 4.18 é apresentada uma sucessão de configurações de

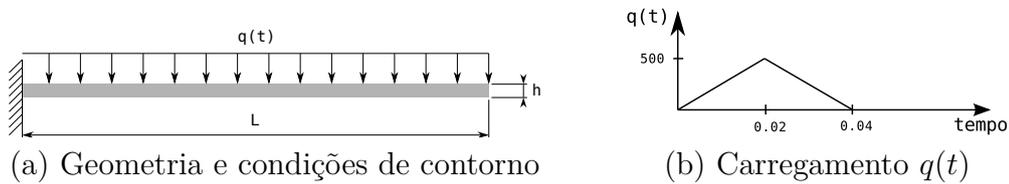


Figura 4.17: Geometria e condições de contorno: viga *Bathe*.

$t = 0.07$ até $t = 0.15$, com $\Delta t = 0.01$, para os integradores temporais $G\alpha$ e $GEMM+\xi$.

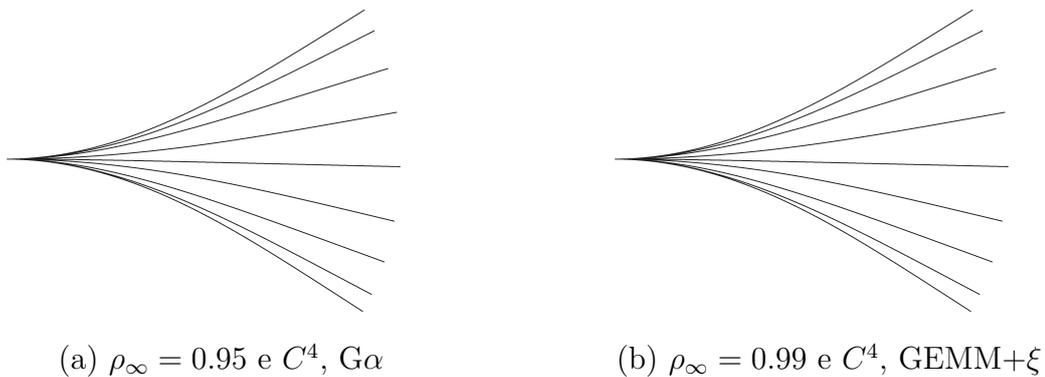


Figura 4.18: Sucessivas configurações: problema 4.8.2.

Para avaliar o nível de dissipação numérica, avaliaram-se diversos raios espectrais para diversas classes de continuidade. Na Tabela 4.6 é apresentado quais análises convergiram durante o tempo de análise e quais análises falharam, assim como o tempo para o qual o algoritmo falhou, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade. Nas figuras apresentadas, i.e., Figuras 4.19-4.46 são apresentados os balanços de energia, momento linear e angular, assim como a análise de convergência

em termos de deslocamentos e forças. Na Tabela 4.7 é apresentado o nível máximo de

Tabela 4.6: Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha.

ρ_∞	C^1	C^2	C^3	C^4
G α massa consistente				
0.95	conv.	conv.	conv.	conv.
0.99	falha $t_f = 1.209s$	falha $t_f = 1.557s$	falha $t_f = 1.791s$	falha $t_f = 1.687s$
1.00	falha $t_f = 1.038s$	falha $t_f = 1.024s$	falha $t_f = 1.027s$	falha $t_f = 1.133s$
G α massa diagonalizada				
1.00	falha $t_f = 1.140s$	falha $t_f = 1.177s$	falha $t_f = 1.206s$	falha $t_f = 1.221s$
GEMM+ ξ massa consistente				
0.99	conv.	conv.	conv.	conv.
1.00	falha $t_f = 0.431s$	falha $t_f = 0.793s$	falha $t_f = 0.790s$	conv.
GEMM+ ξ massa diagonalizada				
1.00	falha $t_f = 0.973s$	falha $t_f = 0.972s$	conv.	falha $t_f = 1.890s$

dissipação observado nas análises, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade.

Tabela 4.7: Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.

ρ_∞	C^1	C^2	C^3	C^4
G α massa consistente				
0.95	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-4}\%$
0.99	$\uparrow 3 \cdot 10^{-2}\%$	$4 \cdot 10^{-3}\%$	$1 \cdot 10^{-2}\%$	$8 \cdot 10^{-4}\%$
1.00	$1 \cdot 10^{-3}\%$	$\uparrow 1 \cdot 10^{-4}\%$	$\uparrow 3 \cdot 10^{-4}\%$	$\uparrow 6 \cdot 10^{-4}\%$
G α massa diagonalizada				
1.00	0.25%	0.11%	0.12%	0.066%
GEMM+ ξ massa consistente				
0.99	0.71%	0.71%	0.71%	0.71%
1.00	$\uparrow 3 \cdot 10^{-3}\%$	$\uparrow 4 \cdot 10^{-3}\%$	$\uparrow 4 \cdot 10^{-3}\%$	$3 \cdot 10^{-3}\%$
GEMM+ ξ massa diagonalizada				
1.00	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$5 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-2}\%$	$4 \cdot 10^{-4}\%$
\uparrow indica aumento de energia.				

Pode-se observar das Tabelas 4.6-4.7 que, para às análises realizadas, não existe uma dependência clara entre a convergência e a classe de continuidade utilizada. Ainda, contra toda expectativa, neste exemplo obteve-se uma dissipação maior para o raio espectral $\rho_\infty = 0.95$ do que para $\rho_\infty = 0.90$. Também pode-se observar na Tabela 4.7, que em algumas análises obteve-se um aumento da energia total, embora relativamente ínfimo,

este fato deve justificar, em parte, a instabilidade numérica observada.

Nas Figuras 4.19a-4.46a, são apresentadas as evoluções das energias ao longo do tempo e no que concerne às dissipações numéricas apresentadas na Tabela 4.7, todas resultaram tão insignificantes que não podem ser observadas nestas figuras. O trabalho externo é apresentado a fim de observar a deterioração ao longo integração temporal.

Nos trabalhos apresentados por Bathe e Baig (2005); Kuhl e Ramm (1996, 1999), sempre é possível observar como uma determinada análise diverge, i.e., observa-se na evolução temporal das energias que estas começam a oscilar até o ponto em que o algoritmo diverge, assim como no campo de deslocamentos. Este comportamento não é observado nas análises aqui realizadas, pode-se interpretar que o algoritmo não diverge, entretanto, em alguns casos, este não consegue atingir a convergência, de forma que a análise é abortada. Visto a dificuldade de prever se o algoritmo não irá atingir a convergência nas Figuras 4.19e,4.19f-4.46e,4.46f, são apresentadas as taxas de convergência em termos de deslocamento e forças. Para estas análises, observa-se que a taxa de convergência em deslocamentos é levemente maior do que em forças. Facilmente, pode-se observar nestas figuras quando uma análise não vai atingir a convergência, visto que a observa-se nos gráficos de convergências que esta se deteriora. Para as simulações realizadas com o método GEMM+ ξ não se observa deterioração na convergência e nem nas energias quando estas falham na integração temporal.

Observar que a taxa de convergência para o método $G\alpha$ é em torno de 2.2 enquanto que a taxa de convergência para o método GEMM+ ξ é em torno de 1.5.

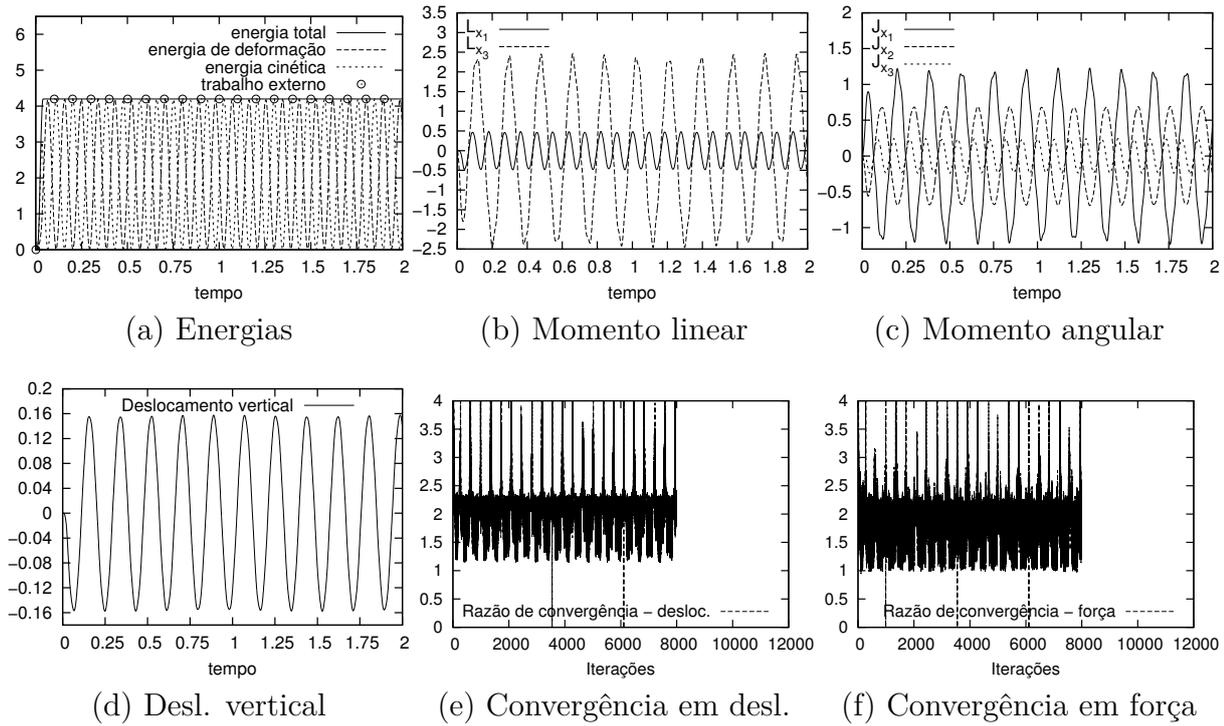


Figura 4.19: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

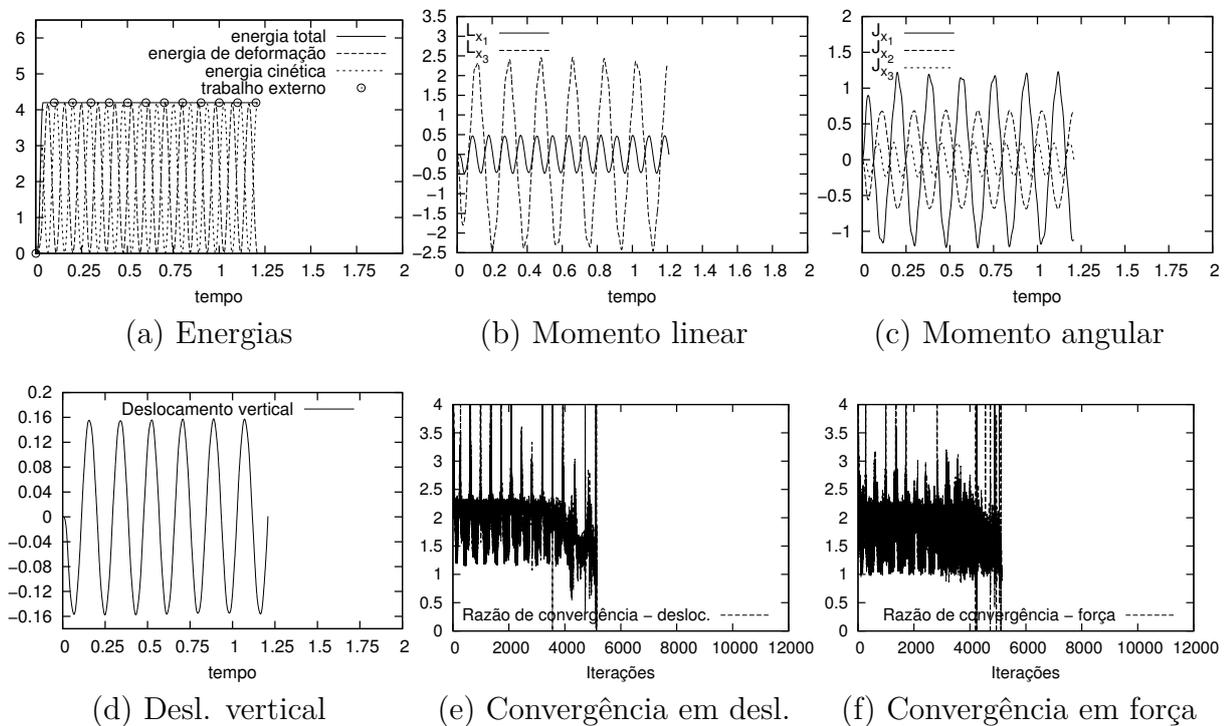


Figura 4.20: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

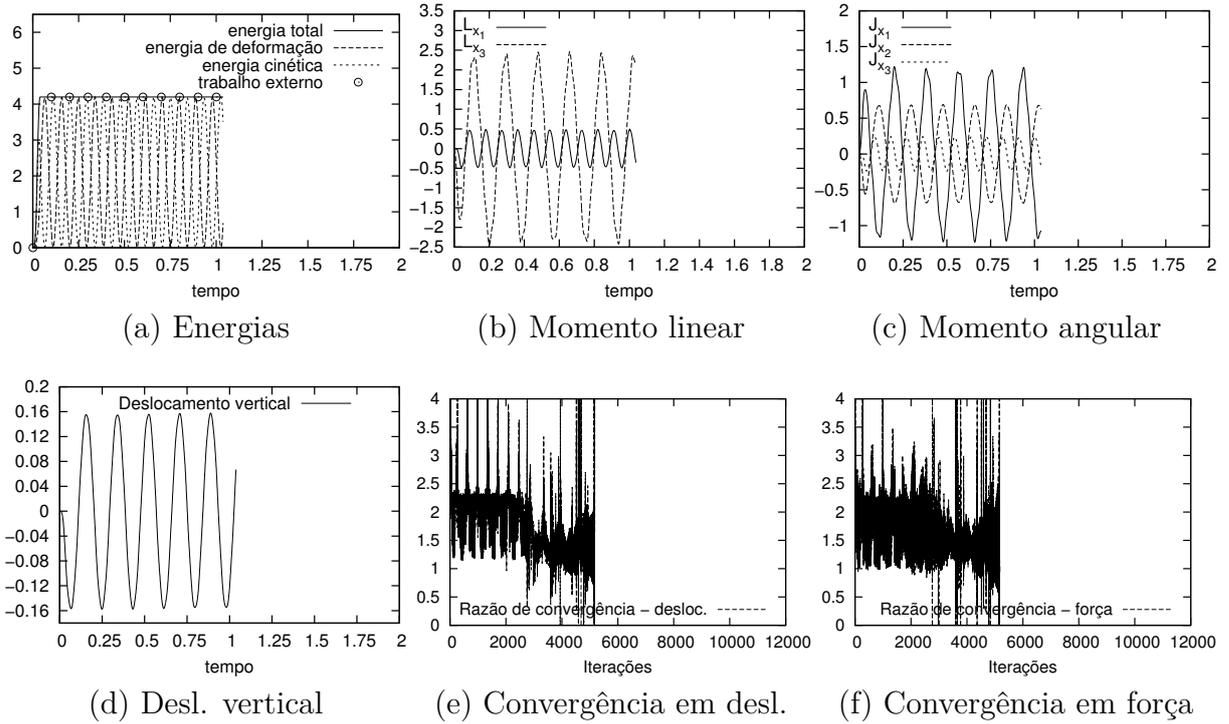


Figura 4.21: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

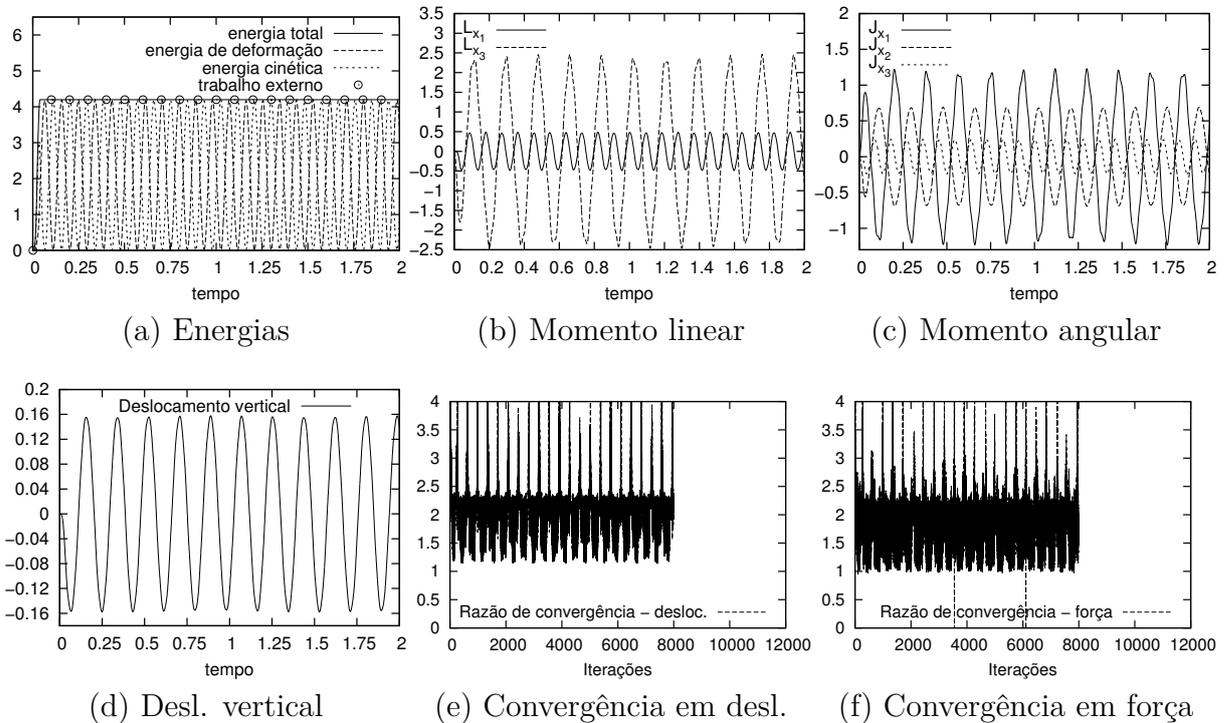


Figura 4.22: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.95$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

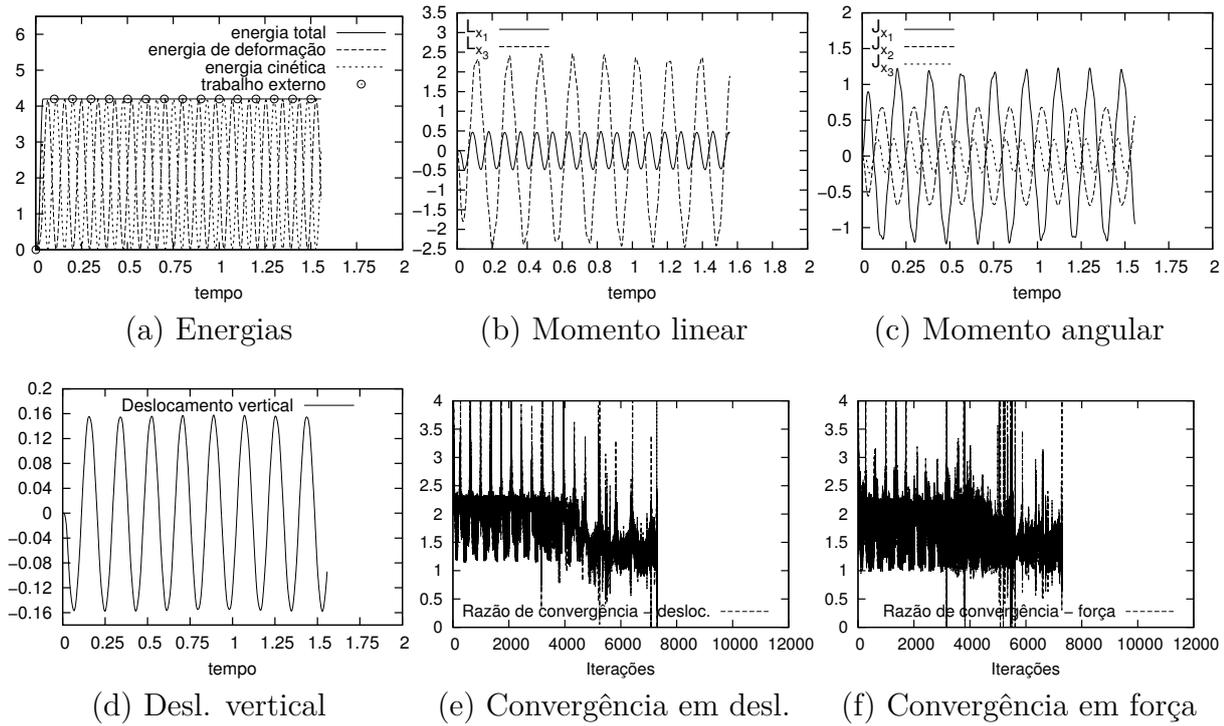


Figura 4.23: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

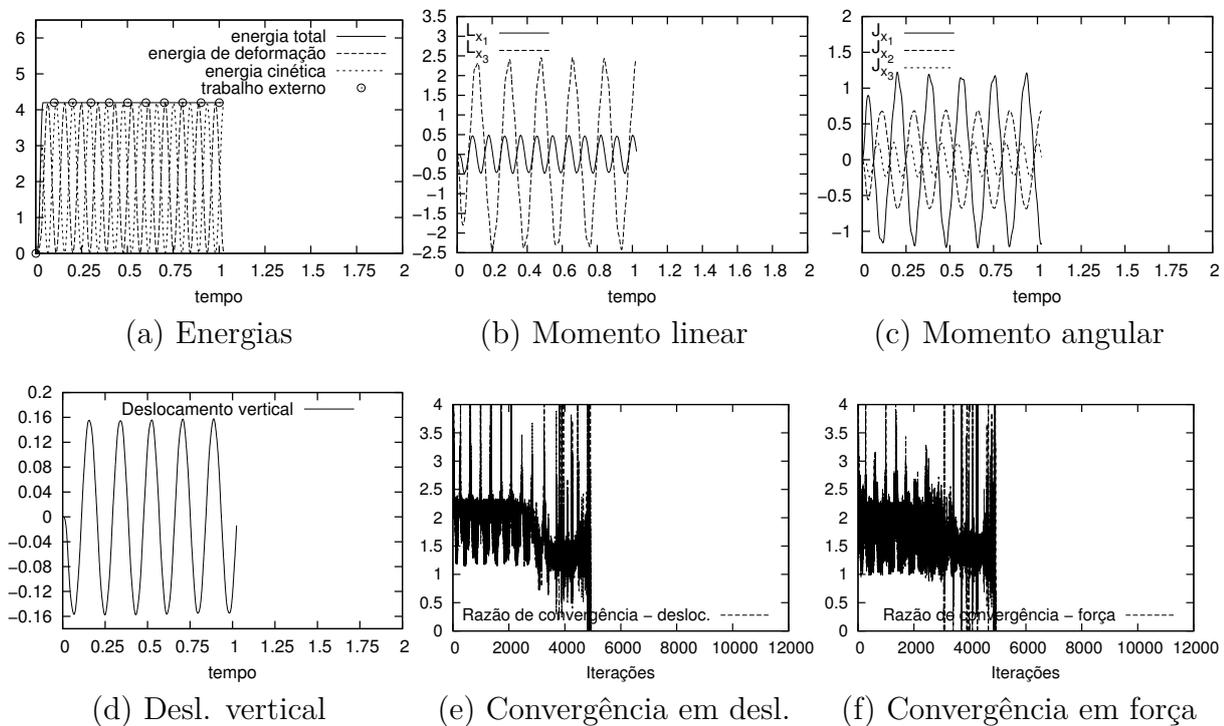


Figura 4.24: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

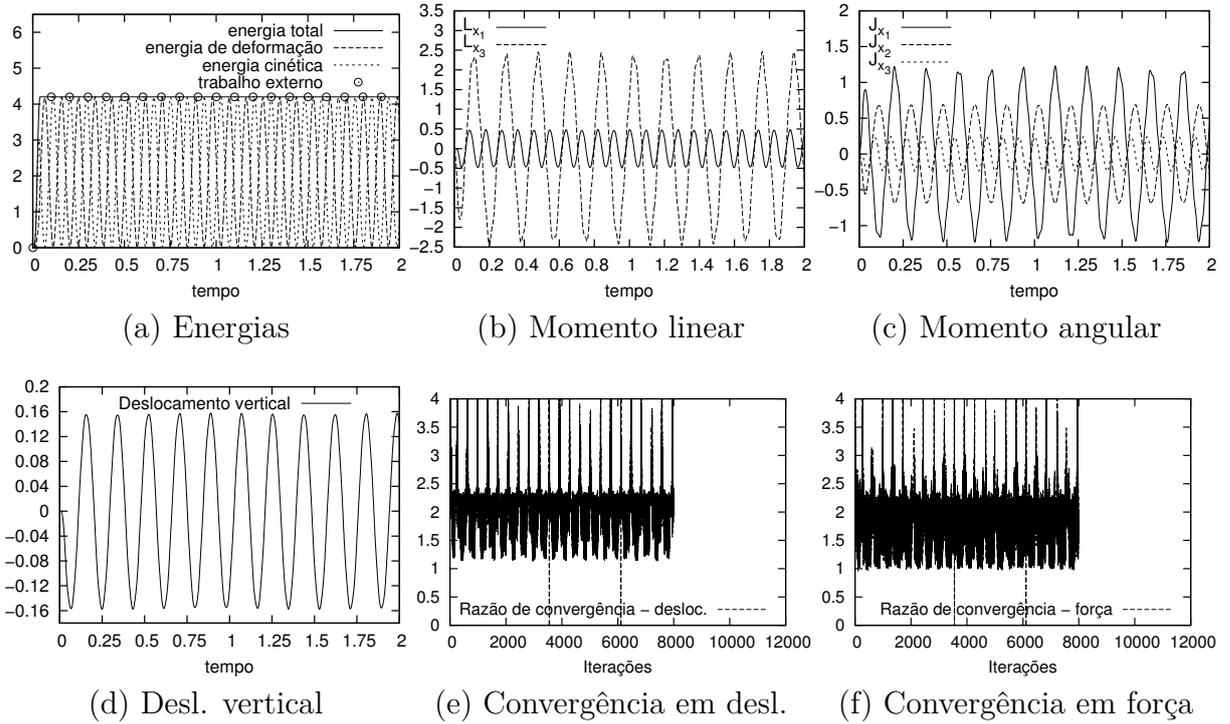


Figura 4.25: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.95$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

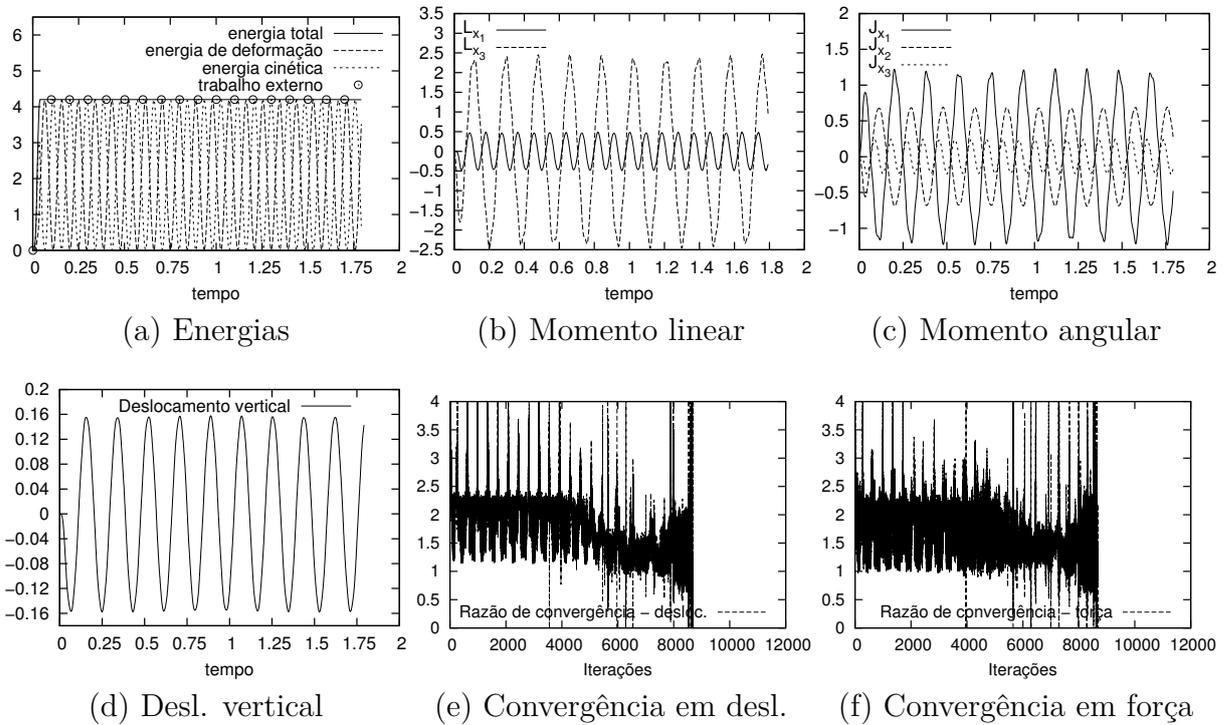


Figura 4.26: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

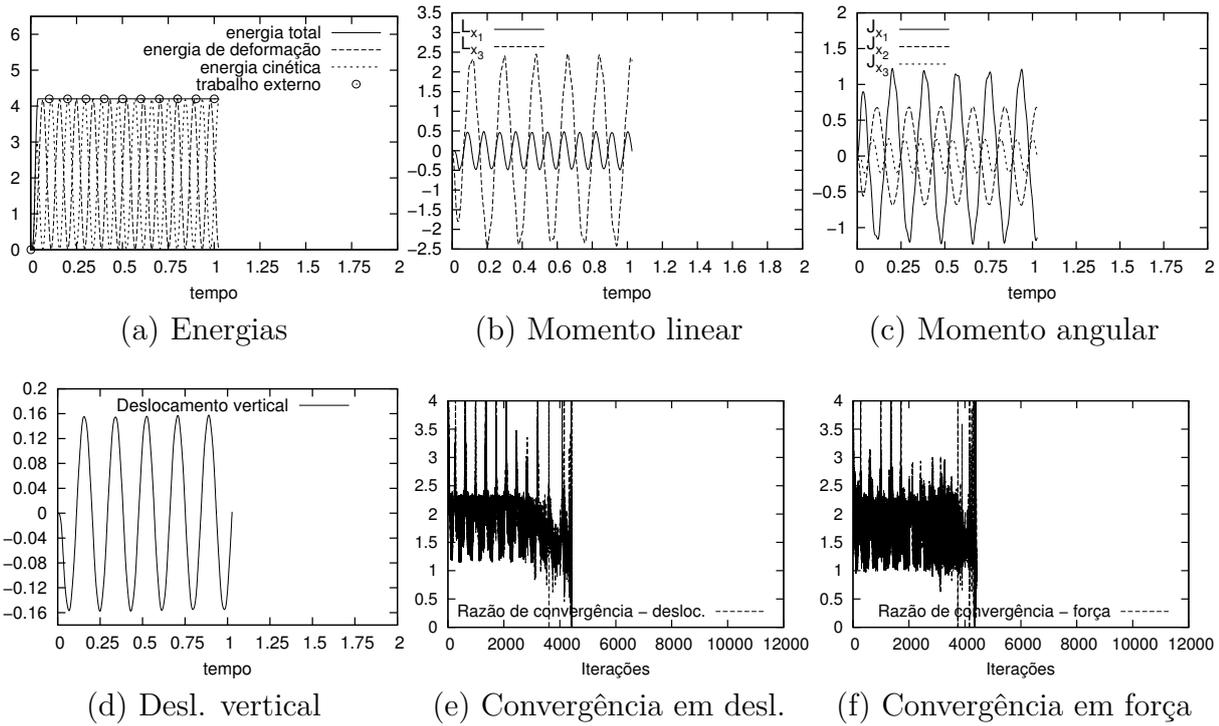


Figura 4.27: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

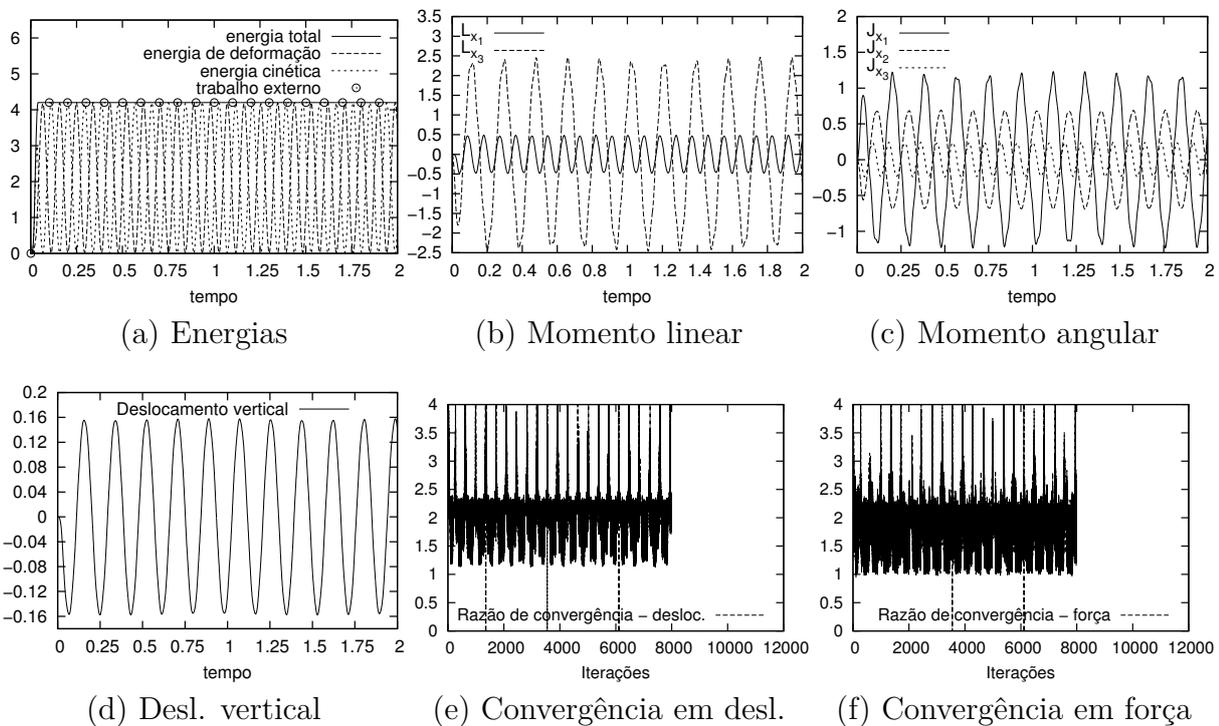


Figura 4.28: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

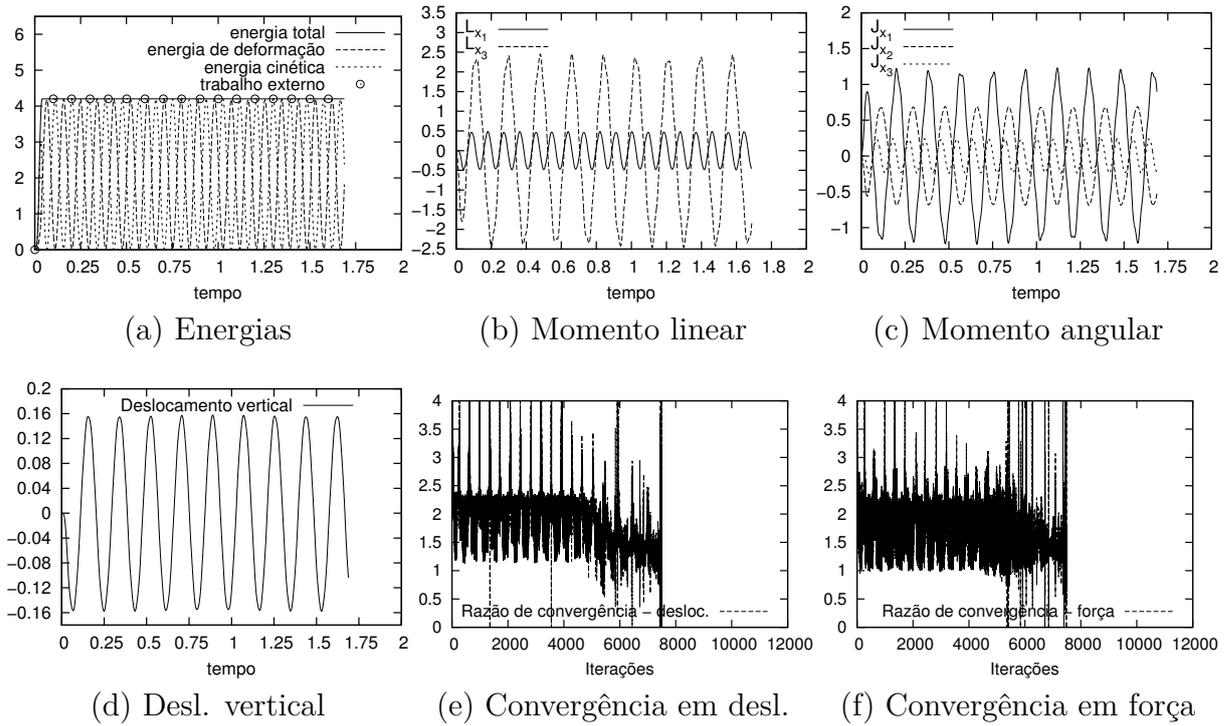


Figura 4.29: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

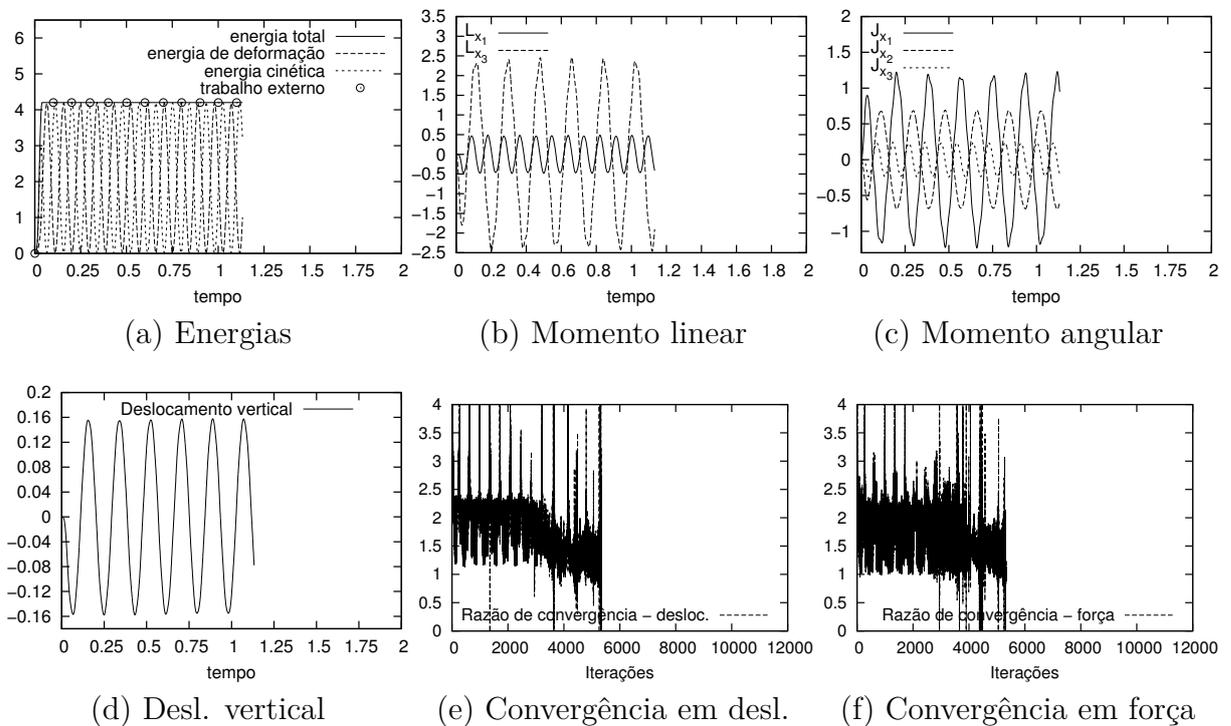


Figura 4.30: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

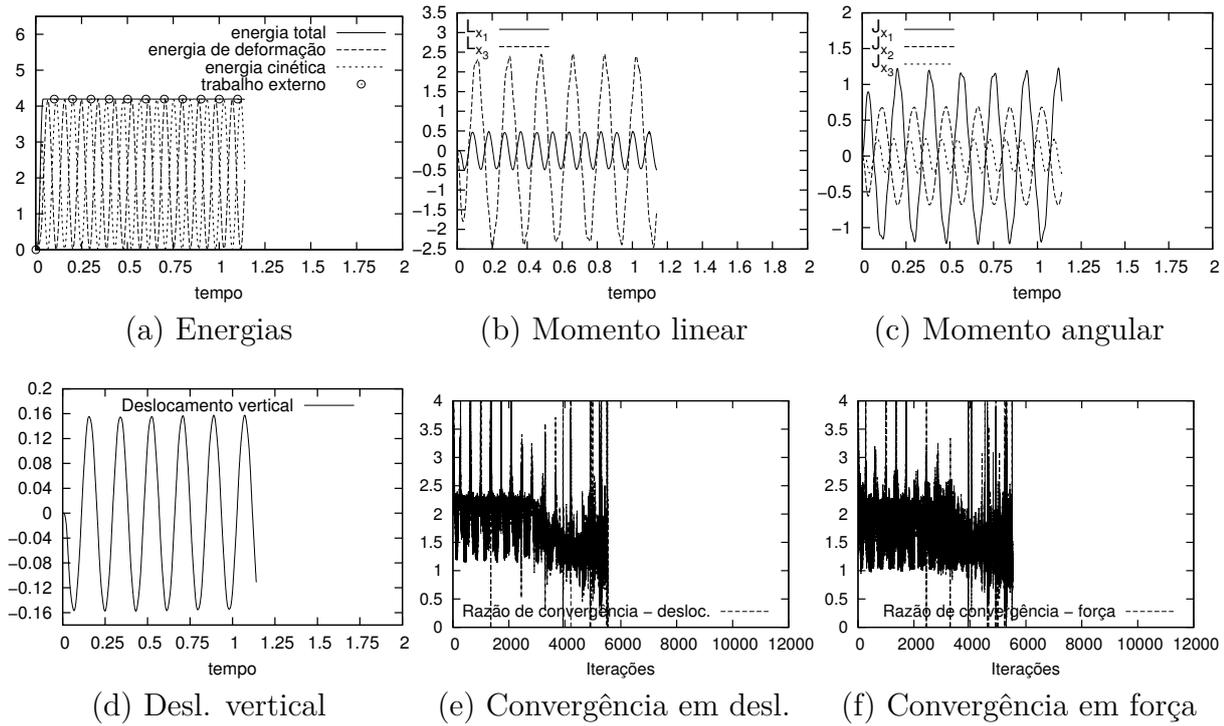


Figura 4.31: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa diagonalizada.

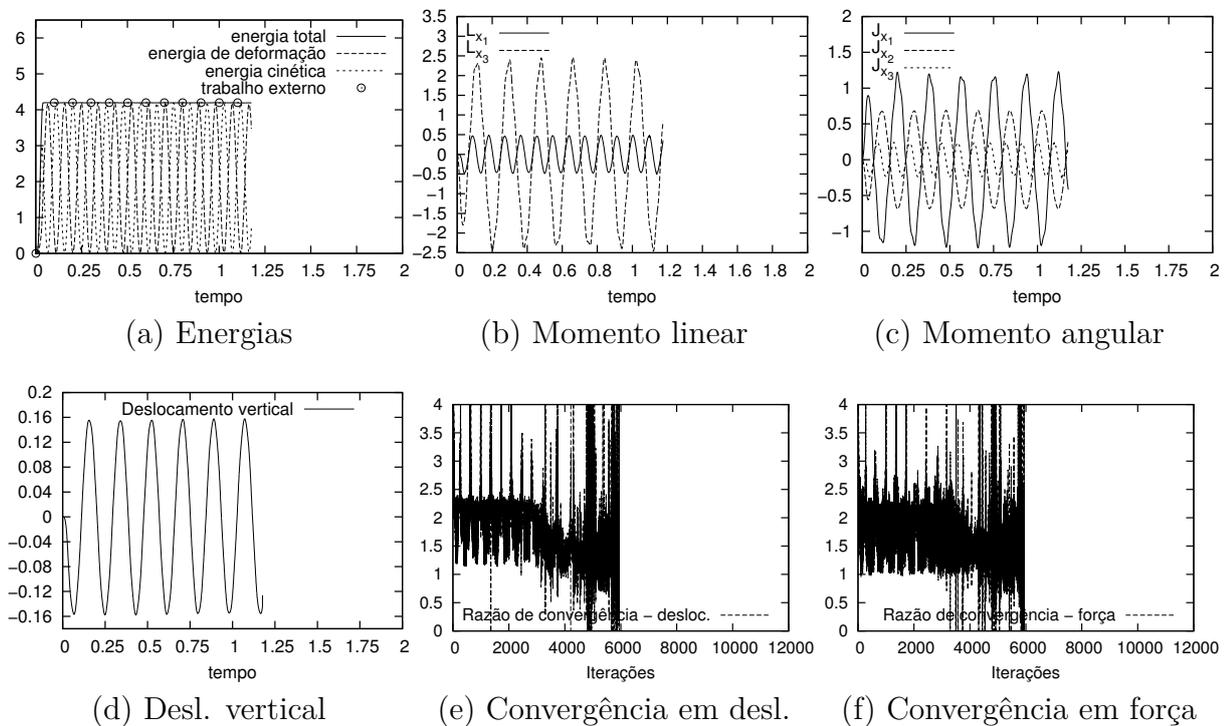


Figura 4.32: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa diagonalizada.

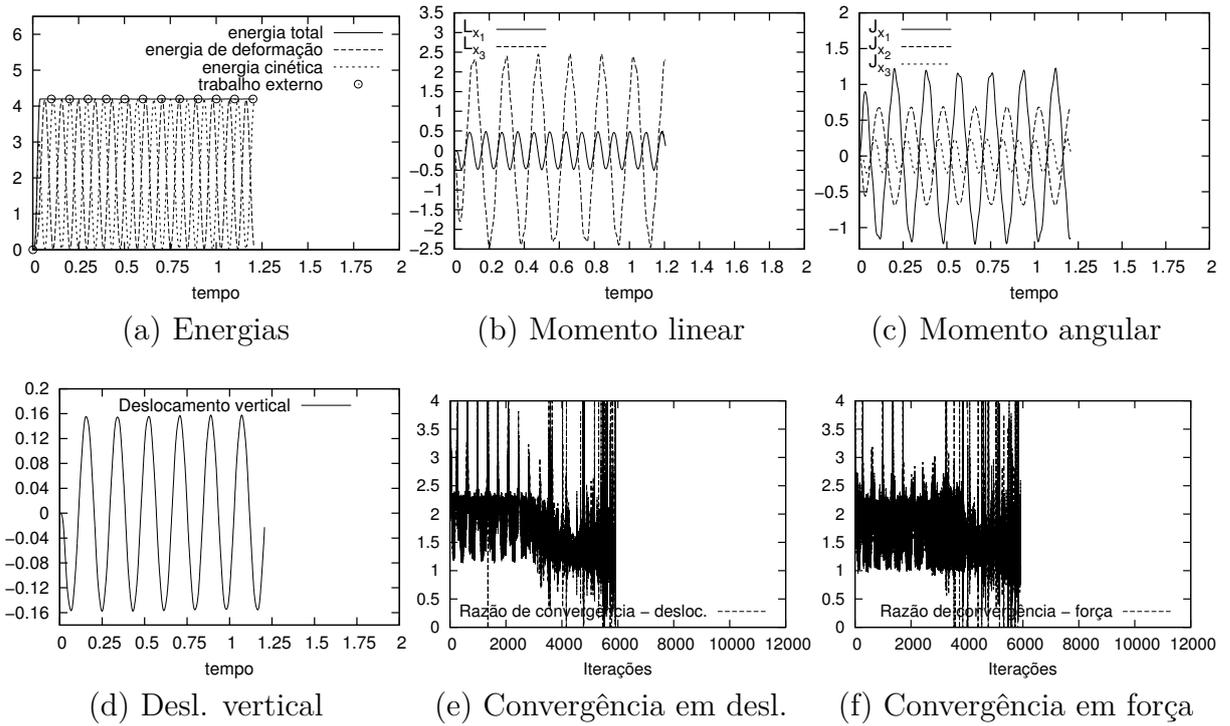


Figura 4.33: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa diagonalizada.

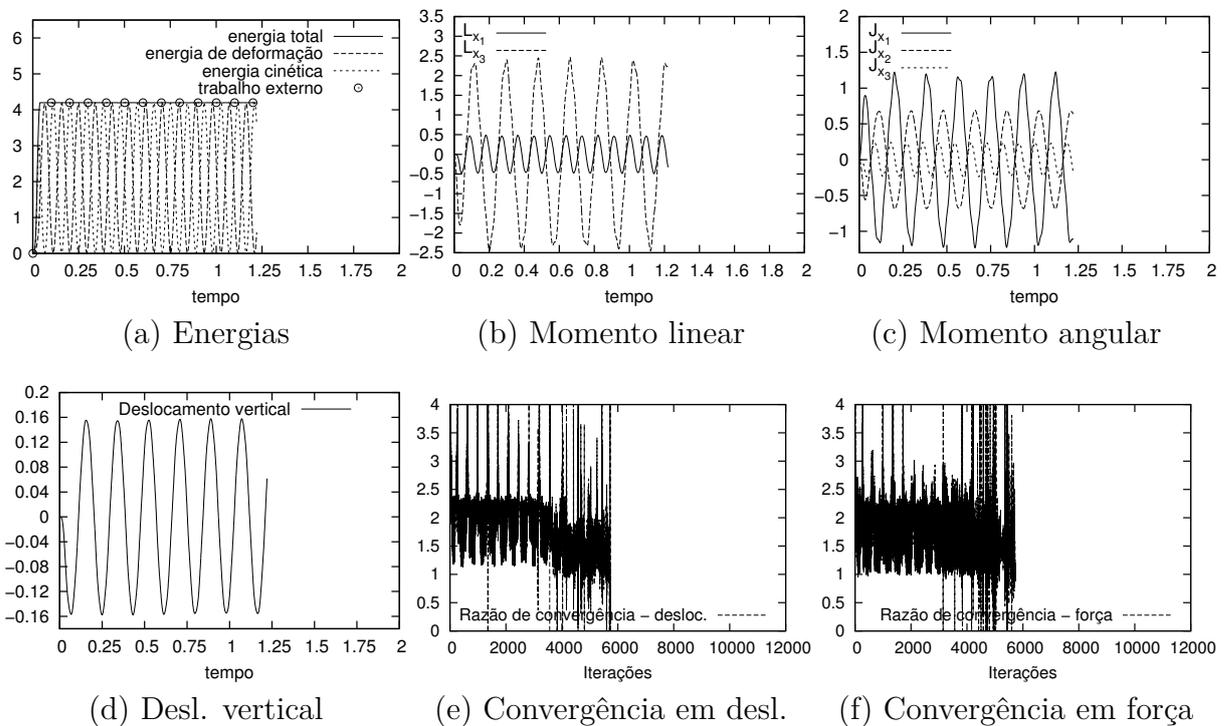


Figura 4.34: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa diagonalizada.

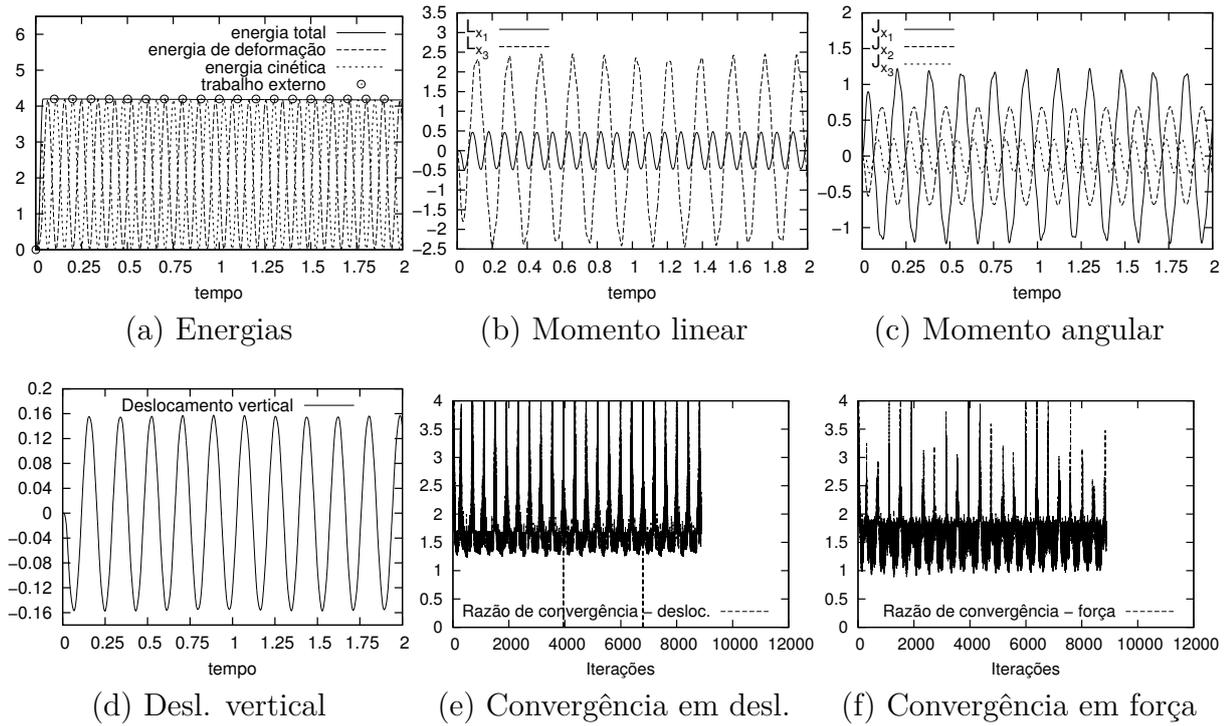


Figura 4.35: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente.

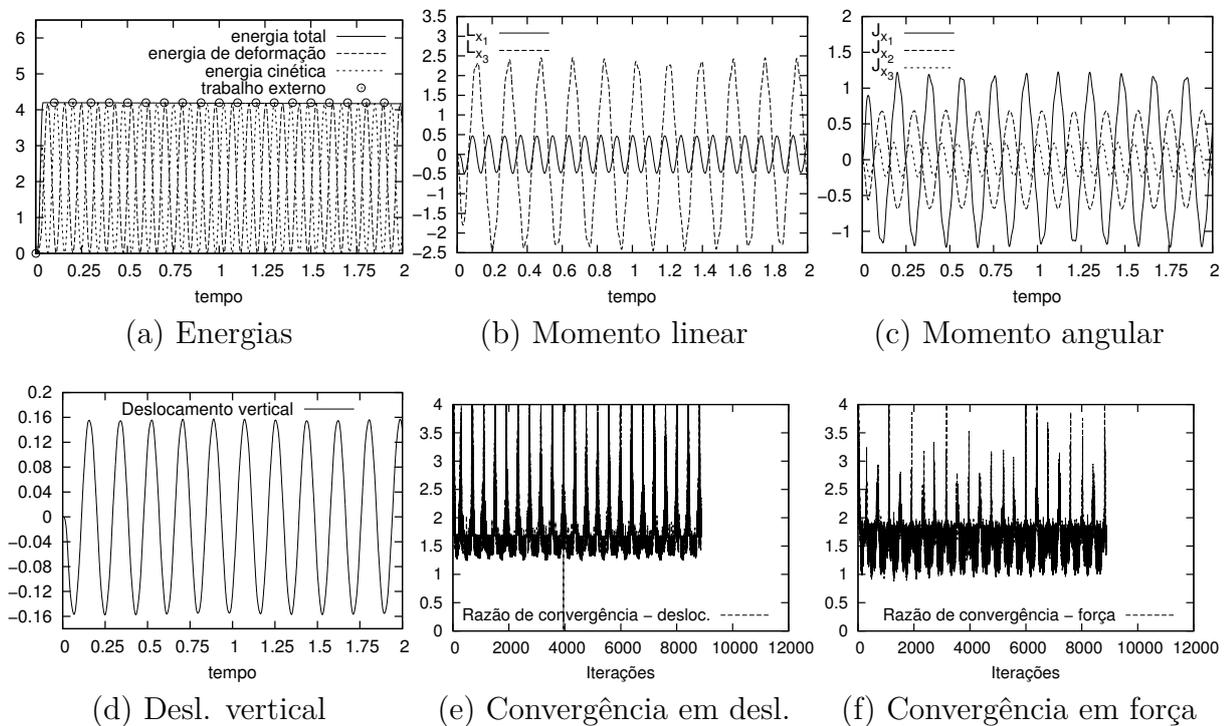


Figura 4.36: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente.

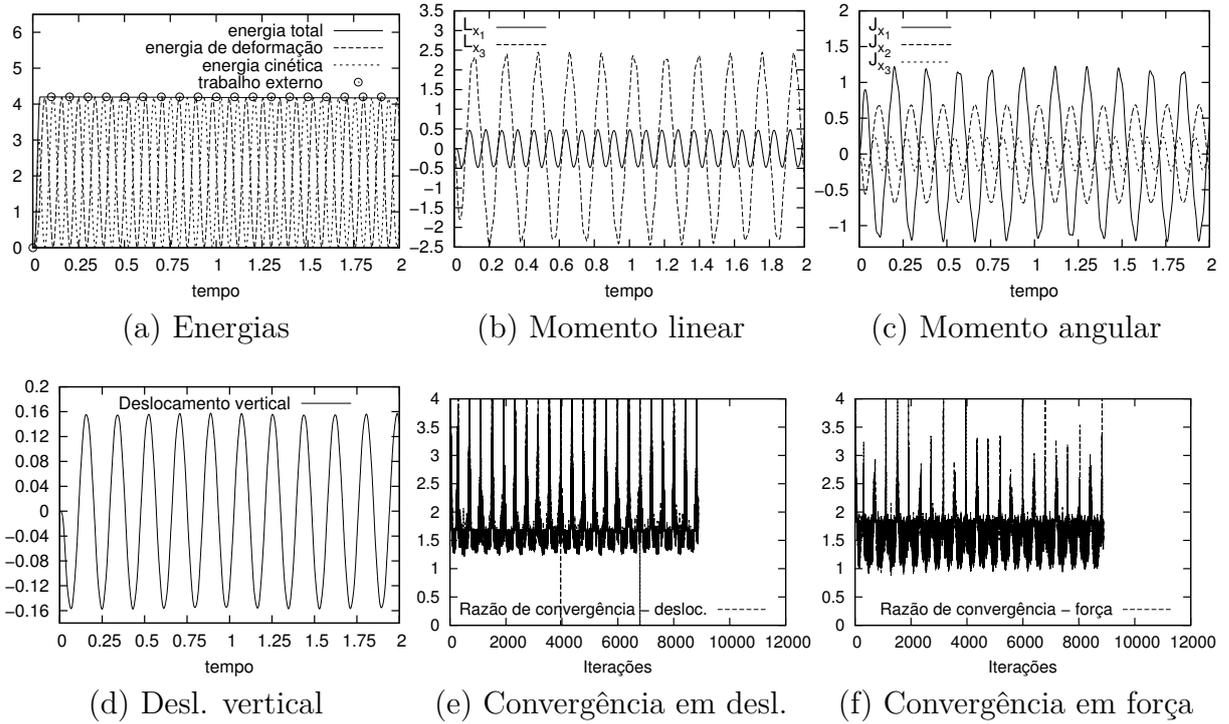


Figura 4.37: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente.

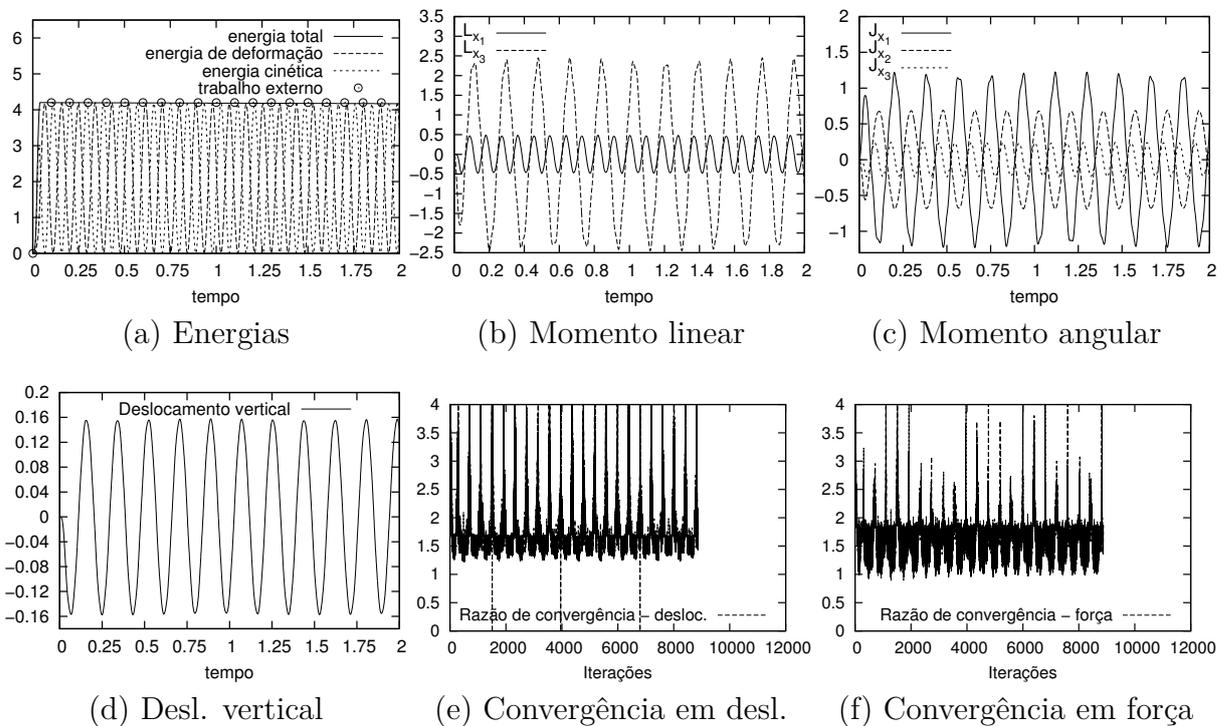


Figura 4.38: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente.

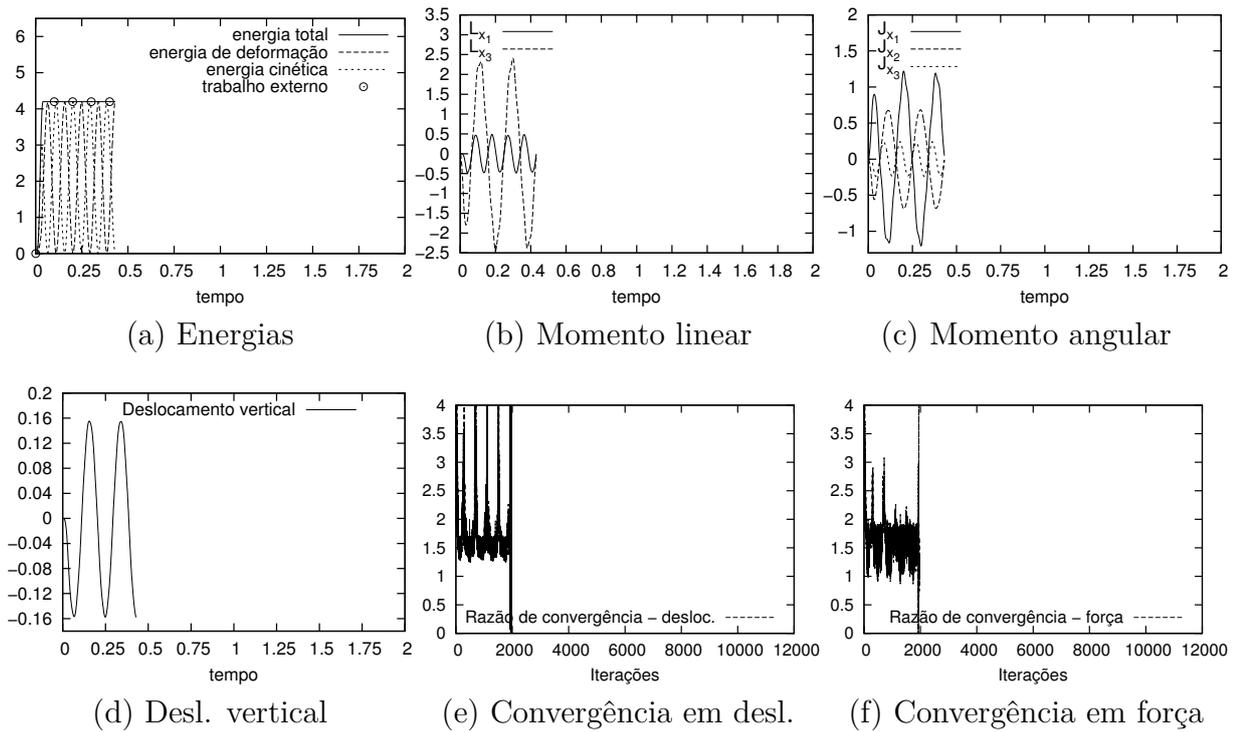


Figura 4.39: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente.

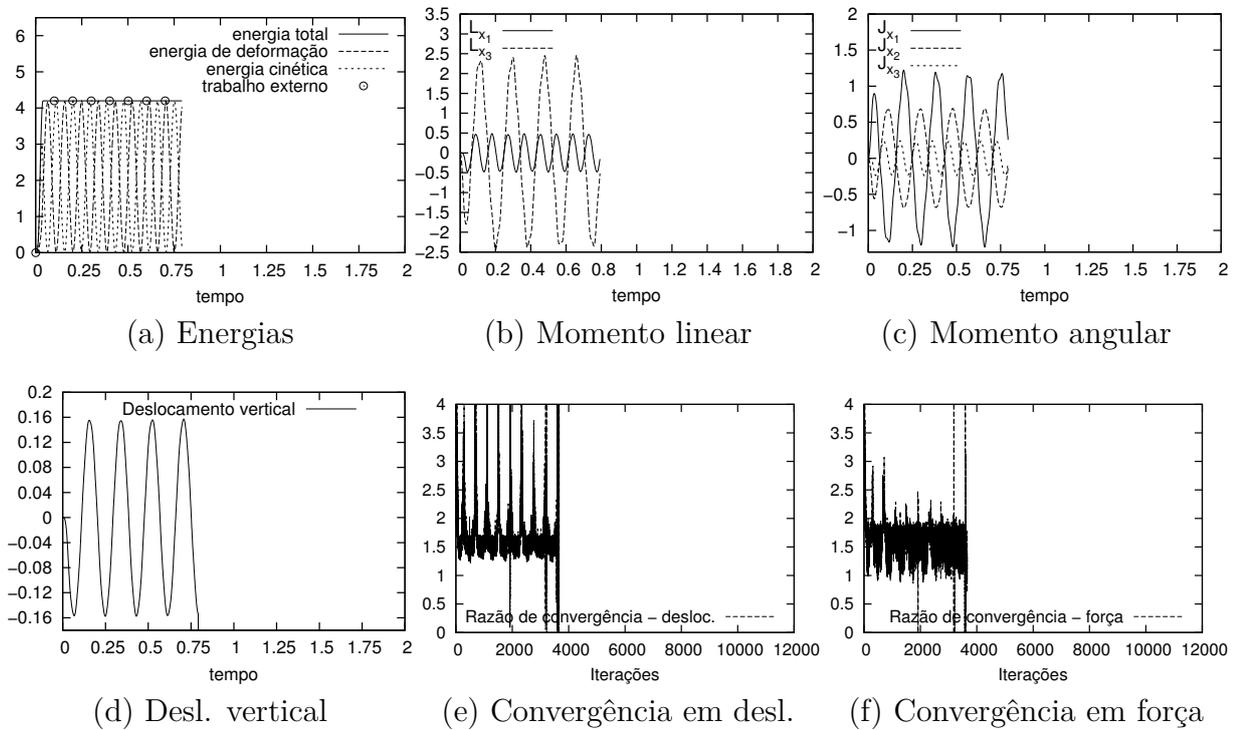


Figura 4.40: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente.

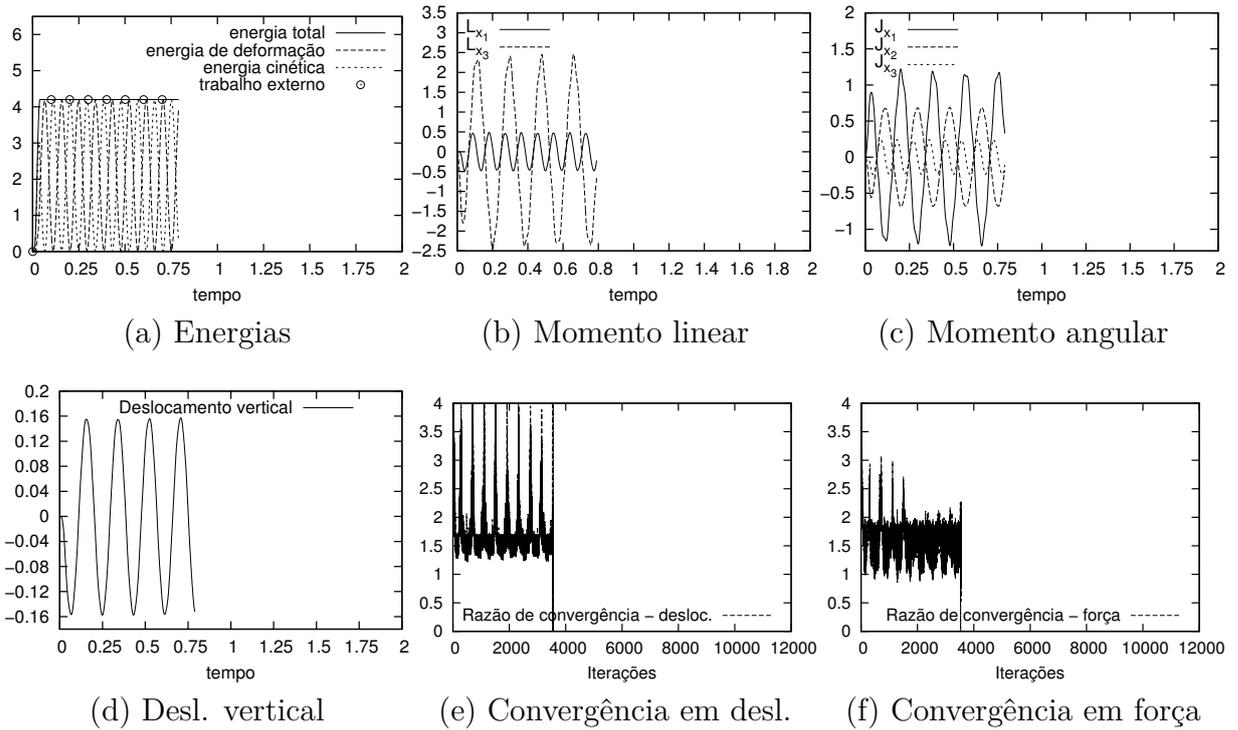


Figura 4.41: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente.

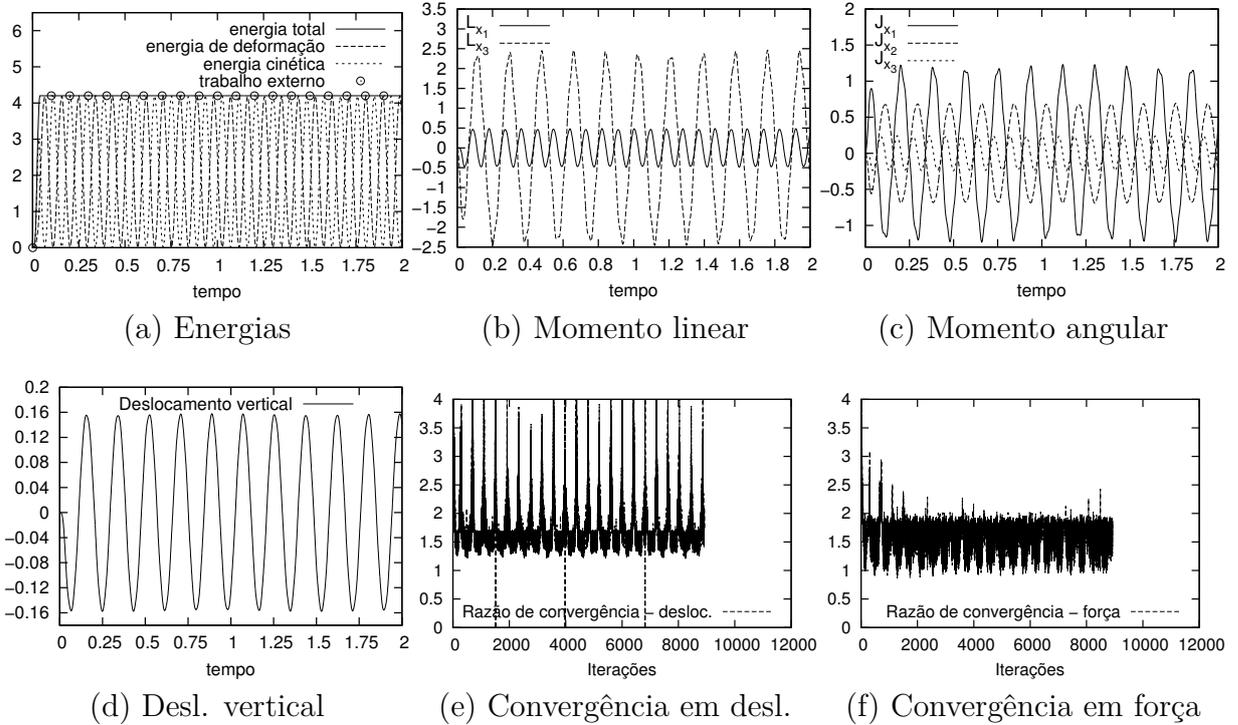


Figura 4.42: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente.

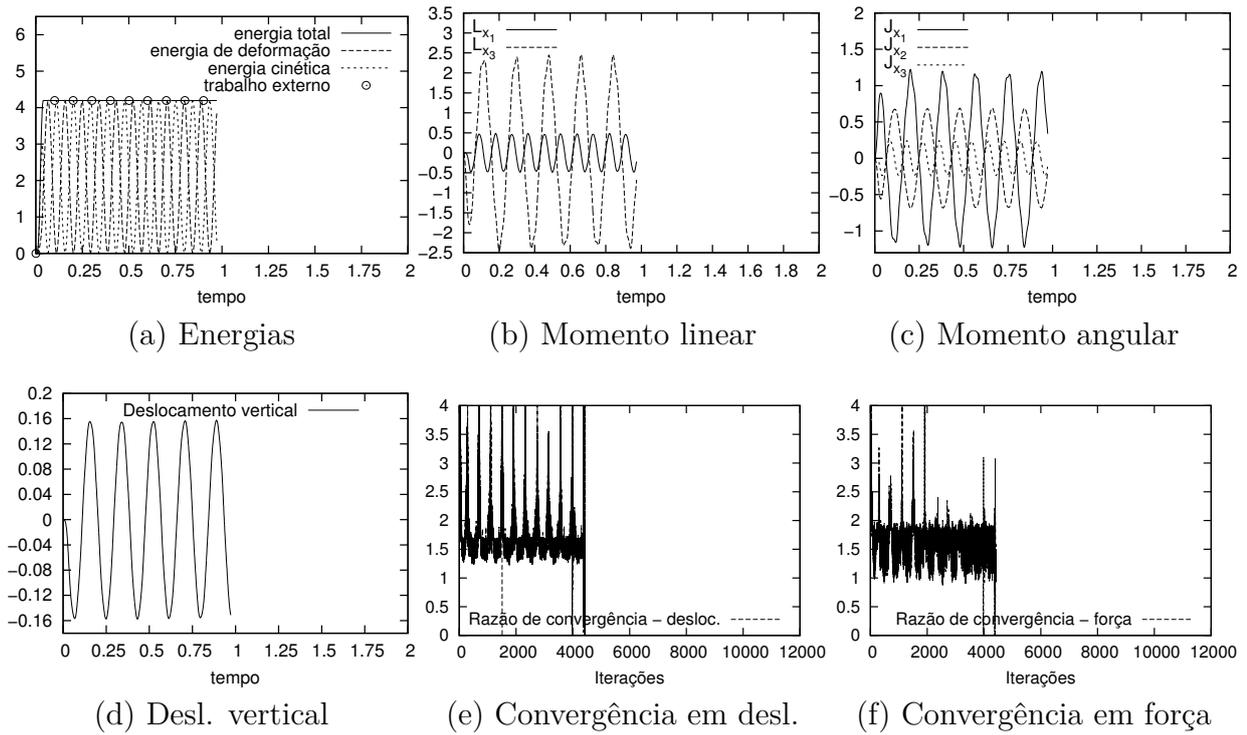


Figura 4.43: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

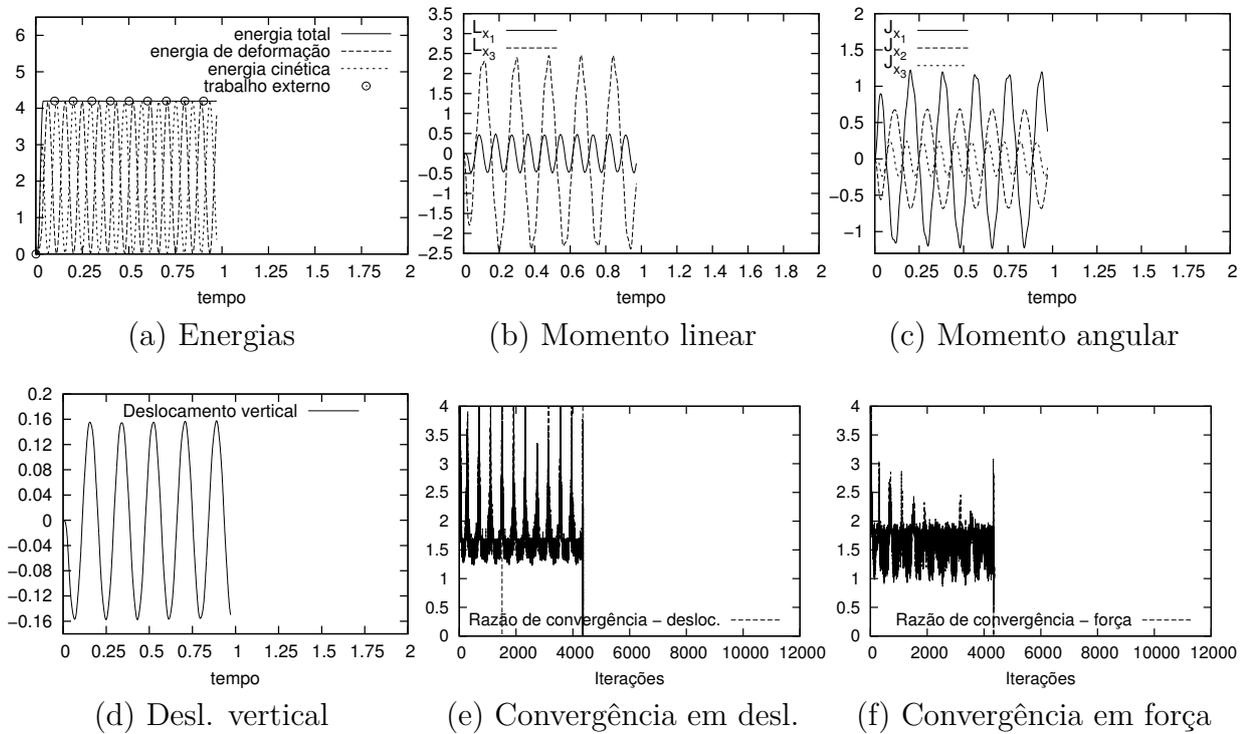


Figura 4.44: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

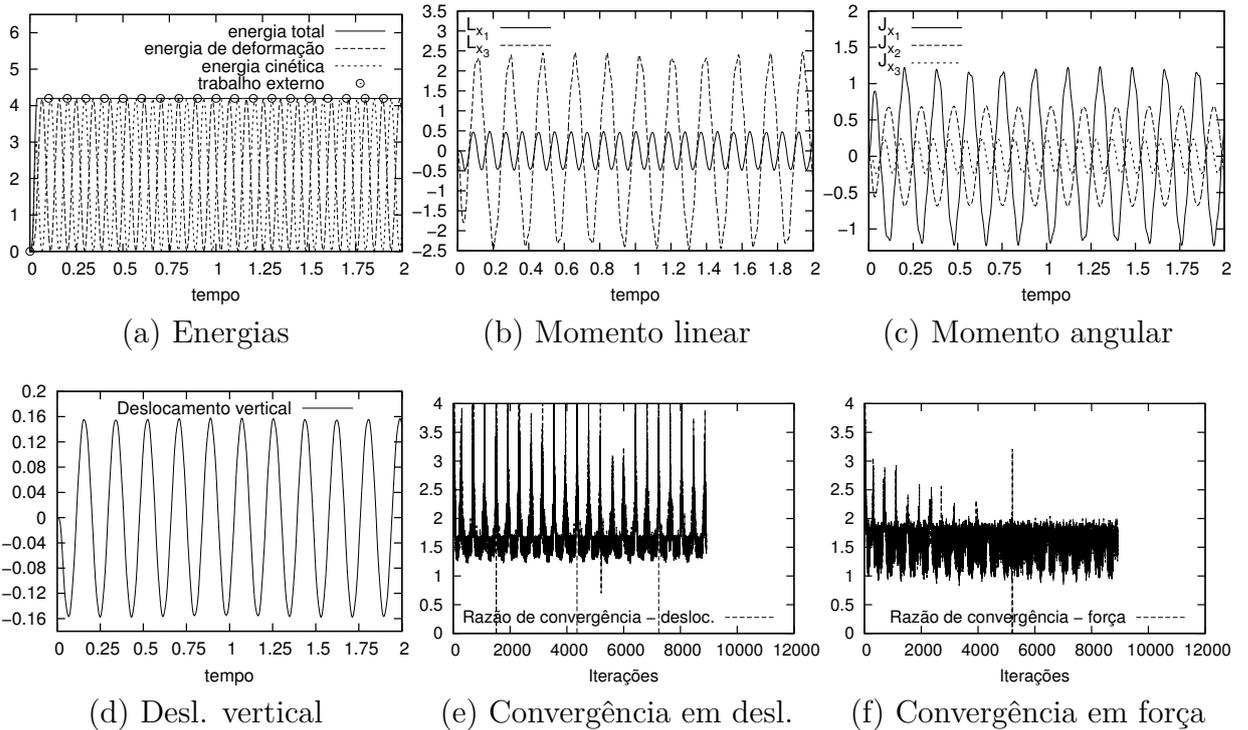


Figura 4.45: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

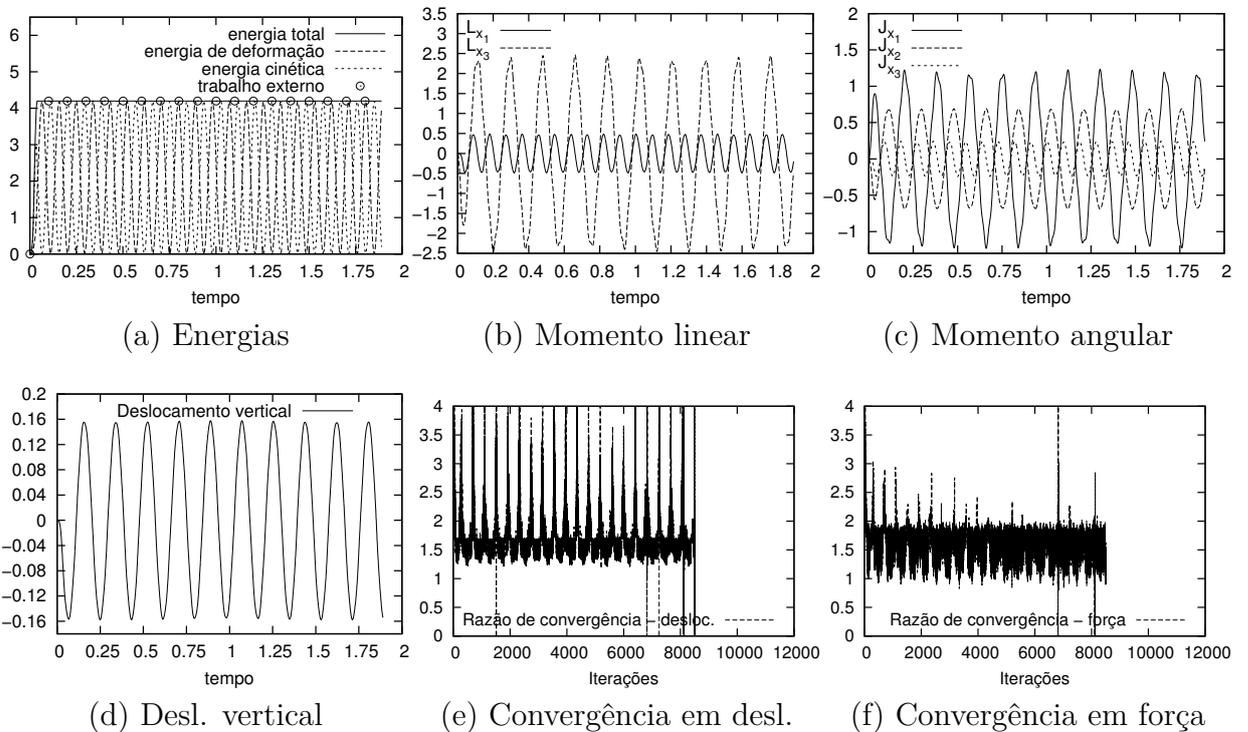


Figura 4.46: Viga *Bathe* ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

4.8.3 Régua voando: (*Flying toss rule*)

Este problema foi analisado por Kuhl e Ramm (1996, 1999); Simo e Tarnow (1992). O incremento de tempo utilizado é $\Delta t = 0.01$ e a carga no tempo é um pulso triangular, apresentado na Figura 4.47b. O comprimento, a largura e a espessura da viga são iguais à 0.3, 0.002 e 0.06, respectivamente. As propriedades materiais são: $E = 2.06 \times 10^{11}$, $\nu = 0.3$ e $\rho = 7.8 \times 10^3$. Quatro malhas foram testadas, para quatro valores de raios espectrais, como relatado na seção 4.8.1.

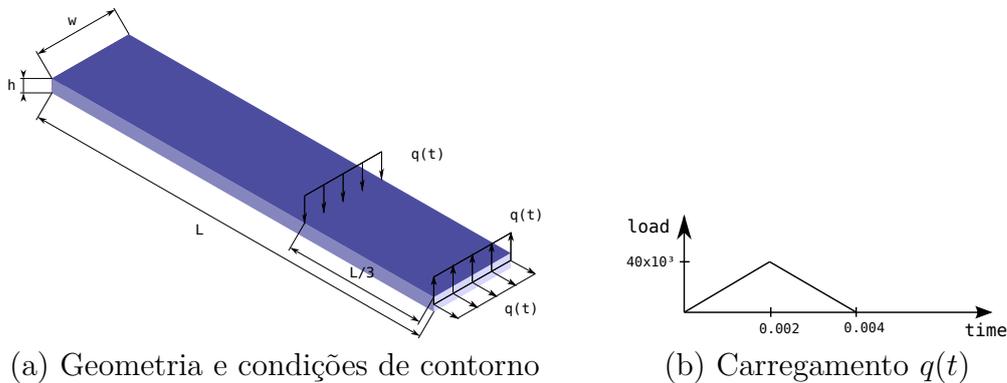


Figura 4.47: Geometria e condições de contorno: Régua voando.

Na Figura 4.48 são apresentadas sucessões de configurações deformadas utilizando os métodos $G\alpha$ e $GEMM+\xi$. Nas Figuras 4.48a, 4.48c, 4.48e e 4.48g são apresentadas as configurações entre $t = 0.0$ e $t = 0.1$ com $\Delta t = 0.01$. Enquanto nas Figuras 4.48b, 4.48d, 4.48f e 4.48h são apresentadas as configurações entre $t = 0.0$ e $t = 0.03$ com $\Delta t = 0.001$. Para avaliar o nível de dissipação numérica, avaliaram-se diversos raios espectrais para diversas classes de continuidade. Na Tabela 4.8 é apresentado quais análises convergiram durante o tempo de análise e quais análises falharam, assim como o tempo para o qual o algoritmo falhou, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade. Nas figuras apresentadas, i.e., Figuras 4.49-4.76 são apresentados os balanços de energia, momento linear e angular, assim como a análise de convergência em termos de deslocamentos e forças. Na Tabela 4.9 é apresentado o nível máximo de dissipação observado nas análises, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade. Em termos da conservação do momento linear e angular, em nenhuma das análises percebe-se algum tipo de variação, i.e., independente do raio espectral e classe adotada não observa-se variação alguma destas quantidades, \underline{J} e \underline{L} . A conservação dos momentos linear e angular pode ser constatada nas Figuras 4.49b, 4.49c-4.76b, 4.76c.

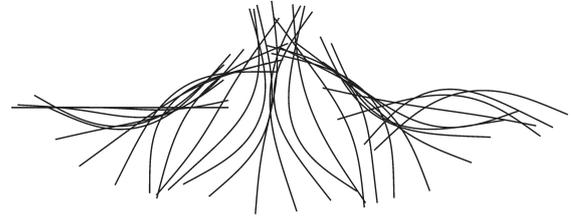
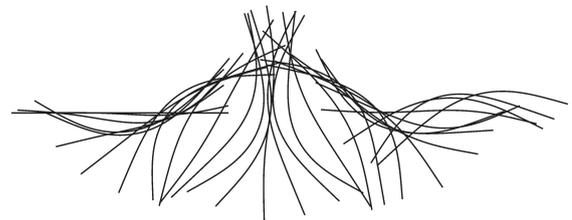
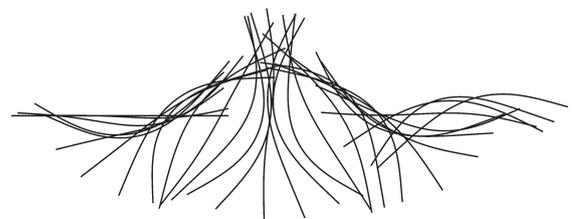
(a) $\rho_\infty = 0.95$ e C^1 : $G\alpha$ (b) $\rho_\infty = 0.95$ e C^1 : $G\alpha$ (c) $\rho_\infty = 0.95$ e C^4 : $G\alpha$ (d) $\rho_\infty = 0.95$ e C^4 : $G\alpha$ (e) $\rho_\infty = 1.00$ e C^1 : $GEMM+\xi$ (f) $\rho_\infty = 1.00$ e C^1 : $GEMM+\xi$ (g) $\rho_\infty = 1.00$ e C^4 : $GEMM+\xi$ (h) $\rho_\infty = 1.00$ e C^4 : $GEMM+\xi$

Figura 4.48: Sucessivas configurações.

Tabela 4.8: Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha ($t_f \cdot 10^{-1}$).

ρ_∞	C^1	C^2	C^3	C^4
G α massa consistente				
0.50	conv.	conv.	conv.	conv.
0.95	conv.	conv.	conv.	conv.
0.99	conv.	conv.	falha $t_f = 0.9175s$	falha $t_f = 0.8860s$
1.00	falha $t_f = 0.6105s$	falha $t_f = 0.5150s$	falha $t_f = 0.5355s$	falha $t_f = 0.5305s$
G α massa diagonalizada				
1.00	conv.	conv.	falha $t_f = 0.7795s$	falha $t_f = 0.6115s$
GEMM+ ξ massa consistente				
1.00	conv.	conv.	conv.	conv.
GEMM+ ξ massa diagonalizada				
1.00	conv.	conv.	conv.	conv.

Tabela 4.9: Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.

ρ_∞	C^1	C^2	C^3	C^4
G α massa consistente				
0.50	$1 \cdot 10^{-1}\%$	$1 \cdot 10^{-1}\%$	$1 \cdot 10^{-1}\%$	$1 \cdot 10^{-1}\%$
0.95	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$2 \cdot 10^{-4}\%$	$1 \cdot 10^{-4}\%$
0.99	$8 \cdot 10^{-4}\%$	$1 \cdot 10^{-4}\%$	$8 \cdot 10^{-4}\%$	$3 \cdot 10^{-3}\%$
1.00	0%	0%	0%	0%
G α massa diagonalizada				
1.00	0.44%	0.42%	0.32%	0.39%
GEMM+ ξ massa consistente				
1.00	$4 \cdot 10^{-3}\%$	$3 \cdot 10^{-3}\%$	$\uparrow 1 \cdot 10^{-2}\%$	$\uparrow 8 \cdot 10^{-2}\%$
GEMM+ ξ massa diagonalizada				
1.00	0.45%	0.42%	0.37%	0.17%
\uparrow indica aumento de energia.				

Também, resulta difícil avaliar o nível de dissipação da energia, visto que os valores são insignificantes, sendo a maior parte destes impossível de ser observado em precisão simples.

Pode-se observar das Tabelas 4.8-4.9 que, para as análises realizadas, não existe uma dependência entre a convergência e a classe de continuidade utilizada.

Nas Figuras 4.49a-4.76a, são apresentadas as evoluções das energias ao longo do tempo e no que concerne às dissipações numéricas apresentadas na Tabela 4.9, todas resultaram tão insignificativas que não podem ser observadas nestas figuras.

Nos trabalhos apresentados por Kuhl e Ramm (1996, 1999) esta análise é realizada, e

um estudo paramétrico é levado a cabo em função dos raios espectrais e do coeficiente de Armero e Petocz, para os métodos energia-momento restrito (realizado por [Kuhl e Ramm \(1996\)](#)), energia-momento generalizado e α -generalizado (realizado por [Kuhl e Ramm \(1999\)](#)). [Kuhl e Ramm \(1999\)](#) apresentam o método α -generalizado como um método instável numericamente e altamente dissipativo, entretanto no exemplo anterior, [4.8.2](#), e no presente exemplo, [4.8.3](#), observa-se um comportamento bastante estável e nada dissipativo. Nas Figuras [4.49d,4.49e-4.76d,4.76e](#), são apresentadas as taxas de convergência em termos de deslocamento e forças. Para estas análises, observa-se que a taxa de convergência em deslocamentos é sensivelmente maior do que em forças.

As análises realizadas com massa diagonalizada para o método $G\alpha$ são concluídas com êxito para as classes de continuidade C^1 e C^2 enquanto que para as classes C^3 e C^4 as análises divergem. Para estes últimos dois casos, a convergência se deteriora (ver Figuras [4.67d-4.67e](#) e [4.68d-4.68e](#)).

Todas as análises realizadas com o método $GEMM+\xi$ são concluídas com êxito e sem deterioração da convergência. Entretanto, a taxa de convergência é em torno de 1.8 enquanto no método $G\alpha$ obteve-se uma taxa de convergência em torno de 2.0.

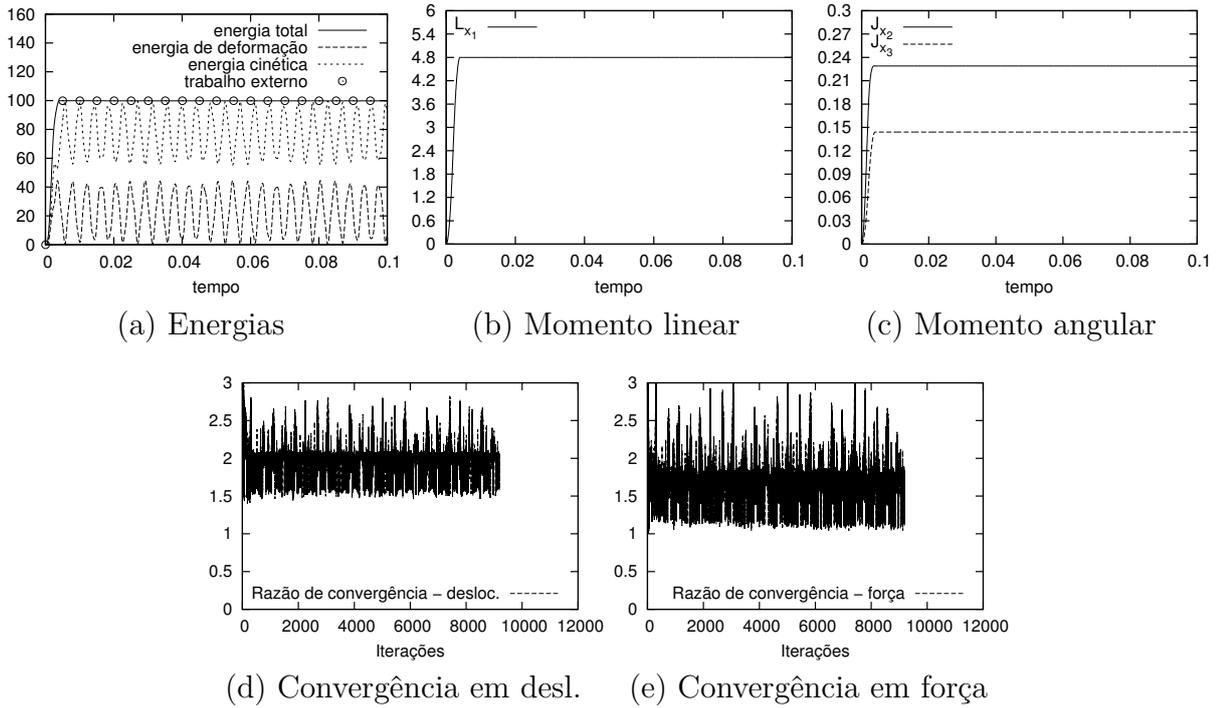


Figura 4.49: Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

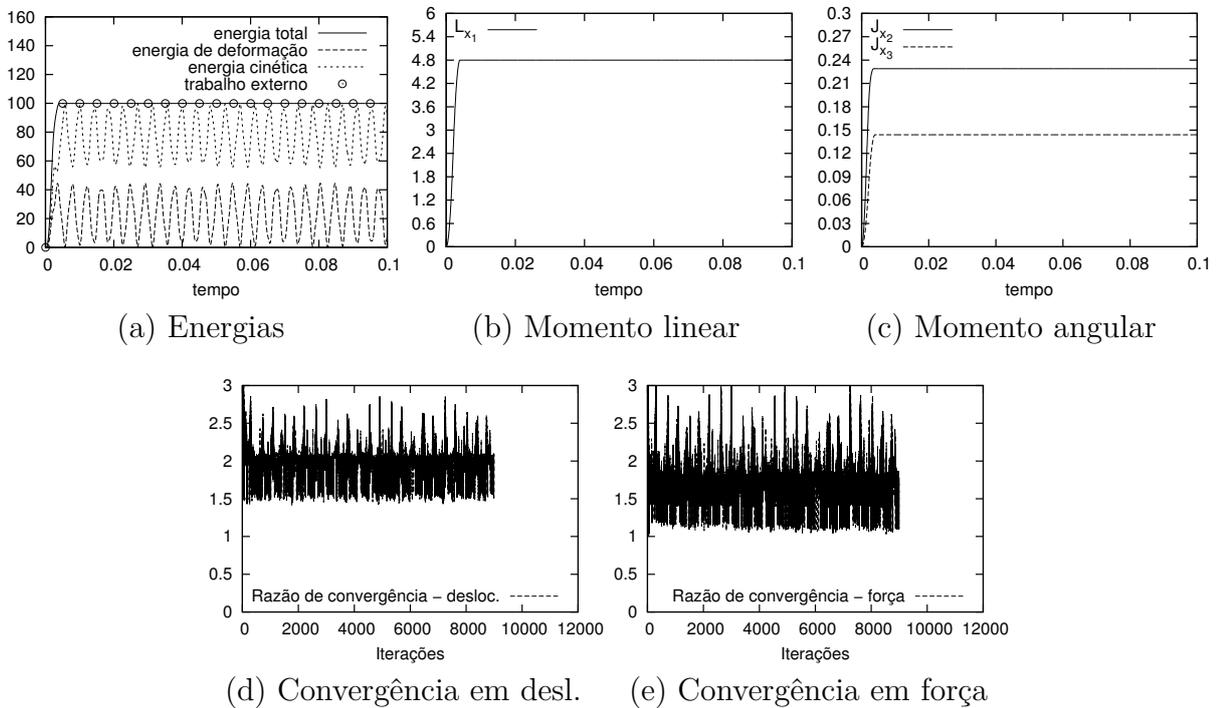


Figura 4.50: Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

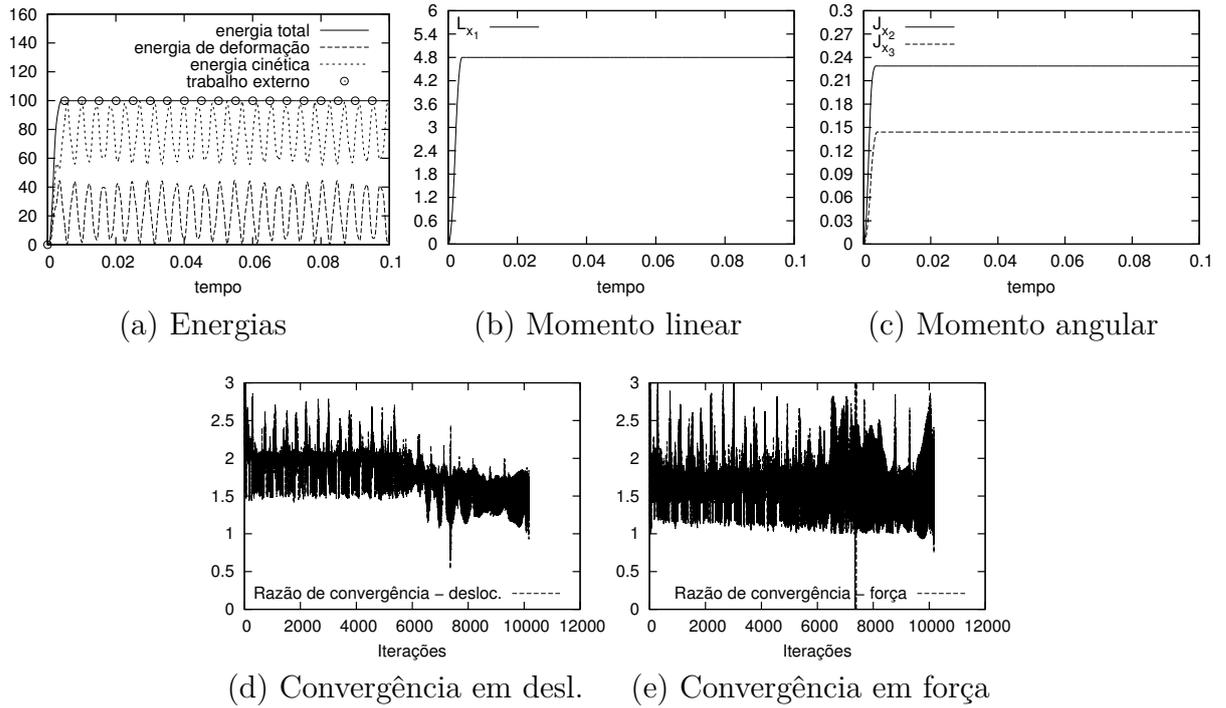


Figura 4.51: Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

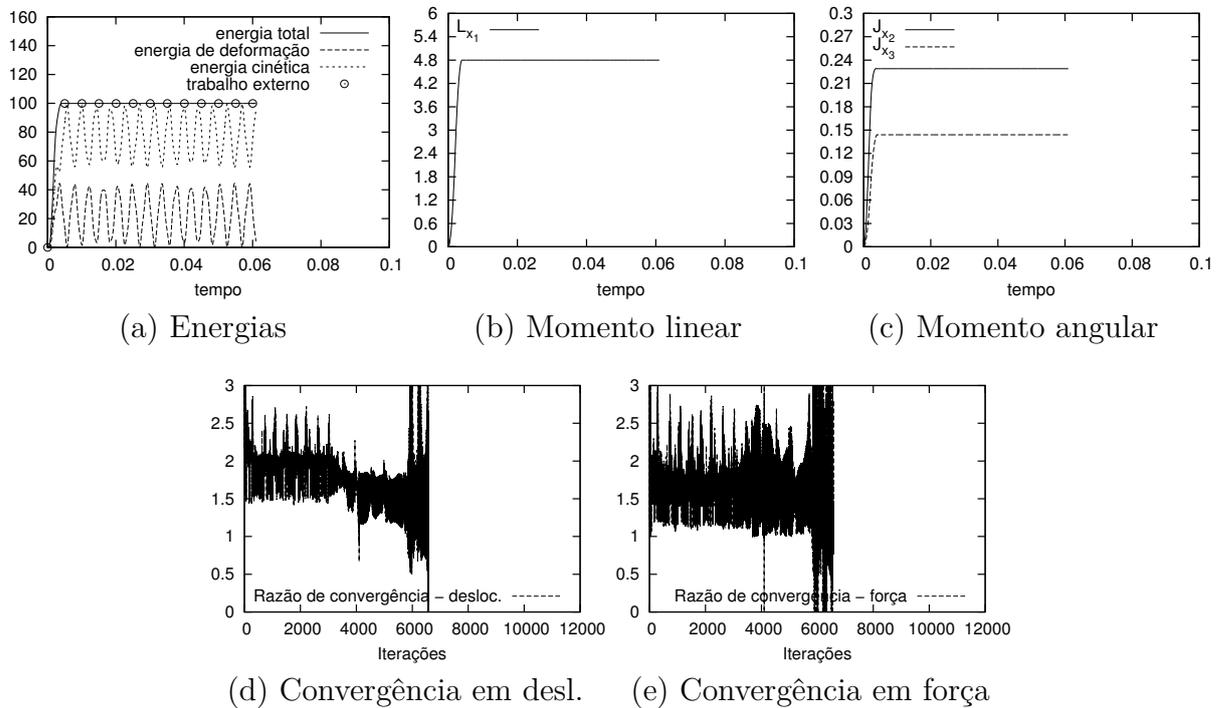


Figura 4.52: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.

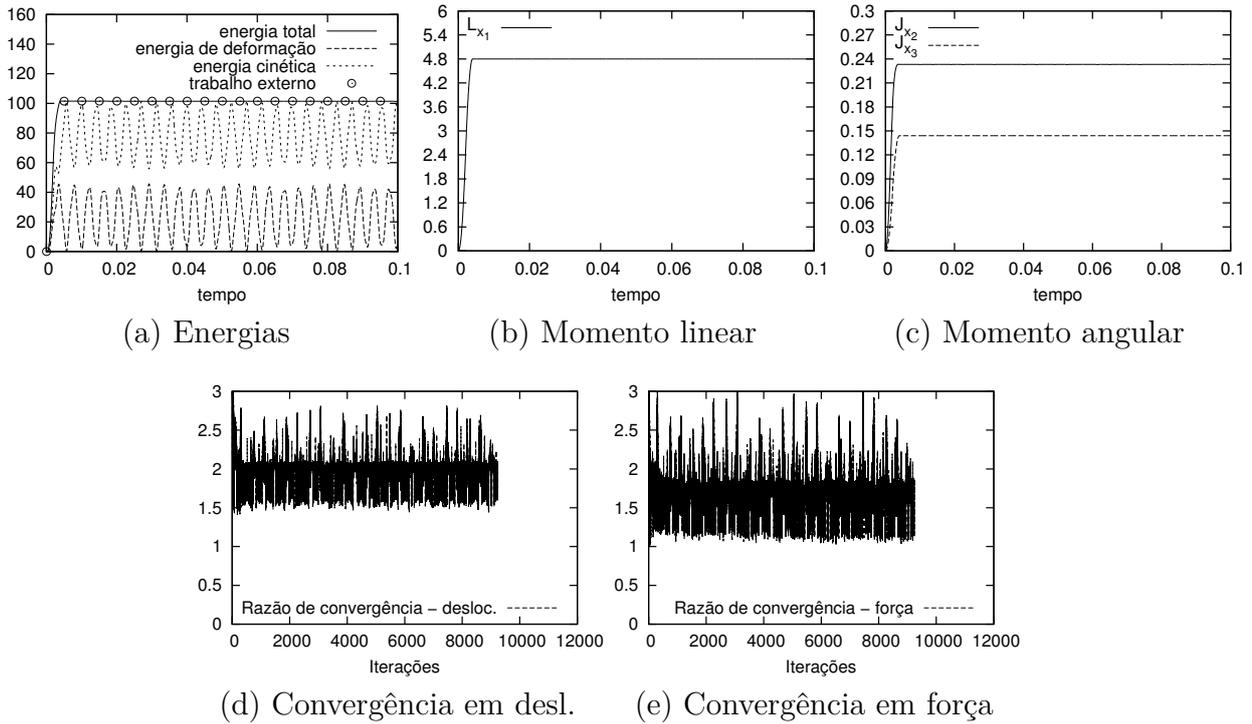


Figura 4.53: Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

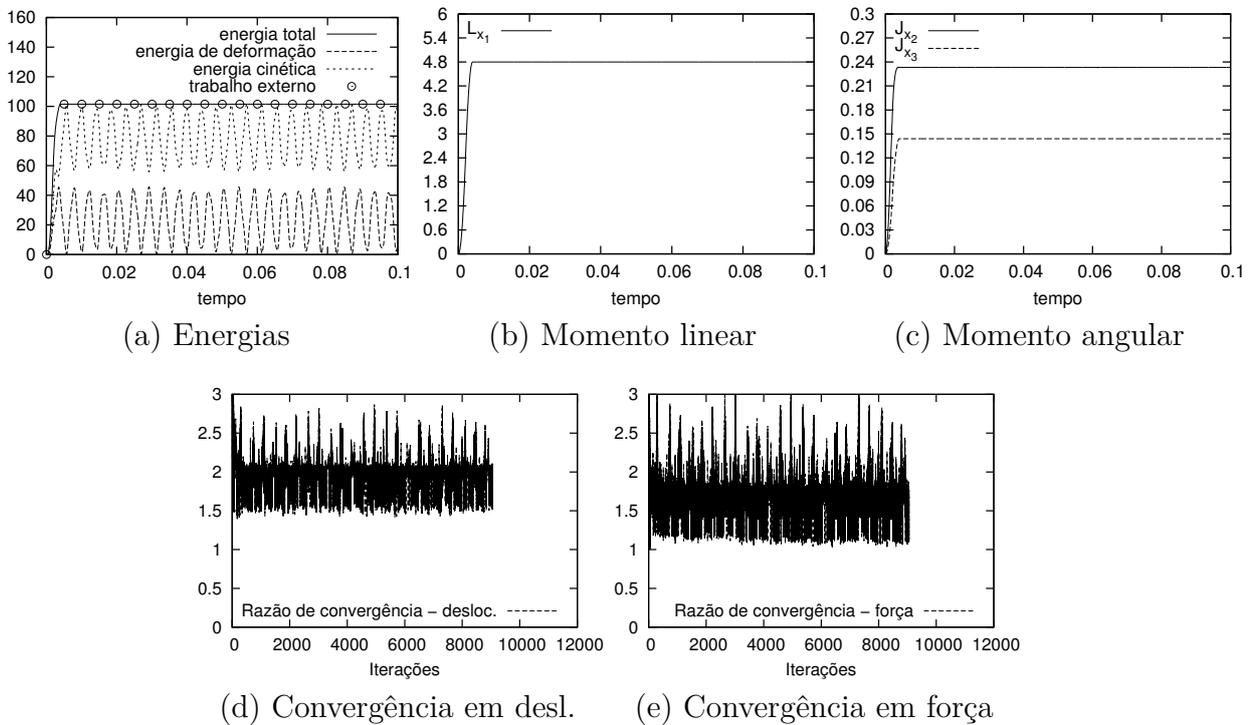


Figura 4.54: Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

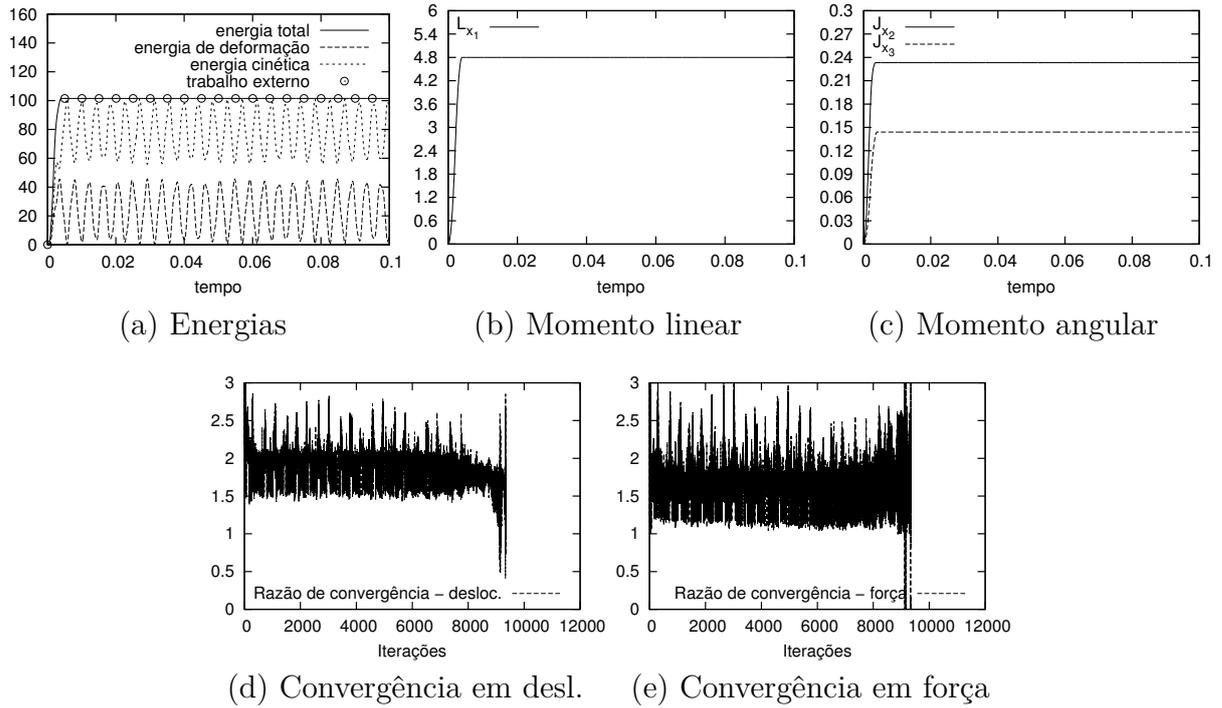


Figura 4.55: Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

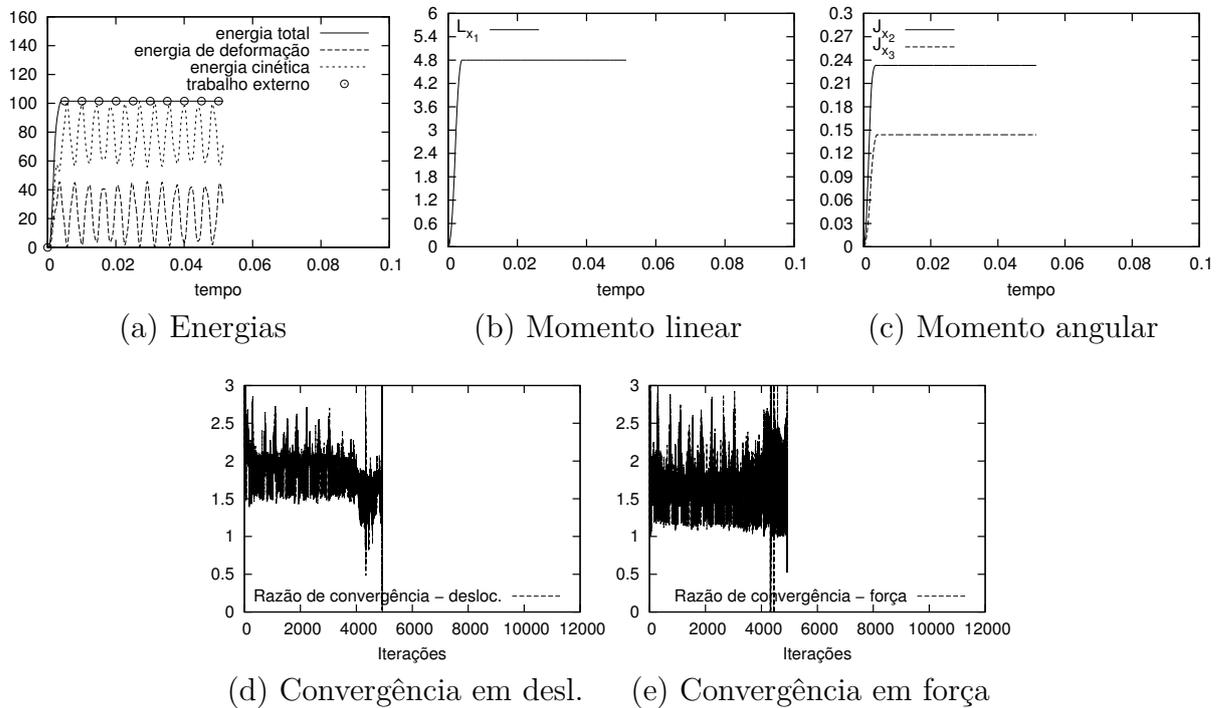


Figura 4.56: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa consistente.

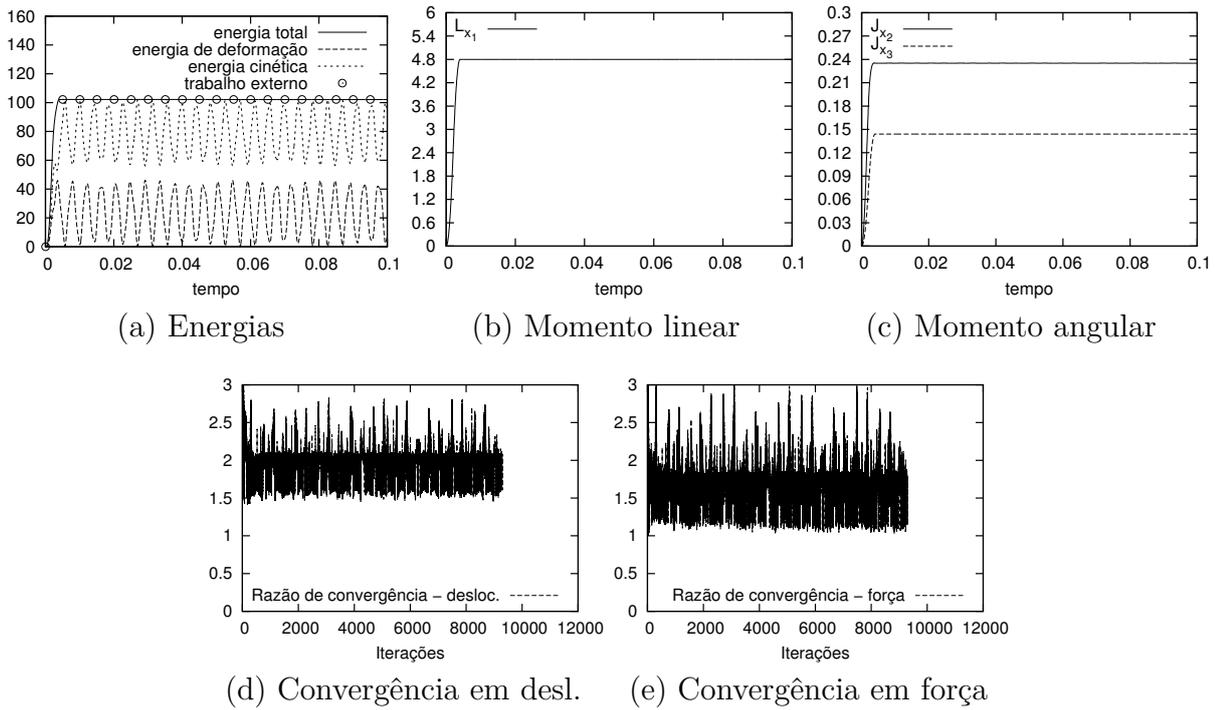


Figura 4.57: Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

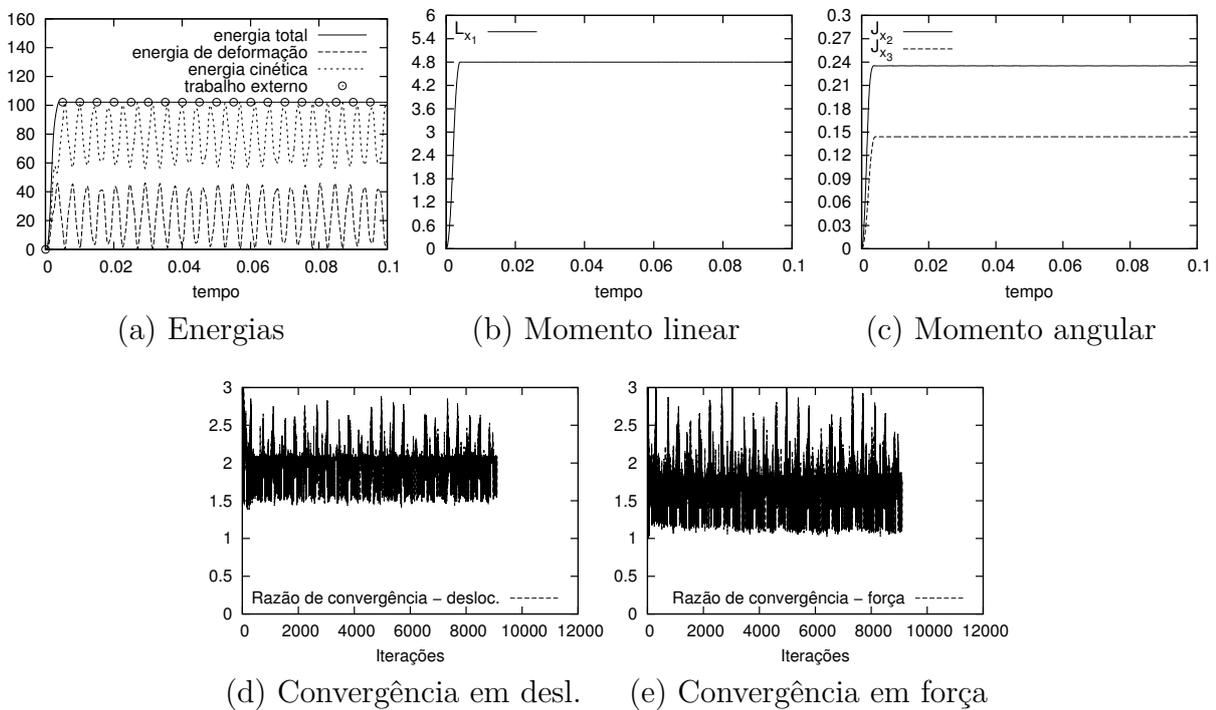


Figura 4.58: Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

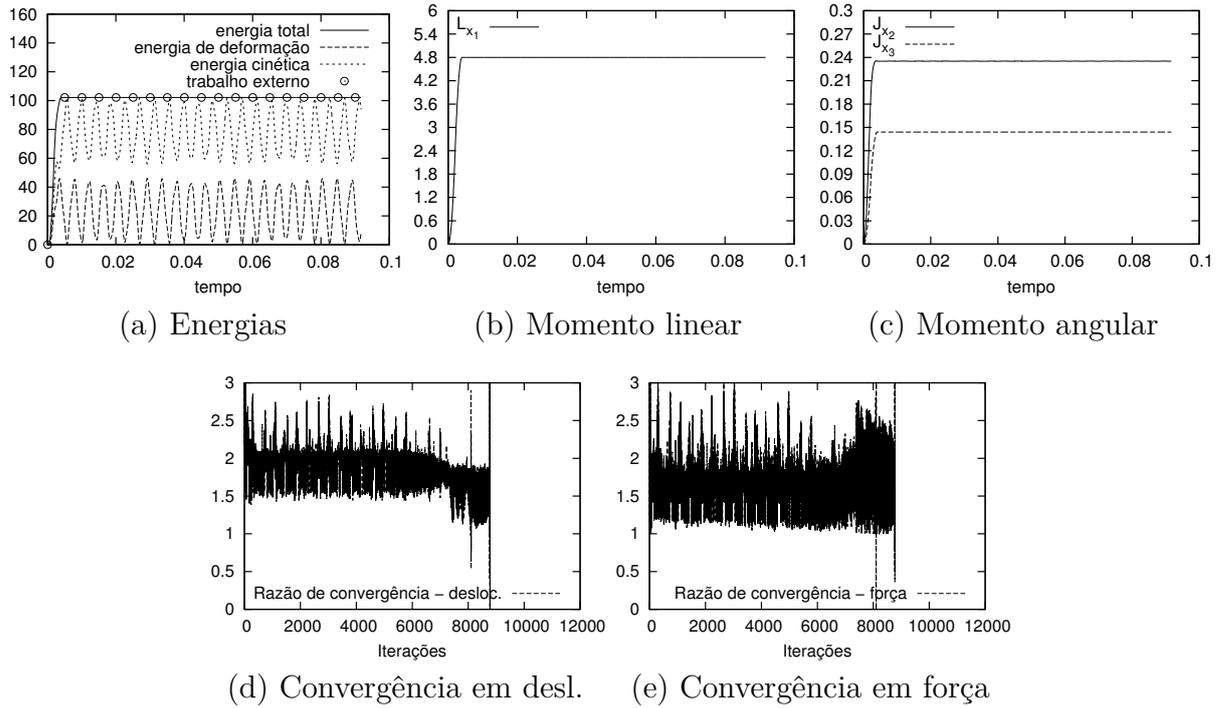


Figura 4.59: Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

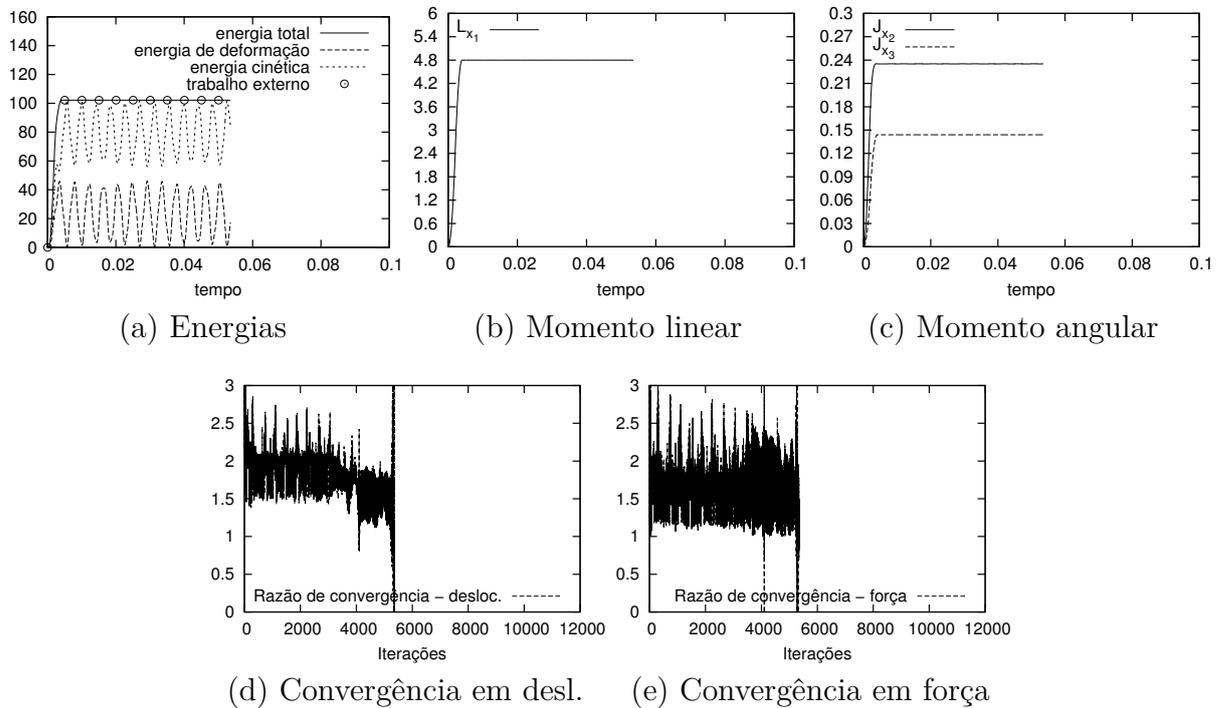


Figura 4.60: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa consistente.

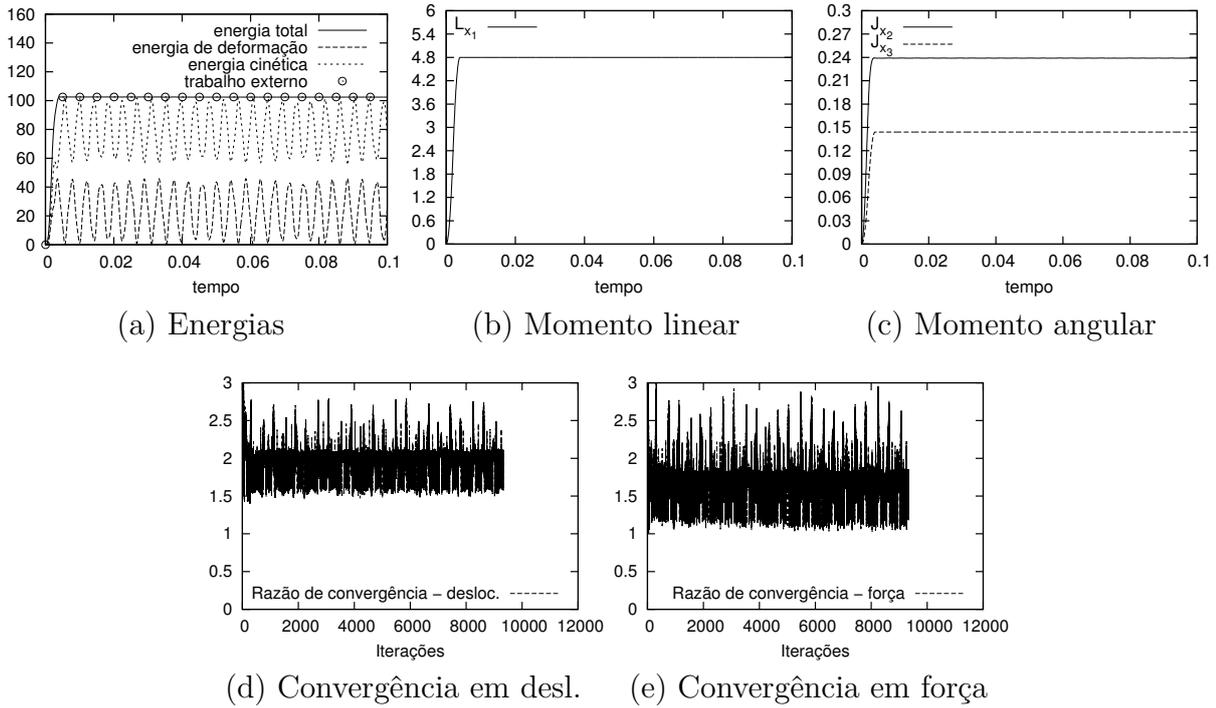


Figura 4.61: Régua voando ($\rho_\infty = 0.50$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

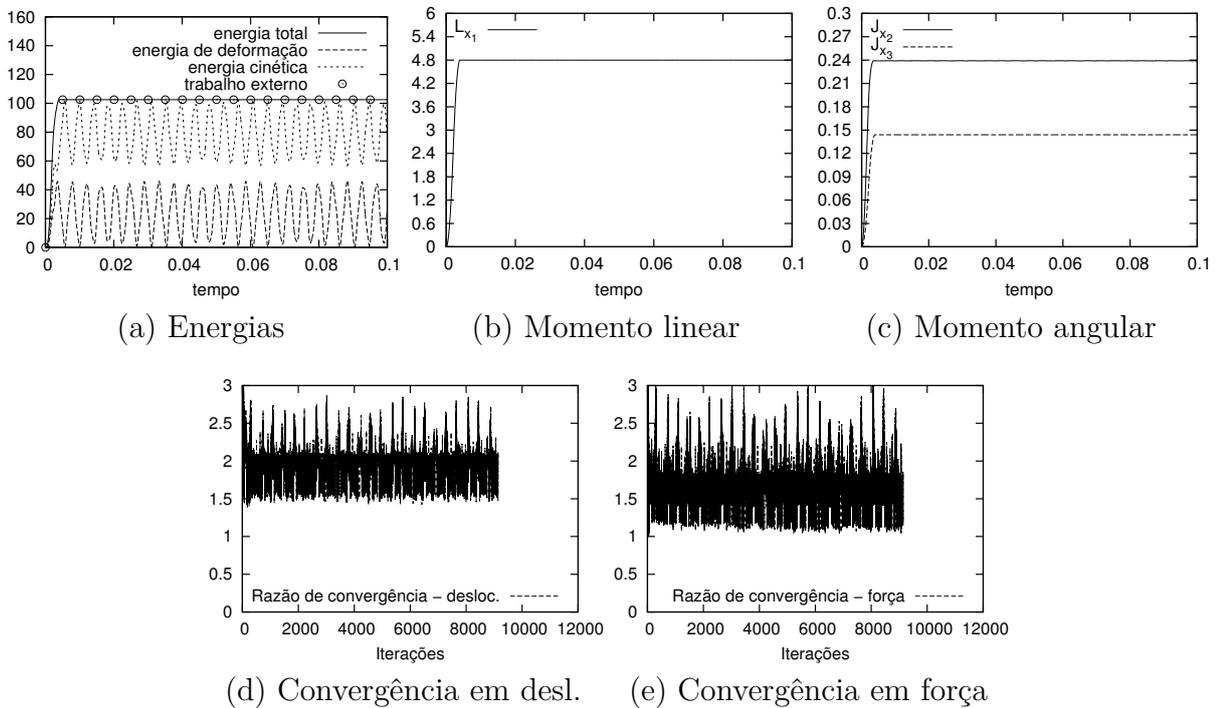


Figura 4.62: Régua voando ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

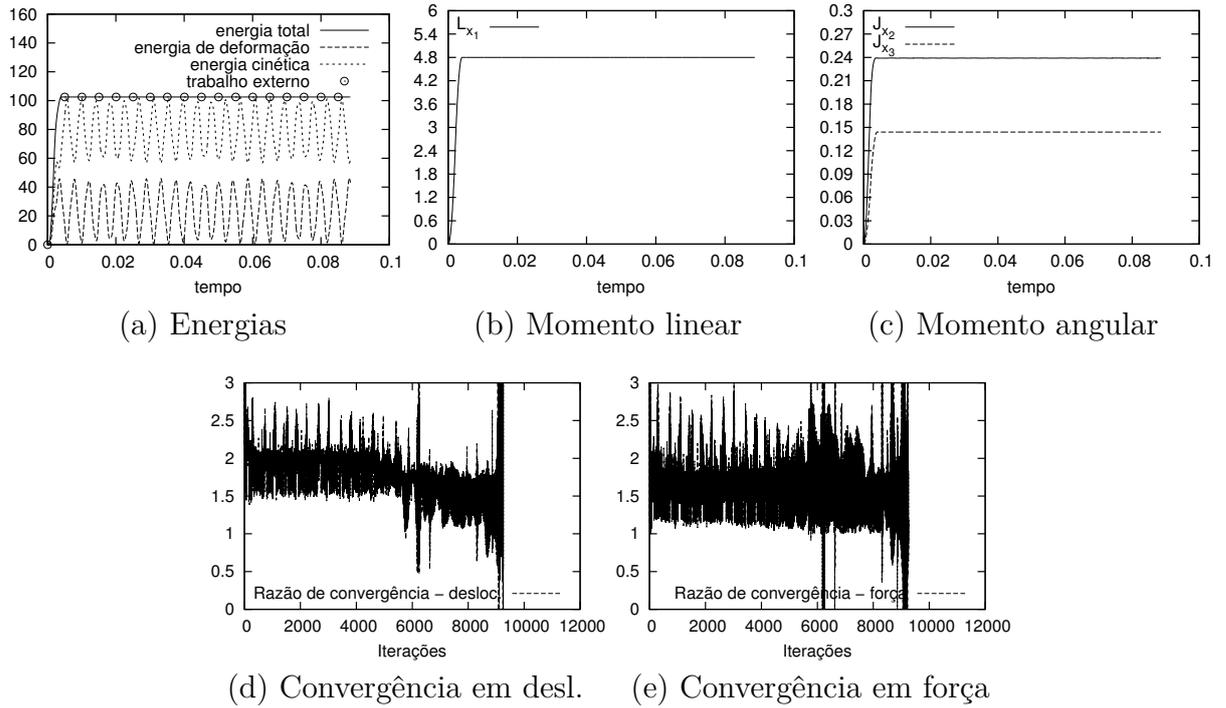


Figura 4.63: Régua voando ($\rho_\infty = 0.99$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

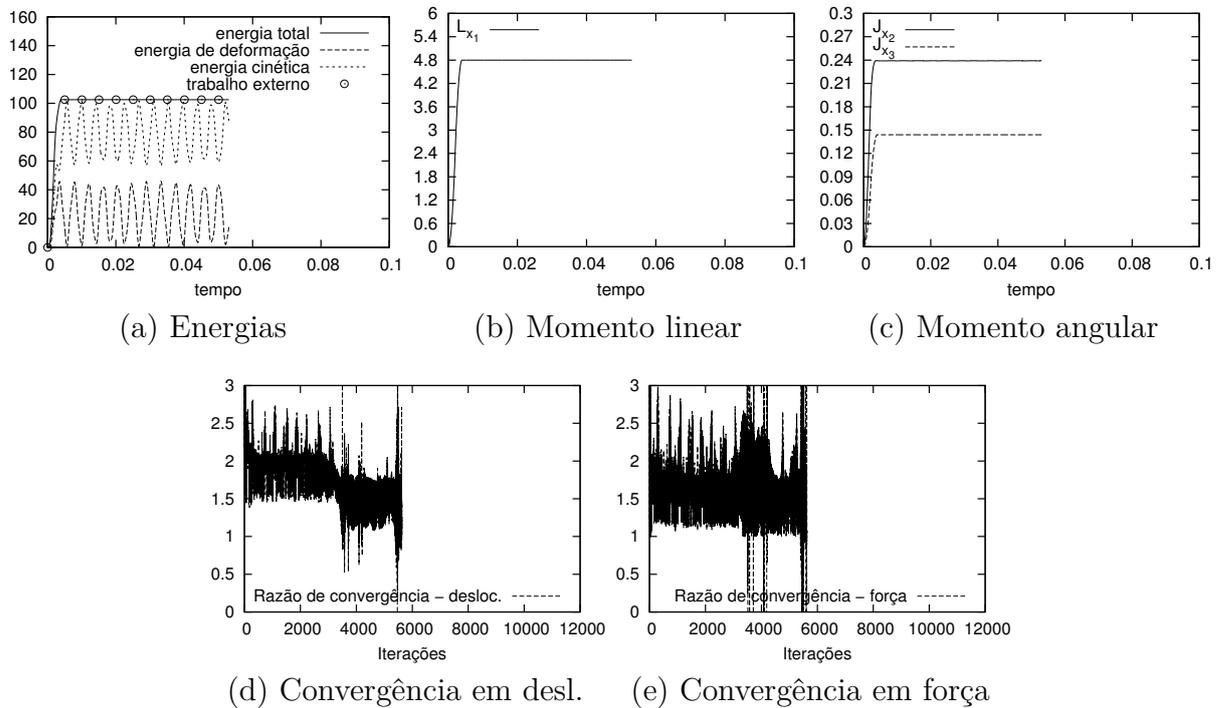


Figura 4.64: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.

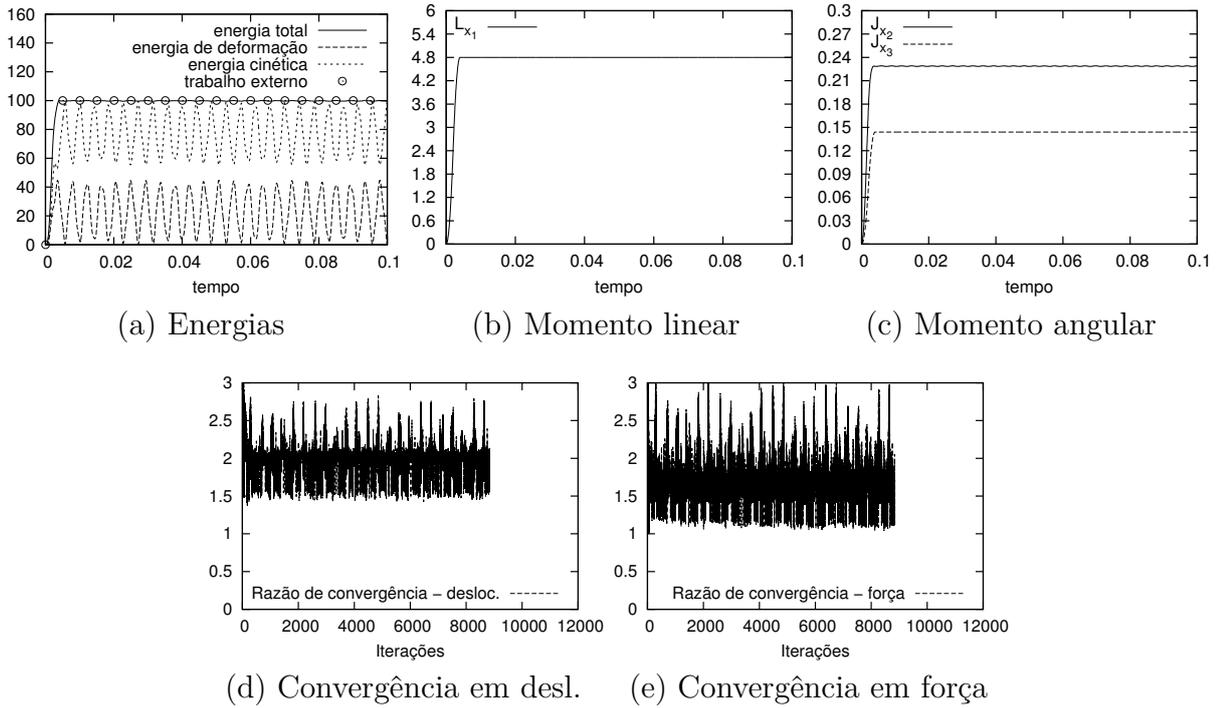


Figura 4.65: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) $G\alpha$ massa diagonalizada.

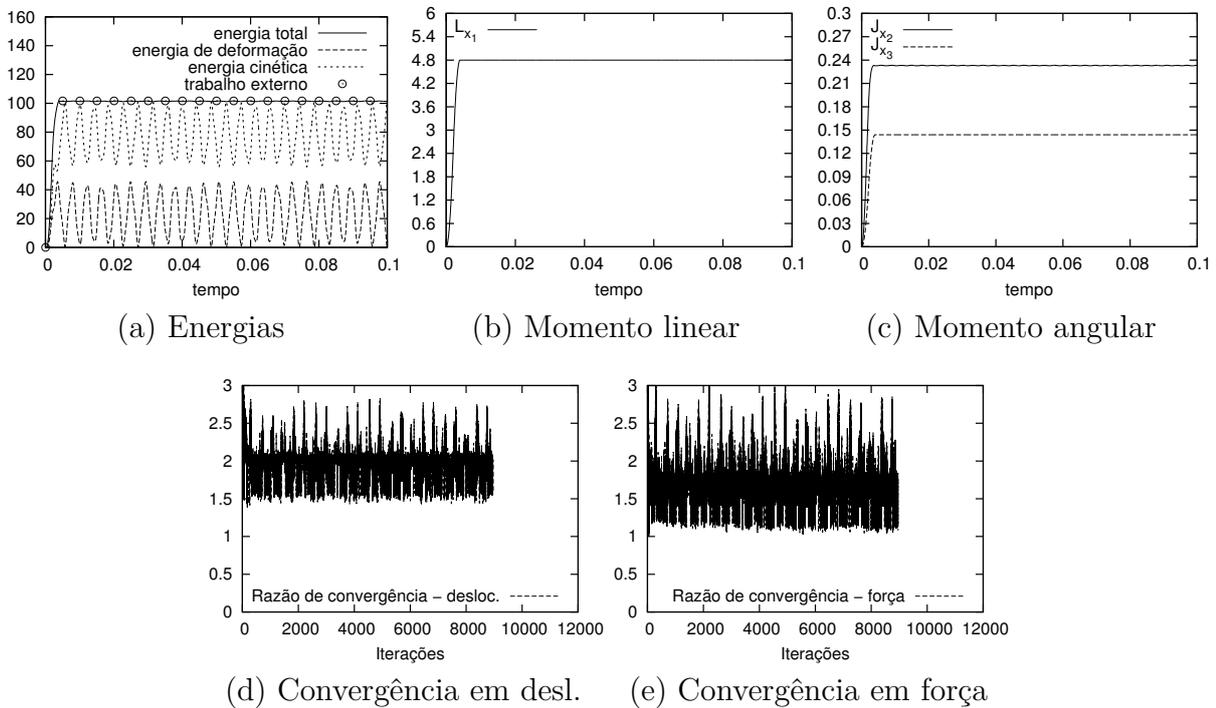


Figura 4.66: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) $G\alpha$ massa diagonalizada.

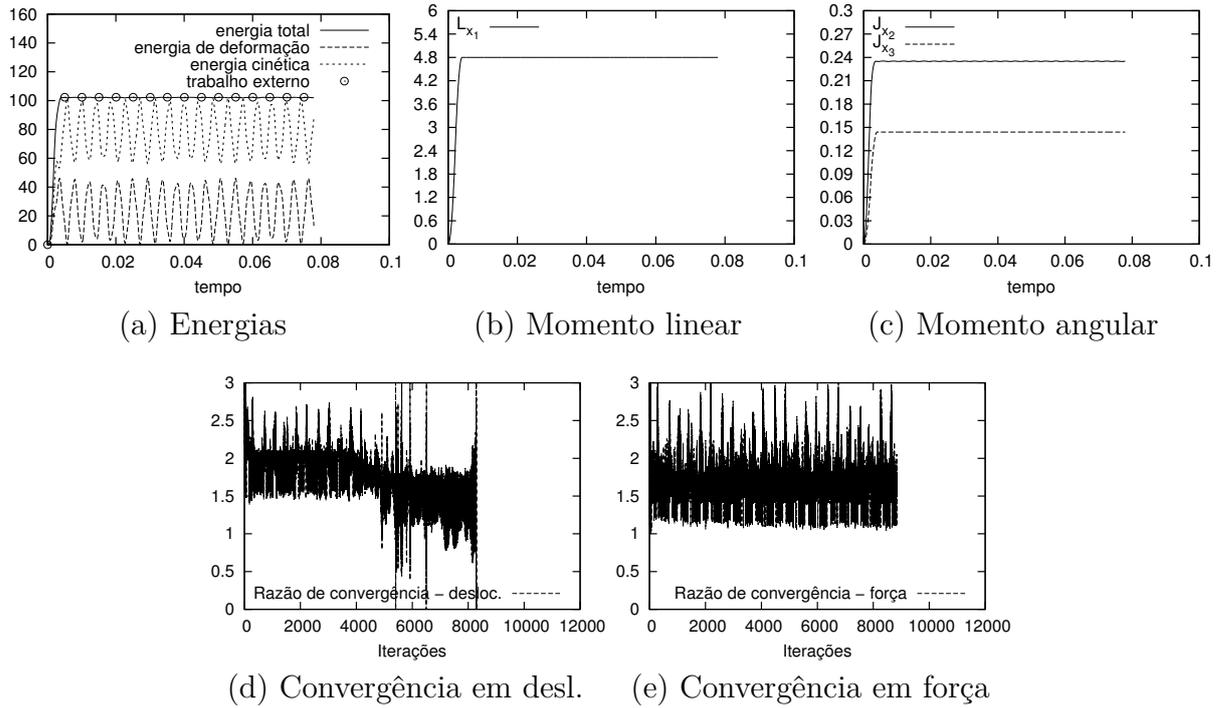


Figura 4.67: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) $G\alpha$ massa diagonalizada.

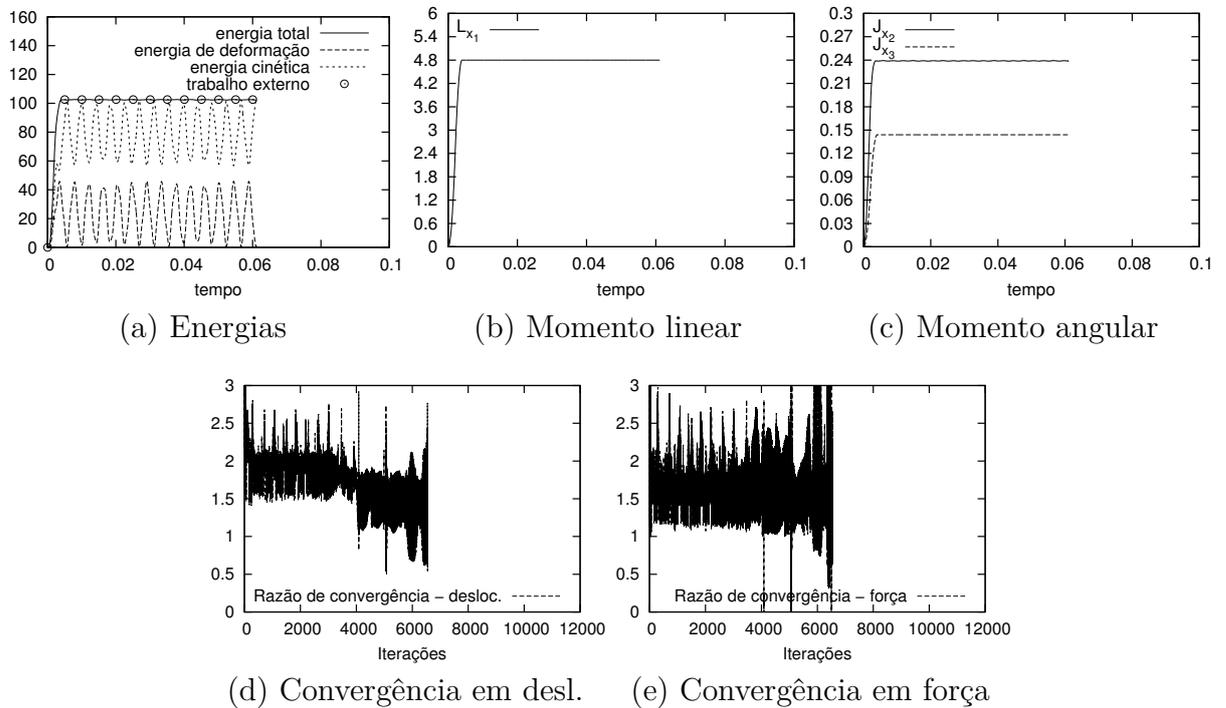


Figura 4.68: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) $G\alpha$ massa diagonalizada.

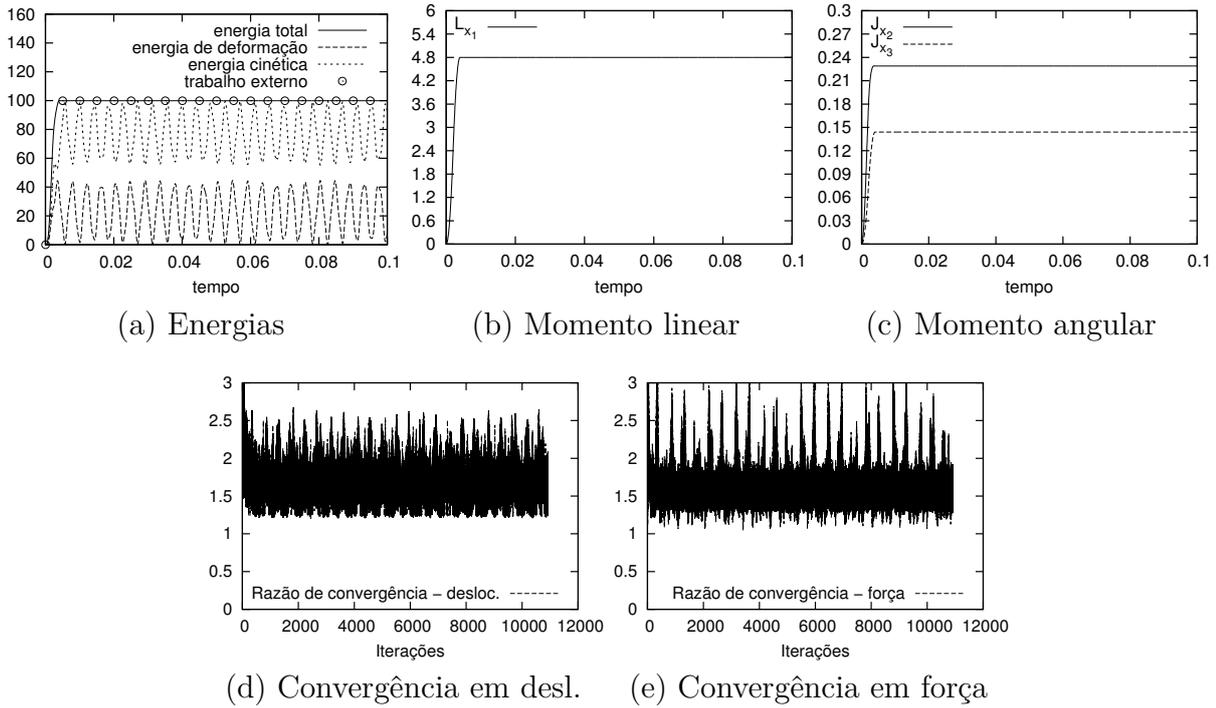


Figura 4.69: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente.

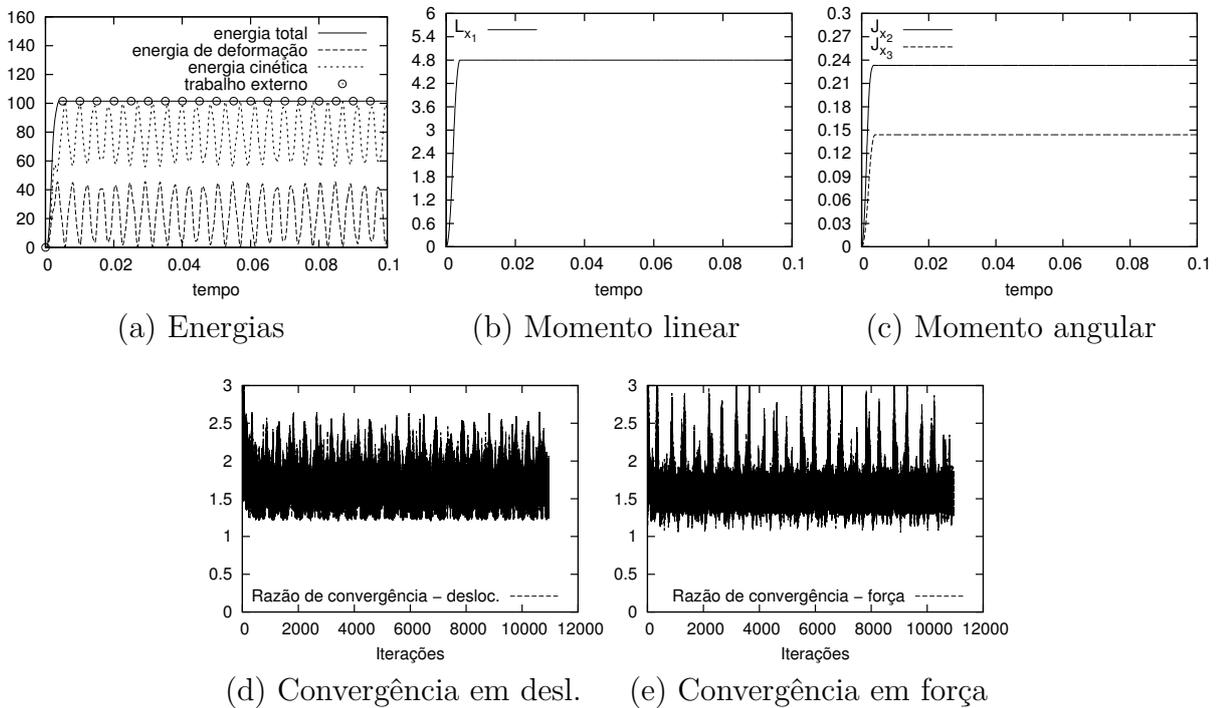


Figura 4.70: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa consistente.

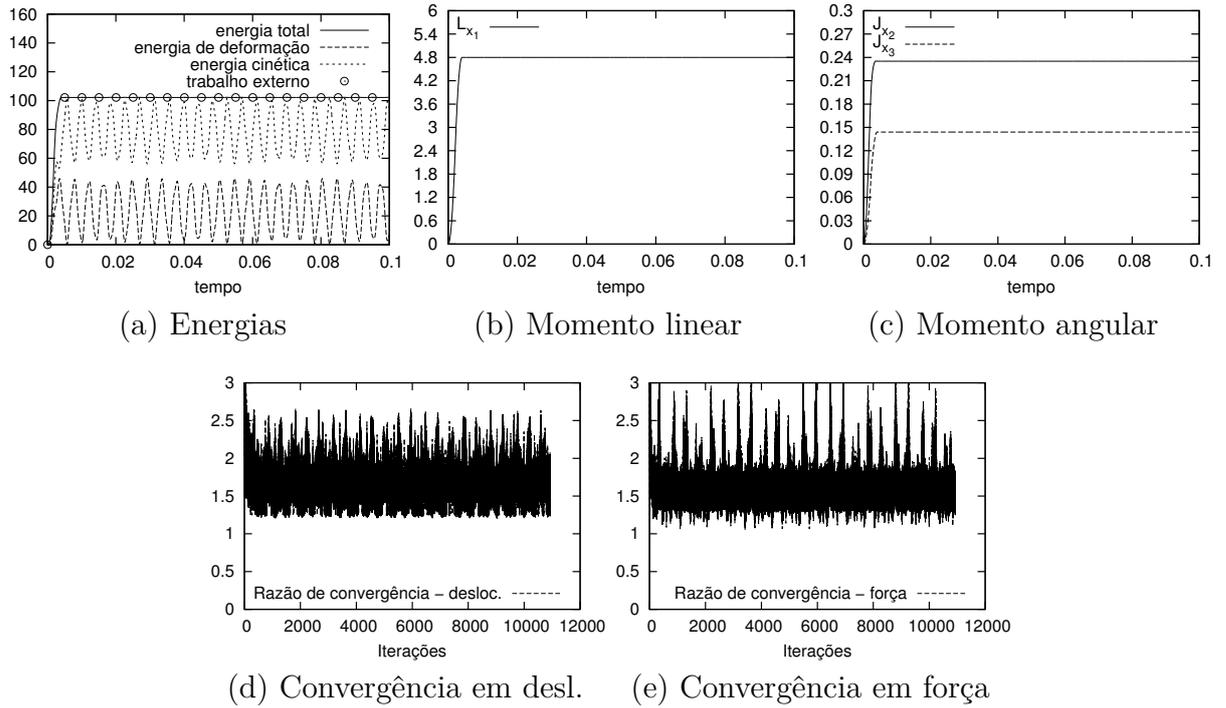


Figura 4.71: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa consistente.

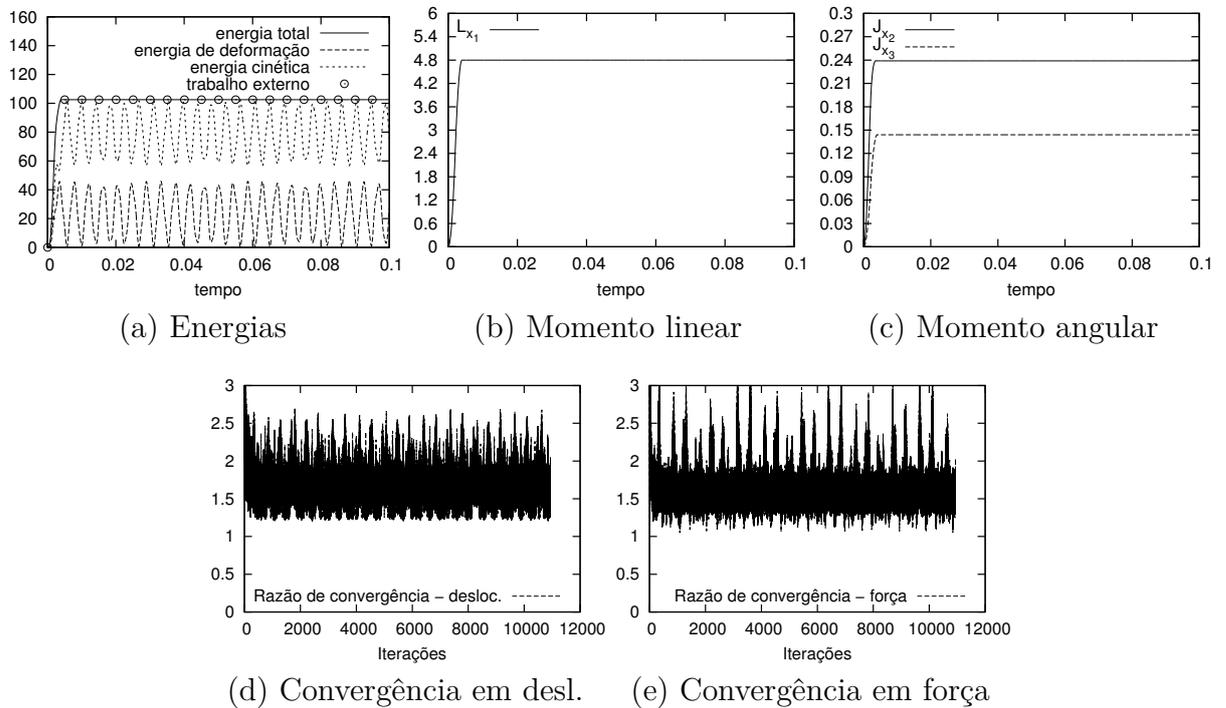


Figura 4.72: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente.

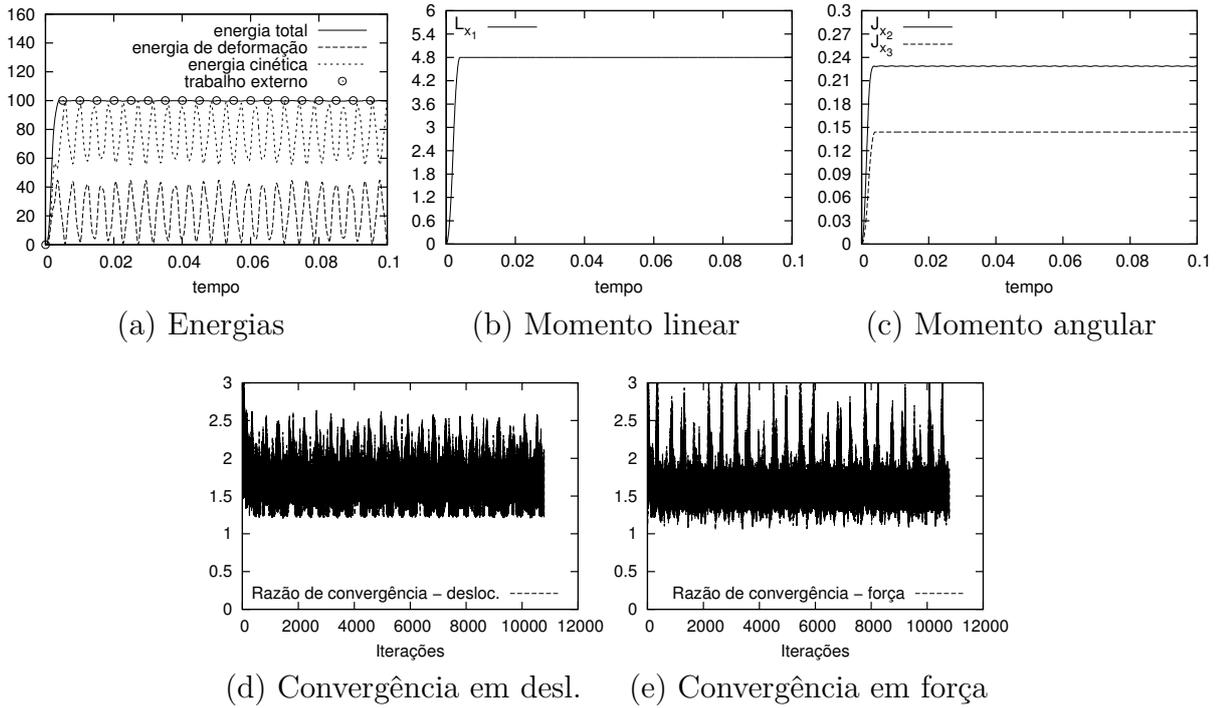


Figura 4.73: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^1) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

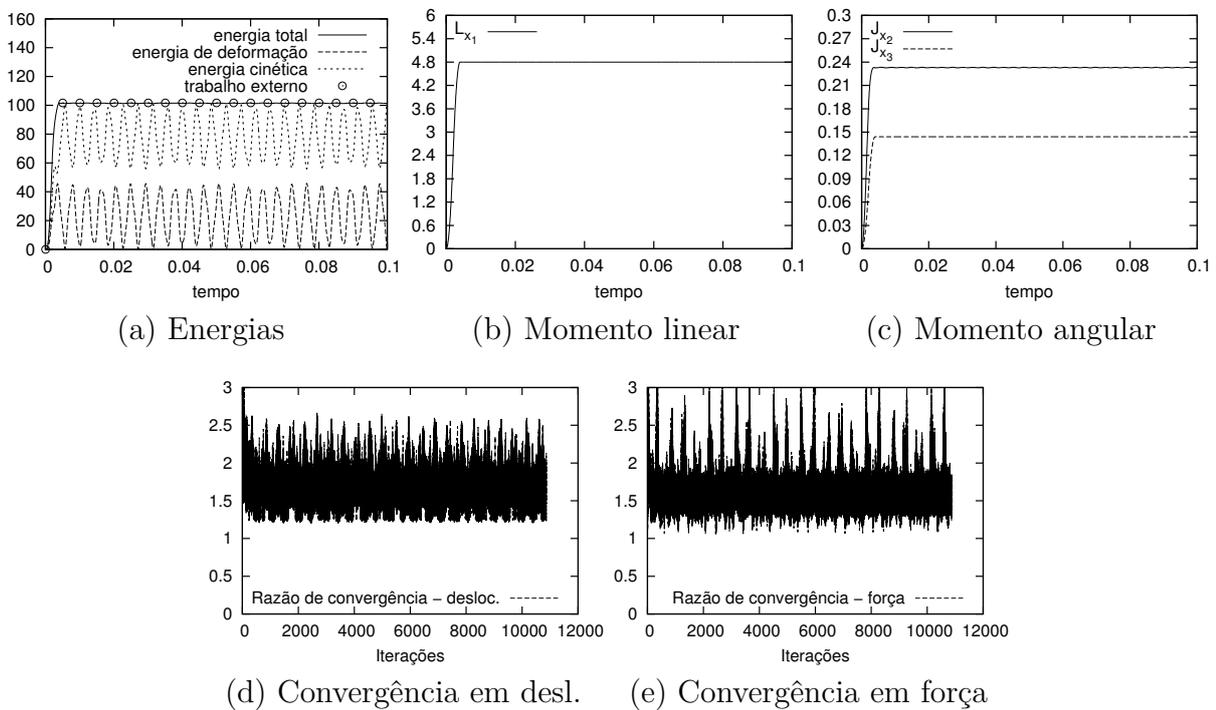


Figura 4.74: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^2) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

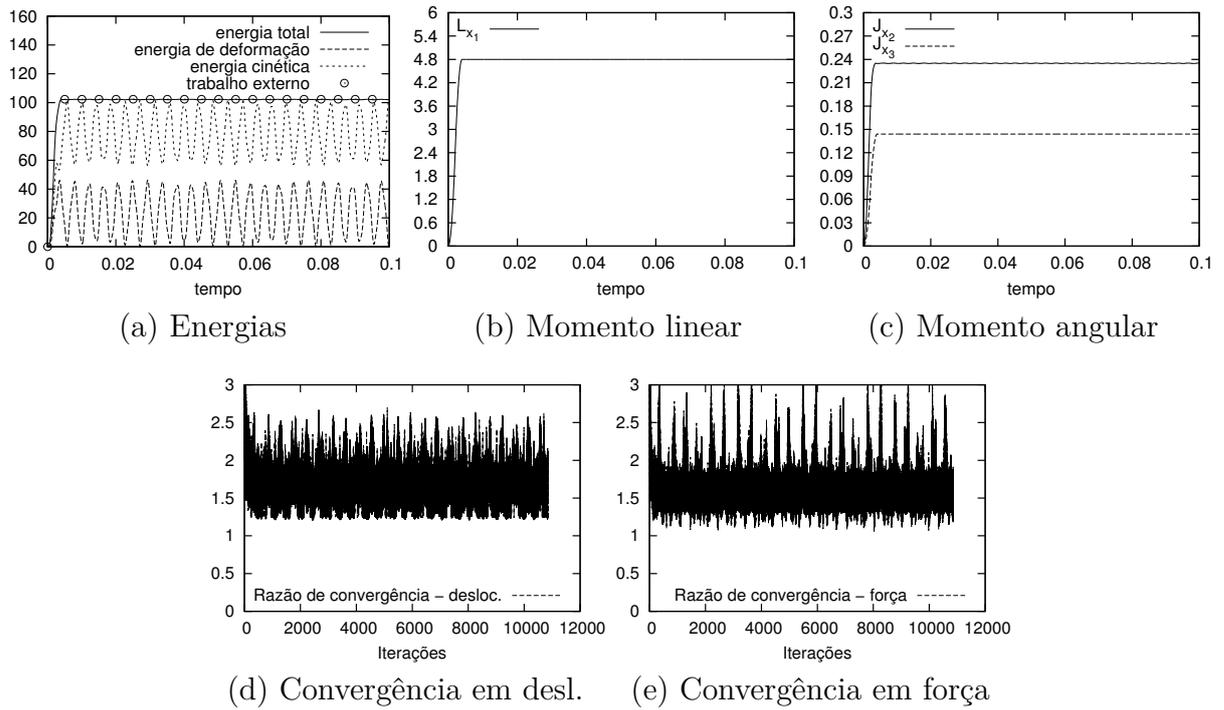


Figura 4.75: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^3) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

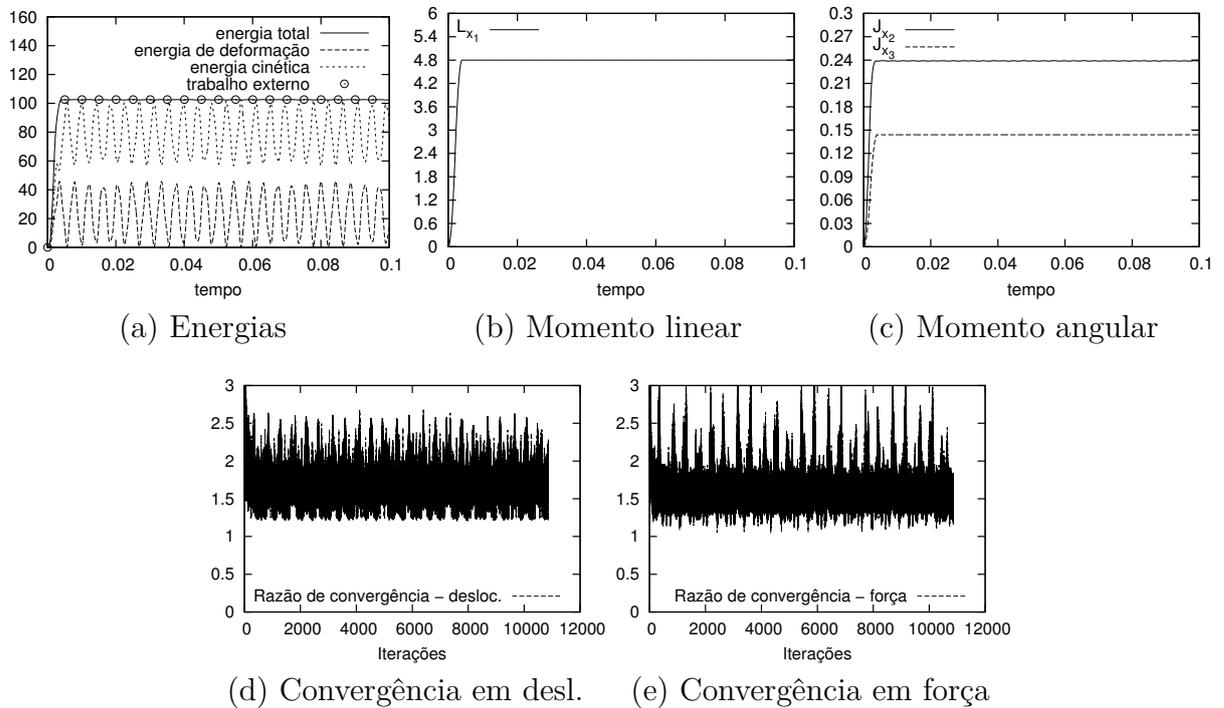


Figura 4.76: Régua voando ($\rho_\infty = 1.00$ e C^4) GEMM+ ξ massa diagonalizada.

4.8.4 Casca sujeita à flambagem dinâmica: (“*Snap-Through*” of *cylindrical shell*)

Este exemplo apresenta grandes dificuldades na representação adequada das altas frequências e diversos autores têm se debruçado sobre este exemplo para definir novos tipo de integração temporal para problemas não lineares.

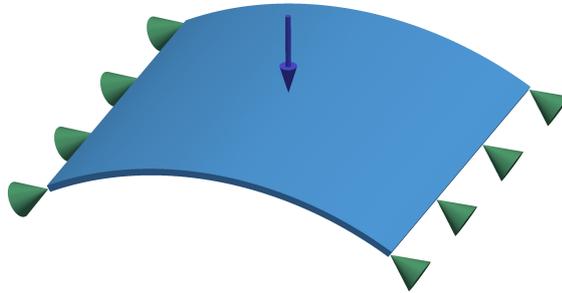
Este problema foi analisado por [Simo e Tarnow \(1992\)](#); [Kuhl e Ramm \(1996, 1999\)](#); [Balah e Al-Ghamedy \(2005\)](#). O incremento de tempo utilizado é $\Delta t = 0.0005$ e a carga no tempo é apresentada na Figura 4.77b. A casca é definida por um setor de circunferência de ângulo $\pi/3$ rad de raio 5.0, espessura 0.1 e comprimento 5.0. As propriedades materiais são: $E = 2.0 \times 10^{11}$, $\nu = 0.25$ e $\rho = 10^4$. Duas malhas foram testadas, para três valores de raios espectrais, como relatado na seção 4.8.1.

Este exemplo é de grande interesse visto que uma ampla gama de frequências estão presentes na resposta, incluindo altas frequências. Este fato, permite observar o efeito do raio espectral sobre a dissipação das altas frequências. Nas Figuras 4.80a e 4.83a, correspondentes às análises com $\rho_\infty = 0.50$ para classes C^1 e C^4 , pode-se constatar que o efeito do raio espectral só é observado quando a estrutura vibra sob alta frequência, tal fenômeno ocorre a partir do tempo $t \approx 0.15$, onde observa-se o afastamento das curvas de energia total e trabalho externo. De mesmo modo, observa-se que isto não ocorre para as análises realizadas com raios espectrais próximos à unidade $\rho_\infty = 0.90, 0.95$, no método $G\alpha$.

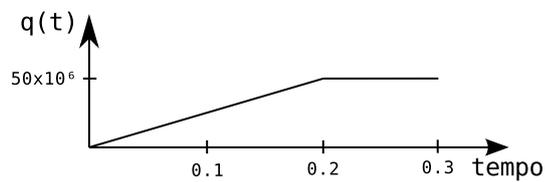
Quando compara-se o resultado obtido com os resultados apresentados por [Simo e Tarnow \(1992\)](#); [Kuhl e Ramm \(1996, 1999\)](#); [Balah e Al-Ghamedy \(2005\)](#) é fácil constatar que a análise que mais se aproxima são as realizadas com raios espectral $\rho_\infty = 0.50$. As análises realizadas por [Simo e Tarnow \(1992\)](#) com o método energia-momento, divergem no tempo $t \approx 0.16$. [Kuhl e Ramm \(1999\)](#) utiliza adaptação do passo de tempo, de modo que pode lidar facilmente com fenômenos de alta frequência. [Kuhl e Ramm \(1996\)](#) apresentam uma resposta que sugere que as altas frequências foram filtradas dando lugar apenas à baixas frequências (ver Figura 4.57b).

Nas Figuras 4.77a e 4.77 são apresentadas a geometria e as condições de contorno,

respectivamente. Nas Figuras 4.78 e 4.79 são apresentadas a sequência de configurações,



(a) Geometria e condições de contorno



(b) Carregamento

Figura 4.77: Geometria e condições de contorno.

correspondendo às etapas de pré-flambagem, flambagem e pós-flambagem, para a análise da malha msh1 para o método $G\alpha$ com raio espectral $\rho_\infty = 0.50$ e para o método GEMM+ ξ com raio espectral $\rho_\infty = 0.95$. Para avaliar o nível de dissipação numérica,

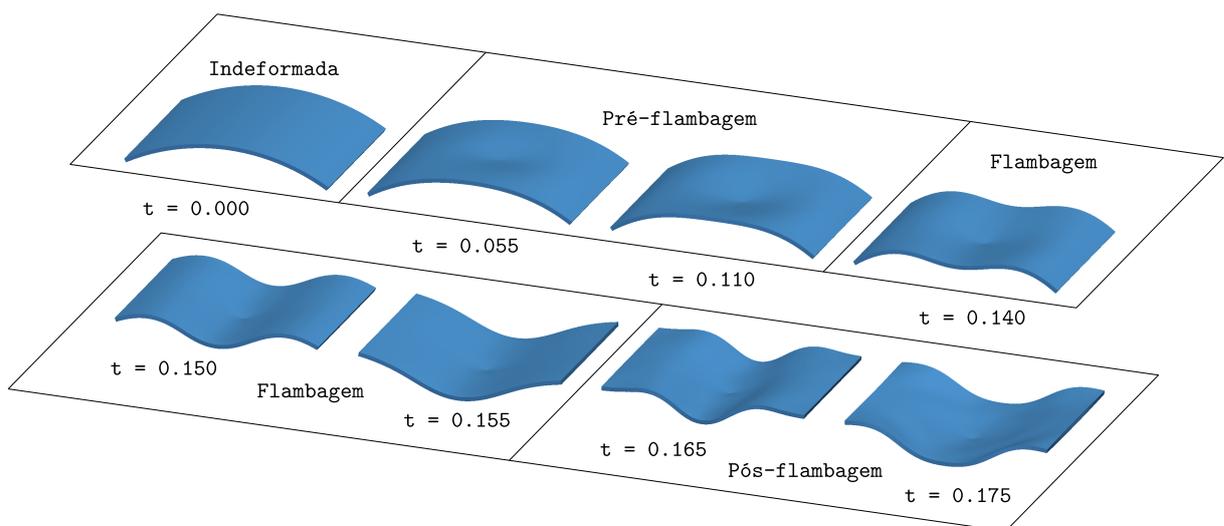


Figura 4.78: Sucessivas configurações: $G\alpha$.

avaliaram-se diversos raios espectrais para diversas classes de continuidade. Na Tabela 4.10 é apresentado quais análises convergiram durante o tempo de análise e quais análises

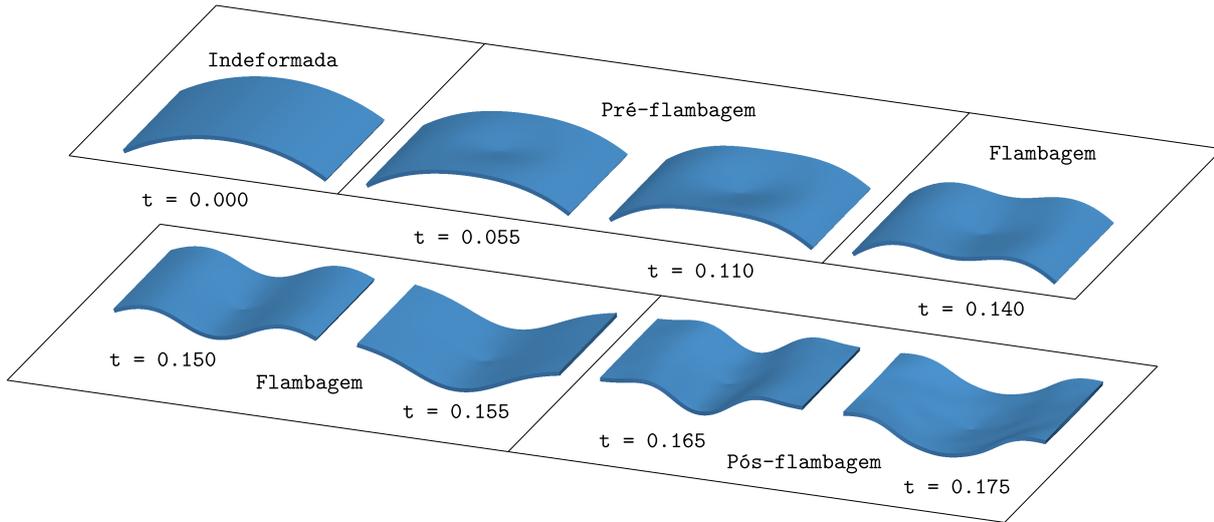


Figura 4.79: Sucessivas configurações: GEMM+ ξ .

falharam, assim como o tempo para o qual o algoritmo falhou, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade. Na Tabela 4.11 é apresentado o nível

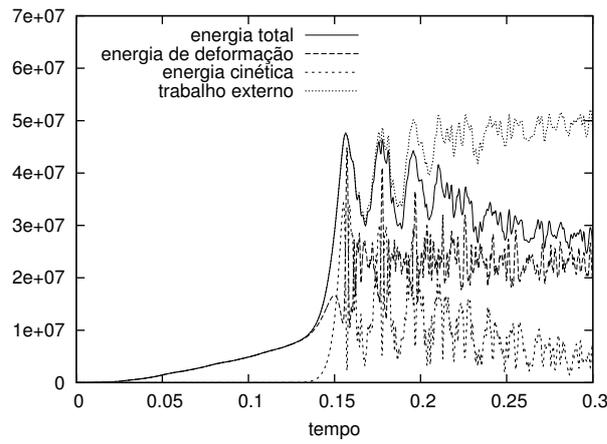
Tabela 4.10: Convergência das análises dinâmicas não lineares e tempo de falha.

ρ_∞	C^1	C^4
G α massa consistente		
0.50	conv.	conv.
0.90	conv.	falha $t_f = 0.2934s$
0.95	falha $t_f = 0.2952s$	falha $t_f = 0.2910s$
GEMM+ ξ massa consistente		
1.00	conv.	conv.

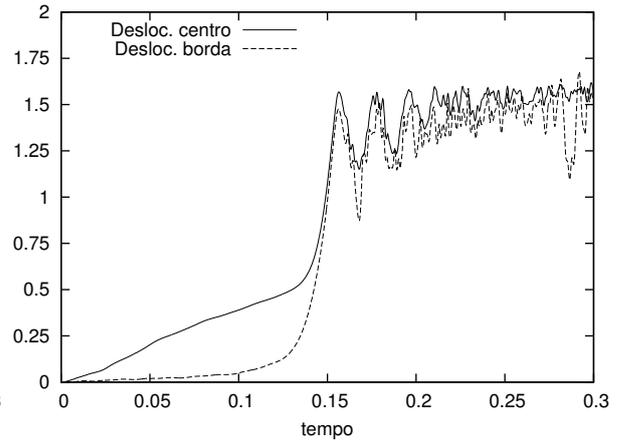
máximo de dissipação observado nas análises, para diferentes raios espectrais e diferentes classes de continuidade.

Tabela 4.11: Nível de dissipação máxima em termos da energia total durante as análises.

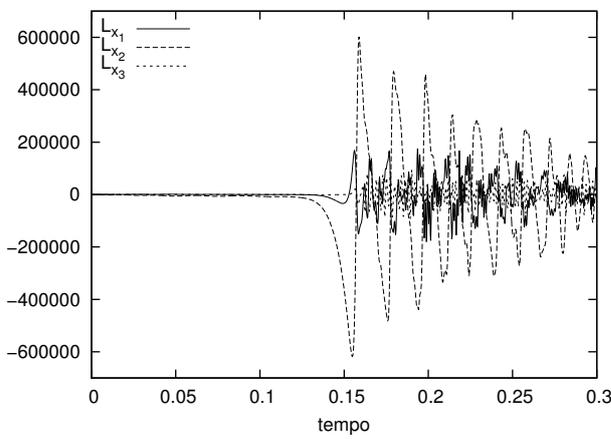
ρ_∞	C^1	C^4
G α massa consistente		
0.50	51%	47%
0.90	7%	8%
0.95	1%	1%
GEMM+ ξ massa consistente		
0.90	64%	57%
0.95	46%	46%
↑ indica aumento de energia.		



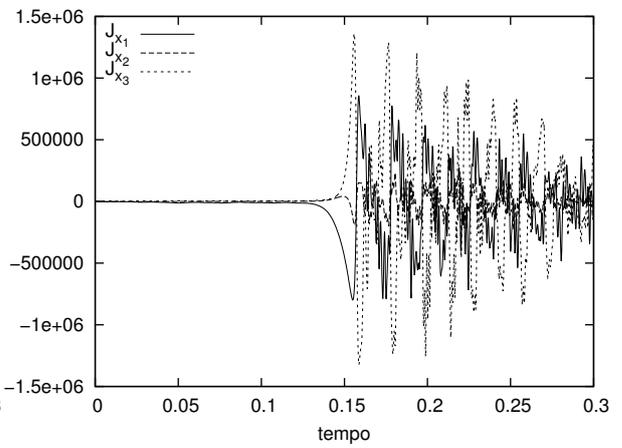
(a) Energias



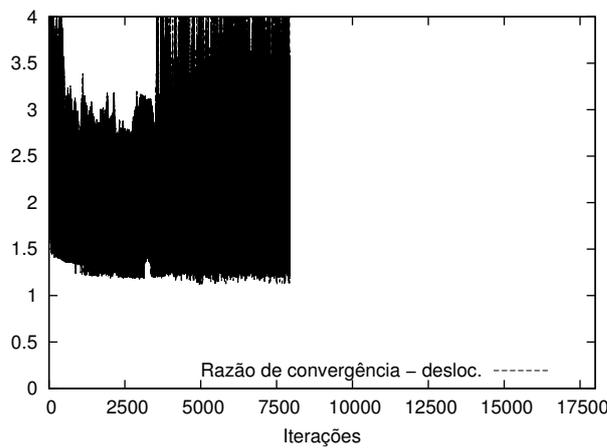
(b) Desl. vertical



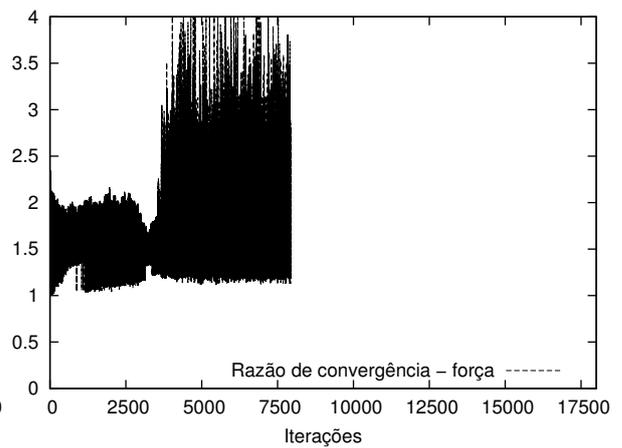
(c) Momento linear



(d) Momento angular

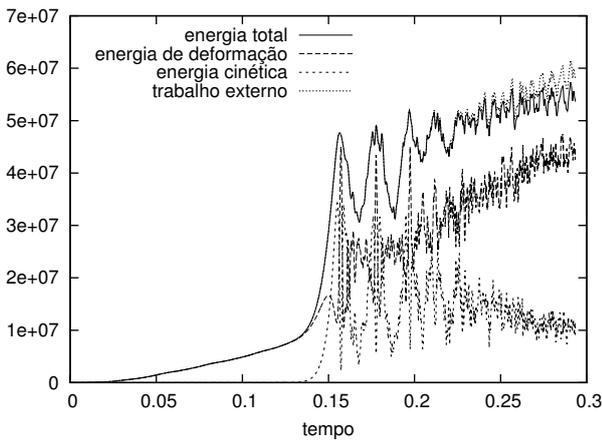


(e) Convergência em desl.

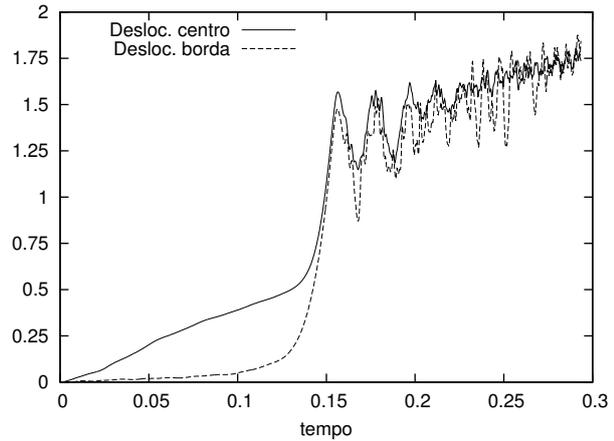


(f) Convergência em força

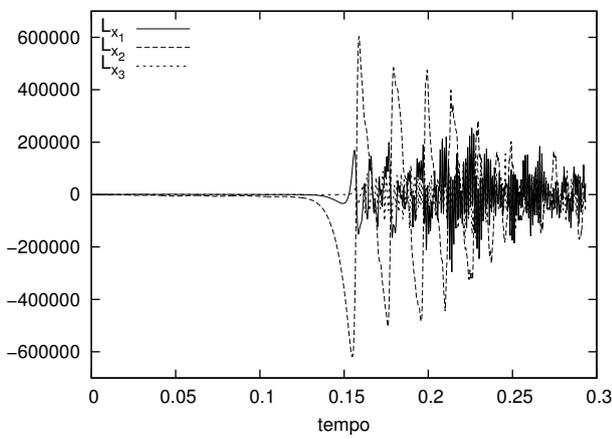
Figura 4.80: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.50$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.



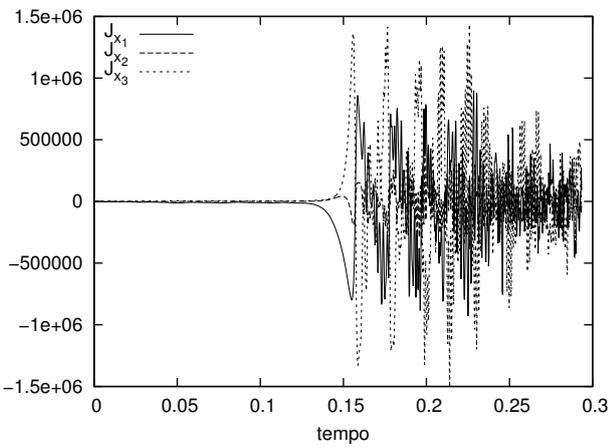
(a) Energias



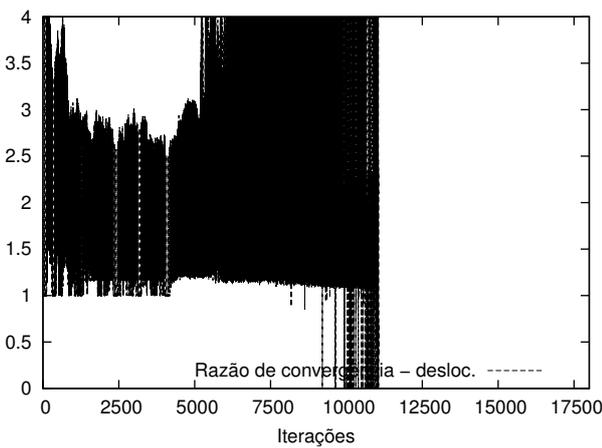
(b) Desl. vertical



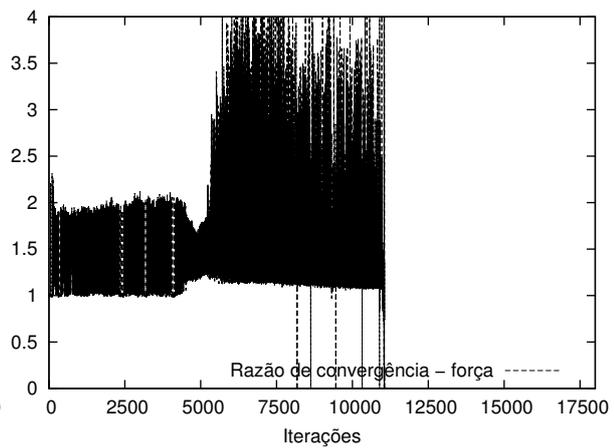
(c) Momento linear



(d) Momento angular

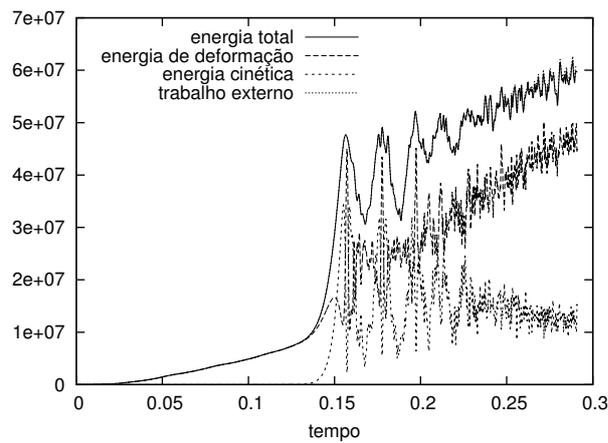


(e) Convergência em desl.

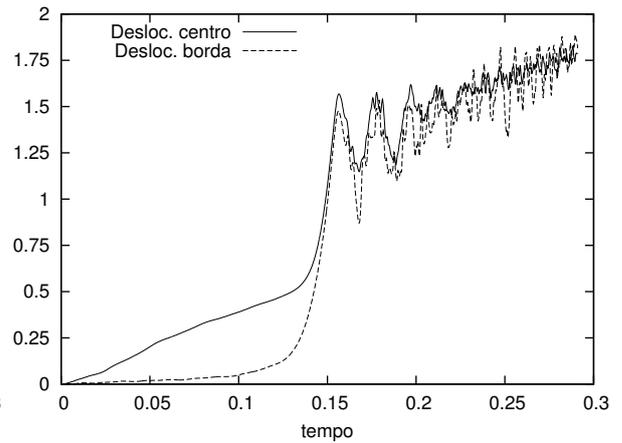


(f) Convergência em força

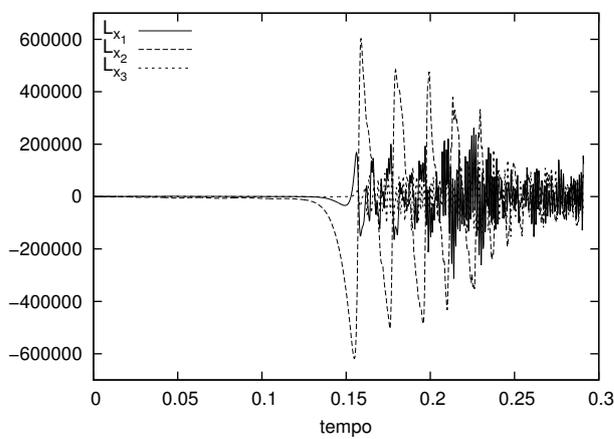
Figura 4.81: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.



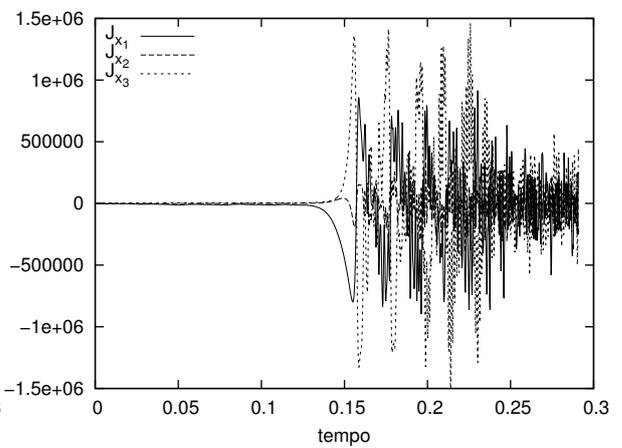
(a) Energias



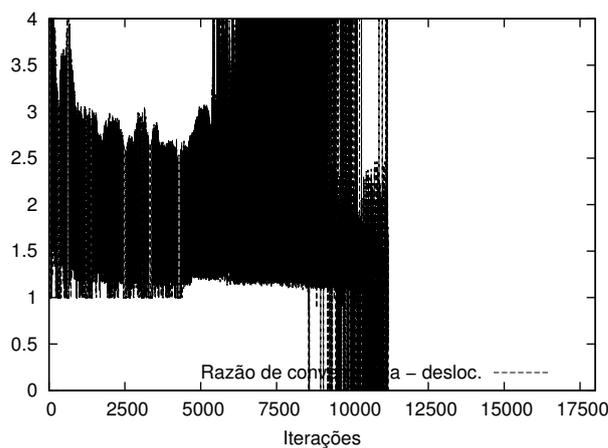
(b) Desl. vertical



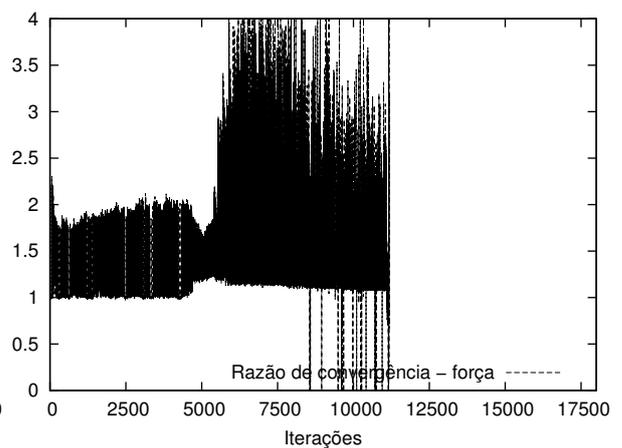
(c) Momento linear



(d) Momento angular

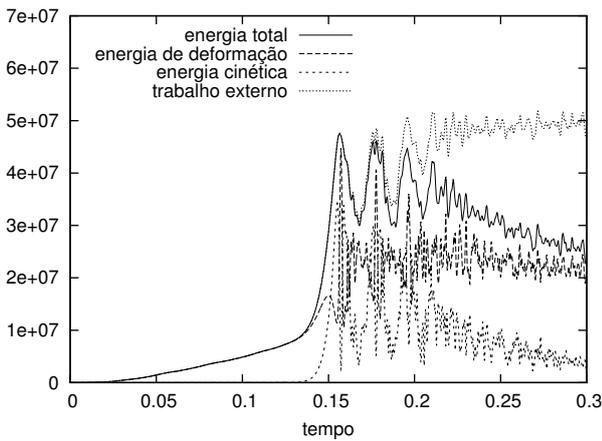


(e) Convergência em desl.

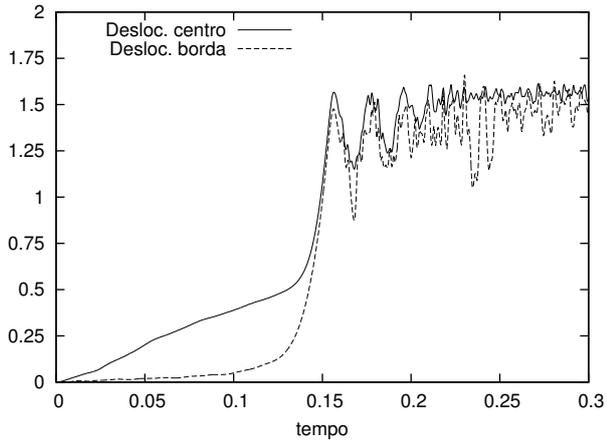


(f) Convergência em força

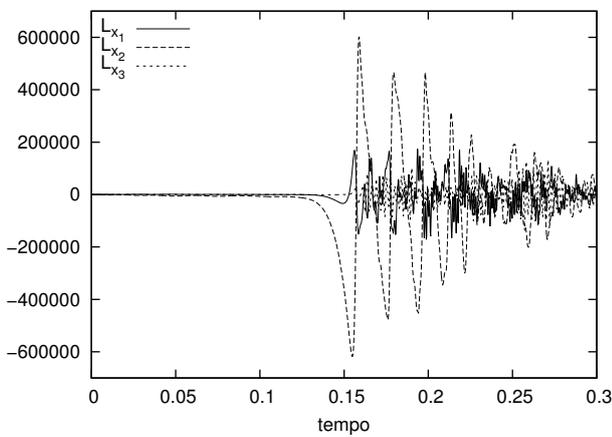
Figura 4.82: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0,95$ e C^1) $G\alpha$ massa consistente.



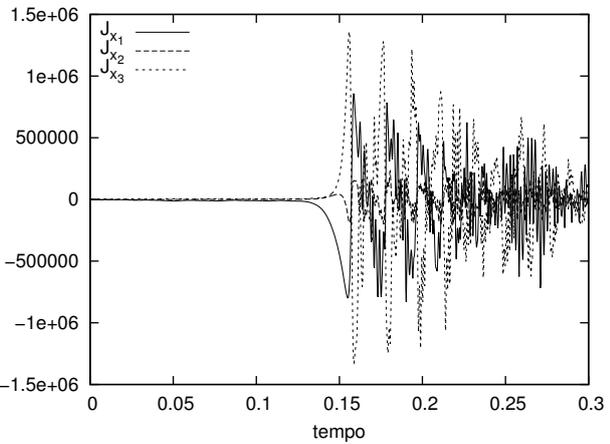
(a) Energias



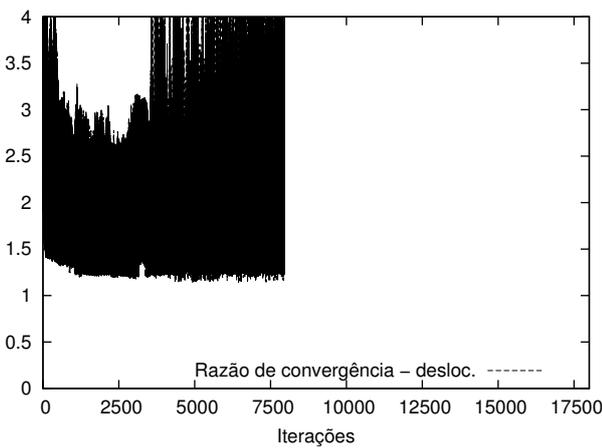
(b) Desl. vertical



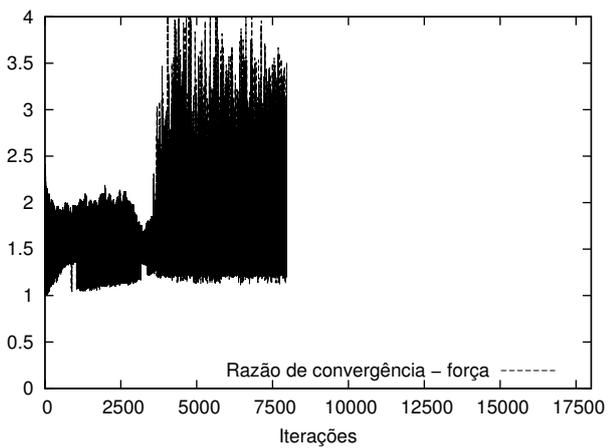
(c) Momento linear



(d) Momento angular

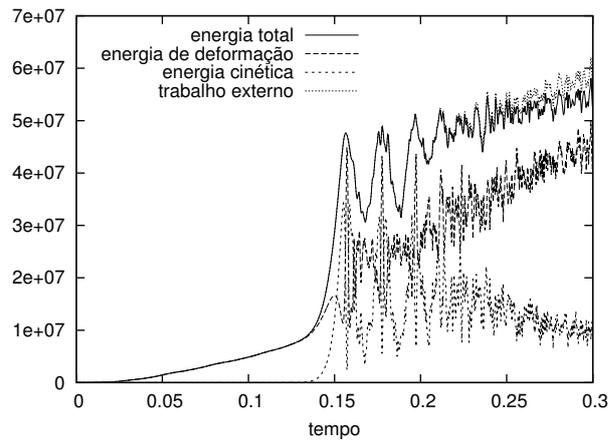


(e) Convergência em desl.

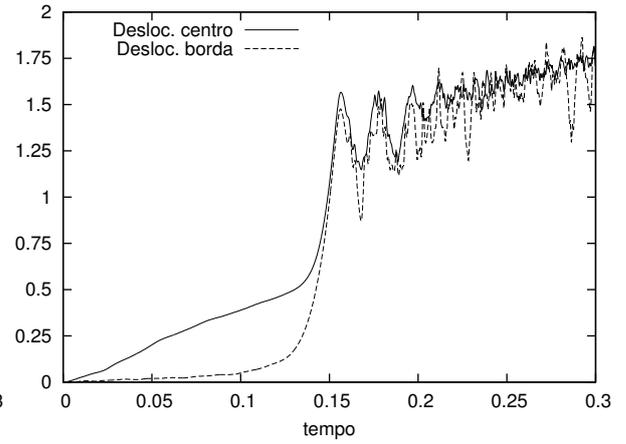


(f) Convergência em força

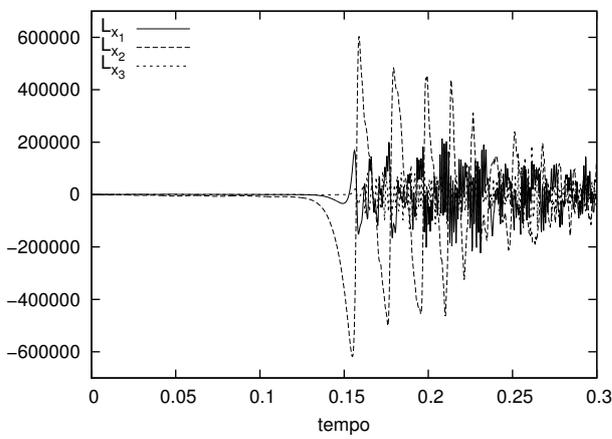
Figura 4.83: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.50$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.



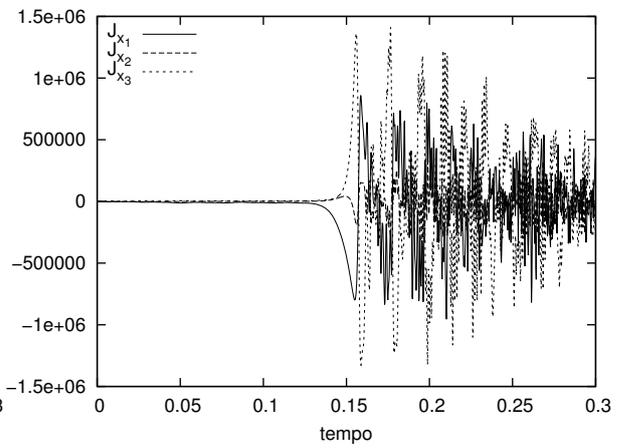
(a) Energias



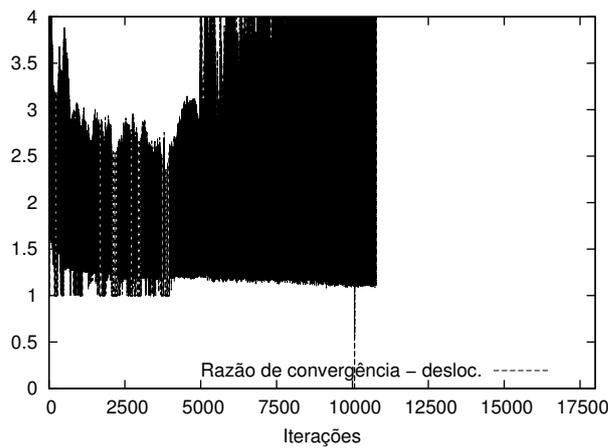
(b) Desl. vertical



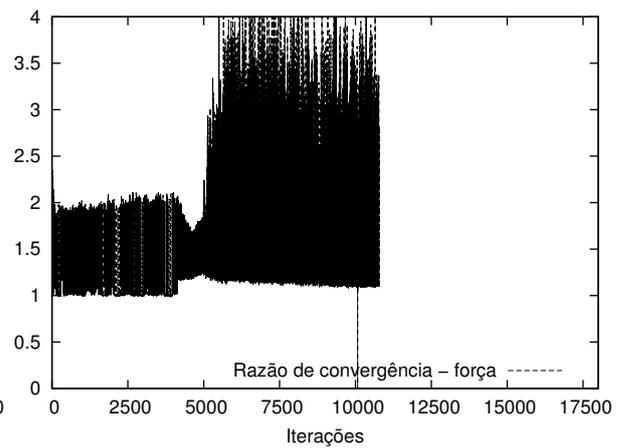
(c) Momento linear



(d) Momento angular

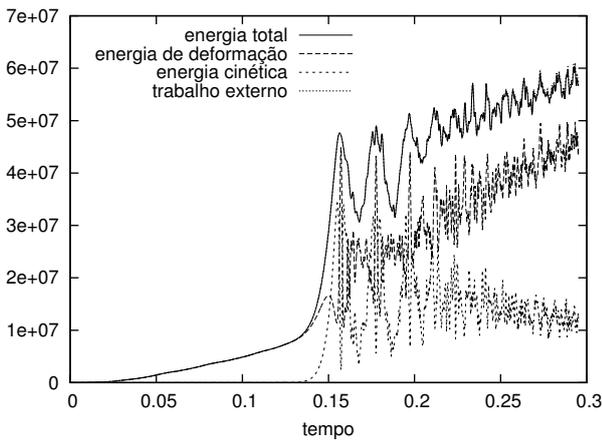


(e) Convergência em desl.

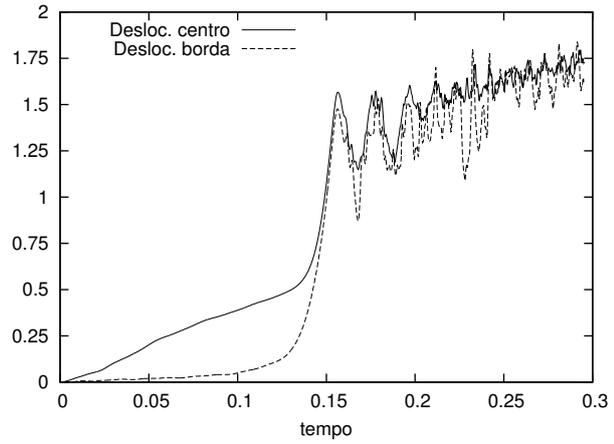


(f) Convergência em força

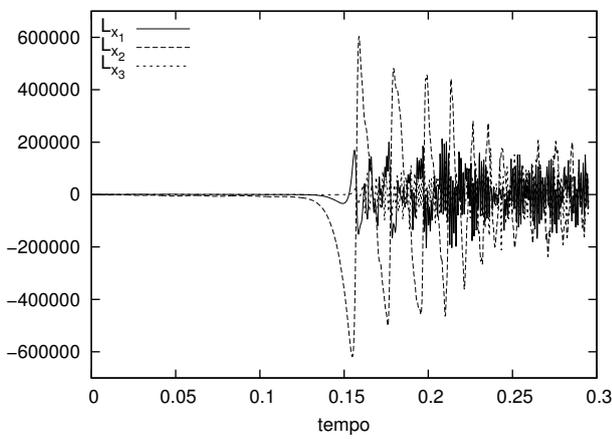
Figura 4.84: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0,90$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.



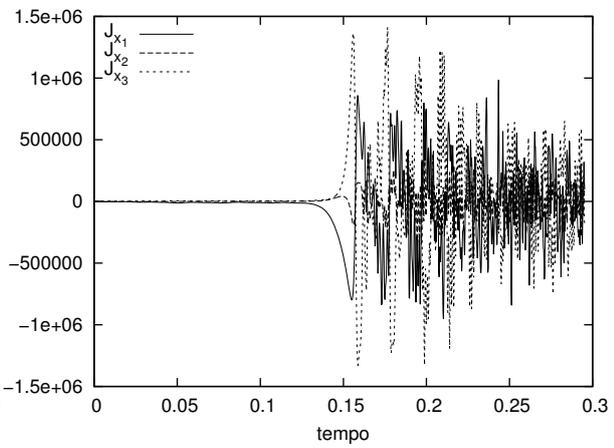
(a) Energias



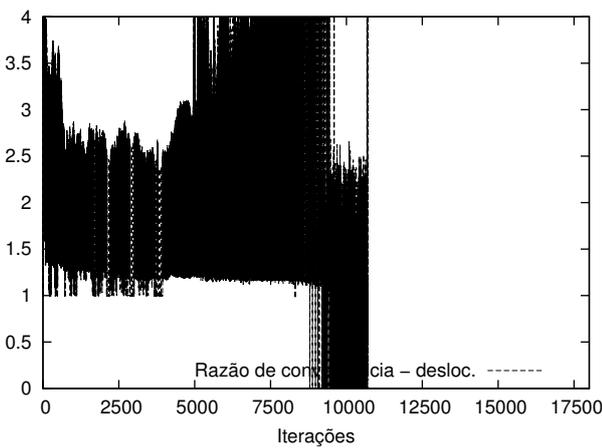
(b) Desl. vertical



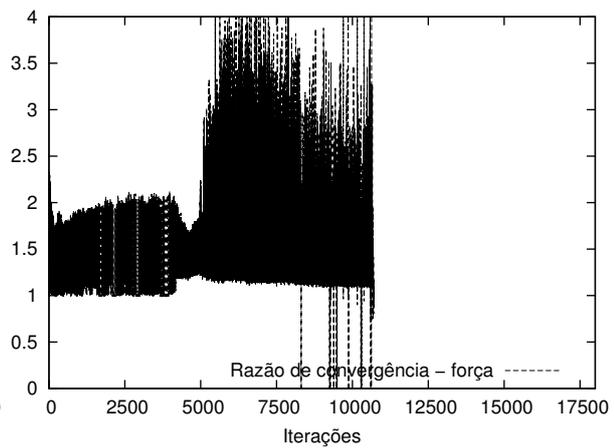
(c) Momento linear



(d) Momento angular

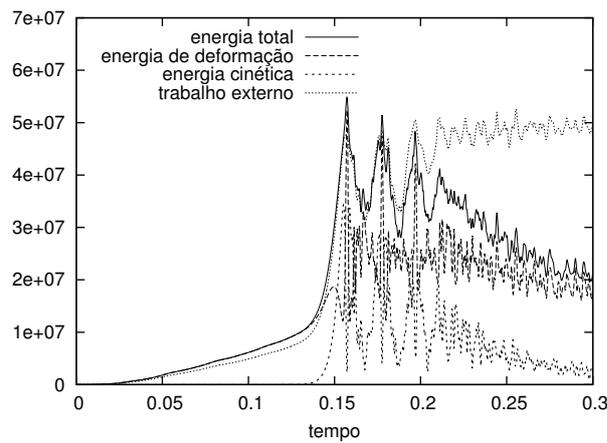


(e) Convergência em desl.

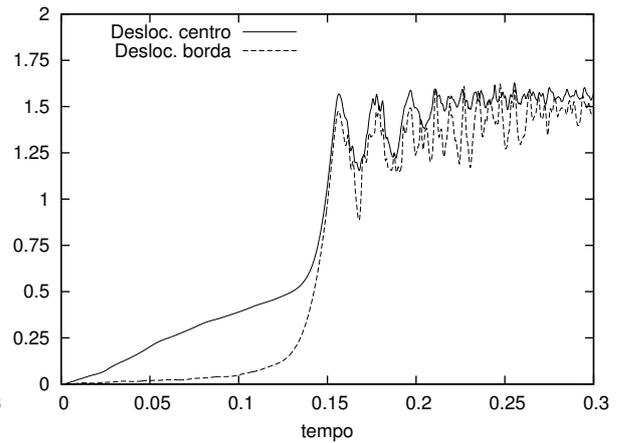


(f) Convergência em força

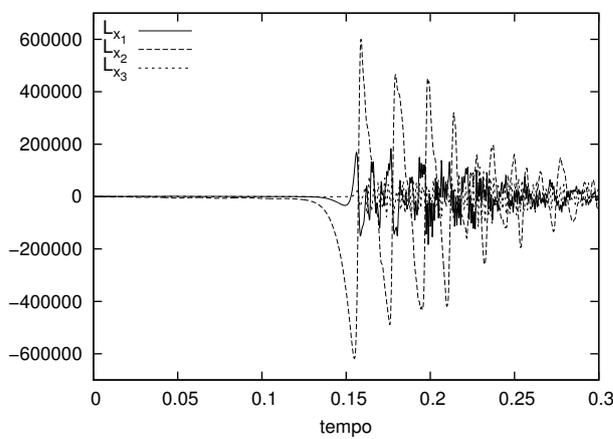
Figura 4.85: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) $G\alpha$ massa consistente.



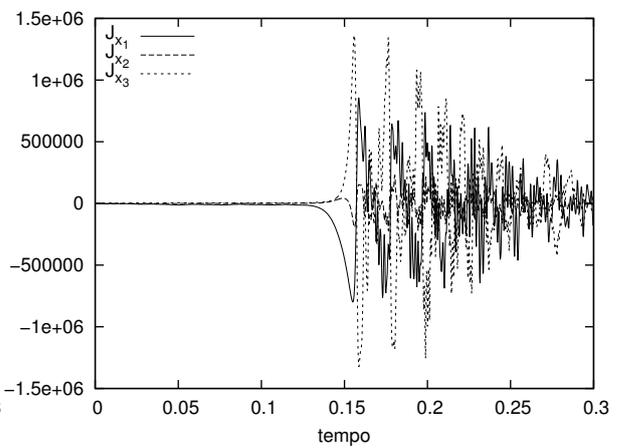
(a) Energias



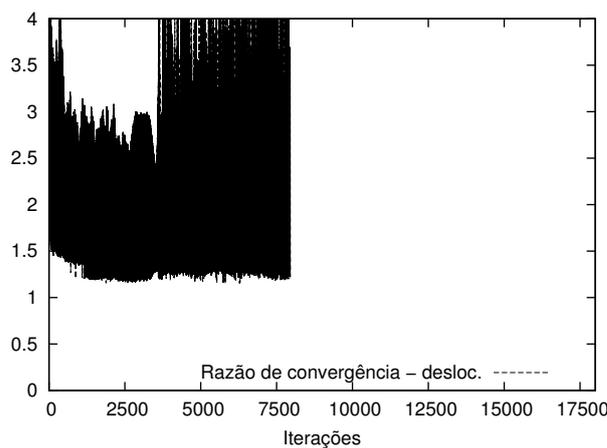
(b) Desl. vertical



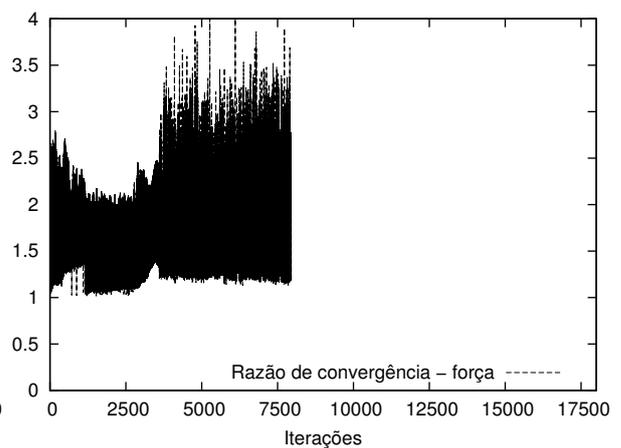
(c) Momento linear



(d) Momento angular



(e) Convergência em desl.



(f) Convergência em força

Figura 4.86: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente.

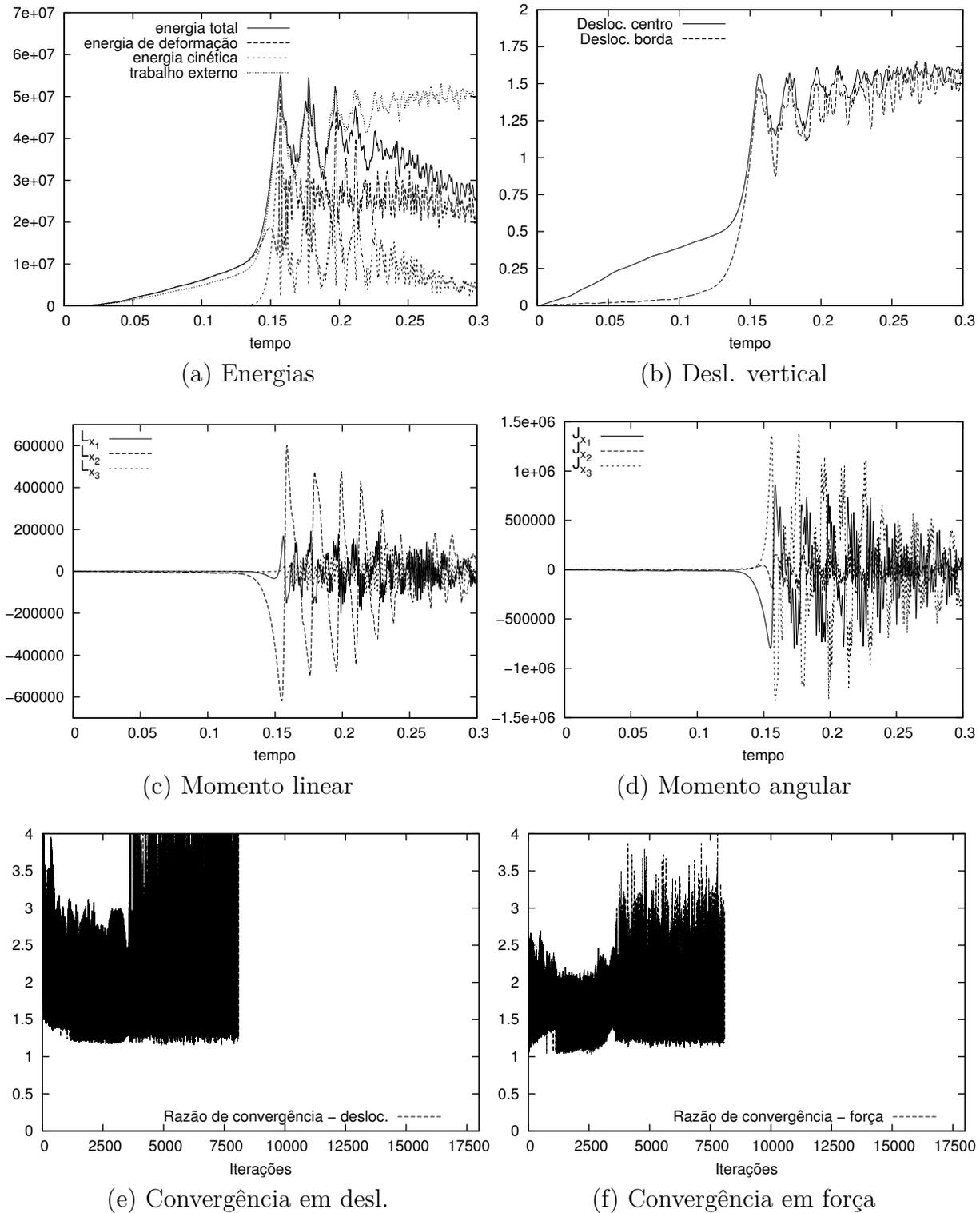
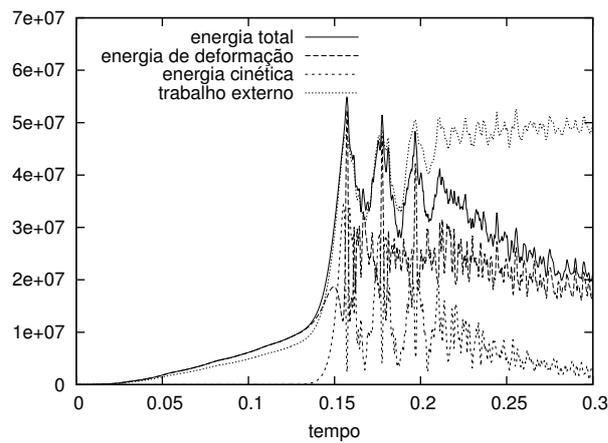
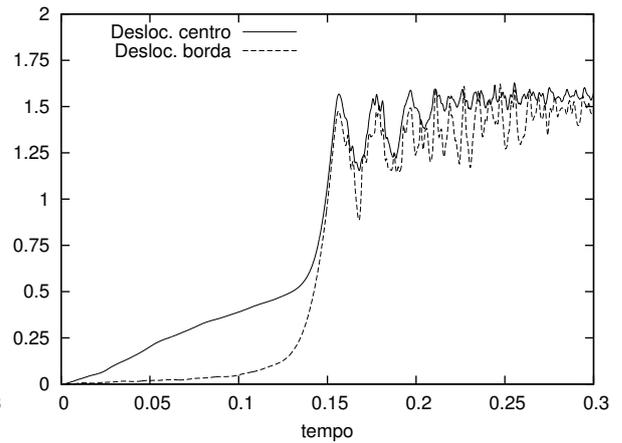


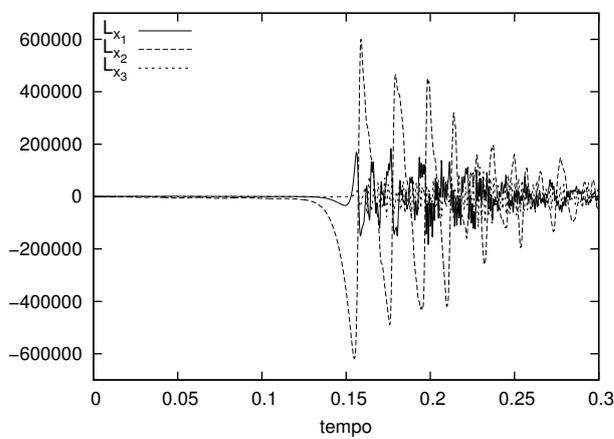
Figura 4.87: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^1) GEMM+ ξ massa consistente.



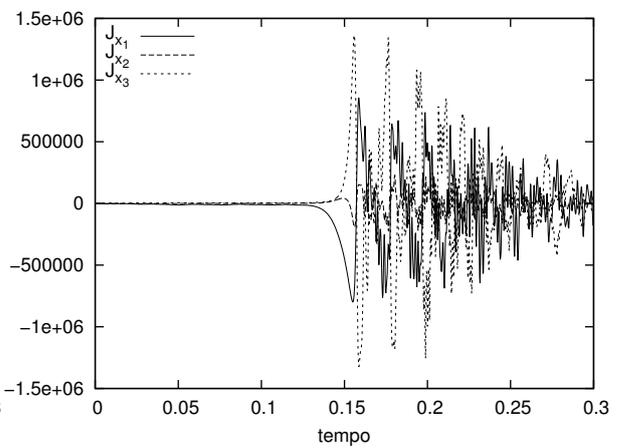
(a) Energias



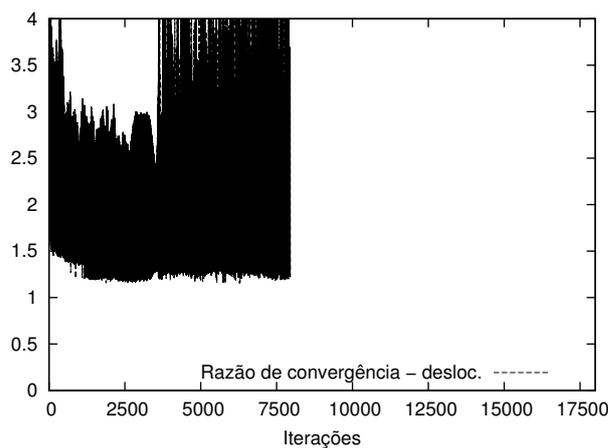
(b) Desl. vertical



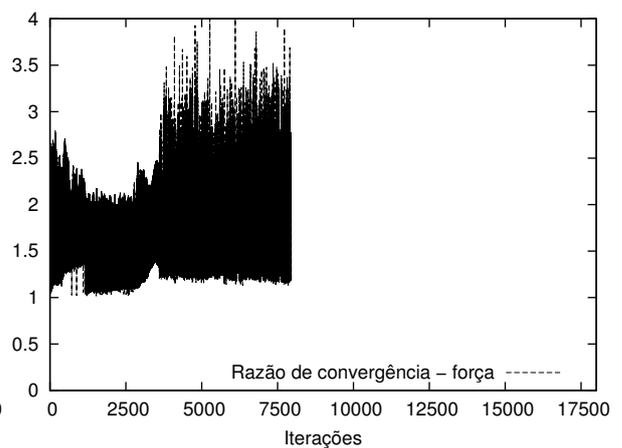
(c) Momento linear



(d) Momento angular

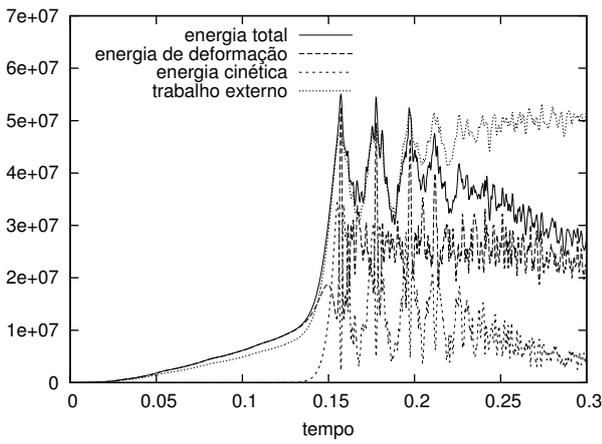


(e) Convergência em desl.

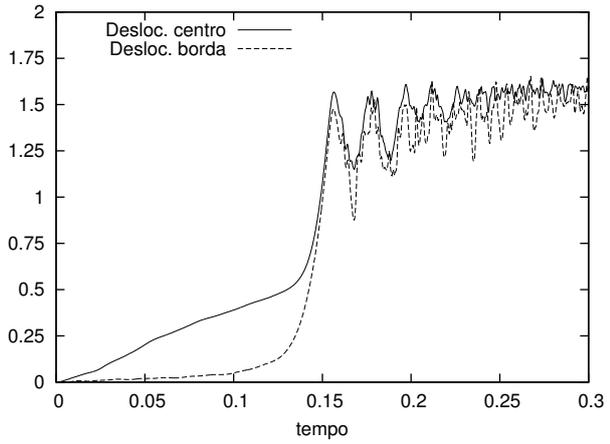


(f) Convergência em força

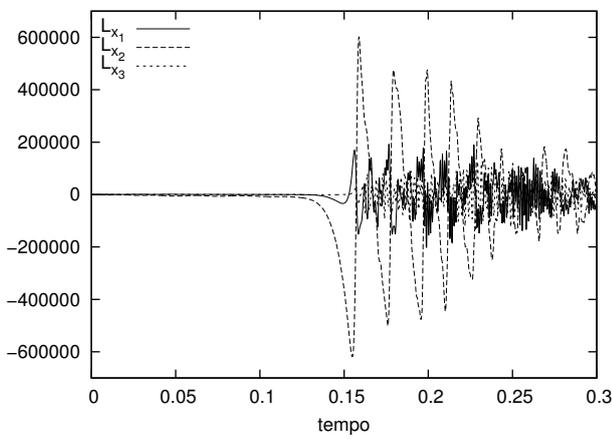
Figura 4.88: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0,90$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente.



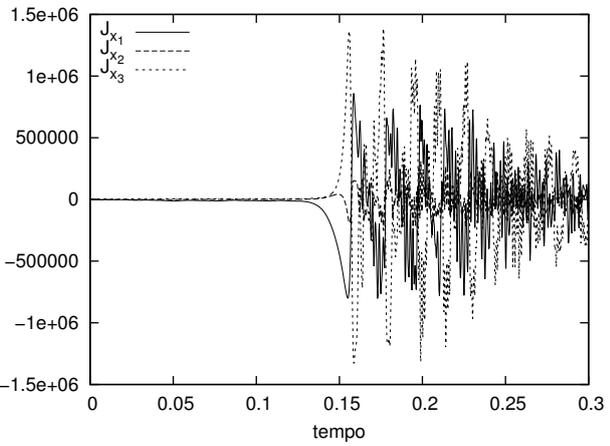
(a) Energias



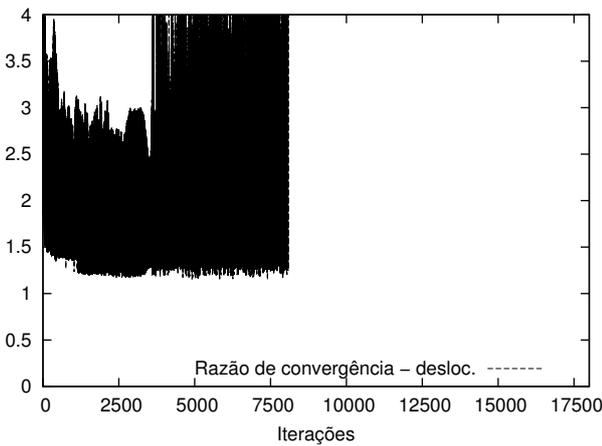
(b) Desl. vertical



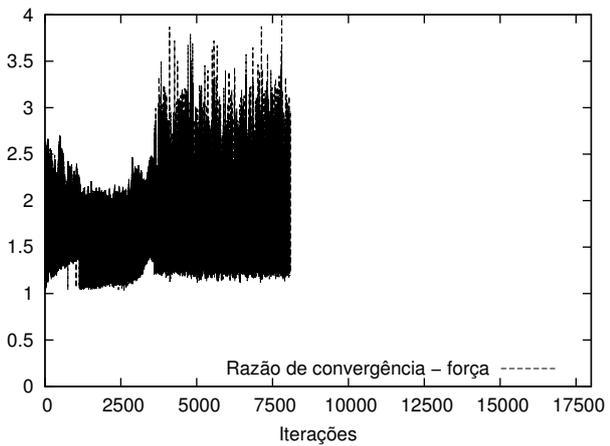
(c) Momento linear



(d) Momento angular



(e) Convergência em desl.



(f) Convergência em força

Figura 4.89: Casca sujeita à flambagem dinâmica ($\rho_\infty = 0.95$ e C^4) GEMM+ ξ massa consistente.

Na Figura 4.57a é apresentado o resultado, do deslocamento do centro da casca, do presente trabalho contra os apresentados pelo Abaqus (esta análise foi realizada explicitamente) e por Kuhl e Ramm (1999), enquanto na Figura 4.57b o resultado é avaliado contra os apresentados por Kuhl e Ramm (1996); Balah e Al-Ghamedy (2005) Observar que todos os resultados apresentados nas Figuras 4.90 não coincidem, sugerindo

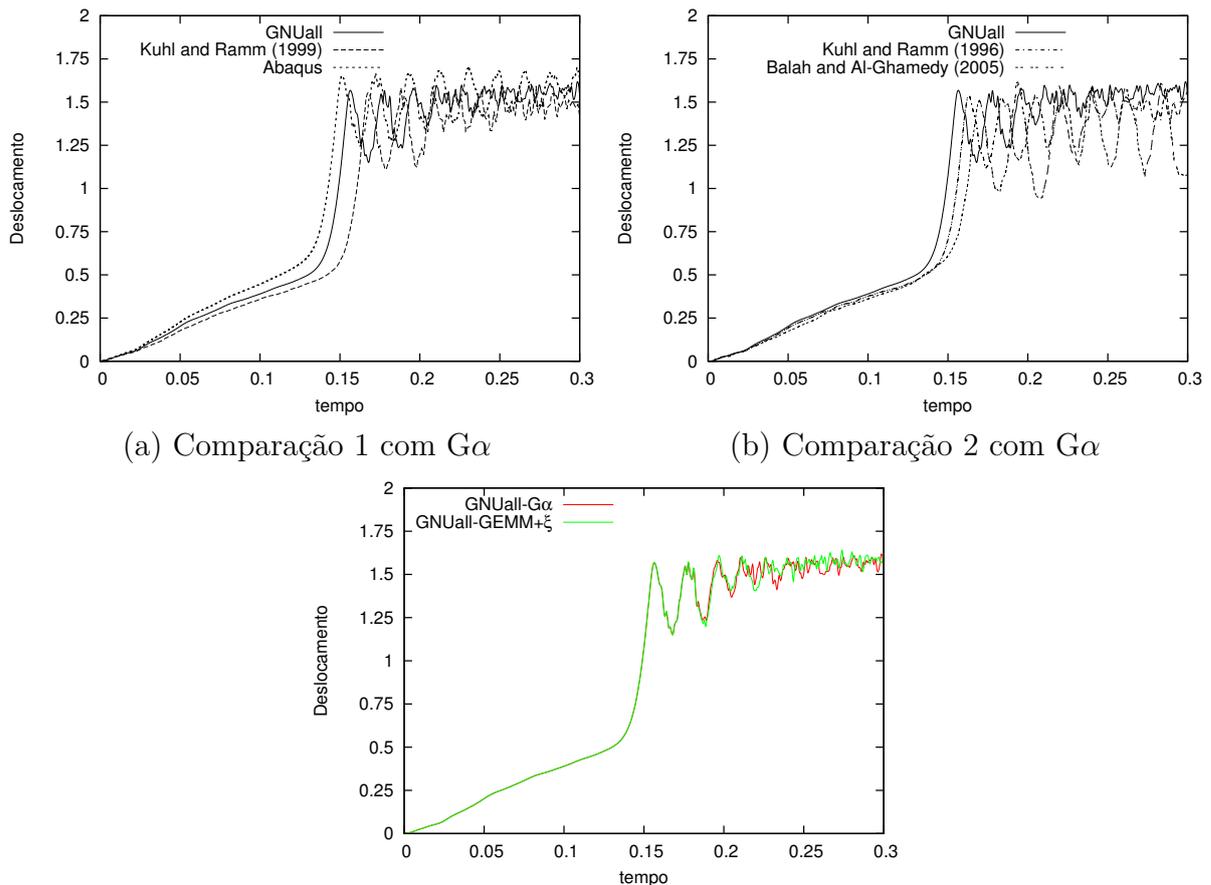
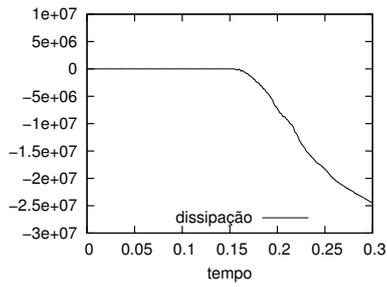
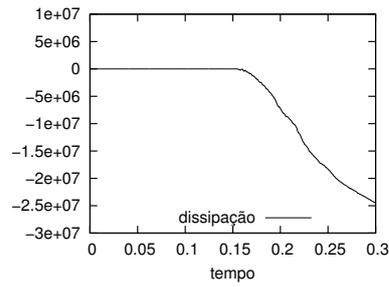
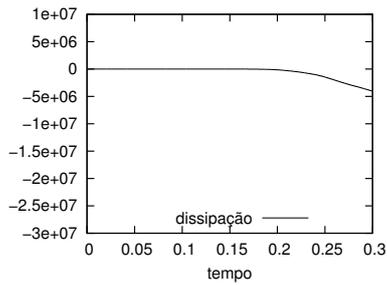
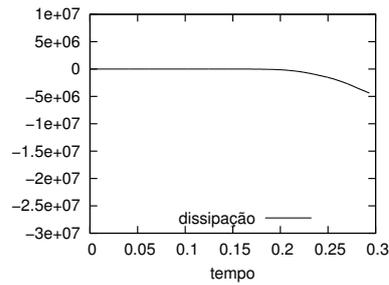
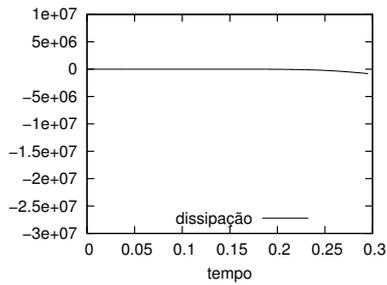
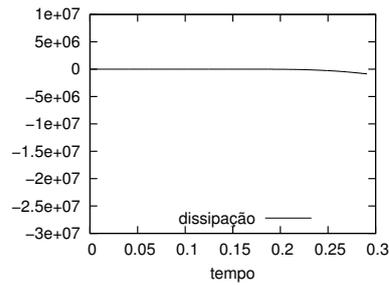
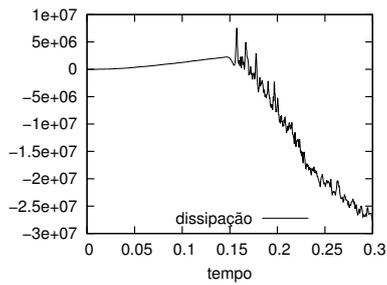
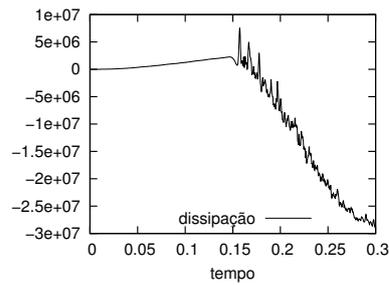
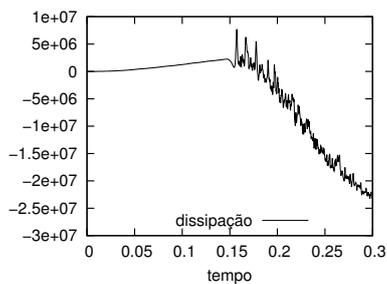
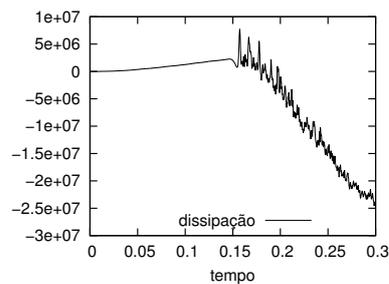


Figura 4.90: $G\alpha$ ($\rho_\infty = 0.50$, C^4) vs $GEMM+\xi$ ($\rho_\infty = 0.95$, C^4).

que talvez nenhuma das análises realizadas (neste trabalho, assim como as das referências) sejam de grande acurácia.

Nas Figuras 4.91 são apresentadas as dissipações numéricas totais ao longo de cada análise. Observar que nas análises com $G\alpha$ a dissipação numérica apenas tem lugar a partir do $t = 0.2$, quando as altas frequências são excitadas. Já para o método $GEMM+\xi$ observa-se que para $t < 0.2$ energias espúrias são introduzidas no sistema, após $t = 0.2$ observa-se uma alta dissipação total. No que concerne à condição suficiente (conservação ou decaimento da energia total) no regime não linear, verifica-se que o método $GEMM+\xi$ não satisfaz tal condição.

(a) $G\alpha, C^1, \rho_\infty = 0.50$ (b) $G\alpha, C^4, \rho_\infty = 0.50$ (c) $G\alpha, C^1, \rho_\infty = 0.90$ (d) $G\alpha, C^4, \rho_\infty = 0.90$ (e) $G\alpha, C^1, \rho_\infty = 0.95$ (f) $G\alpha, C^4, \rho_\infty = 0.95$ (g) $GEMM+\xi, C^1, \rho_\infty = 0.90$ (h) $GEMM+\xi, C^4, \rho_\infty = 0.90$ (i) $GEMM+\xi, C^1, \rho_\infty = 0.95$ (j) $GEMM+\xi, C^4, \rho_\infty = 0.95$ Figura 4.91: Dissipação $G\alpha$ vs Dissipação $GEMM+\xi$.

4.8.5 Análise das dissipações por transformadas rápidas - Fourier e ondaletas (*FFT-CWT*)

Na expectativa de avaliar quais as frequências são dissipadas, e como isto altera a resposta dinâmica, nas Figuras 4.92-4.93 são apresentados os espectros de potência avaliados por transformada rápida de Fourier (FFT do acrônimo do inglês *Fast Fourier Transform*). Enquanto nas Figuras 4.94-4.94 são apresentados os espectros de potência avaliados por transformadas contínuas de ondaletas (CWT do acrônimo do inglês *Continuous Wavelet Transform*).

Para avaliar corretamente os sinais, as Figuras 4.92-4.93, apresentam três gráficos, onde o primeiro gráfico representa o espectro de potência do sinal modificado, o segundo gráfico representa o sinal original (para $0.2 < t < 0.3$) e sua respectiva regressão linear (reta), o terceiro gráfico representa o sinal modificado para o intervalo de tempo em questão. O sinal modificado é obtido pela subtração do sinal original pela regressão linear do sinal original. Este procedimento leva-se a cabo a fim de eliminar frequências espúrias na FFT; em geral, equivalentes à uma frequência igual ao inverso do tempo de análise. Ainda o espectro de potência é amplificado por um fator 10^5 e é representado em escala logarítmica.

Nas Figuras 4.92a-4.92b são apresentados os resultados obtidos para às análises com $\rho_\infty = 0.50$ e classes C^1 e C^4 para o método $G\alpha$, respectivamente. Nas Figuras 4.92c-4.92d são apresentados os resultados obtidos para às análises com $\rho_\infty = 0.90$ e classes C^1 e C^4 para o método $G\alpha$, respectivamente. Nas Figuras 4.92e-4.92f são apresentados os resultados obtidos para às análises com $\rho_\infty = 0.95$ e classes C^1 e C^4 no método $G\alpha$, respectivamente.

Nas Figuras 4.94a-4.94b são apresentados os resultados obtidos para às análises com $\rho_\infty = 0.90$ e classes C^1 e C^4 para método $GEMM+\xi$, respectivamente. Nas Figuras 4.94c-4.94d são apresentados os resultados obtidos para às análises com $\rho_\infty = 0.95$ e classes C^1 e C^4 para o método $GEMM+\xi$, respectivamente.

Observar como as altas frequências são dissipadas na Figura 4.92, enquanto que nas Figuras 4.93 e 4.94 a dissipação nas altas frequências não é notada. Deste modo percebe-se o efeito do raio espectral, embora apenas qualitativamente no método $G\alpha$. Este

resultado é bastante limitado, visto que não pode-se avaliar o nível de dissipação das baixas frequências. Este inconveniente vem dado pela falta de periodicidade da resposta analisada e por esta razão, na seção 4.8.5 são apresentados espectros de potência obtidos de maneira mais adequada.

No que concerne às FFT para o resultados obtidos com o método $G\alpha$, observa-se que apenas conseguiu-se dissipar as altas frequências com $\rho_\infty = 0.50$. Já para o método GEMM+ ξ observa-se a dissipação nas altas frequências para os dois raios espectrais utilizados.

Com as CWT espera-se avaliar as escalas envolvidas no fenômeno físico (comprimento de onda), as diferentes frequências, quando estas ocorrem e em que intensidade (energia associada a cada frequência); deste modo pode-se avaliar o efeito do raio espectral e da classe de continuidade das funções de base.

O efeito mas significativo pode ser visto que a medida que se diminui o raio espectral, observa-se que os fenômenos de pequenas escalas, altas frequências são dissipado. A diferença do método $G\alpha$, nas CWT aplicadas às respostas obtidas pelo método GEMM+ ξ , observa-se que estas são quase indistinguíveis, indicando que apenas as energias relacionadas às frequências de menor importância foram dissipadas. Já para o método $G\alpha$ com $\rho_\infty = 0.50$ observa-se nas CWT que a resposta é drasticamente modificada, assim como a energia associadas a cada frequência.

4.8.6 Compilação dos resultados dos exemplos de dinâmica com comportamento geometricamente não linear

Cabe salientar que buscou-se o limite da estabilidade da integração temporal nos exemplos analisados. Alguns aspectos importantes a serem destacados são:

- A integração $G\alpha$ apresenta resultados menos estáveis do que a integração GEMM+ ξ para o mesmo raio espectral;
- A literatura apresenta o método $G\alpha$ como um método dissipativo; fato que se mostra falso para elementos de alta ordem e alta classe de continuidade;

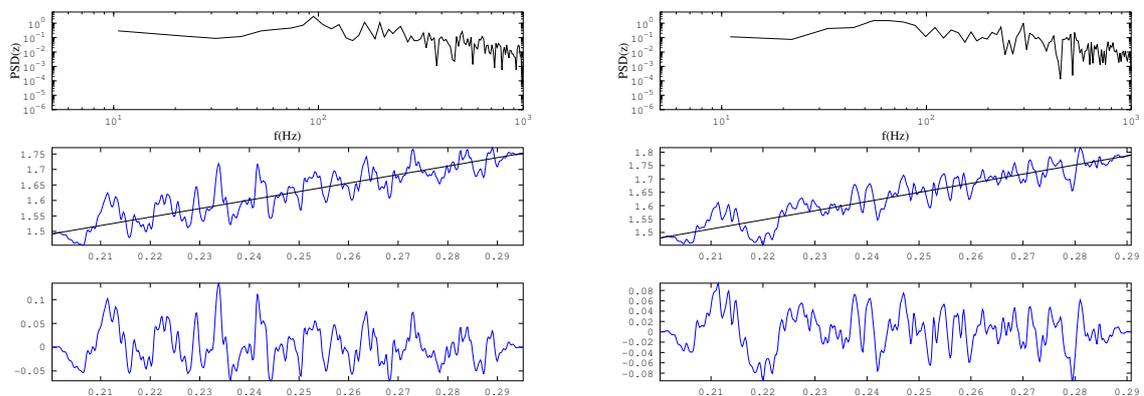
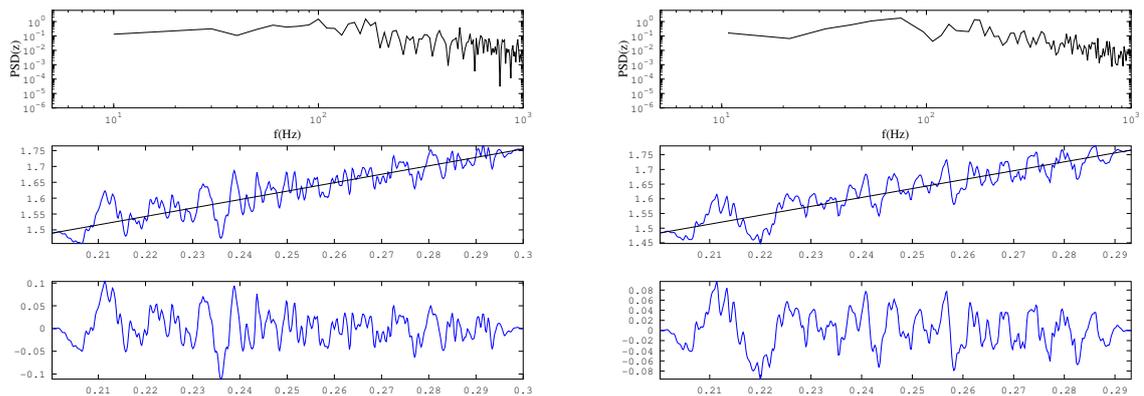
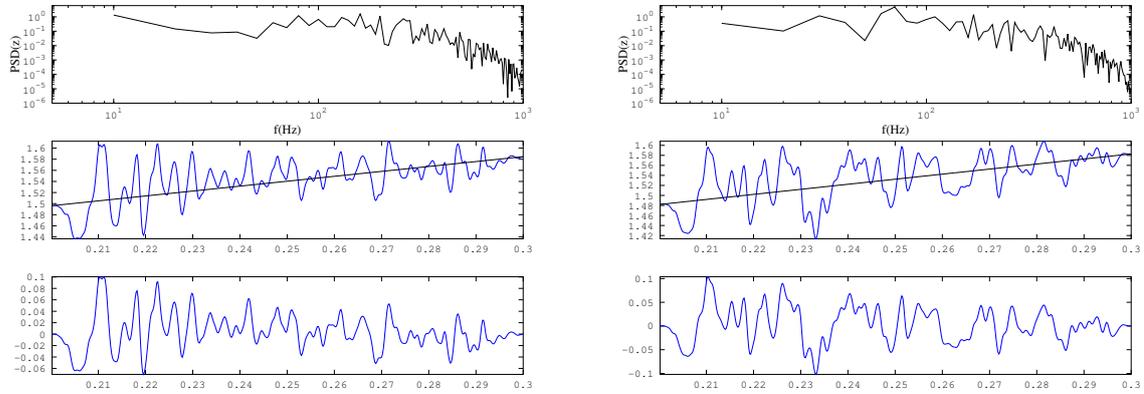
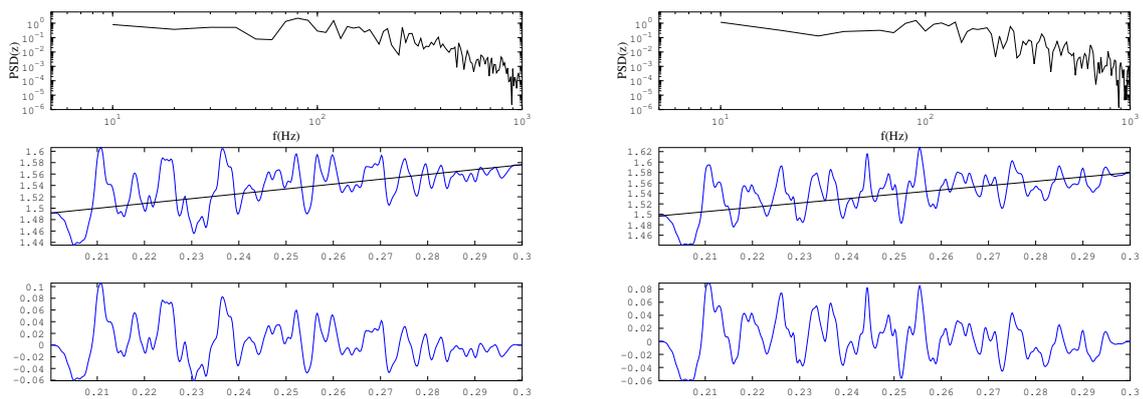
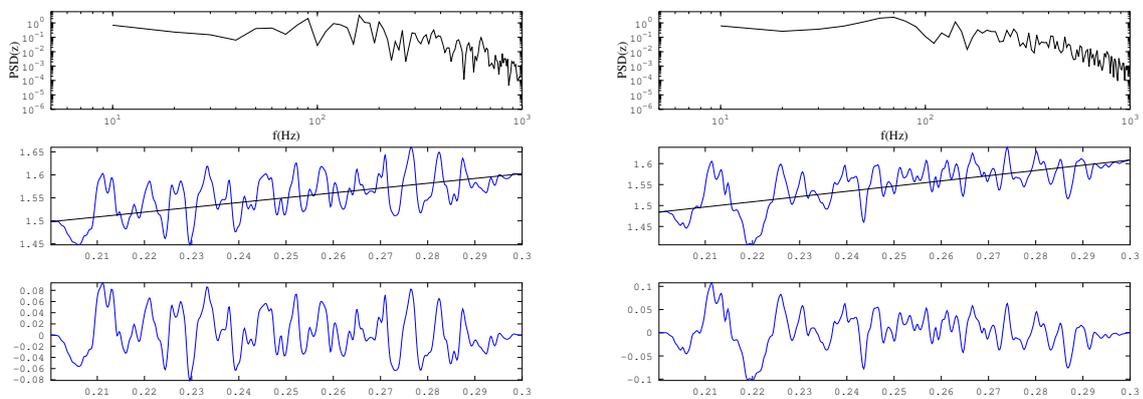


Figura 4.92: Espectros de potência FFT $G\alpha$.

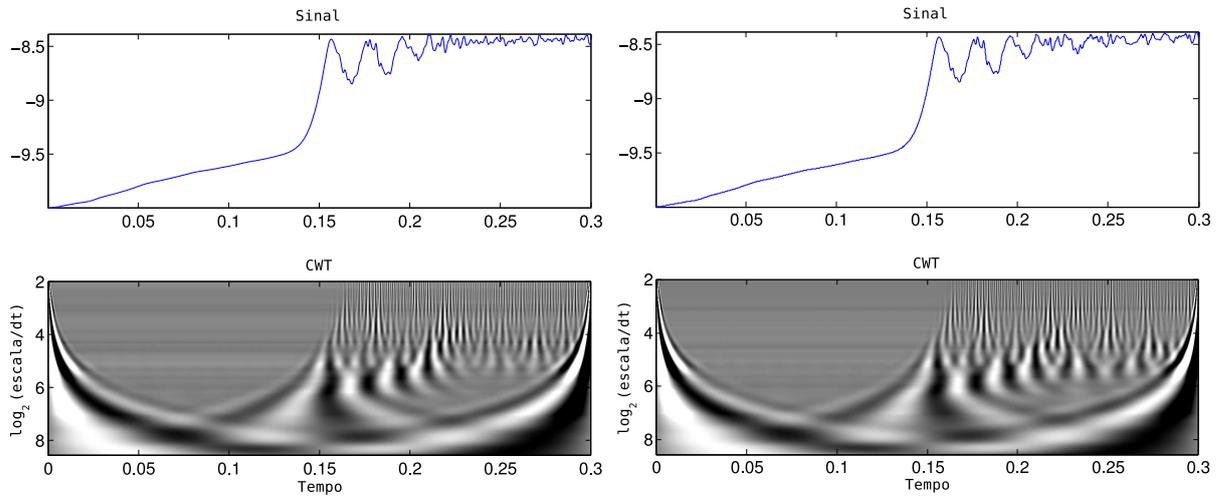


(a) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) (b) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)

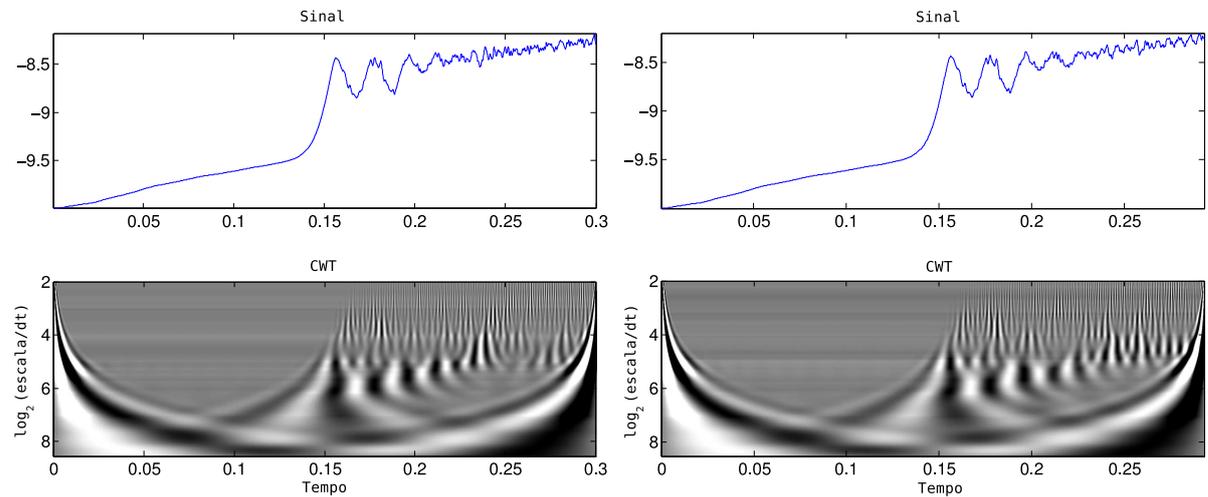


(c) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) (d) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)

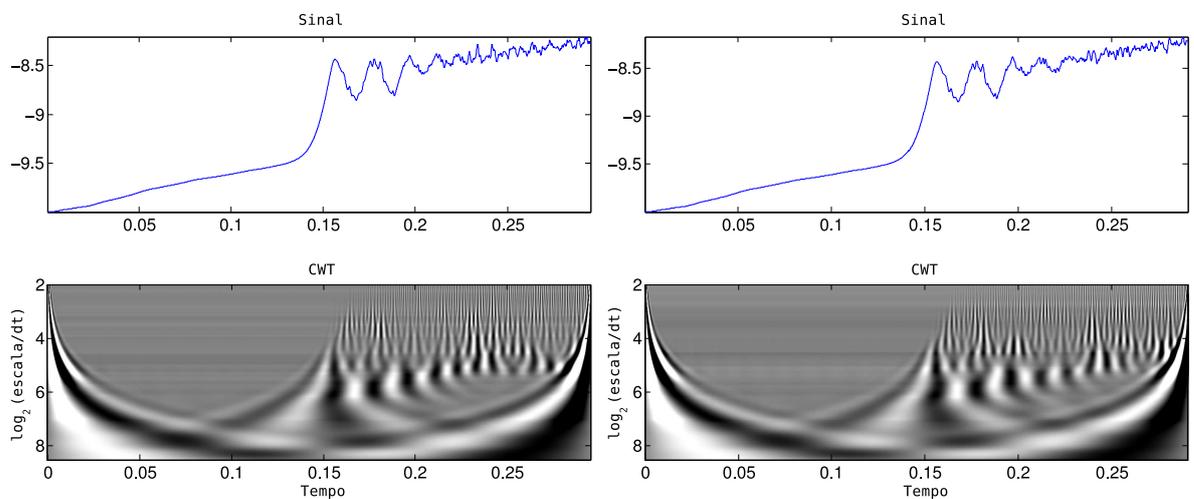
Figura 4.93: Espectros de potência FFT GEMM+ ξ .



(a) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.50$ e C^1) (b) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.50$ e C^4)

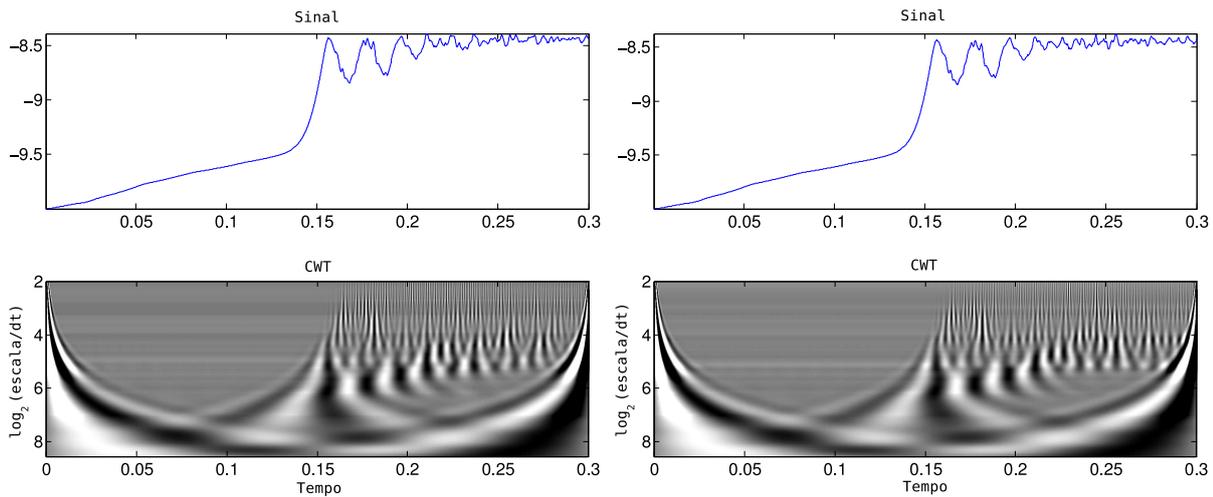
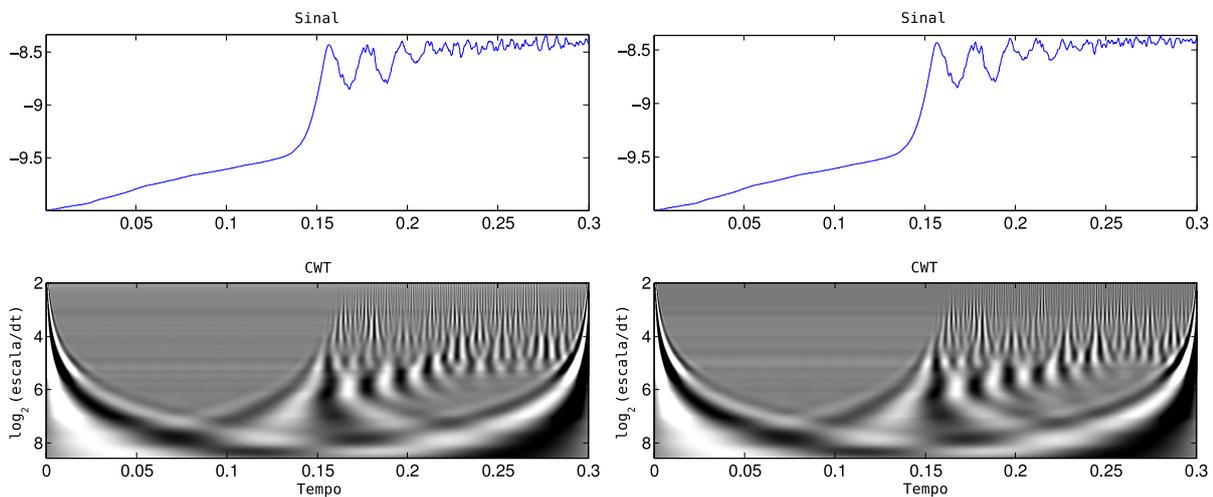


(c) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) (d) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)



(e) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1) (f) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)

Figura 4.94: Espectros de potência CWT G_α .

(a) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1)(b) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)(c) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^1)(d) Espectro de potência ($\rho_\infty = 0.90$ e C^4)Figura 4.95: Espectros de potência CWT GEMM+ ξ .

- A conservação de energia e momento é mais fiel para a integração $G\alpha$ do que para $GEMM+\xi$; o oposto é apresentado na literatura;
- Da Figura 4.91 observa-se que apenas a integração $G\alpha$ satisfaz a condição suficiente para a estabilidade: $E_{t_{n+1}} - E_{t_n} \leq W_{ext}$, onde W_{ext} é o trabalho externo;
- A conservação da energia total e dos momentos angular e linear não dependem da classe de continuidade adotada;
- Dos espectros de potência (Figuras 4.94 e 4.95) mostra-se que apenas as altas frequências são dissipadas quando desejado, de acordo com o raio espectral assumido;
- Dos gráficos de razão de convergência, observa-se que a integração $G\alpha$ é a que possui maior razão de convergência, tanto para forças quanto para deslocamentos;
- a integração $GEMM+\xi$ requer maior esforço computacional quando comparada com $G\alpha$;
- Talvez o fato mais intrigante é que a classe de continuidade possui uma grande influência na integração temporal, na estabilidade e ainda, das Figuras 4.48, observa-se a a classe de continuidade possui mais influência na integração temporal que o próprio integrador temporal;
- Embora esta lista favoreça a integração $G\alpha$ é indiscutível a robustez da integração $GEMM+\xi$.

Vale destacar que não resultam claros os efeitos impostos pelas diferentes classes de continuidade, pelo menos o efeito não tem uma resposta monótona.

Capítulo 5

Equações de conservação e método característico com separação da equação de momento para dinâmica de fluidos – CBS

5.1 Introdução

As equações de conservação de quantidade de movimento, de massa e de energia constituem um sistema de equações diferenciais parciais não lineares que descrevem o movimento e o cumprimento da primeira Lei da Termodinâmica em um meio contínuo (ver [Malvern \(1969\)](#)). O desenvolvimento teórico está baseado no trabalho de [Linn \(2013\)](#).

No contexto da Análise por Elementos Finitos (FEA) emprega-se o método dos resíduos ponderados do tipo Bubnov-Galerkin para a discretização espacial do domínio físico. Para a integração temporal utiliza-se uma série de Taylor defasada no tempo definindo então o Método Característico CBS (do acrônimo do inglês *Characterisc-Based Split*), na qual se efetua uma separação da equação de quantidade de movimento, dividindo o avanço temporal em quatro passos. Utilizam-se malhas não estruturadas com elementos triangulares e tetraédricos lineares para problemas bidimensionais e tridimensionais, respectivamente.

Apenas fluidos Newtonianos e gases perfeitos são aqui tratados, assim restringindo à abordagem. Entretanto estas premissas são viáveis sob o enfoque desta tese.

Visto que as funções de base empregadas são contínuas em toda sua definição, alguma dissipação viscosa artificial deve ser introduzida a fim de estabilizar o método.

5.2 Equações de conservação

As equações de conservação de quantidade de movimento linear e angular de massa e de energia constituem um sistema de equações diferenciais o qual classifica-se em um tipo mais amplo de problema denominado de problema de advecção-difusão. A forma mais geral apresenta-se derivada a partir da conservação de massa, da conservação de momento linear e angular e da conservação de energia. Todas as equações podem ser derivadas do Teorema de Transporte de Reynolds. Estudos mais aprofundados e detalhados podem ser encontrados em [Malvern \(1969\)](#); [Schlichting \(1979\)](#); [White \(1991\)](#). Na forma conservativa, na cinemática Euleriana, tem-se que a conservação de massa é expressa por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{grad}} \rho + \rho \underline{\mathbf{div}} \underline{\mathbf{u}} = 0 \quad (5.1)$$

onde ρ é a massa específica, $\underline{\mathbf{u}}$ é a velocidade do fluido e t o tempo. A equação da continuidade expressa a relação entre a massa acumulada no interior de um volume de controle com o fluxo através de seu contorno. A partir da Segunda Lei de Newton, deriva-se a equação de conservação de momento

$$\frac{\partial (\rho \underline{\mathbf{u}})}{\partial t} + \underline{\mathbf{div}} (\rho \underline{\mathbf{u}} \otimes \underline{\mathbf{u}}) - \underline{\mathbf{div}} \underline{\boldsymbol{\tau}} + \underline{\mathbf{grad}} p - \underline{\mathbf{b}} = \mathbf{0} \quad (5.2)$$

onde p é a pressão, $\underline{\mathbf{b}}$ é a força de campo por unidade de volume e $\underline{\boldsymbol{\tau}}$ são as tensões desviadoras, as quais são proporcionais à parte simétrica do gradiente de velocidades (taxa de deformação) para fluidos Newtonianos. Adotando-se a hipótese de Stokes, a qual relaciona efeitos viscosos com a variação de volume, obtém-se para a relação constitutiva para as tensões desviadoras

$$\underline{\boldsymbol{\tau}} = \underline{\underline{\underline{\mathbf{C}}}}^n : \underline{\mathbf{d}} = \lambda \text{tr}(\underline{\mathbf{d}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\mathbf{d}} = -\frac{2}{3} \mu \text{tr}(\underline{\mathbf{d}}) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu \underline{\mathbf{d}} \quad (5.3)$$

sendo $\underline{\underline{\underline{\mathbf{C}}}}^n$ o tensor de quarta ordem da relação constitutiva entre o tensor de tensões desviadoras, $\underline{\boldsymbol{\tau}}$ e o tensor taxa de deformação, $\underline{\mathbf{d}}$. Os coeficientes μ e λ são a viscosidade dinâmica e volumétrica do fluido. Ainda o tensor de tensões de Cauchy é definido por $\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \underline{\boldsymbol{\tau}} - p \underline{\mathbf{1}}$. A conservação de energia é derivada da Primeira Lei da Termodinâmica,

em conjunto com a adoção da Lei de Condutibilidade Térmica de Fourier (a qual adota a hipótese de que o fluxo de calor deve ser proporcional ao gradiente de temperatura local), resultando

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho \mathbf{u} E) - \mathbf{div}(k \mathbf{grad} T) + \mathbf{div}(p \mathbf{u}) - \mathbf{div}(\underline{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} + q = 0 \quad (5.4)$$

onde T é a temperatura absoluta, k é a condutibilidade térmica, q é a fonte de calor, \mathbf{b} são as forças de campo por unidade de volume e E é a energia total por unidade de massa, a qual inclui a energia interna específica por unidade de massa, e e a energia cinética por unidade de massa

$$E = e_i + e_k \quad (5.5)$$

onde a energia cinética é $e_k = \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$. Ainda da conservação do momento angular é possível constatar que $\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}}^t$.

As equações de conservação podem ser escritas em uma forma mais generalizada, representando todas as equações em uma mesma forma

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x_i} + \mathbf{Q} = \mathbf{0} \quad (5.6)$$

onde $\Phi \in \mathbb{R}^5$, $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$, $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$ e $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^5$ são dadas por

$$\Phi = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u_i \\ \rho E \end{Bmatrix} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{F} = \begin{Bmatrix} \rho u_j \\ \rho u_i u_j + p \delta_{ij} \\ \rho E u_j \end{Bmatrix} \quad (5.8)$$

$$\mathbf{G} = \begin{Bmatrix} 0 \\ -\tau_{ji} \\ -\tau_{ij} u_j - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{Bmatrix} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \rho g_i \\ \rho g_i u_i - q \end{Bmatrix} \quad (5.10)$$

O vetor Φ contém as variáveis de conservação, \mathbf{F} contém os termos advectivos, \mathbf{G} possui os termos difusivos e \mathbf{Q} os termos de campo e fonte. Embora formulado para casos tridimensionais, as equações anteriores podem ser facilmente bidimensionalizadas através da redução da gama de variação dos índices i , j e k de 3 para 2. Quando desprezam-se os termos difusivos, ou seja, $\mathbf{G} = \mathbf{0}$, o sistema resultante é chamado de Equações de Euler.

O sistema de equações (5.6) possui mais variáveis do que número de equações e portanto não pode ser resolvido ainda. É necessário a inclusão das equações de estado para o completo fechamento das equações de conservação. A equação termodinâmica da lei dos gases ideais é utilizada para relacionar a massa específica ρ com a pressão p e a temperatura absoluta T através da constante universal dos gases R

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (5.11)$$

entretanto, a equação anterior é mais comumente expressa em função da relação entre os coeficiente de calor específico a pressão e a volume constante, C_p e C_v , respectivamente

$$p = (\gamma - 1) \rho e_i \quad (5.12)$$

onde $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$. Ainda, considerando que a energia interna e_i e a entalpia h sejam funções lineares da temperatura, i.e., $\frac{de_i}{dT} = C_v$ e $\frac{dh}{dT} = C_p$, tem-se que $e_i = C_v T$ e $h = C_p T$.

O sistema está agora fechado, contendo cinco equações diferenciais parciais para cinco variáveis independentes ρ , $\underline{\mathbf{u}}$ e e_i juntamente com equações algébricas para o cálculo de p , $\underline{\boldsymbol{\tau}}$ e T . Resta apenas especificar condições iniciais e de contorno adequadas.

5.2.1 Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais que devem ser estabelecidas para se resolver as equações do sistema (5.6) são

$$\rho(\underline{\mathbf{x}}, t_0) = \bar{\rho}_0 \quad \text{em } \Omega \quad (5.13a)$$

$$\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}, t_0) = \bar{\underline{\mathbf{u}}}_0 \quad \text{em } \Omega \quad (5.13b)$$

$$e_i(\underline{\mathbf{x}}, t_0) = \bar{e}_{i0} \quad \text{em } \Omega \quad (5.13c)$$

em que $\underline{\mathbf{x}}$ é a posição e Ω representa o domínio. As condições de contorno possíveis são aplicadas em três tipos distintos de contornos físicos (Figura 5.1). O primeiro deles é o contorno onde há fluxo de entrada $\Gamma_{in} = \{\underline{\mathbf{x}} \in \Omega \mid \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0\}$ (sendo $\underline{\mathbf{n}}$ a normal externa), onde prescreve-se massa específica, energia e velocidade

$$\rho = \bar{\rho} \quad \text{sobre } \Gamma_{in} \times [t_0, t] \quad (5.14a)$$

$$\underline{\mathbf{u}} = \bar{\underline{\mathbf{u}}} \quad \text{sobre } \Gamma_{in} \times [t_0, t] \quad (5.14b)$$

$$e = \bar{e} \quad \text{sobre } \Gamma_{in} \times [t_0, t] \quad (5.14c)$$

As condições de contorno de entrada são sempre do tipo de condições de contorno de Dirichlet.

O segundo tipo de contorno é o de fluxo de saída $\Gamma_{out} = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} > 0\}$, onde prescreve-se a velocidade ou tensões nulas

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_{out} \quad \vee \quad -p + \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} : (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) = 0 \quad \text{sobre} \quad \Gamma_{out} \times [t_0, t] \quad (5.15)$$

Observar que no contorno de saída, prescrevem-se condições de contorno de Dirichlet sobre \mathbf{u} ou condições de contorno de Neumann sobre $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}$.

Por último, há o contorno do tipo parede sólida $\Gamma_w = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0\}$, onde prescreve-se a condição de não deslizamento (para escoamentos viscoso) ou condição de deslizamento livre (para escoamentos não viscoso) conjuntamente com a imposição de uma dada temperatura ou um fluxo prescrito

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \wedge \quad (T = T_w \quad \vee \quad \mathbf{grad} T \cdot \mathbf{n} = q_w) \quad \text{sobre} \quad \Gamma_w \times [t_0, t] \quad (5.16a)$$

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \wedge \quad (T = T_w \quad \vee \quad \mathbf{grad} T \cdot \mathbf{n} = q_w) \quad \text{sobre} \quad \Gamma_w \times [t_0, t] \quad (5.16b)$$

onde a expressão (5.16a) é utilizada para escoamentos viscosos, enquanto a expressão (5.16b) é utilizada para escoamentos não viscosos.

A união de cada uma das partes do contorno fornece o contorno total $\Gamma = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_w$, sendo que a intersecção entre estas deve ser idêntica ao conjunto vazio $\Gamma_{in} \cap \Gamma_{out} = \emptyset$, $\Gamma_{in} \cap \Gamma_w = \emptyset$ e $\Gamma_w \cap \Gamma_{out} = \emptyset$. Posto estas condições, o problema está bem definido, sendo a solução também única e dependente das condições iniciais e de contorno aplicadas. Condições iniciais ou de contorno insuficientes ou incorretas podem levar a soluções errôneas, ou nenhuma solução.

5.2.2 Forma adimensional

Embora as equações de conservação apresentadas anteriormente possam ser utilizadas para solução numérica, é mais conveniente utilizá-las de forma adimensional. Entre as vantagens obtidas nesse procedimento pode-se citar o facilitamento do escalonamento das equações para obtenção de resultados em situações reais de fluxos, o erro de arredondamento devido à manipulação de números em escalas muito distintas é

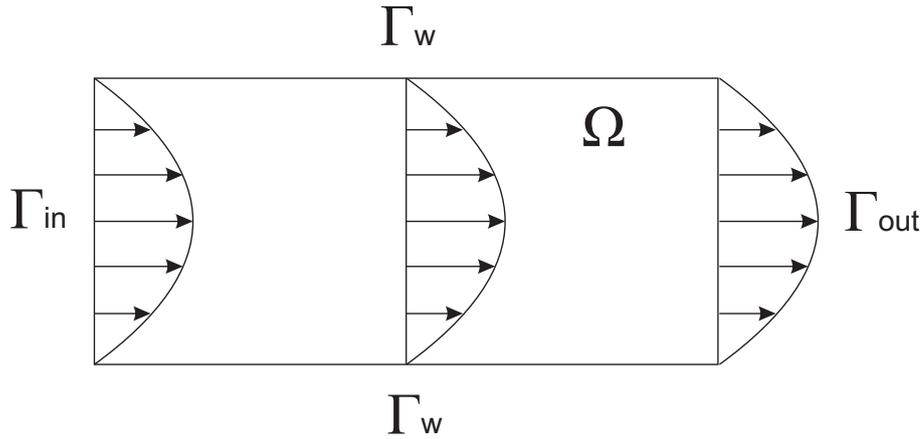


Figura 5.1: Domínio e regiões do contorno.

minimizado e o acesso direto a termos de fundamental importância para o modelo. Os termos adimensionalizados utilizados são

$$\begin{aligned} \bar{t} &= \frac{tu_\infty}{L} & \bar{\mathbf{x}} &= \frac{\mathbf{x}}{L} & \bar{\rho} &= \frac{\rho}{\rho_\infty} & \bar{p} &= \frac{p}{\rho_\infty u_\infty^2} \\ \bar{\mathbf{u}} &= \frac{\mathbf{u}}{u_\infty} & \bar{E} &= \frac{E}{u_\infty} & \bar{T} &= \frac{TC_p}{u_\infty^2} & \bar{c}^2 &= \frac{c^2}{u_\infty^2} \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde $(\bar{\cdot})$ indica que a variável é adimensional, L é o comprimento de referência, $(\cdot)_\infty$ representa uma quantidade de corrente livre e c é a velocidade do som no meio. Convém também definir os seguintes números adimensionais

$$Re = \frac{\rho_\infty u_\infty L}{\mu_\infty} \quad Pr = \frac{C_p \mu_\infty}{k_\infty} \quad M = \frac{\|\mathbf{u}\|_2}{c_\infty} \quad (5.18)$$

em que Re é o número de Reynolds (relação entre forças de inércia e forças de viscosidade), Pr é o número de Prandtl (relação entre taxas de difusão viscosa e taxa de difusão térmica) e M é o número de Mach (relação entre velocidade e velocidade do som). Utilizando-se as variáveis na forma adimensional nas equações governantes obtém-se a seguinte forma para a equação da conservação de massa

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{t}} = \frac{1}{\bar{c}^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{t}} = - \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial \bar{x}_i} \quad (5.19)$$

onde considerou-se o escoamento como isentrópico e $U_i = \rho u_i$ é o fluxo de massa. A equação de conservação de momento linear resulta

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}_j} (\bar{u}_j \bar{U}_i) + \frac{1}{Re} \frac{\partial (\bar{\nu} \bar{\tau}_{ij})}{\partial \bar{x}_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}_i} + \bar{\rho} \bar{g}_i \quad (5.20)$$

em que $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ é a viscosidade cinemática e

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{\nu_\infty} \quad \bar{g}_i = \frac{g_i L}{u_\infty^2} \quad (5.21)$$

A equação de conservação de energia adimensional é dada por

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\bar{E})}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} (\bar{\rho}\bar{u}_i\bar{E}) + \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} \left(\bar{k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}_i} \right) - \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} (\bar{p}\bar{u}_i) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} (\bar{\nu}\bar{\tau}_{ij}\bar{u}_j) \quad (5.22)$$

onde

$$\bar{k} = \frac{k}{k_\infty} \quad (5.23)$$

A equação de estado adimensional resulta

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \bar{T} \quad (5.24)$$

Por motivo de clareza, as equações na forma original serão mantidas no restante do trabalho.

5.3 Solução numérica das equações de conservação

A aplicação do Método Característico com separação da equação de quantidade de movimento linear (*Characteristic Based-Split*) sobre as equações de conservação é capaz de proporcionar a separação dos termos advectivos e difusivos. Nesta separação, o operador diferencial de cada uma das equações individualmente tratadas é auto-adjunto para a discretização adotada e portanto a aplicação do método variacional de Galerkin para discretizar o espaço torna-se justificável matematicamente, bem como otimizado (Zienkiewicz et al., 2011).

5.3.1 Método característico

Os métodos CBS têm sido muito utilizados em diversas áreas da mecânica dos fluidos bem como da mecânica dos sólidos (Zienkiewicz et al. (2011)). Para tornar mais claro o entendimento do método, considera-se inicialmente a equação de convecção-difusão para o caso unidimensional na forma não-conservativa

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + Q = 0 \quad (5.25)$$

onde ϕ é uma variável de conservação. O problema assim definido é não-linear a menos que U seja independente de ϕ . Entretanto, a forma não-conservativa da equação acima

admite variação espacial de U . Aplica-se então uma mudança da variável independente x da seguinte forma

$$dx' = dx - Udt \quad (5.26)$$

Observando-se que $\phi = \phi(x', t)$ tem-se a seguinte derivada

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x=\text{const}} = \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial t} + \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x'=\text{const}} = -U \frac{\partial \phi}{\partial x'} + \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x'=\text{const}} \quad (5.27)$$

a qual pode ser substituída em (5.25), resultando

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x'} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x'} \right) + Q(x') = 0 \quad (5.28)$$

e uma equação deste tipo possui um operador auto-adjunto e pode ser adequadamente discretizada espacialmente via Galerkin. O sistema de coordenadas descrito por (5.26) descreve as linhas ou direções características. Como simples corolário desta mudança de coordenadas tem-se que, na ausência de difusão ($k = 0$) e termos de fonte ($Q = 0$), a equação (5.25) torna-se simplesmente

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (5.29)$$

para o caso unidimensional, ou, de outra forma

$$\phi(x') = \phi(x - Ut) = \text{constante} \quad (5.30)$$

ao longo de uma linha ou direção característica (considerando-se U constante). Está é uma típica equação de onda propagando-se com velocidade U na direção x , como mostra a Figura 5.2. A natureza do comportamento assemelhada à propagação de uma onda é evidente neste problema, mesmo para o caso em que a difusão não seja nula, onde deve-se obter uma onda que se atenua à medida que se propaga. Nas condições anteriormente

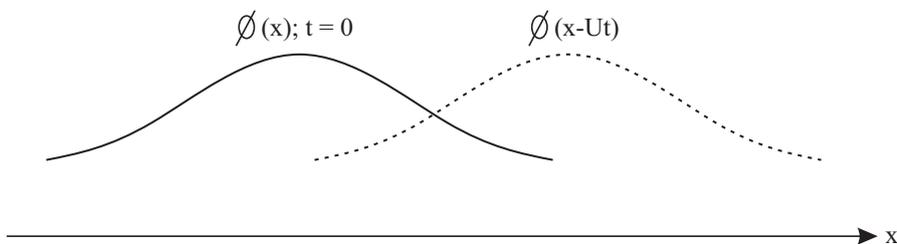


Figura 5.2: Natureza do comportamento em forma de onda.

estabelecidas, pode-se escrever a seguinte igualdade

$$\phi(x')^{n+1} = \phi(x)^n \quad (5.31)$$

em que o super-índice indica tempo, ou seja, a variável propagada ao longo da linha ou direção característica é constante independentemente do tempo no qual a partícula é analisada. Na Figura 5.3 é mostrado a propagação de linhas características no plano $x - t$ em que a velocidade de convecção é constante. A partir da equação de convecção

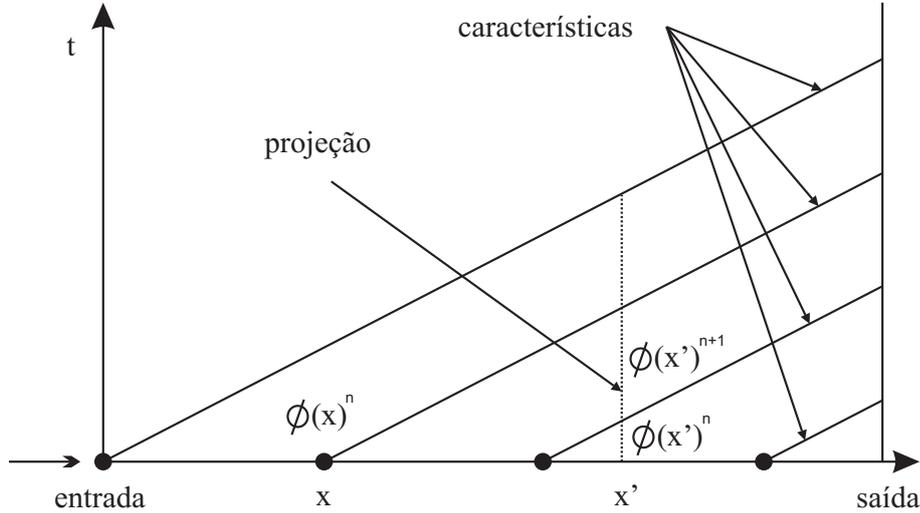


Figura 5.3: Convecção linear. Características.

escalar unidimensional ao longo da linha característica, Equação (5.29), é possível uma discretização no tempo da forma

$$\frac{\phi(x')^{n+1} - \phi(x)^n}{\Delta t} = 0 \quad (5.32)$$

em que Δt é o passo de tempo. Se $\phi(x')^{n+1}$ puder ser analiticamente representado em x , o problema de projeção é evitado. Alternativamente, $\phi(x)^n$ pode ser expressado em termos de x' . É possível integrar (5.29) através de um método indireto, entretanto, um método explícito utilizando uma expansão de série de Taylor para determinar uma relação entre $\phi(x)^n$ em termos de quantidades em x' torna o problema significativamente simplificado (Nithiarasu et al. (2006)). A seguinte expansão de Taylor é utilizada em um entorno $(x' - x)$ da distância entre $\phi(x')^n$ e $\phi(x)^n$ em um tempo n

$$\phi(x)^n = \phi(x')^n - (x' - x) \frac{\partial \phi(x')^n}{\partial x} + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{\partial^2 \phi(x')^n}{\partial x^2} - \frac{(x' - x)^3}{6} \frac{\partial^3 \phi(x')^n}{\partial x^3} + \dots \quad (5.33)$$

Na expressão acima, a distância $(x' - x)$ pode ser expressada em termos do passo de tempo e da velocidade média \bar{u} ao longo da linha ou direção característica na forma

$$x' - x = \bar{u} \Delta t \quad (5.34)$$

A Equação (5.33) pode ser substituída em (5.32) juntamente com (5.34), resultando na seguinte expressão

$$\frac{\phi(x')^{n+1} - \phi(x')^n}{\Delta t} = -\bar{u} \frac{\partial \phi(x')^n}{\partial x} + \frac{\Delta t \bar{u}^2}{2} \frac{\partial^2 \phi(x')^n}{\partial x^2} - \frac{\Delta t^2 \bar{u}^3}{6} \frac{\partial^3 \phi(x')^n}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (5.35)$$

Embora deduzida para o caso de convecção linear, a Equação (5.35) pode ser estendida ao caso não-linear ao se considerar a seguinte aproximação para $u\phi(x)$

$$u\phi(x)^n = u\phi(x') - (x' - x) \frac{\partial}{\partial x} (u\phi(x'))^n + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{\partial}{\partial x^2} (u\phi(x'))^n - \dots \quad (5.36)$$

Considerando-se a aproximação $\Delta t = \frac{(x' - x)}{u}$ e substituindo-se na Equação (5.30), obtém-se:

$$\frac{\phi(x')^{n+1} - \phi(x')^n}{\Delta t} = -\frac{\partial \phi}{\partial x} (u\phi(x'))^n + \frac{\Delta t}{2} u \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} (u\phi(x')) \right]^n + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (5.37)$$

A equação acima é a forma conservativa do método CBS explícito para um problema de convecção escalar. Para um problema de convecção-difusão, o método CBS sem termos de alta ordem resultante tem a seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\phi(x')^{n+1} - \phi(x')^n}{\Delta t} &= -\frac{\partial \phi}{\partial x} (u\phi(x'))^n + \frac{\partial \phi}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} (x') \right)^n \\ &+ \frac{\Delta t}{2} u \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} (u\phi(x')) - \frac{\partial \phi}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} (x') \right)^n \right]^n + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (5.38)$$

Os termos de ordem maior ou igual a 3 na equação acima podem ser negligenciados para elementos lineares, entretanto, para elementos de ordem superior devem ser incluídos. Isto se deve ao fato de que, embora ao se considerar mais termos a equação torna-se de ordem maior no tempo, as derivadas espaciais não acompanham esta discretização. Para problemas não escalares, há uma diferença fundamental em que a variável que sofre convecção não necessariamente se torna uma variável característica e a velocidade na qual ocorre essa convecção não necessariamente é a velocidade característica. A próxima seção trata do método CBS aplicado às equações de conservação de quantidade de movimento e energia.

5.3.2 Método CBS aplicado à mecânica de fluidos

Para a utilização do método CBS nas equações de conservação aplica-se uma separação dos termos advectivos e difusivos. Considera-se inicialmente a equação da continuidade

juntamente com a equação da conservação de quantidade de movimento a ser resolvida para as variáveis u_i e p . Com exceção do termo de pressão, esta equação é similar à equação de convecção-difusão. Este termo pode, contudo, ser tratado como uma quantidade conhecida (do tipo fonte), fornecendo uma forma independente de se calcular a pressão. O objetivo aqui é que esta separação proposta forneça uma forma de se calcular uma solução (U_i^{n+1}, p^{n+1}) no tempo t^{n+1} a partir dos valores (U_i^n, p^n) no tempo t^n . Assume-se que o incremento de tempo é $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. O fluxo de massa é então dividido em duas parcelas

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta U_i^* + \Delta U_i^{**} \quad (5.39)$$

Discretiza-se no tempo também a aproximação para o intervalo $t^n \leq t \leq t^{n+1}$

$$\frac{\partial U_i^n}{\partial t} = \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{\Delta U_i^*}{\Delta t} + \frac{\Delta U_i^{**}}{\Delta t} \quad (5.40)$$

Utilizando-se a Equação (5.38), estendendo-a ao caso de multidimensional e substituindo-se u por u_j e ϕ por U_i obtém-se

$$\begin{aligned} U_i^{n+1} - U_i^n = \Delta t \left[-\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j U_i)^n + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_j} + (\rho g_i)^n \right] - \Delta t \frac{\partial p^{n+\theta_2}}{\partial x_i} \\ + \frac{\Delta t^2}{2} u_k^n \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j U_i) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g_i \right]^n + \frac{\Delta t^2}{2} u_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial p^{n+\theta_2}}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (5.41)$$

Na equação acima adotou-se

$$\frac{\partial p^{n+\theta_2}}{\partial x_i} = \frac{\partial p^n}{\partial x_i} + \theta_2 \frac{\partial \Delta p}{\partial x_i} \quad (5.42)$$

onde $0 \leq \theta_2 \leq 1$, sendo $\theta_2 = 0$ para um esquema explícito e $\theta_2 > 0$ para esquemas semi-implícitos e com

$$\Delta p = p^{n+1} - p^n \quad (5.43)$$

Observa-se que a velocidade e os termos da tensão desviadora são calculados em t^n ao passo que a pressão é calculada em $t^{n+\theta_2}$. Utilizando as variáveis auxiliares ΔU_i^* e ΔU_i^{**} divide-se a Equação (5.41) em duas partes. Neste ponto há pelo menos duas alternativas. A primeira é eliminar a pressão do cálculo inicial para ser posteriormente introduzido. A segunda alternativa é considerar apenas o gradiente de pressão no começo do passo de tempo no cálculo inicial. Utiliza-se a segunda alternativa mencionada no presente trabalho, com a inclusão do gradiente de pressão no começo do passo de tempo. Para a solução das equações de Navier-Stokes, o método CBS pode ser resumido nos 4 passos seguintes

1. Resolver as equações de conservação de momento considerando apenas o gradiente de pressão no início do passo para calcular ΔU_i^* ,
2. Calcular o incremento de pressão Δp ,
3. Calcular a correção das velocidades ΔU_i^{**} para finalmente calcular o valor de U_i em t^{n+1} ,
4. Calcular variáveis escalares adicionais como temperatura e massa específica através da equação de conservação da energia.

Para o passo 1 tem-se a seguinte equação a ser resolvida

$$\Delta U_i^* = \Delta t \left[-\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j U_i) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\Delta t}{2} u_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j U_i) - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \right]^n \quad (5.44)$$

No passo 2 calcula-se o incremento de pressão

$$\Delta \rho = \left(\frac{1}{c^2} \right)^n \Delta p = -\Delta t \left[\frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} + \theta_1 \frac{\partial \Delta U_i^*}{\partial x_i} - \Delta t \theta_1 \left(\frac{\partial^2 p^n}{\partial x_i^2} + \theta_2 \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x_i^2} \right) \right] \quad (5.45)$$

onde $1/2 \leq \theta_1 \leq 1$. Tendo o incremento de pressão, calcula-se a correção das velocidades no passo 3

$$\Delta U_i^{**} = -\Delta t \frac{\partial p^{n+\theta_2}}{\partial x_i} \quad (5.46)$$

Finalmente, calcula-se U_i em t^{n+1} . Resta apenas o passo 4 para atualização das variáveis escalares, ou seja

$$\begin{aligned} \frac{(\rho E)^{n+1} - (\rho E)^n}{\Delta t} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \rho E)^n + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^n - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i p)^n + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij} u_j)^n - \rho g_i u_i^n \\ & + \frac{\Delta t}{2} u_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \rho E) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i p) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij} u_j) + \rho g_i u_i \right]^n \end{aligned} \quad (5.47)$$

Desta forma, tem-se que o método proporciona um operador que é auto-adjunto nas variáveis Δp (ou $\Delta \rho$) para uma discretização espacial do tipo Galerkin e, portanto, tal discretização é empregada de forma otimizada. É importante observar que a sequência de passos utilizada no algoritmo CBS promove uma forma eficiente de se revolver as equações de conservação com adequada estabilização por convecção. Como resultante, o método é adequado para resolver problemas de escoamentos em ampla faixa de velocidade, desde problemas subsônicos, transônicos, supersônicos até hipersônicos pois a forma conservativa

empregada na formulação garante que as ondas de choque serão posicionadas corretamente e que a solução encontrada (se houver) será única. Mesmo em problemas de escoamentos supersônicos, existem regiões de estagnação onde de fato não há grande compressibilidade. Este tipo de região causa grandes oscilações e instabilidades em outros métodos, como por exemplo o de Taylor-Galerkin. Cabe ressaltar também que para malhas convencionais é necessário algum tipo de amortecimento numérico na região próxima aos choques por razões de estabilidade numérica. Este tópico é discutido em outra seção deste trabalho.

5.3.3 Discretização espacial

Uma discretização espacial padrão do tipo Galerkin é empregada sobre as equações correspondentes aos 4 passos do método CBS. Utiliza-se neste trabalho apenas elementos triangulares e tetraédricos lineares para problema bidimensionais e tridimensionais, respectivamente. A discretização espacial das variáveis utiliza as seguintes aproximações

$$\begin{aligned} U_i &= \mathbf{N}_u \tilde{U}_i, & \Delta U_i &= \mathbf{N}_u \Delta \tilde{U}_i, & \Delta U_i^* &= \mathbf{N}_u \Delta \tilde{U}_i^*, & \Delta U_i^{**} &= \mathbf{N}_u \Delta \tilde{U}_i^{**} \\ u_i &= \mathbf{N}_u \tilde{u}_i, & p &= \mathbf{N}_p \tilde{p}, & \rho &= \mathbf{N}_\rho \tilde{\rho} \end{aligned} \quad (5.48)$$

onde o símbolo \sim acima da variável indica uma quantidade nodal, sendo \mathbf{N}_i as funções de interpolação tal que

$$\begin{aligned} \tilde{U}_i &= [U_i^1 U_i^2 \cdots U_i^a \cdots U_i^m]^t, & i &= 1, 2, 3 \\ \mathbf{N}_j &= [N_j^1 N_j^2 \cdots N_j^a \cdots N_j^m] & j &= u_i, p, \rho \end{aligned} \quad (5.49)$$

em que a é o nó (ou variável), o qual varia entre 1 e m . As equações obtidas para o método CBS aplicado às equações de Navier-Stokes anteriormente são agora ponderadas por \mathbf{N}^t e integradas sobre o domínio. Empregando-se a Equação 5.48 e integrando-se por partes, obtém-se a discretização final utilizada, sendo ela a seguinte

- **Passo 1**

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \Delta \tilde{U}_i^* &= \Delta t [(\mathbf{C} - \mathbf{S}) (\tilde{u}_j \tilde{U}_i) + (\mathbf{K}_\tau - \mathbf{T}_\tau) \tau_{ij}]^n \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \tilde{u}_k [(\mathbf{K}_u - \mathbf{T}_u) (\tilde{u}_j \tilde{U}_i) + (\mathbf{K}_p - \mathbf{T}_p) \tilde{p}]^n \end{aligned} \quad (5.50)$$

- **Passo 2**

$$\mathbf{M} \Delta \tilde{\rho} = \Delta t [(\mathbf{D} - \mathbf{R}_u) (\tilde{U}_i + \theta_1 \Delta \tilde{U}_i^*) - \Delta t \theta_1 \mathbf{K} \tilde{p}]^n \quad (5.51)$$

- Passo 3

$$\mathbf{M}\tilde{\mathbf{U}}_i = \mathbf{M}\Delta\tilde{\mathbf{U}}_i^* + \Delta t[(\mathbf{D} - \mathbf{R}_u)\tilde{\mathbf{p}}]^n \quad (5.52)$$

- Passo 4

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\Delta\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{E}} = \Delta t & \left[(\mathbf{C} - \mathbf{S})\tilde{\mathbf{u}}_j (\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{p}}) + (\mathbf{T}_\tau - \mathbf{K}_\tau) \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} + \tau_{ij}\tilde{\mathbf{u}}_j \right) \right]^n \\ & - \frac{\Delta t^2}{2} [\tilde{\mathbf{u}}_k (\mathbf{K}_u - \mathbf{T}_u)\tilde{\mathbf{u}}_j (\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{p}})]^n \end{aligned} \quad (5.53)$$

onde as matrizes e vetores que foram introduzidos são dados por

$$\mathbf{M} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{N} d\Omega \quad (5.54a)$$

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_j} \mathbf{N} d\Omega \quad (5.54b)$$

$$\mathbf{D} = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_i} \mathbf{N} d\Omega \quad (5.54c)$$

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_i} d\Omega \quad (5.54d)$$

$$\mathbf{K}_\tau = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_j} d\Omega \quad (5.54e)$$

$$\mathbf{K}_u = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_k} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_j} d\Omega \quad (5.54f)$$

$$\mathbf{K}_p = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_k} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_i} d\Omega \quad (5.54g)$$

$$\mathbf{R}_u = \int_{\Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{N} n_i d\Omega \quad (5.54h)$$

$$\mathbf{S} = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^t \mathbf{N} n_j d\Gamma \quad (5.54i)$$

$$\mathbf{T}_\tau = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^t n_j d\Gamma \quad (5.54j)$$

$$\mathbf{T}_u = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^t \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_j} n_k d\Gamma \quad (5.54k)$$

$$\mathbf{T}_p = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^t \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_i} n_k d\Gamma \quad (5.54l)$$

Convém salientar algumas considerações, as quais foram necessárias para se chegar à forma final das equações acima apresentadas. Os termos contendo variáveis de força de campo g_i foram desconsiderados. Os passos 2 e 3 são calculados explicitamente em termos da pressão, ou seja, adota-se $\theta_2 = 0$. Termos referentes à conservação de energia e ao gradiente da temperatura no passo 4 são calculados aproximadamente à nível de elemento, utilizando as funções de forma.

5.3.4 Tratamento de problemas de escoamentos compressíveis

Para melhor desempenho do método CBS (bem como para outros métodos) em encontrar soluções suaves para problemas de escoamentos compressíveis em ampla faixa de velocidade, tratamentos adicionais são requeridos. Entre eles, os aqui utilizados são a Lei de Sutherland para relacionar a viscosidade com a temperatura, a dissipação artificial para captura de choques em problemas com número de Mach alto e suavização para problemas com número de Mach baixo.

Lei de Sutherland

Em escoamentos com altos gradientes de temperatura, como é o caso de escoamentos compressíveis, a viscosidade e a condutividade térmica não podem ser consideradas constantes, mas sim função da temperatura. Adota-se neste trabalho a Lei de Sutherland [Hirsch \(1988\)](#) a qual estima a viscosidade em função da temperatura através da seguinte relação válida para o ar

$$\mu = \mu_{ref} \frac{S_\mu + T_{ref}}{S_\mu + T} \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.55a)$$

$$k = k_{ref} \frac{S_k + T_{ref}}{S_k + T} \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.55b)$$

com $S_\mu = 110.5K$ e $S_k = 114.95K$ para o ar. As unidades são as do SI.

Difusão artificial

Em problemas transônicos, supersônicos e de velocidade mais altas, o escoamento apresenta um efeito distinto ao dos escoamentos subsônicos e escoamentos de fluidos incompressíveis com a formação de ondas de choques em certas regiões do domínio. Claramente, utilizando-se aproximações de elementos finitos nas quais todas as variáveis são interpoladas utilizando-se continuidade C^0 não é possível a exata reprodução de choques. Em tal aproximação, os choques são representados simplesmente como regiões de alto gradiente. A situação ideal é obtida se esta alta variação for confinada à uma região onde realmente ocorre a formação do choque. Infelizmente, esta aproximação da descontinuidade introduz oscilações locais as quais podem persistir por uma área

considerável do domínio. Por esta razão, introduz-se na análise de elementos finitos viscosidades adicionais as quais ajudam a amortecer as oscilações causadas pelos choques no intuito de tentar reproduzir a descontinuidade o melhor possível. Adota-se neste trabalho a seguinte metodologia para corrigir as variáveis de conservação Φ para os casos de escoamentos compressíveis não difusivos, proposta por [Nithiarasu et al. \(1998\)](#)

$$\tilde{\Phi}_s^{n+1} = \tilde{\Phi}^{n+1} + \Delta t \mathbf{M}_L^{-1} \frac{C_e S_e}{\Delta t_e} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_L) \tilde{\Phi}^n \quad (5.56)$$

onde o subíndice s indica a variável suavizada, C_e é uma constante entre 0 e 1 especificada pelo usuário, \mathbf{M}_L é a matriz de massa discreta obtida da forma

$$M_{L,ab} = \delta_{ab} \int_{\Omega} N_a d\Omega \quad (5.57)$$

o termo Δt_e é o passo de tempo local do elemento e S_e é o sensor de pressão do elemento, o qual é avaliado segundo a média dos sensores de pressão nodais do elemento S_a os quais são dados por

$$S_a = \frac{|\sum_e (p_a - p_k)|}{\sum_e |p_a - p_k|} \quad (5.58)$$

onde o índice a indica um nó e k indica os nós conectados ao nó a . Para escoamentos compressíveis difusivos utiliza-se a seguinte formulação para captura das ondas de choque proposta por [Nithiarasu et al. \(1998\)](#)

$$\tilde{\Phi}_s^{n+1} = \tilde{\Phi}^{n+1} - \Delta t \mathbf{M}_L^{-1} C_e h^3 \frac{\|\mathbf{u}\|_2 + c}{\hat{p}} \left| \frac{\partial^2 p}{\partial x_i^2} \right|_e^n \left(\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^t}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_i} d\Omega \right) \tilde{\Phi}^n \quad (5.59)$$

em que h é o tamanho característico do elemento, \hat{p} é a pressão média no elemento e o subíndice e indica um elemento. Observa-se que as duas metodologias apresentam características importantes que devem estar presentes em qualquer tipo de difusão artificial: ao passo que o tamanho do elemento ou o gradiente de pressão tende a zero, a difusão artificial também deve tender a zero. Além disto, o sensor de pressão ajuda a limitar a região a ser suavizada a apenas a região no entorno do choque. Um dos tipos de difusão artificial acima mencionado é adicionado ao final do passo 1, 2 e 4 do método CBS em problemas transônicos ou supersônicos.

Suavização de variáveis à baixas velocidades

Em problemas subsônicos ($\mathbf{M} < 0.8$) torna-se conveniente incluir um procedimento para suavização das variáveis se o acoplamento entre energia e outras variáveis existir. Outra

possibilidade seria a de utilizar aproximações isotérmicas para tal objetivo. Entretanto, para resolver-se um problema compressível em regimes de baixo número de Mach sem a remoção do acoplamento térmico utiliza-se neste trabalho a seguinte suavização proposta por [Thomas e Nithiarasu \(2005\)](#)

$$\Phi = \left[\frac{1}{1 + 0.5\alpha} \Phi + \frac{\alpha}{1 + 0.5\alpha} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_D) \mathbf{M}_L^{-1} \Phi \right] \quad (5.60)$$

onde α é um parâmetro de suavização o qual varia entre 0 e 0.05 e \mathbf{M}_D é a matriz \mathbf{M} sem os termos não-diagonais.

5.3.5 Incremento de tempo

O método explícito é condicionalmente estável e portanto é importante adotar-se um passo de tempo que seja inferior ou no máximo igual ao passo de tempo crítico. O cálculo do incremento de tempo Δt é feito adotando-se o incremento mínimo de tempo global da malha. Utiliza-se o valor mínimo de incremento de tempo entre os incrementos convectivos Δt_{conv} e difusivos Δt_{diff}

$$\Delta t = \min(\Delta t_{conv}, \Delta t_{diff}) CFL \quad (5.61)$$

onde

$$\Delta t_{conv} = \frac{h}{c + \|\mathbf{u}\|_2} \quad (5.62)$$

e

$$\Delta t_{diff} = \frac{h^2}{2\nu} \quad (5.63)$$

em que o termo h é uma direção característica do elemento. O termo CFL é o número de Courant–Friedrichs–Lewy, o qual tem um papel de coeficiente de segurança neste caso (adotado entre 0 e 1, dependendo do problema e da malha adotada). Percebe-se que antes de se calcular o incremento de tempo mínimo global final do passo é preciso calcular o incremento de tempo em cada nó da malha. É também preciso determinar a dimensão característica h em cada um destes nós. Embora essa determinação não seja única, adota-se a seguinte metodologia neste trabalho para o caso bidimensional

$$h_i = \min \left(2A/\hat{L} \right)_{ie} \quad (5.64)$$

onde o valor mínimo é selecionado entre o número de elementos ie conectados ao nó i , A é a área do elemento e \hat{L} indica o comprimento da aresta oposta ao nó i no elemento.

Para o caso tridimensional adota-se

$$h_i = \min \left(3V/\hat{A} \right)_{ie} \quad (5.65)$$

onde V é o volume do elemento e \hat{A} indica a área da face oposta do nó i no elemento.

5.3.6 Simulações estacionárias e transientes

Para o caso de simulação de problemas estacionários, os 4 passos do algoritmo CBS são realizados utilizando-se a matriz de massa \mathbf{M} na sua forma discreta (ou diagonalizada) \mathbf{M}_L e o programa é executado até um limite de incrementos de tempo ou até a convergência a qual deve atender à tolerância tol , dada por

$$tol = \sqrt{\frac{\sum_{a=1}^{nnos} \left(\frac{\rho_a^{n+1} - \rho_a^n}{\Delta t} \right)^2}{\sum_{a=1}^{nnos} (\rho_a^{n+1})^2}} \quad (5.66)$$

a qual é adimensionalizada utilizando-se uma escala de tempo característica $\frac{L}{u_\infty}$ e $nnos$ indica o número de nós da malha. A tolerância adimensional é reduzida até um valor mínimo de 10^{-5} para se obter um estado estacionário do fluxo. Para problemas transientes, a matriz de massa \mathbf{M} é utilizada na forma completa e calcula-se iterativamente as variáveis da seguinte forma (Löhner (2008))

$$\Phi_{i+1} = \mathbf{M}_L^{-1} \mathbf{r}_n + \mathbf{M}_L^{-1} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_L) \Phi_i \quad (5.67)$$

onde obtém-se o termo \mathbf{r}_n que representa o lado direito da igualdade das equações dos passos do método CBS iterada n vezes. Tipicamente, $n \leq 3$ é suficiente e aplica-se o método nos passos 2 e 4 quando utilizado (nos outros passos utilizam a matriz de massa discreta \mathbf{M}_L).

5.4 Coeficientes aerodinâmicos

A utilização dos coeficientes aerodinâmicos facilitam a descrição global do comportamento aerodinâmico de corpos imersos em escoamentos e o emprego destes é bastante comum na análise aerodinâmica. Nesta seção são apresentados os coeficientes de pressão, arrasto

e sustentação, sendo estes definidos por

$$C_p = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} \left(\int_\Gamma (p - p_\infty) d\Gamma \right) \quad (5.68a)$$

$$C_D = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} \left(\int_\Gamma \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} d\Gamma \right) \underline{\underline{e}}_1 \quad (5.68b)$$

$$C_L = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} \left(\int_\Gamma \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} d\Gamma \right) \underline{\underline{e}}_2 \quad (5.68c)$$

5.5 Código numérico

O código numérico utilizado é baseado no algoritmo desenvolvido por [Nithiarasu et al. \(2006\)](#). O código original de [Nithiarasu et al. \(2006\)](#) foi escrito em Fortran 77, no presente trabalho o código numérico foi reescrito em Fortran 95 e adaptado para lidar facilmente com a diferenciação automática. Na dissertação (PPGEC) de [Linn \(2013\)](#) foi desenvolvido um código de adaptação h (refinamento e desrefinamento, baseado na recuperação do Hessiano do elemento), o qual também é utilizado no presente trabalho.

O código numérico tridimensional foi desenvolvido em conjunto com Renato Vaz Linn, baseado no código bidimensional.

5.6 Aplicações numéricas

5.6.1 Descrição geral das aplicações numéricas

Os exemplos aqui apresentados são populares problemas de referência realizados sobre os regimes transônicos e supersônicos, não viscosos e viscosos, bidimensionais e tridimensionais. As propriedades geométricas e valores de referência são dados de acordo com o sistema SI. A seguir a seguinte nomenclatura é utilizada:

- Re - número de Reynolds;
- α - ângulo de ataque;
- ρ_∞ - massa específica de referência;
- $\|u_\infty\|_2$ - velocidade de referência na direção α ;

- p_∞ - pressão de referência;
- M - número de Mach;
- T_∞ - temperatura de referência;
- γ - coeficiente de dilatação adiabática $\frac{C_p}{C_v}$
- CAF - coeficiente de amortecimento fictício ou difusão artificial;
- CS - coeficiente de segurança sobre o Δt na integração temporal.

Os campos apresentados são os campos relativos às variáveis de conservação, ρ , $\rho \underline{v}$, ρE e os campos de pressão, p e número de Mach, M .

5.6.2 Aerofólio NACA 0012 em escoamento viscoso transônico - 2D

O aerofólio NACA 0012 (2D) é estudado no regime transônico laminar viscoso. Na tabela 5.1 são apresentados os parâmetros físicos e numéricos utilizados na presente validação. Nas Figuras 5.7a, 5.7b, 5.7c, 5.7d, 5.7e e 5.7f são apresentados os campos da massa

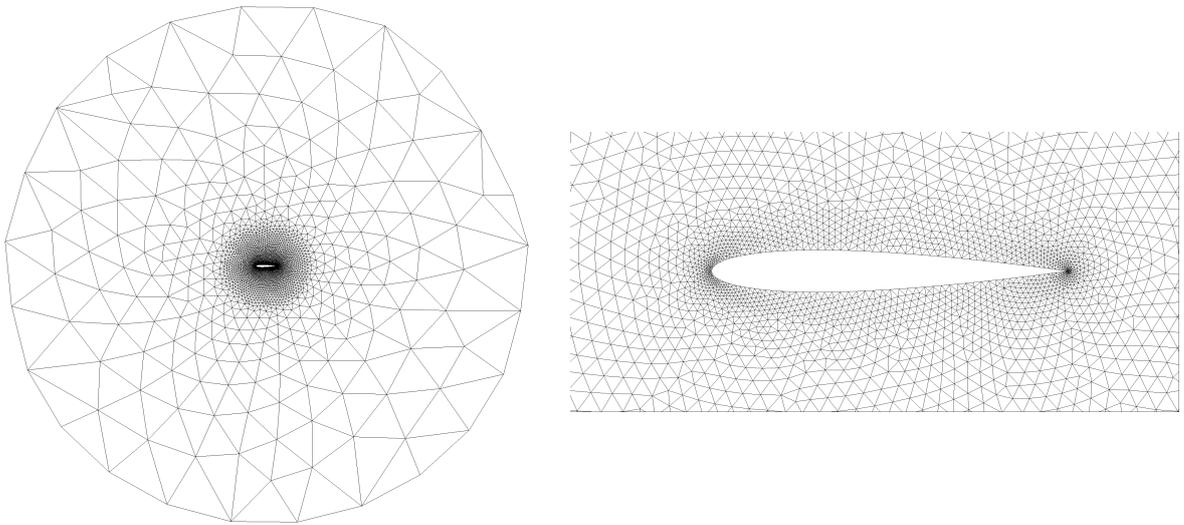
Tabela 5.1: Compilação das características do escoamento analisado

Análise	Re	α	ρ_∞	$\ u_\infty\ _2$	p_∞	M_∞	T_∞	γ	CAF	CS
NACA0012-2D	500	10	1.0	1.0	0.714280	0.8	300	1.4	0.25	0.1

específica ρ , energia ρE , velocidade ρv_1 , velocidade ρv_2 , pressão p e número de Mach M , respectivamente, para as quatro simulações.

Na Figura 5.4 é apresentada a malha inicial utilizada na simulação bidimensional. Na malha adaptada o número de elementos é $n_{el} = 185537$ e o número de nós é $n_{cp} = 93078$. Na Figura 5.5 é apresentada a malha após o processo de adaptação de malhas.

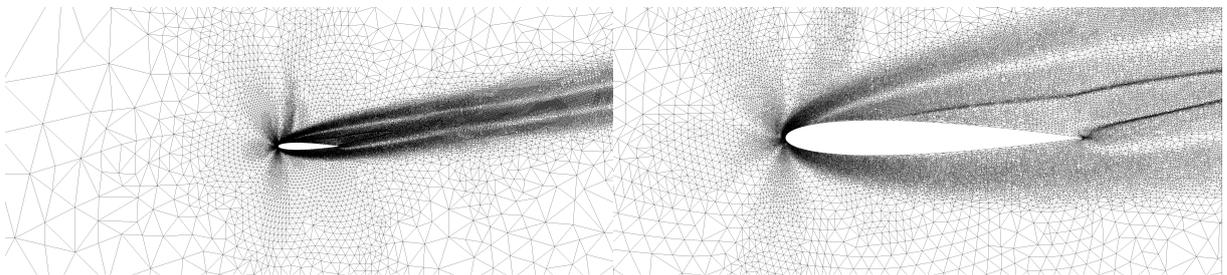
Na Figura 5.6 são apresentadas as linhas de correntes sobre o campo número de Mach (onde a escala e paleta de cores constam na Figura 5.7f). Observa-se da Figura 5.5 que a malha da região acima do aerofólio foi corretamente adaptada a fim de descrever corretamente a alta vorticidade presente no escoamento.



(a) Malha inicial empregada

(b) Detalhe da malha inicial

Figura 5.4: Malha inicial para o aerofólio NACA 0012.



(a) Malha adaptada

(b) Detalhe da malha adaptada

Figura 5.5: Malha final para o aerofólio NACA 0012.

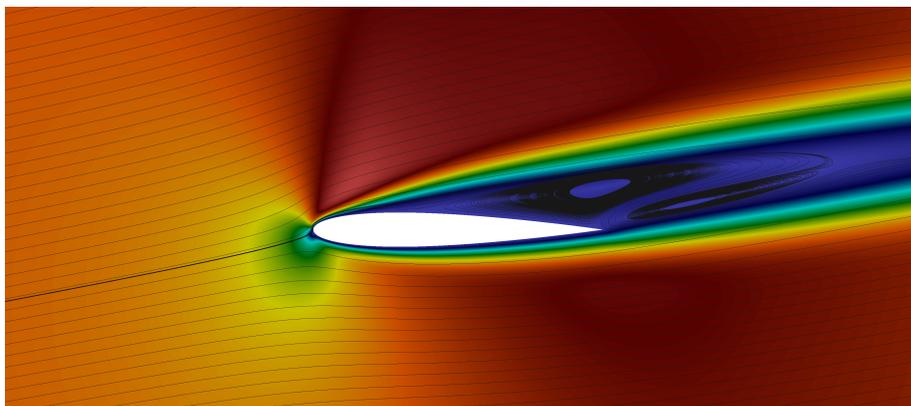


Figura 5.6: Linhas de correntes.

No que concerne aos coeficientes aerodinâmicos, obtiveram-se aproximações excelentes quando comparados com as referências. O coeficiente de arrasto na solução adaptada é $C_D = 0.274$ enquanto que o coeficiente de sustentação resultou em $C_L = 0.436$. No trabalho de Bono (2008) obtiveram-se os seguintes coeficientes $C_D = 0.277$ e $C_L = 0.469$.

Na Figura 5.8 é apresentado o coeficiente de pressão ao longo do aerofólio, comparando com a referência Bono (2008).

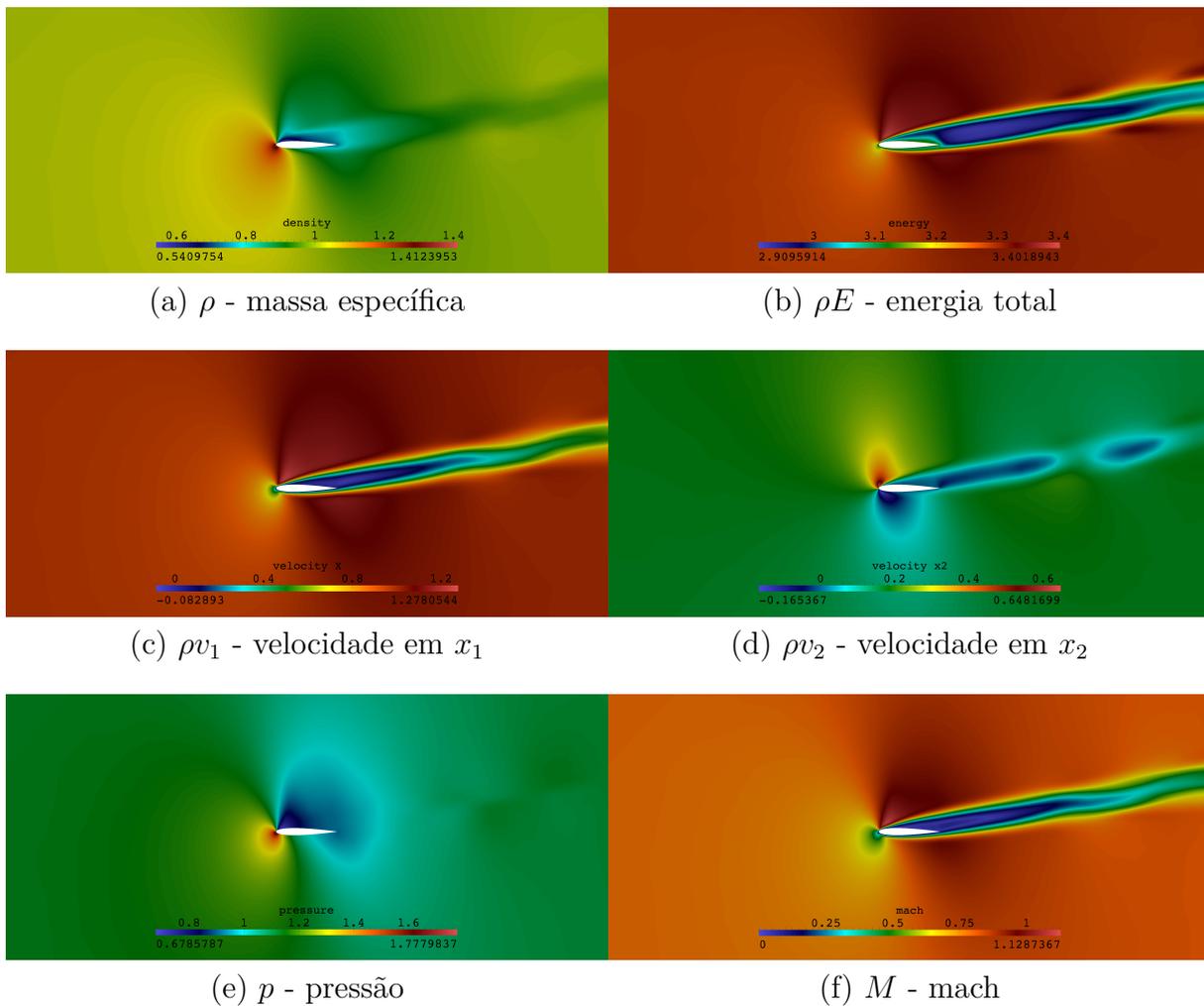


Figura 5.7: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M .

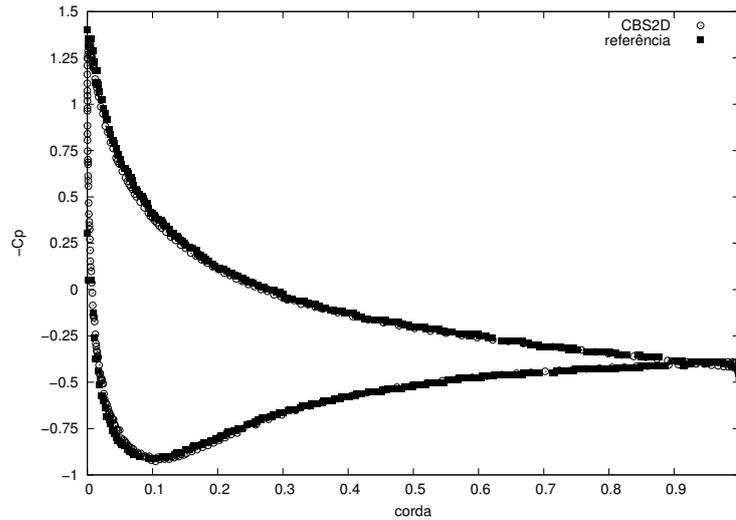


Figura 5.8: Coeficiente de pressão $-C_p$.

5.6.3 Asa Onera M6 em escoamento não viscoso transônico - 3D

A asa Onera M6 é estudada no regime transônico laminar não viscoso. Na tabela 5.2 são apresentados os parâmetros físicos e numéricos utilizados na presente validação. Na

Tabela 5.2: Compilação das características do escoamento analisado. Onera M6

Análise	Re	α	ρ_∞	$\ u_\infty\ _2$	p_∞	M_∞	T_∞	γ	CAF	CS
Onera-M6	—	3.06	1.0	1.0	1.013515	0.8395	300	1.4	7.0	0.05

Figura 5.9 é apresentada a geometria da asa Onera M6.

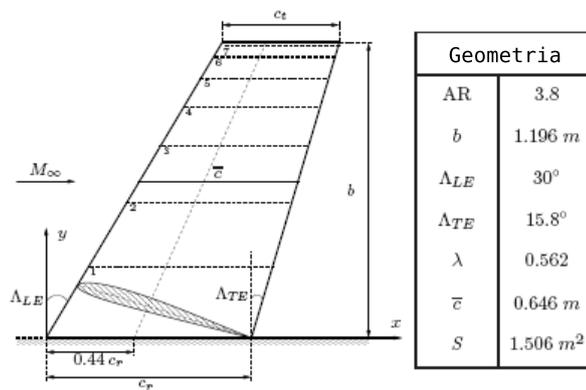
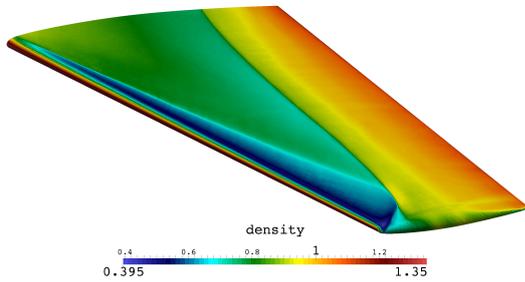
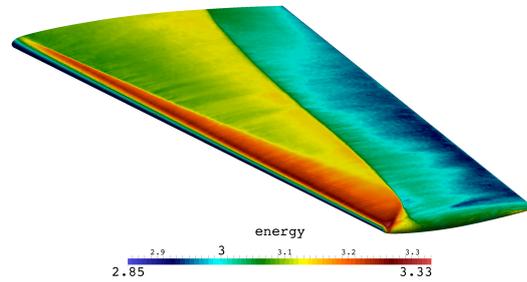
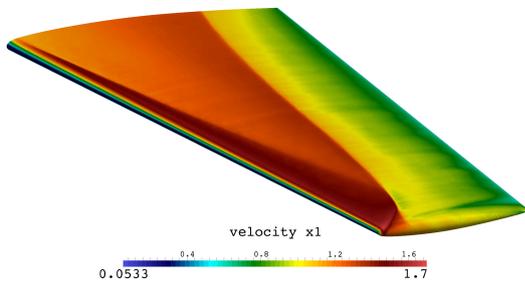
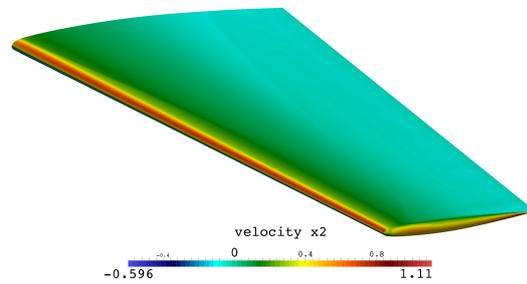
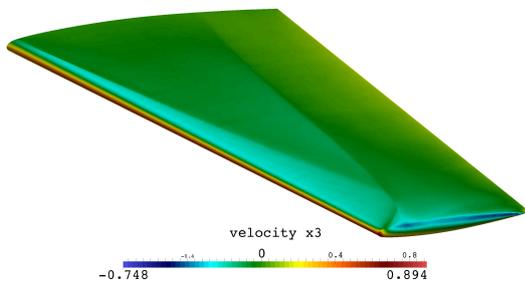
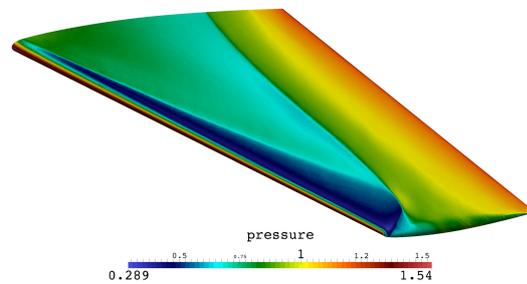
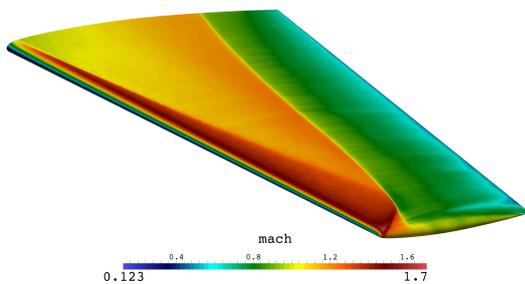
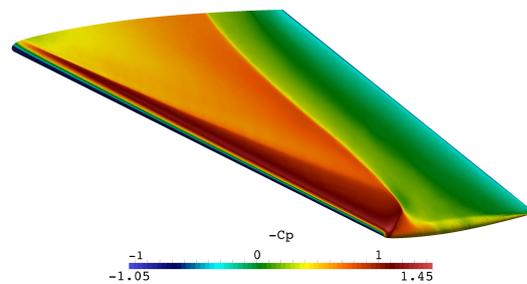
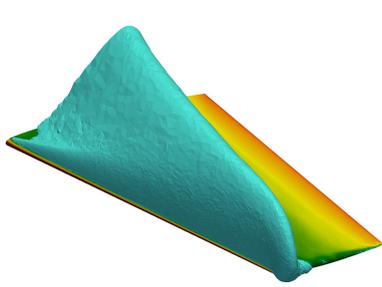


Figura 5.9: Geometria da asa Onera M6.

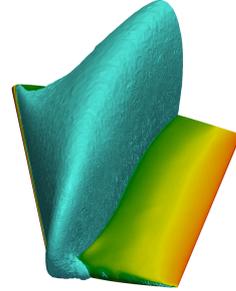
Na malha adaptada o número de elementos é $n_{el} = 46255536$ e o número de nós é $n_{cp} = 8106902$. Na Figura 5.10 são apresentados os campos do escoamento (ρ , E , \underline{v} , M , p e $-C_p$) em torno da superfície da asa.

(a) ρ - massa específica(b) ρE - energia total(c) ρv_1 - velocidade em x_1 (d) ρv_2 - velocidade em x_2 (e) ρv_3 - velocidade em x_3 (f) p - pressão(g) M - mach(h) $-Cp$ - coeficiente de pressãoFigura 5.10: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , ρv_3 , p , M , $-Cp$.

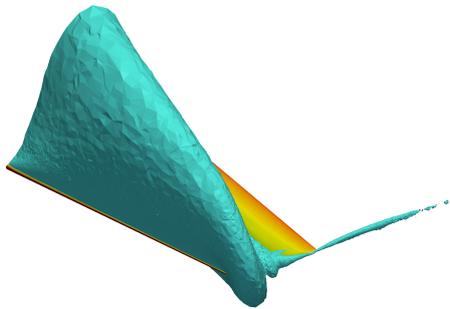
Na Figura 5.11 são apresentados os isocontornos de $\rho = 0.95$ e $M = 1.0$, em duas perspectivas distintas.



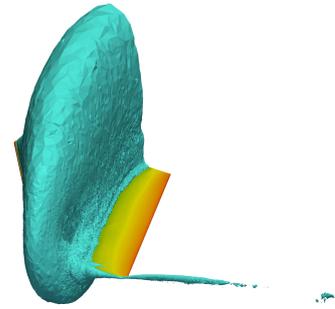
(a) Perspectiva 1 - isocontorno $M = 1.0$



(b) Perspectiva 2 - isocontorno $M = 1.0$



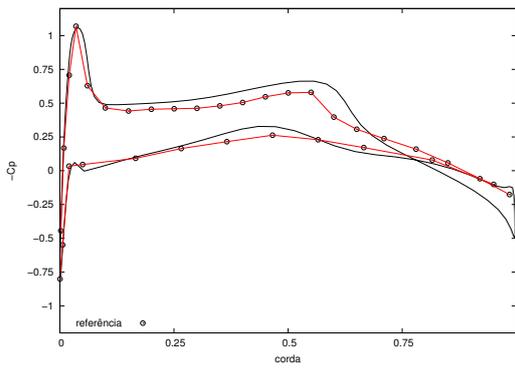
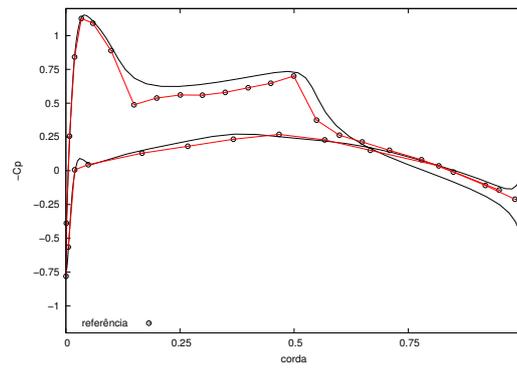
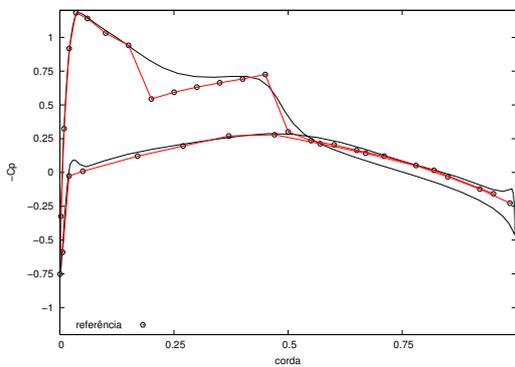
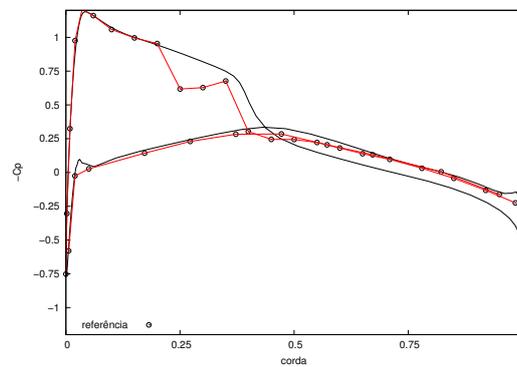
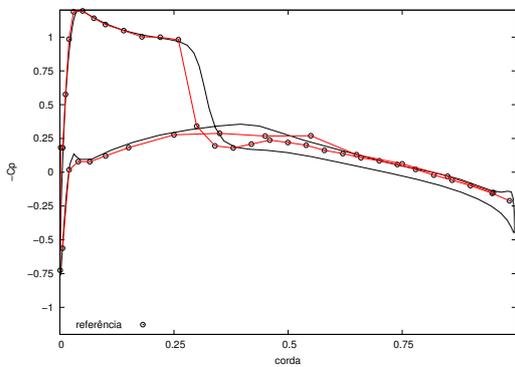
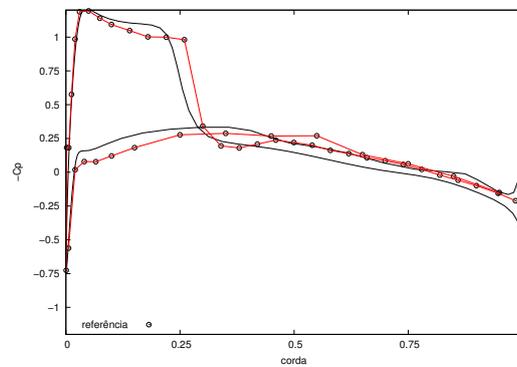
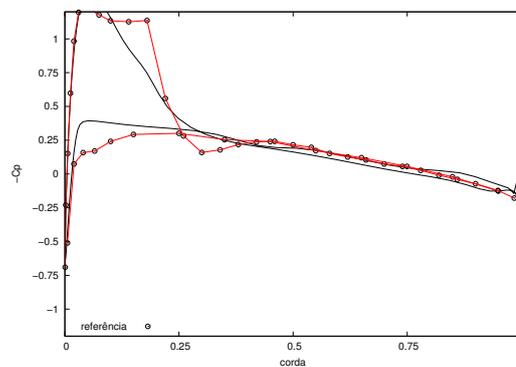
(c) Perspectiva 1 - isocontorno $\rho = 0.95$



(d) Perspectiva 2 - isocontorno $\rho = 0.95$

Figura 5.11: Isocontornos de ρ e M .

Na Figura 5.12 são apresentadas as curvas do coeficiente de pressão ao longo do vão da asa, sendo a referência [Schmitt e Charpin \(1979\)](#).

(a) $-C_p$; $x_3 = 0.20b$ (b) $-C_p$; $x_3 = 0.44b$ (c) $-C_p$; $x_3 = 0.65b$ (d) $-C_p$; $x_3 = 0.80b$ (e) $-C_p$; $x_3 = 0.90b$ (f) $-C_p$; $x_3 = 0.95b$ (g) $-C_p$; $x_3 = 0.99b$ Figura 5.12: Curvas de $-C_p$.

5.6.4 Compilação dos resultados dos exemplos de aerodinâmica

A integração temporal CBS apresenta-se com uma excelente razão de convergência quando comparada com outros tipos de integrações temporais, tais como Taylor-Galerkin de um e dois passos e FCT (do acrônimo do inglês *Flux Corrected Transport*). Entretanto, a convergência desta integração em problemas estacionários ainda é muito inferior quando comparada a integradores temporais acompanhados de técnicas de multi-malha.

Vale novamente salientar que esta integração temporal torna a aplicação de Galerkin ótima, uma vez que torna o sistema de equações diferenciais descrito por um operador auto-adjunto (ver ([Zienkiewicz et al., 2011](#))).

Os dois exemplos apresentam uma boa concordância, com resultados numéricos no exemplo [5.6.2](#) bidimensional, e com resultados experimentais no exemplo [5.6.3](#) tridimensional.

Capítulo 6

Otimização de forma estrutural

6.1 Introdução

Cascas pertencem ao tipo de elemento estrutural mais comum na natureza e eficiente em relação à tecnologia. Elas são utilizadas quando alta resistência, grandes vãos e quantidade mínima de materiais são requeridas ou então com função de contenção. Neste contexto, elas podem também ser denominadas estruturas ótimas, apresentando excelente performance estrutural e em muitos casos até arquitetonicamente belas. Entretanto, como consequência de sistemas otimizados, cascas podem ser extremamente sensíveis no que concerne ao seu comportamento mecânico bem como sua aparência estética. Qualquer projeto deve considerar esta sensibilidade para se tornar bem sucedido. Além da distribuição da espessura, toda a forma da casca está diretamente relacionada com esta sensibilidade.

É bem sabido que grandes reservatórios de paredes muito finas dependem de um princípio de carga baseado em um estado de tensões de membrana onde devem ser evitadas flexões ao máximo possível. Além disso, o estado de tensão deve refletir as características do material escolhido: uma casca de concreto armado deve estar sob compressão principalmente. Esta situação ideal, é claro, raramente pode ser obtida, se uma forma de casca é adotada intuitivamente. Neste caso, são necessários elementos estruturais adicionais como reforços, pré-tensão, enrijecedores, etc., para ter uma casca na condição desejada. Em contraste, formas estruturais ou naturais tentam evitar a maior parte destes componentes de rigidez extra. Eles são obtidos através de uma aproximação inversa, na

qual o objetivo de uma desejada resposta estrutural é prescrita, e.g. a distribuição da espessura e forma. Um dos métodos descritos, chamado otimização estrutural, aparenta ser a técnica mais versátil e generalista como ferramenta de projeto. Esta afirmação se baseia no fato que cada projeto segue essencialmente um processo de otimização. Especificamente no que concerne à encontrar a forma de uma estrutura de casca o objetivo pode ser definido como segue, i.e., encontrar a distribuição da espessura e forma de uma casca tal que:

- as condições de contorno e todos os possíveis casos de carregamento são considerados;
- propriedades dos materiais são levados em consideração;
- tensões e deslocamentos são limitados a certos valores;
- um estado de tensão de membrana praticamente uniforme é obtido;
- flambagem, deformações excessivas, e efeitos negativos são evitados;
- uma razoável vida útil (durabilidade) é garantida;

e, além disso espera-se

- que custos de produção e serviços sejam justificados, e que o resultado seja esteticamente agradável.

Otimização estrutural é atualmente entendida como uma síntese de diversas disciplinas individuais como análise IsoGeométrica ou análise por elementos finitos, diferenciação automática (baseada na teoria de grafos), NURBS (projeto auxiliado por computador), otimização matemática, etc. Aparentemente, a otimização é um método computacional, conseqüentemente apenas aqueles requerimentos descritos acima podem ser parte do processo, o qual pode ser introduzido em uma formulação matemática. Infelizmente, o termo “otimização” também é ilusório, uma vez que ele sugestiona que exista apenas uma única solução ótima. Em outras palavras, a criatividade é ainda mantida como parte do processo; felizmente, o processo é – nesta perspectiva generalizada – extremamente sensível

aos parâmetros e permite uma ampla liberdade quanto ao projeto e *design*. Otimização estrutural é nada mais que um apoio ao projeto. Suas aplicações podem ser classificadas como:

- problemas de homogenização (estados de tensões uniformes etc.);
- uso otimizado de materiais (capacidade máxima de carregamento etc.);
- resposta estrutural otimizada (e.g. frequências).

6.2 Definição do problema de otimização estrutural

As declarações de um problema matemático abstrato de otimização não linear do tipo estudado no capítulo 2, têm de ser redefinidos em termos mecânicos. As funções e variáveis típicas em otimização de forma de cascas segundo Ramm et al. (1993) são:

variáveis de otimização:

- coordenadas dos nós selecionados;
- espessura dos nós selecionados;
- outros parâmetros da seção transversal.

No presente trabalho são propostas as seguintes variáveis de otimização:

- pontos de controle em coordenadas homogêneas $\mathbf{P}_{i,j}^w$, i.e., pontos de controle e pesos;
- parâmetros que descrevem a variação espessura.

funções objetivo:

- massa ou volume $\mathcal{F}_w = \int \rho \, d\Omega$; onde ρ é a massa específica;
- energia de deformação $\mathcal{F}_E = \frac{1}{2} \int \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\epsilon}} \, d\Omega$; onde $\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{\epsilon}}$ são os tensores de tensões e deformações, respectivamente;

- nível de tensão $\mathcal{F}_s = \int (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{obj})^2 d\Omega$; onde $\boldsymbol{\sigma}_{obj}$ é um nível de tensão objetivo;
- função de ajuste $\mathcal{F}_\lambda = \sum \frac{(\lambda - \lambda_{obj})^2}{\lambda_{obj}^2}$; onde λ_{obj} é o ajuste à uma determinada resposta;
- frequência natural $\mathcal{F}_\omega = \omega$; onde ω é uma das frequências naturais da estrutura;
- fator de carga crítico $\mathcal{F}_\lambda = -\lambda$; onde λ é o fator de carga crítico.

restrições:

- massa ou volume $\mathcal{C}_w = 1 - \frac{w}{w_{all}} = 0$; onde w_{all} é o peso ou a massa da estrutura;
- deslocamentos $\mathcal{C}_u = 1 - \frac{u}{u_{all}} \geq 0$; onde u é um deslocamento máximo permitido;
- tensões $\mathcal{C}_s = 1 - \frac{\sigma}{\sigma_{all}} \geq 0$; onde σ_{all} é um nível de tensão máximo permitido;
- frequências $\mathcal{C}_\omega = 1 - \frac{\omega}{\omega_{all}} \geq 0$; onde ω_{all} é uma frequência máxima permitida;
- fator de carga $\mathcal{C}_\lambda = \frac{\lambda}{\lambda_{all}} - 1 \geq 0$; onde λ_{all} é um fator de carga crítico máximo permitido.

Além do objetivo mais comum, o peso, há outras funções objetivos de significância, como minimização de energia de deformação, o que é equivalente a maximizar a rigidez. Isso significa que as deformações por flexão em uma casca são minimizadas a um ponto em que são obtidas tensões de membrana. Nível de tensão baseado em uma tensão “alvo” prescrita pode ser aplicado para gerar uma casca principalmente em compressão. Ajuste para uma dada resposta, por exemplo, uma frequência específica ou um desejado espectro ou maximizar a carga de falha são objetivos clássicos em engenharia. Restrições de desigualdade são levadas em conta para analisar requisitos de segurança e confiabilidade as quais devem ser satisfeitas. Restrições típicas deste tipo são limites de tensões e deslocamentos. Se a rigidez ou o fator de carga crítica deve ser maximizado, uma massa estrutural prescrita é introduzida através de uma restrição de igualdade. Esta restrição proíbe um acúmulo de massa, o qual, de outra forma, produziria uma estrutura massiva irreal.

No que concerne à otimização estrutural, é utilizado o algoritmo SQP na busca do ponto de mínimo. A avaliação da função objetivo é calculada com análise IsoGeométrica,

enquanto as derivadas são avaliadas pela diferenciação automática no modo adjunto reverso.

6.3 Aplicações numéricas

Nesta seção são apresentados problemas de otimização estrutural de cascas modeladas como sólidos, de maneira a obter a forma ótima bem como a distribuição de espessura ótima. Os exemplos a seguir analisados são problemas de otimização não linear, entretanto a análise estrutural é linear, na sequência é explanado porque não foi considerada a não linearidade geométrica.

Cabe salientar que a descrição da espessura é realizada por meio de uma transformação não linear da superfície inferior na superfície superior do sólido, esta transformação também é conhecida por *non-uniform offset*.

Tabela 6.1: descrição dos problemas de otimização de formas de casca

características	caso 1	caso 2	caso 3	caso 4	caso 5	caso 6
p superfície	6	6	10	6	6	10
classe da superfície	C^5	C^5	C^9	C^5	C^5	C^9
p espessura	2	2	2	2	2	2
classe da espessura	C^1	C^1	C^1	C^1	C^1	C^1
nº planos de simetria	2	2	2	4	4	4
nº de variáveis de otimização	45	45	91	29	29	55
filtro do gradiente	não	sim	sim	não	sim	sim

A discretização para todos os casos é formada por 16 elementos sobre a superfície e 1 elemento sobre a espessura. Os casos 1 a 3, representam o problema de uma placa lateralmente apoiada, enquanto que os casos 4 a 6 representam o problema de uma placa apoiada nos quatro cantos.

6.4 Placa apoiada lateralmente

Adota-se como geometria inicial uma placa quadrada, apoiada lateralmente sobre lados opostos com carregamento uniformemente distribuído sobre a superfície superior (Figura 6.3), com valor de 5×10^3 , as dimensões da superfície da placa são 10×10 e a espessura

é igual à 0.1127. As propriedades elásticas são: módulo de elasticidade, $E = 3 \times 10^{10}$ e coeficiente de Poisson, $\nu = 0.2$.

Como variáveis de otimização são utilizados os pontos de controle que definem a superfície inferior (Figura 6.1a caso 1 e 2, Figura 6.2a caso 3) e superior (Figura 6.1b caso 1 e 2, Figura 6.2b caso 3) da casca. As variáveis são apresentadas em vermelho nas Figuras 6.1a-6.1b para os casos 1 e 2, enquanto que para o caso 3 nas Figuras 6.2a-6.2b. As coordenadas dos demais pontos de controle são obtidos por simetrias impostas, ao todo 2 planos de simetria.

Na Figura 6.4a e 6.4b são apresentados a norma do campo de deslocamentos na configuração inicial (casos 1, 2 e 3) do processo de otimização.

Como função objetivo utilizou-se:

- energia de deformação interna

enquanto que as restrições utilizadas foram

- volume constante;
- espessura mínima na rede de controle: 5×10^{-2} ;
- espessura máxima na rede de controle: 45×10^{-2} ;
- a superfície inferior do sólido retém constante sua projeção ortogonal;
- a altura mínima e máxima dos pontos de controle são: 0 e 15, respectivamente.

No processo de otimização, obtiveram-se as geometrias ótimas apresentadas na Figura 6.6a-6.10a-6.14a, enquanto que nas Figuras 6.6b-6.10b-6.14b e 6.6c-6.10c-6.14c são apresentados os pontos de controle e a norma do campo de deslocamentos nas configurações ótimas, respectivamente, para os casos 1, 2 e 3.

Nas Figuras 6.8a-6.12a-6.16a e 6.8b-6.12b-6.16b são apresentadas as vistas laterais e suas respectivas seções transversais, enquanto que nas Figuras 6.8c-6.12c-6.16c e 6.8d-6.12d-6.16d são apresentadas as vistas frontais e suas seções transversais, para os casos 1, 2 e 3,

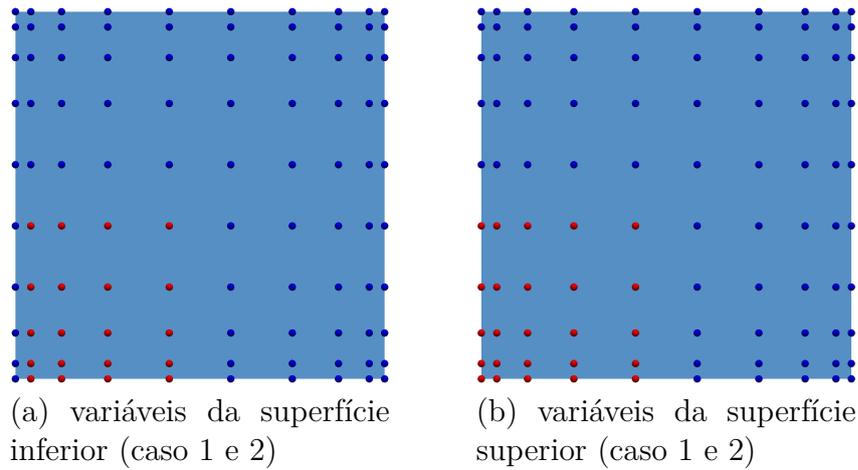


Figura 6.1: Variáveis de otimização dos casos 1 e 2.

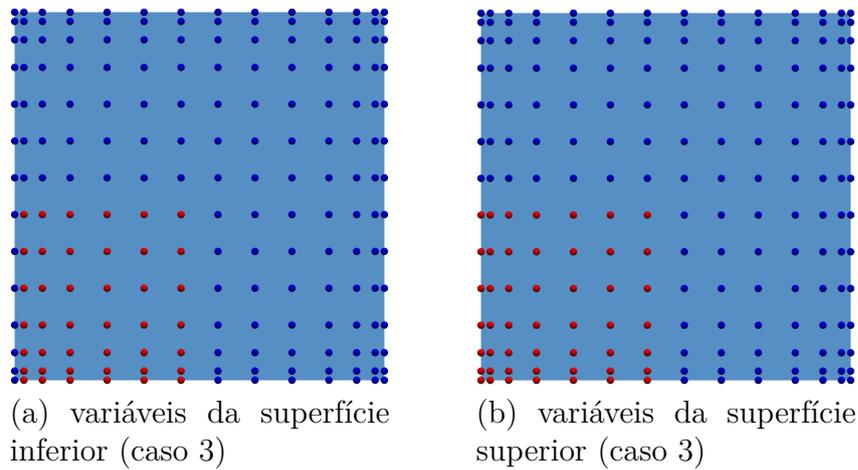


Figura 6.2: Variáveis de otimização dos casos 3.

respectivamente. As perspectivas destas seções são apresentadas nas Figuras 6.7a-6.11a-6.15a e 6.7b-6.11b-6.15b, para os casos 1, 2 e 3, respectivamente.

As seções laterais foram realizadas para os planos definidos por: $x_2 = 0, 1, 2, 3, 4, 4.5, 5$, enquanto que as seções frontais estão definidas pelos planos: $x_1 = 0, 1, 2, 3, 4, 4.5, 5$.

A função objetivo normalizada $\mathcal{F}_{ini} = 1$, após os processos de otimização, resultaram $\mathcal{F}_{opt}^{c1} = 1.123 \times 10^{-3}$, $\mathcal{F}_{opt}^{c2} = 1.185 \times 10^{-3}$ e $\mathcal{F}_{opt}^{c3} = 1.295 \times 10^{-3}$, onde $c1, c2, c3$ representam respectivamente os casos 1, 2 e 3. As reduções da função objetivo resultaram em torno de 1000 vezes, implicando em reduções nos deslocamentos em torno de 1000 vezes, para os três casos analisados.

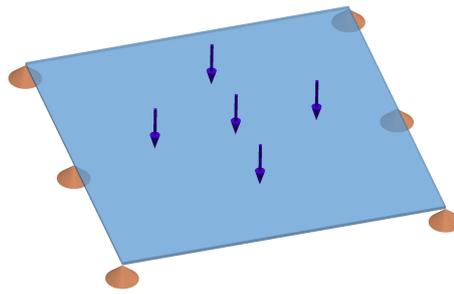


Figura 6.3: condições de contorno.

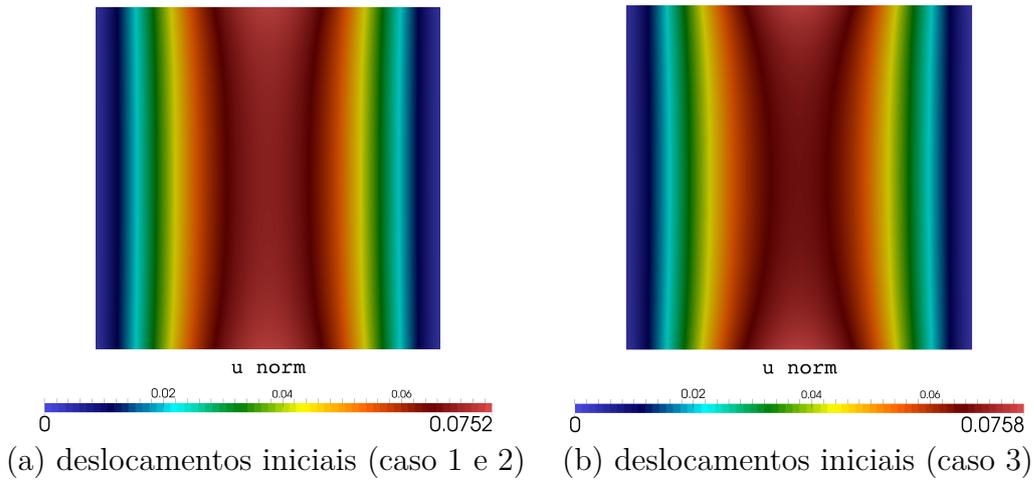


Figura 6.4: Problema inicial (problema 6.4).

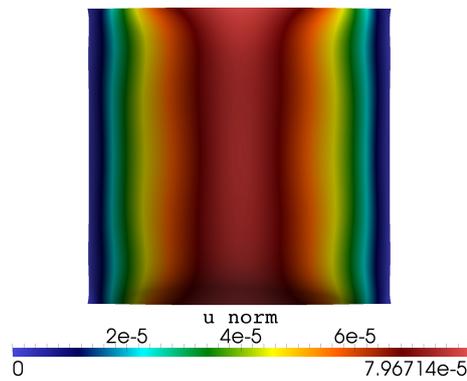


Figura 6.5: deslocamentos finais (problema 6.4 caso 1).

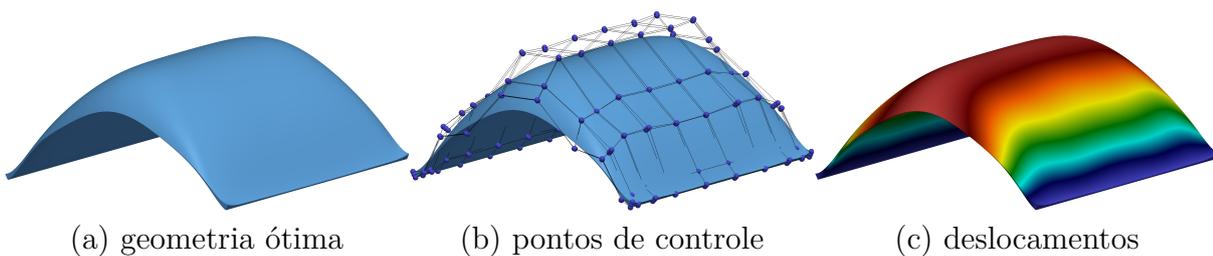


Figura 6.6: Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 1).

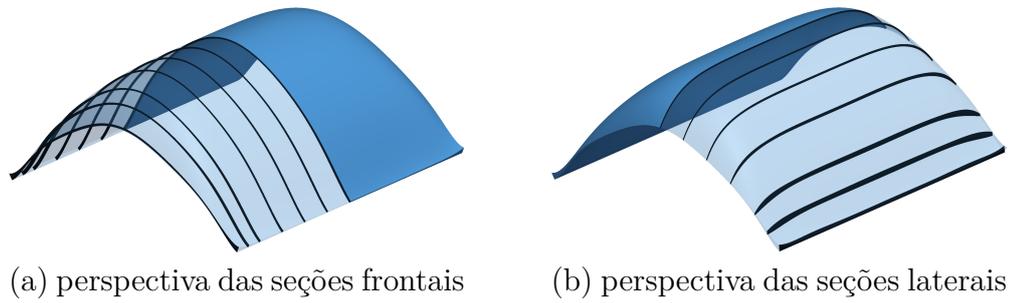


Figura 6.7: perspectiva das seções (problema 6.4 caso 1).

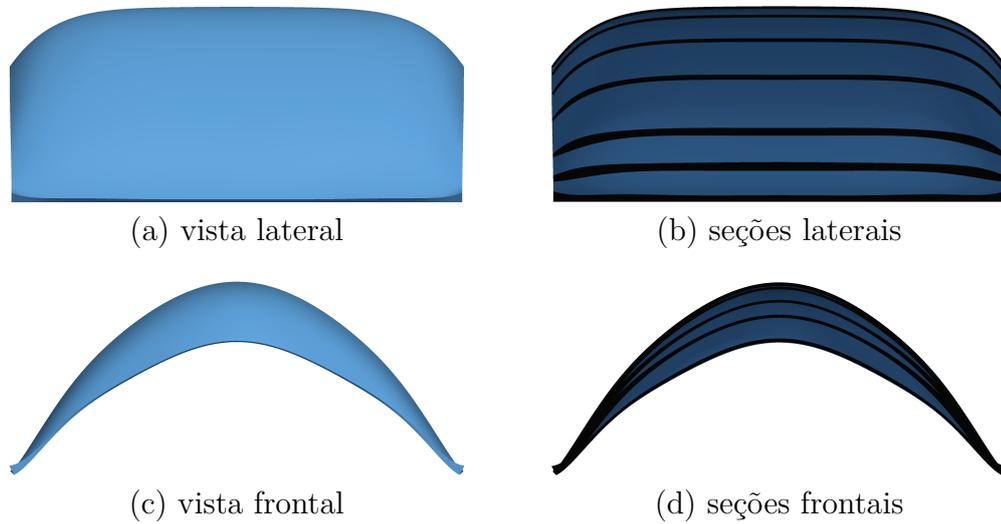


Figura 6.8: Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 1).

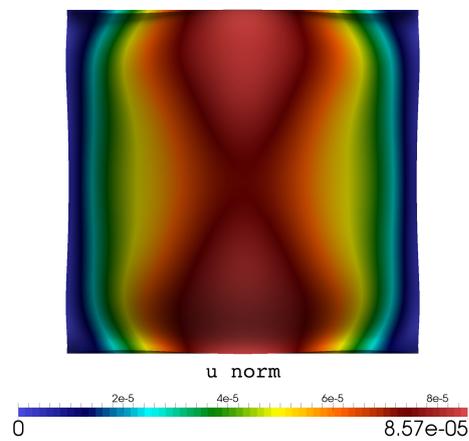


Figura 6.9: deslocamentos finais (problema 6.4 caso 2).

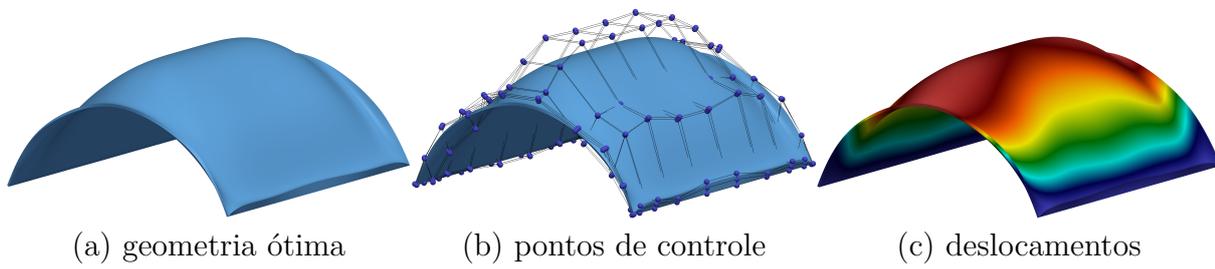


Figura 6.10: Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 2).

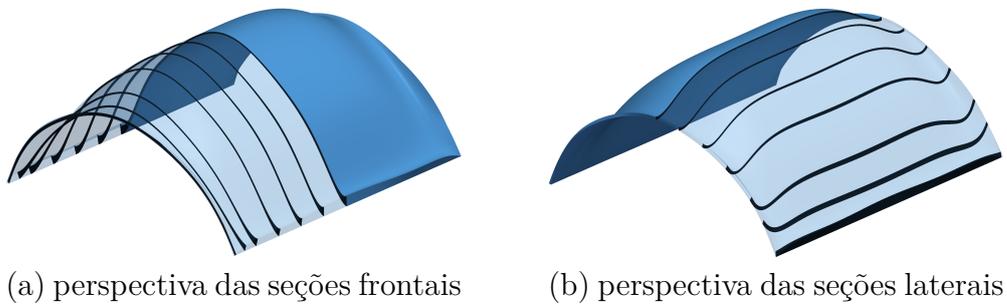


Figura 6.11: perspectiva das seções (problema 6.4 caso 2).

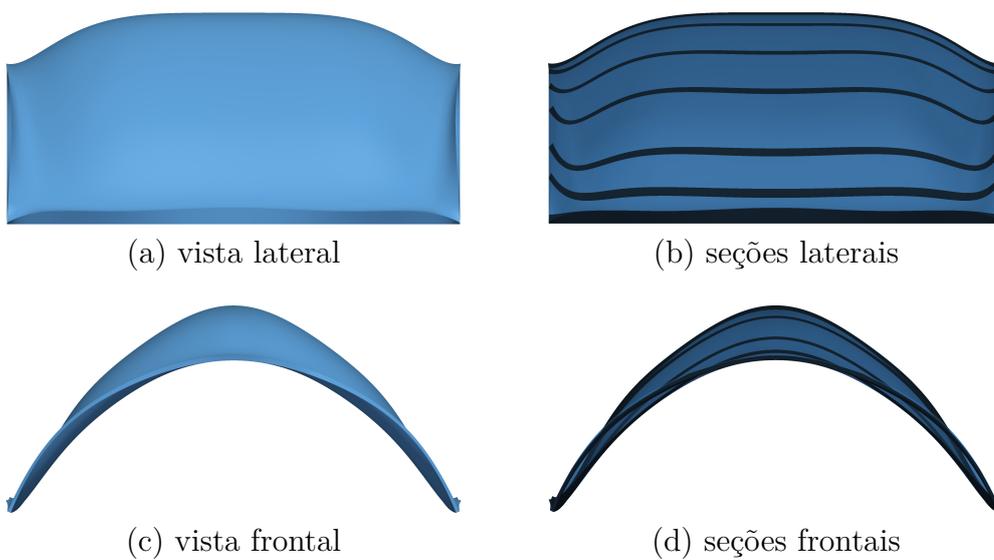


Figura 6.12: Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 2).

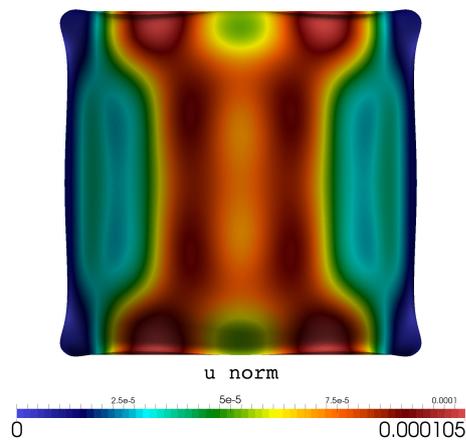
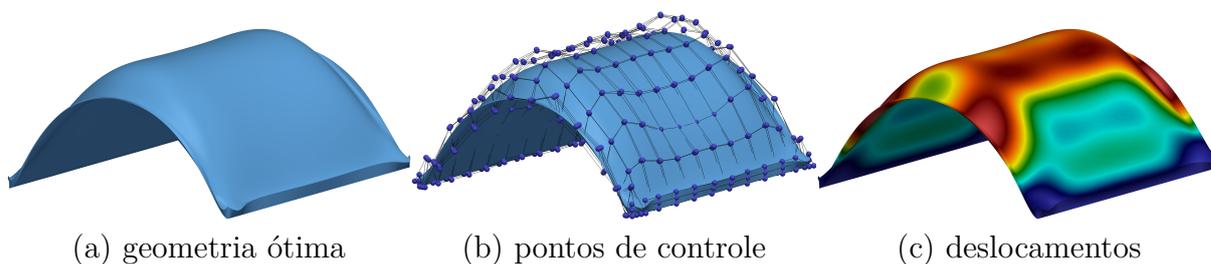


Figura 6.13: deslocamentos finais (problema 6.4 caso 3).

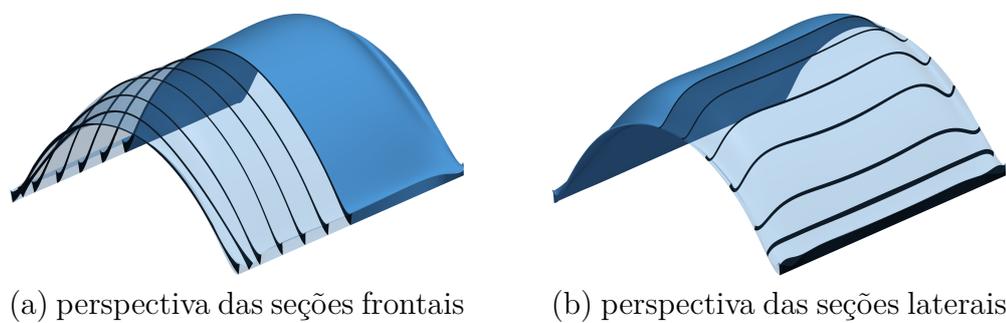


(a) geometria ótima

(b) pontos de controle

(c) deslocamentos

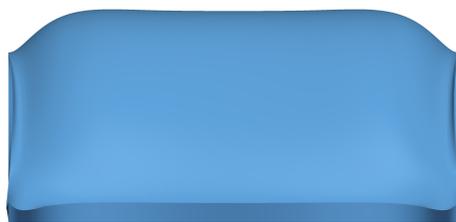
Figura 6.14: Ponto de ótimo (problema 6.4 caso 3).



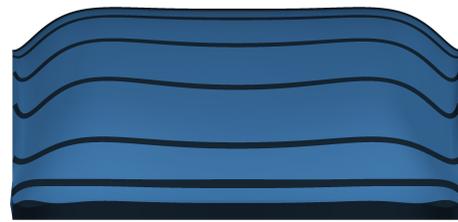
(a) perspectiva das seções frontais

(b) perspectiva das seções laterais

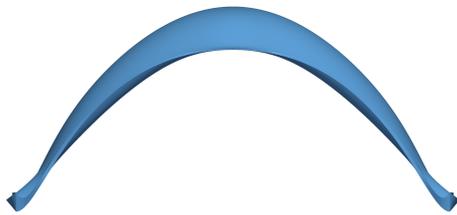
Figura 6.15: perspectiva das seções (problema 6.4 caso 3).



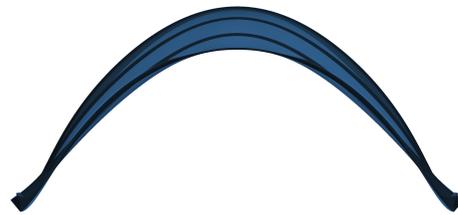
(a) vista lateral



(b) seções laterais



(c) vista frontal



(d) seções frontais

Figura 6.16: Seções da casca ótima (problema 6.4 caso 3).

6.5 Placa apoiada em quatro pontos

Adota-se como geometria inicial uma placa quadrada, apoiada apoiada sobre os quatro cantos com carregamento uniformemente distribuído sobre a superfície superior (Figura 6.19), com valor de 5×10^3 , as dimensões da superfície da placa são 10×10 e a espessura é igual à 0.1127. As propriedades elásticas são: módulo de elasticidade, $E = 3 \times 10^{10}$ e coeficiente de Poisson, $\nu = 0.2$.

Como variáveis de otimização são utilizados os pontos de controle que definem a superfície inferior (Figura 6.17a caso 3 e 4, Figura 6.18a caso 5) e superior (Figura 6.17b caso 3 e 4, Figura 6.18b caso 5) da casca. As variáveis são apresentadas em vermelho nas Figuras 6.1a-6.1b para os casos 3 e 4, enquanto que para o caso 5 nas Figuras 6.2a-6.2b. As coordenadas dos demais pontos de controle são obtidos por simetrias impostas, ao todo 4 planos de simetria.

Na Figura 6.4a e 6.4b são apresentados a norma do campo de deslocamentos na configuração inicial (casos 4, 5 e 6) do processo de otimização.

Como função objetivo utilizou-se:

- energia de deformação interna

enquanto que as restrições utilizadas foram

- volume constante
- espessura mínima na rede de controle: 5×10^{-2} ;
- espessura máxima na rede de controle: 50×10^{-2} ;
- a superfície inferior do sólido retém constante sua projeção ortogonal;
- a altura mínima e máxima dos pontos de controle são: 0 e 15, respectivamente.

No processo de otimização, obtiveram-se as geometrias ótimas apresentadas na Figura 6.22a-6.27a-6.32a, enquanto que nas Figuras 6.22b-6.27b-6.32b e 6.22c-6.27c-6.32c são

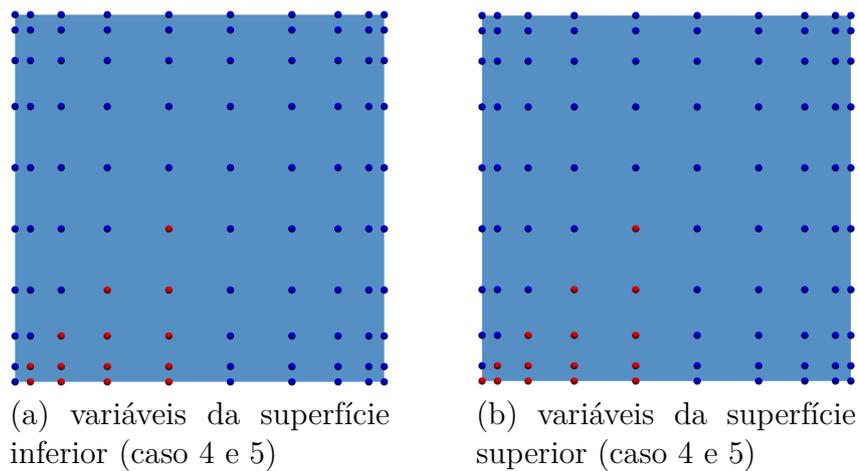


Figura 6.17: Variáveis de otimização dos casos 4 e 5.

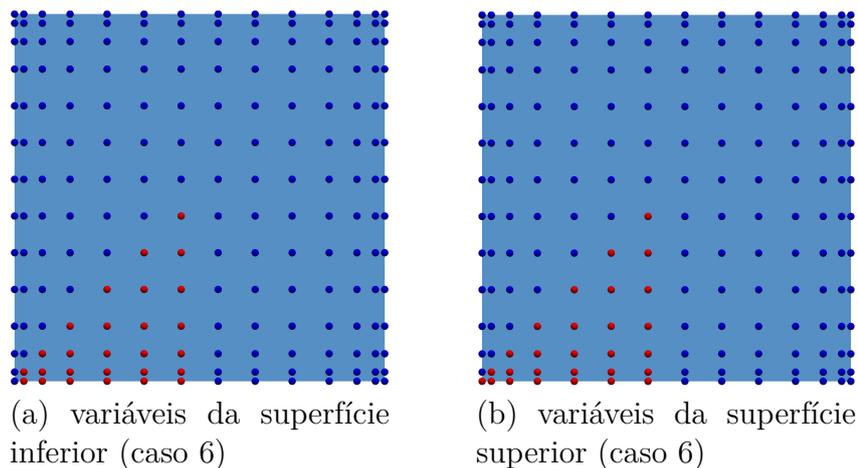


Figura 6.18: Variáveis de otimização dos casos 6.

apresentados os pontos de controle e a norma do campo de deslocamentos nas configurações ótimas, respectivamente, para os casos 4, 5 e 6.

Nas Figuras 6.24a-6.29a-6.34a e 6.24b-6.29b-6.34b são apresentadas as vistas laterais e suas respectivas seções transversais, enquanto que nas Figuras 6.25a-6.30a-6.35a e 6.25b-6.30b-6.35b são apresentadas as vistas frontais e suas seções transversais, para os casos 4, 5 e 6, respectivamente. As perspectivas destas seções são apresentadas nas Figuras 6.23a-6.28a-6.33a e 6.23b-6.28b-6.33b, para os casos 4, 5 e 6, respectivamente.

As seções laterais foram realizadas para os planos definidos por: $x_2 + x_1 = 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5$, enquanto que as seções frontais estão definidas pelos planos: $x_1 = 0, 1, 2, 3, 4, 4.5, 5$.

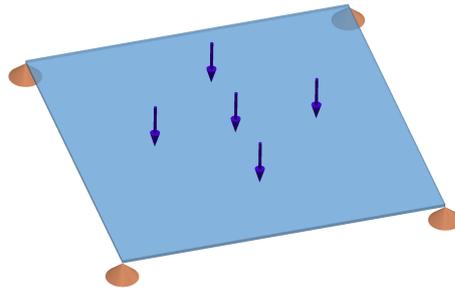


Figura 6.19: condições de contorno.

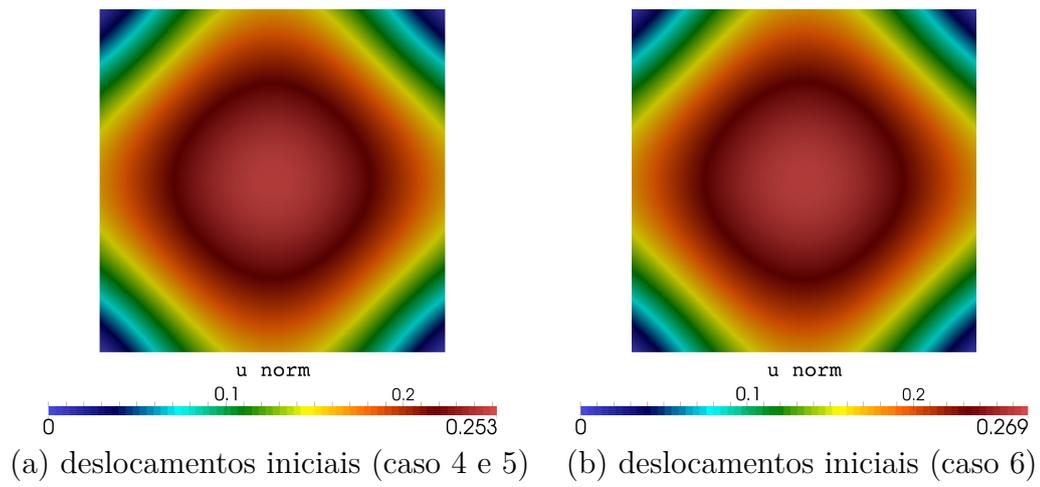


Figura 6.20: Problema inicial (problema 6.5).

A função objetivo normalizada $\mathcal{F}_{ini} = 1$, após os processos de otimização, resultaram $\mathcal{F}_{opt}^{c4} = 8.752 \times 10^{-4}$, $\mathcal{F}_{opt}^{c5} = 1.048 \times 10^{-3}$ e $\mathcal{F}_{opt}^{c6} = 1.201 \times 10^{-3}$, onde $c4$, $c5$, $c6$ representam respectivamente os casos 4, 5 e 6. As reduções da função objetivo resultaram em torno de 1000 vezes, implicando em reduções nos deslocamentos em torno de 1000 vezes, para os três casos analisados.

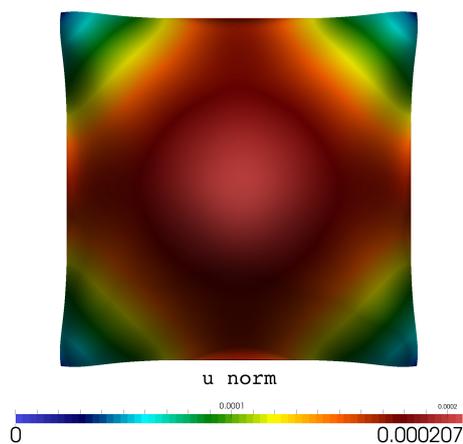


Figura 6.21: deslocamentos finais (problema 6.5 caso 4).

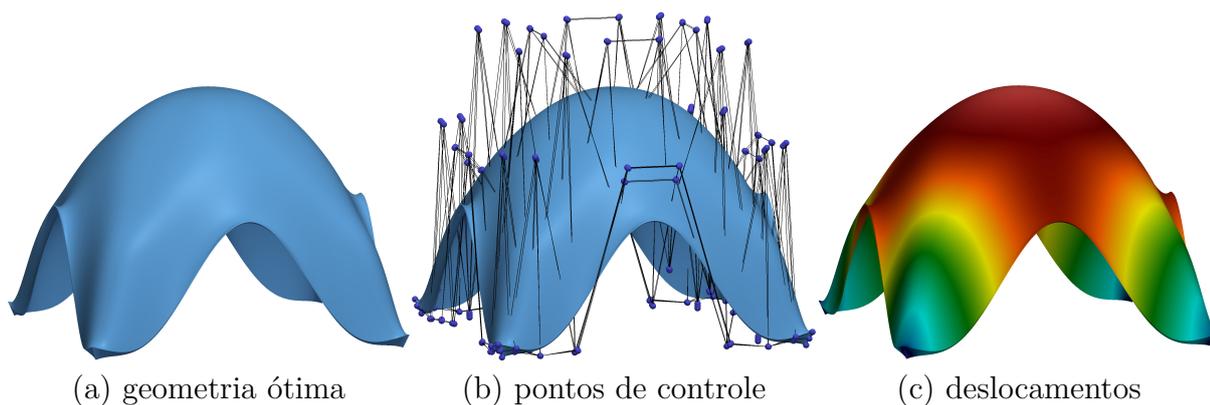


Figura 6.22: Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 4).

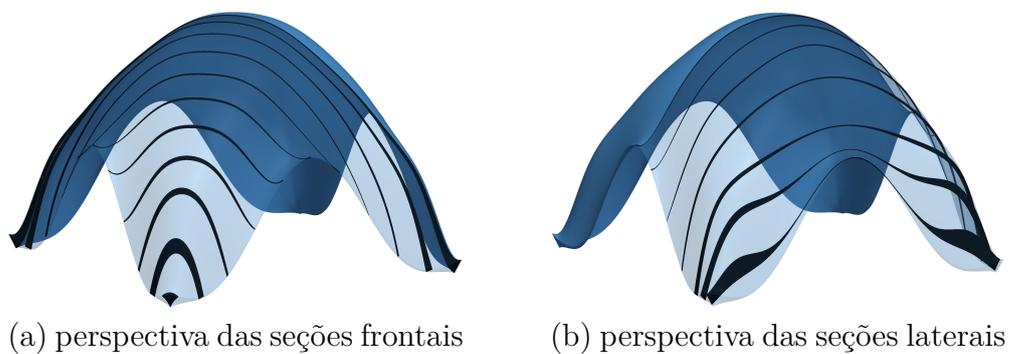


Figura 6.23: perspectiva das seções (problema 6.5 caso 4).

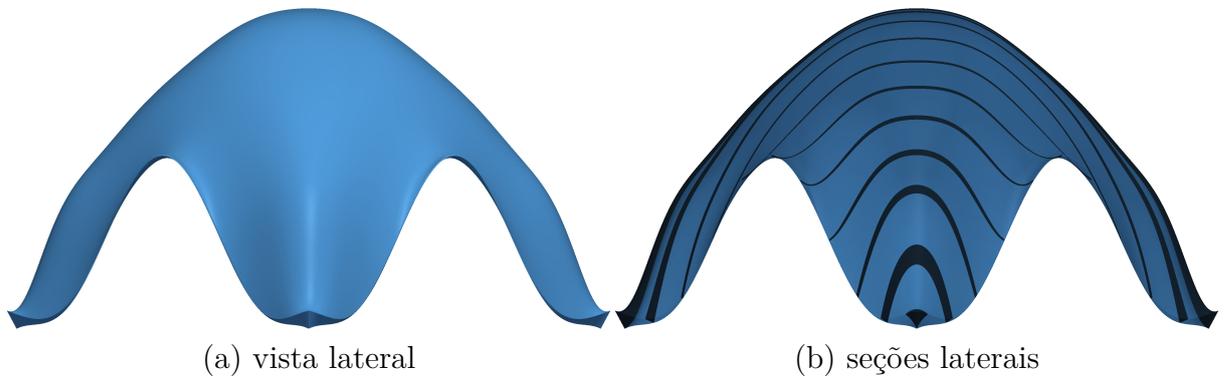


Figura 6.24: Seções laterais da casca ótima (problema 6.5 caso 4).

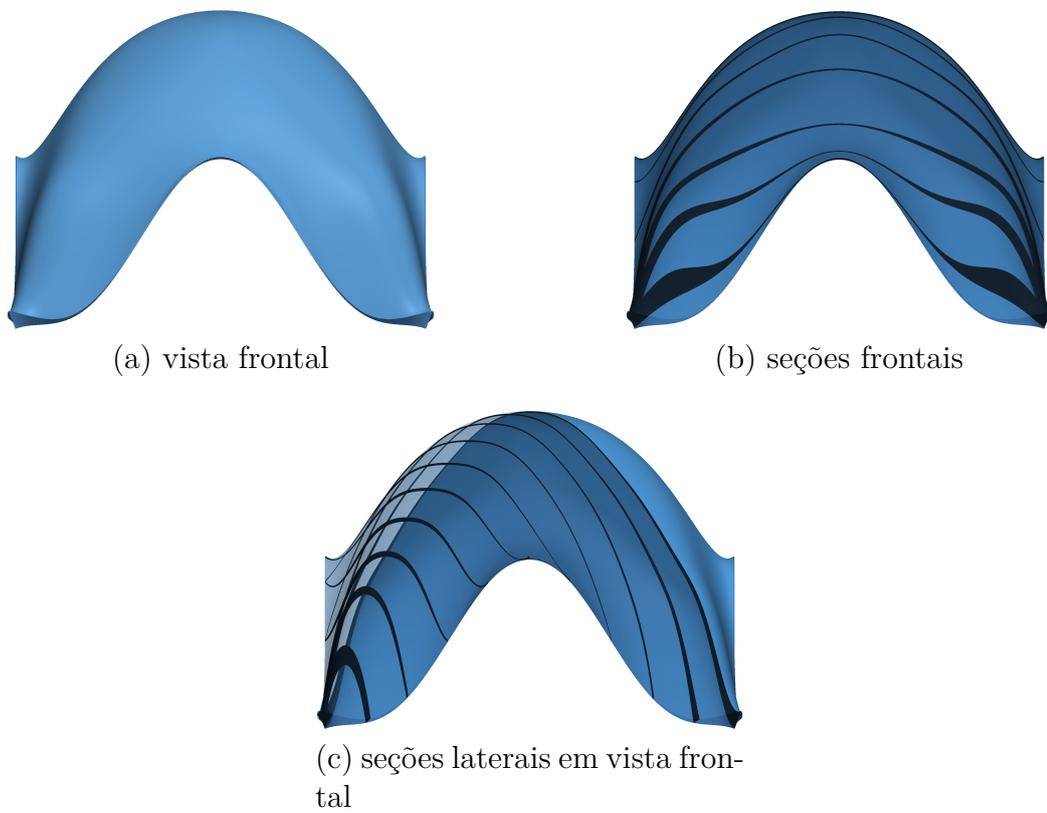


Figura 6.25: Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 4).

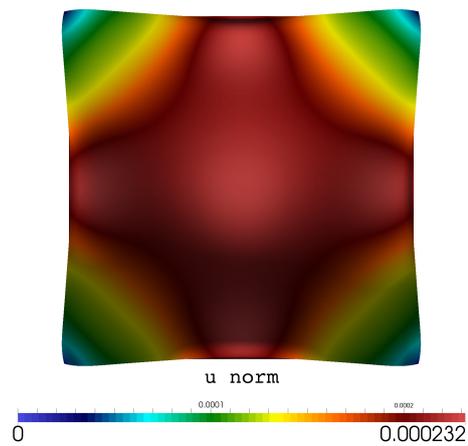


Figura 6.26: deslocamentos finais (problema 6.5 caso 5).

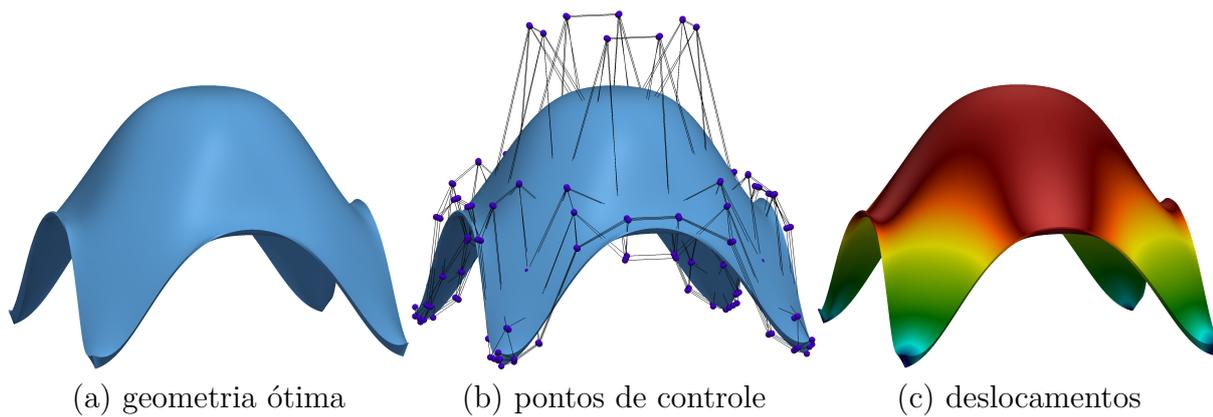


Figura 6.27: Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 5).

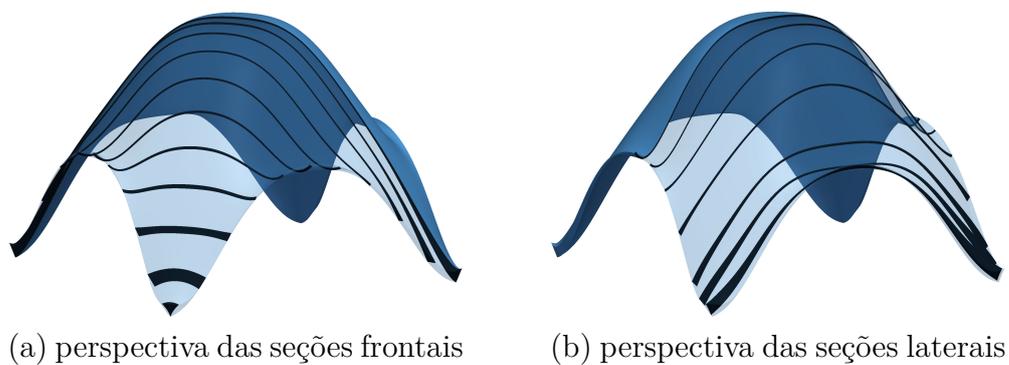


Figura 6.28: perspectiva das seções (problema 6.5 caso 5).

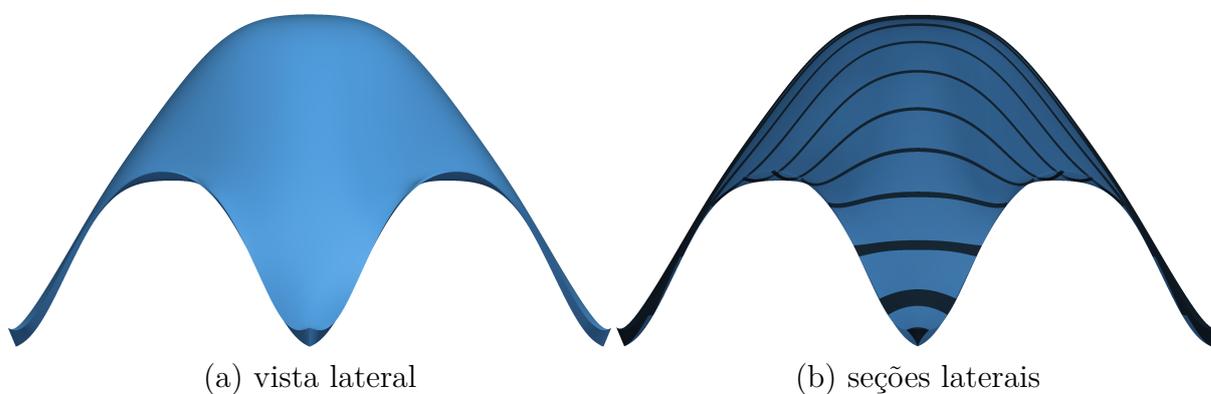


Figura 6.29: Seções laterais da casca ótima (problema 6.5 caso 5).

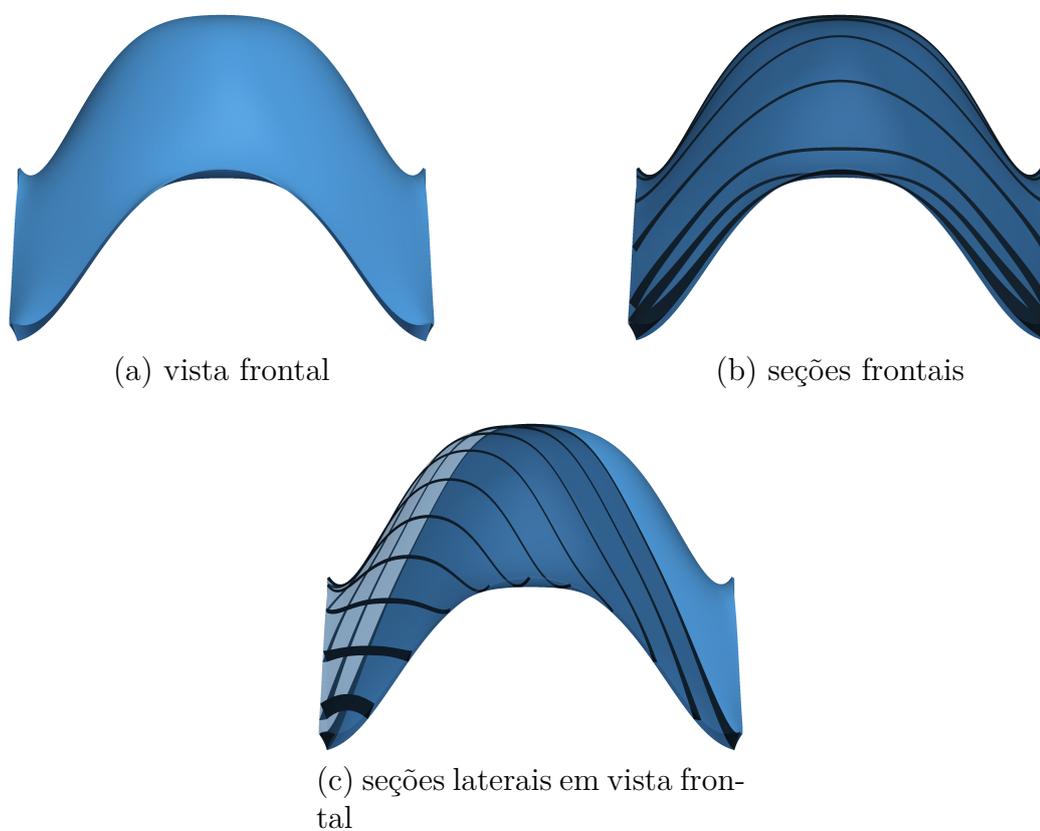


Figura 6.30: Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 5).

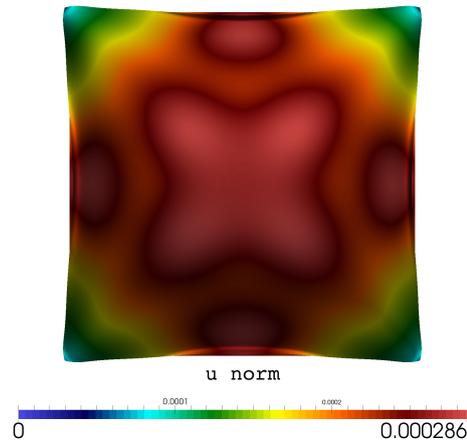
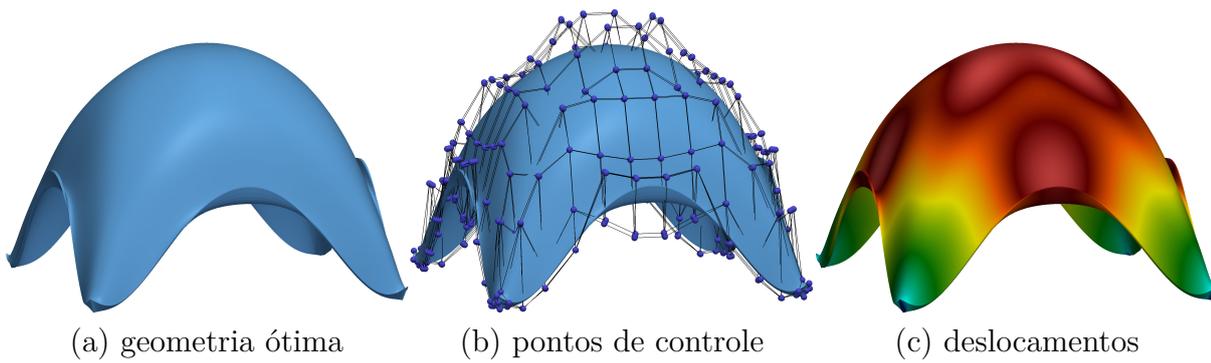


Figura 6.31: deslocamentos finais (problema 6.5 caso 6).

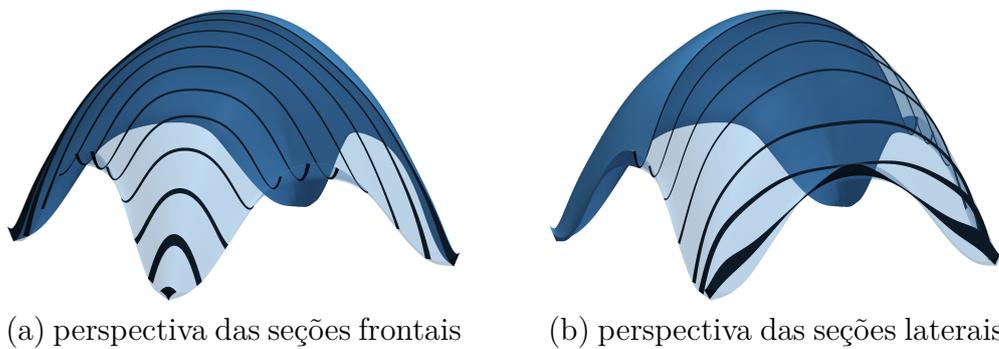


(a) geometria ótima

(b) pontos de controle

(c) deslocamentos

Figura 6.32: Ponto de ótimo (problema 6.5 caso 6).



(a) perspectiva das seções frontais

(b) perspectiva das seções laterais

Figura 6.33: perspectiva das seções (problema 6.5 caso 6).

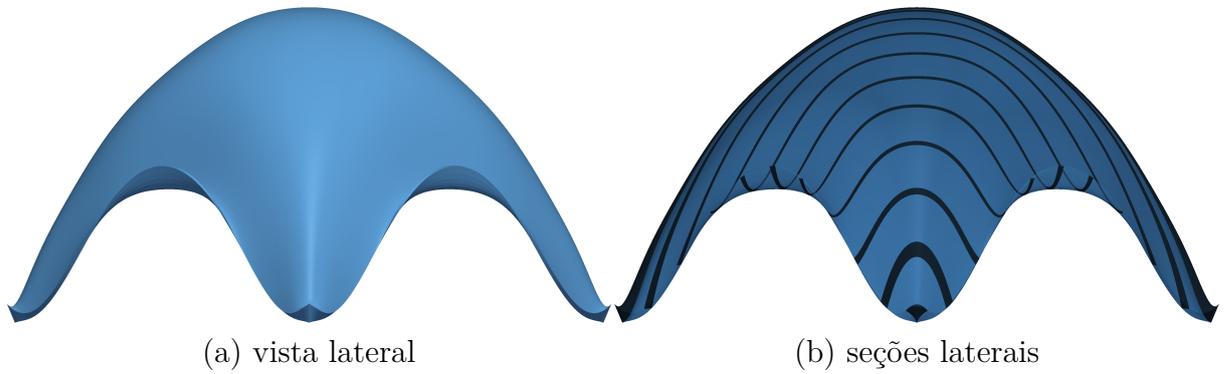


Figura 6.34: Seções da casca ótima (problema 6.5 caso 6).

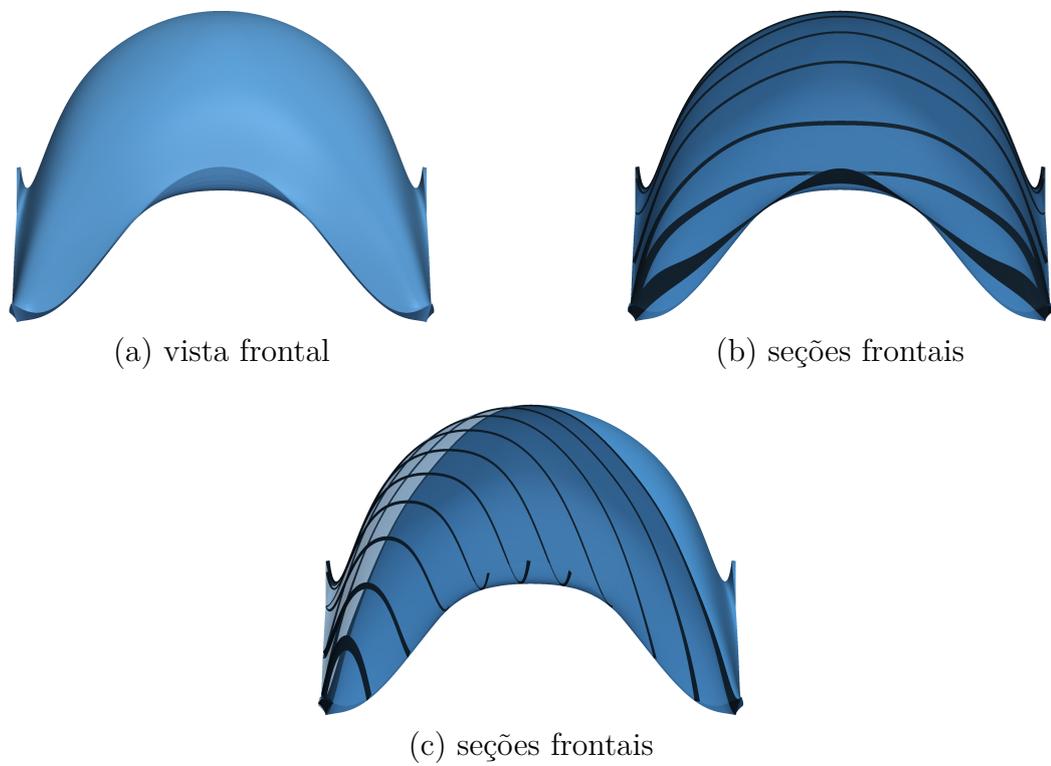


Figura 6.35: Seções frontais da casca ótima (problema 6.5 caso 6).

6.5.1 Compilação dos resultados dos exemplos de otimização de forma estrutural

Definir a espessura da casca como uma variável do problema de otimização, tornou o problema mais complexo, aumentando a não linearidade do problema de otimização. Isto ocorre pelas seguintes razões: variáveis de espécies muito diferentes, i.e., forma da casca e espessura da mesma (implicando em derivadas com ordem de grandeza muito diferentes); geometrias iniciais muito distantes das ótimas; diversas geometrias com desempenho “ótimo”; restrição com alta não linearidade e provavelmente a função objetivo é não convexa.

Na Tabela 6.2 são apresentados os números de avaliações da função objetivo necessárias e o número de iterações do processo de otimização em cada caso. Verifica-se a significativa diminuição do número de iterações e avaliações da função objetivo necessárias para a convergência quando o filtro é aplicado ao gradiente.

Tabela 6.2: Número de avaliações da função objetivo e de iterações

Caso	nº it	nº \mathcal{F}
1	144	883
2	115	238
3	238	1207
4	423	972
5	111	351
6	278	1353

A análise linear é totalmente justificada, visto que os deslocamentos nas geometrias ótimas são da ordem $\mathcal{O}(0.1mm) = \mathcal{O}(L/100000)$, implicando em um comportamento invariavelmente linear. Naturalmente nenhum comportamento não linear será relevante a menos que a carga seja significativamente aumentada. Visto que as características geométricas da casca levam a um comportamento mecânico dominado pelos efeitos de membrana, os efeitos geométricos não lineares apenas serão apreciados quando o carregamento estiver perto da carga de flambagem. Os efeitos de flexão, na otimização, são minimizados de tal maneira que o modo de flambagem principal é anti-simétrico, fazendo com que a casca flambe em um modo de torção, em torno do eixo normal à casca no ponto mais alto da mesma (ou seja, em torno da direção na qual é definido o carregamento).

Um fato interessante que apresentou-se em todas as geometrias ótimas é a aparição de enrijecedores nas extremidades livres das cascas. Bem como o aumento da espessura nos apoios, uma vez que nesta região tem-se concentração de tensões.

Se estas estruturas ótimas forem comparadas com as obtidas pelo mesmo processo de otimização utilizando uma formulação da teoria de cascas, observa-se grande semelhança. Entretanto, observa-se uma maior diferença na altura máxima final, sendo que para a teoria de cascas a altura é menor. Este fato também pode ser atribuído à espessura poder variar livremente, enquanto que na literatura em geral, utiliza-se alguma função para descrever uma variação monótona da espessura.

Justifica-se a utilização da análise isogeométrica, uma vez que nas cascas ótimas observa-se uma variação brusca na espessura, implicando em que a utilização de elementos finitos clássicos não conseguiriam representar adequadamente estas bruscas variações geométricas. Ainda, a utilização de elementos de alta ordem $p = 6$ e $p = 10$ com alta classe de continuidade C^5 e C^9 proporcionaram resultados de alta precisão.

Capítulo 7

Otimização de forma aerodinâmica

7.1 Introdução

As aplicações da otimização de forma aerodinâmica são incontáveis. Para sistemas governados por equações diferenciais parciais, a gama de aplicação se estende da mecânica estrutural ao electromagnetismo e mecânica dos fluidos e, mais recentemente, a combinação dos três fenômenos. Por exemplo, o projeto de um porto onde se minimizam as ondas de entrada pode ser feito a baixo custo através de métodos de otimização padrão uma vez que a simulação numérica da equação de Helmholtz é dominada ([Baron e Pironneau, 1993](#)); tecnologias microfluídicas, grandes máquinas de papel, etc, também podem ser otimizados desta forma ([Mohammadi e Pironneau, 2009](#); [Hamalainen et al., 1999](#)), a maior demanda ainda é para a otimização de aviões, já que mesmo que uma pequena diminuição do arrasto seja obtido, isto significa uma grande redução de custos ([Jameson, 2003a](#); [Alonso et al., 2002](#); [Reuther et al., 1996](#)); entretanto, a multidisciplinaridade cresce ([Mohammadi e Pironneau, 2004](#)).

A otimização de formas é um ramo da otimização diferenciável e mais precisamente de controle ótimo para sistemas distribuídos ([Lions, 1968](#)) e, como tal, os métodos de gradiente e de Newton são ferramentas numéricas naturais. A existência de soluções e a diferenciabilidade dos critérios, no que concerne à deformação de forma, ocupa a maior parte do estudo fenomenológico, desde 1980 ([Pironneau, 1984](#); [Delfour e Zolezio, 2001](#); [Sokolowski e Zolezio, 1991](#); [Haslinger e Makinen, 2003](#)). Tornou-se claro ([Tartar, 1974](#)) que as oscilações das formas poderiam conduzir a soluções não físicas do problema de

otimização, um fenômeno conhecido como a homogeneização, que conduzem a uma nova classe de problemas chamados otimização topológica (por exemplo, são melhores muitos tubos do que um único tubo para o transporte de fluidos?).

Algoritmos numéricos foram desenvolvido de várias formas e algumas perguntas foram respondidas como as seguintes

- Devem os algoritmos de otimização ser aplicados à problemas discretos ou contínuos? A resposta adequada é para problemas discretos se o método de gradientes conjugados é utilizado (a menos que adaptação de malhas seja utilizado ([Lemarchand et al., 2002](#))) e à qualquer um dos dois casos se o método de Newton é utilizado ([Marrocco e Pironneau, 1978](#); [Kim et al., 1999](#));
- Devem as equações diferenciais parciais ser tratadas como restrições ou devem ser adicionadas à função objetivo? Métodos de tiro único (*One-Shot Methods*) ([Arian e S., 1995](#)) defendem o último, entretanto este pode produzir instabilidade quando as equações de conservação são utilizadas de forma completa;
- Deve ser otimizado a posição de todos os pontos da malha, ou somente os do contorno, ou tenta-se reduzir a representação de superfícies por *splines* ou outros? Este último aspecto é ainda uma área de pesquisa, embora uma série de abordagens têm sido propostas: parametrização através de uma superfície de resposta, como o usado por experimentalistas ([Giunta, 1997](#)), bases hierárquicas ([Beux e Dervieux, 1993](#)) como multi-malhas (*multigrids*), projeto assistido por computador (CAD) parametrização-livre ([Mohammadi e Pironneau, 2009](#)), etc.

Aplicações aeronáuticas reis começaram na década de 1990 ([Jameson, 1988](#); [Elliott e Peraire, 1996](#)). Agora é possível otimizar um avião inteiro para um critério como o arrasto, sob restrições geométricas e aerodinâmicas, como volume e sustentação. O último pedido é para o projeto de silêncio (com relação a *Sonic Boom*) em aviões supersônicos ([Nadarajah et al., 2002](#); [Mohammadi, 2002](#)).

De qualquer maneira, a otimização de forma ainda é numericamente difícil, pelo custo computacional e porque, na prática se tem que fazer compromissos entre as formas que são boas com relação a mais de um critério. Uma abordagem é através do ótimo de Pareto,

já que existe um teorema matemático que diz que em situações simples de pontos ótimos de Pareto são minimizadores de uma combinação convexa de todos os critérios, sendo o recíproco também é verdadeiro. O problema é que tais combinações lineares podem levar a problemas de rigidez, com muitos sub-ótimos, exigindo ferramentas de otimização global como algoritmos genéticos.

Os algoritmos genéticos são simples, mas muito lentos e não podem ser usado presentemente com mais de alguns poucos parâmetros (Obayashi, 1997; Makinen et al., 1999); a solução mais adequada pode ser uma combinação ainda a ser encontrada entre gradientes e métodos evolutivos (Quagliarella e Vicini, 1997; Peri e Campana, 2003).

7.2 Definição do problema de otimização aerodinâmico

As declarações de um problema matemático abstrato de otimização não linear do tipo estudado no capítulo 2, têm de ser redefinidos em termos aerodinâmicos. As funções e variáveis típicas em otimização de forma aerodinâmicas são:

variáveis de otimização:

- coordenadas dos nós selecionados;
- espessura dos nós selecionados;
- outros parâmetros da seção transversal.

No presente trabalho são propostas as seguintes variáveis de otimização:

- pontos de controle em coordenadas homogêneas $\mathbf{P}_{i,j}^w$, i.e., pontos de controle e pesos;
- parâmetros que descrevem a variação espessura.

funções objetivo:

- arrasto total $\mathcal{F}_{C_D} = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} (\int_\Gamma \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma) \underline{\mathbf{e}}_1$; onde $\underline{\underline{\sigma}}$ é o tensor de tensões de Cauchy, $\underline{\mathbf{n}}$ é a normal externa ao contorno sólido e A a área de referência;

- sustentação total $\mathcal{F}_{C_L} = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} (\int_\Gamma \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma) \underline{\mathbf{e}}_2$; onde $\underline{\underline{\sigma}}$ é o tensor de tensões de Cauchy, $\underline{\mathbf{n}}$ é a normal externa ao contorno sólido e A a área de referência;
- coeficiente de pressão $\mathcal{F}_{C_p} = \frac{1}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 A} (\int_\Gamma (p - p_\infty) d\Gamma)$; onde p é a pressão sobre o contorno sólido;
- relação arrasto/sustentação $\mathcal{F}_{C_{D/L}} = \frac{C_D}{C_L}$;
- função de ajuste $\mathcal{F}_\lambda = \sum \frac{(\lambda - \lambda_{obj})^2}{\lambda_{obj}^2}$; onde λ_{obj} é o ajuste à uma determinada resposta (ex.: $\lambda = C_D$ ou $\lambda = C_L$).

restrições:

- volume $\mathcal{C}_w = 1 - \frac{w}{w_{all}} = 0$; onde $w_{all} = \int d\Omega$ é volume do corpo aerodinâmico.

Entre as aplicações à mecânica dos fluidos, [Mohammadi e Pironneau \(2004\)](#) utilizam como função objetivo a reflexão da onda monocromática incidente de um radar em escoamentos compressíveis sujeito à restrição do coeficiente de sustentação (*Lift coefficient* C_L), o coeficiente de arrasto (*Drag coefficient* C_D).

As aplicações na mecânica dos fluidos estendem-se

- Redução de peso e projeto aeroacústico de mecanismos de carros, aviões, e ainda instrumentos musicais ([Becache et al., 2001](#));
- Formas eletromagneticamente ótimas, tais como invisibilidade de objetos com restrições aerodinâmicas ([Makinen et al., 1999](#));
- Anulação de ondas em projetos de barcos ([Löhner, 2008](#); [Jameson e Martinelli, 1998](#));
- Redução do arrasto no ar e na água por mecanismos estáticos ou ativos ([Choi et al., 1992](#));
- Aumento da sustentação.

Na indústria, otimização de formas não é de uma vez por todas a ferramenta de solução, já que o projeto de engenharia é feito de compromissos devido aos aspectos multidisciplinares dos problemas e da necessidade de realizar uma concepção multiponto restrita (Mohammadi e Pironneau, 2004).

No que concerne à otimização estrutural, é utilizado o algoritmo SQP na busca do ponto de mínimo. A avaliação da função objetivo é calculada com análise por elementos finitos, enquanto as derivadas são avaliadas pela diferenciação automática no modo adjunto reverso.

7.3 Estudo da convergência das derivadas em esquemas explícitos

No que concerne à avaliação de derivadas em esquemas de integração explícitos, uma questão inquietante é se a razão de convergência das derivadas é semelhante à convergência da função integrada, i.e., as derivadas convergem mais lentamente que a função? ou convergem na mesma razão?

Visto que no processo de otimização cada iteração pode ser reinicializada do último campo convergido, o mesmo pode-se fazer para a avaliação das derivadas. Deste modo, para estudar a convergência das derivadas, toma-se como campo inicial os campos convergidos sobre o aerofólio NACA0012 a um número de Reynolds $Re = 100$, para um ângulo de ataque $\alpha = 0$.

A avaliação foi realizada para: AD - CFL: 0.05, 0.10 e 0.20 e FD - CFL 0.05. Na Figura 7.1 são apresentadas as variáveis de otimização, definidas pela rede de controle NURBS. As curvas NURBS são de grau $p = 3$ e foram utilizados 12 pontos de controle. Nas Figuras 7.2, 7.4, 7.5 e 7.3 são apresentadas as evoluções temporais das vinte variáveis de otimização em função do número iterações, respectivamente. Na Figura 7.6 é apresentado o gradiente da função C_D em relação à posição vertical avaliado por AD (CFL = 0.05, 0.10, 0.150) e FD (CFL = 0.05). Neste estudo a malha empregada possui $n_{el} = 7351$ elementos e $n_{cp} = 3753$ nós.

Este estudo fornece informações tais como, quantas iterações são necessárias para a

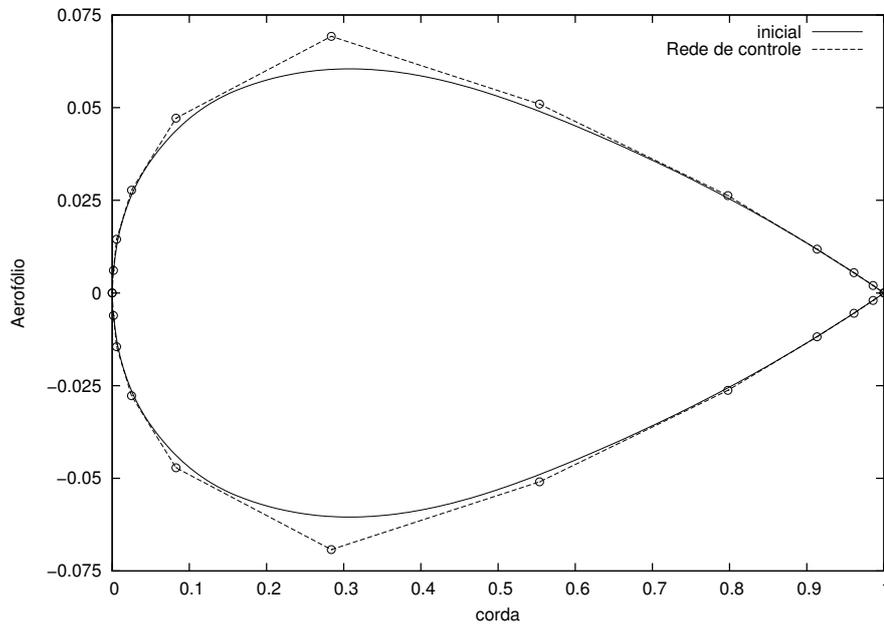


Figura 7.1: Variáveis de otimização - NACA0012.

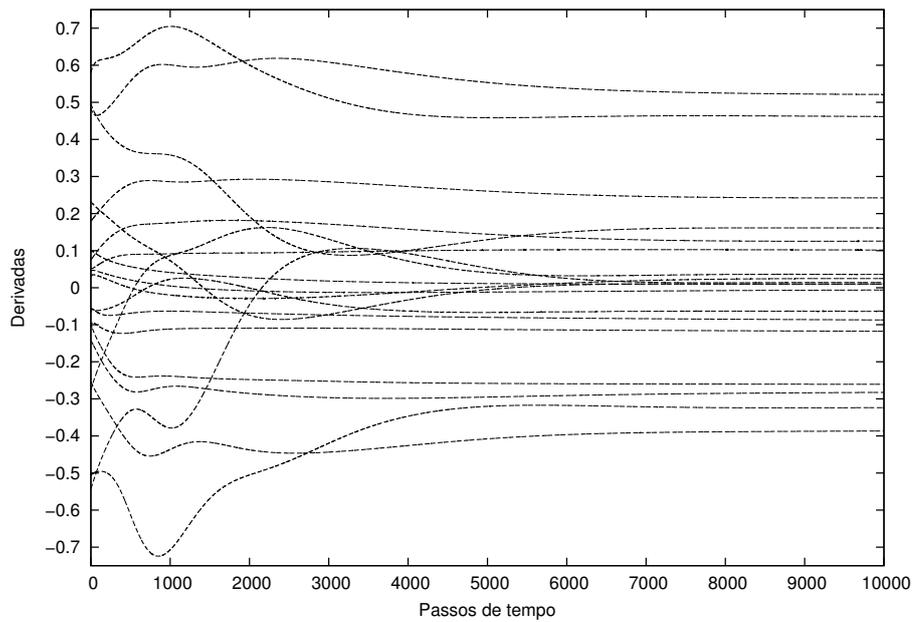


Figura 7.2: Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.05.

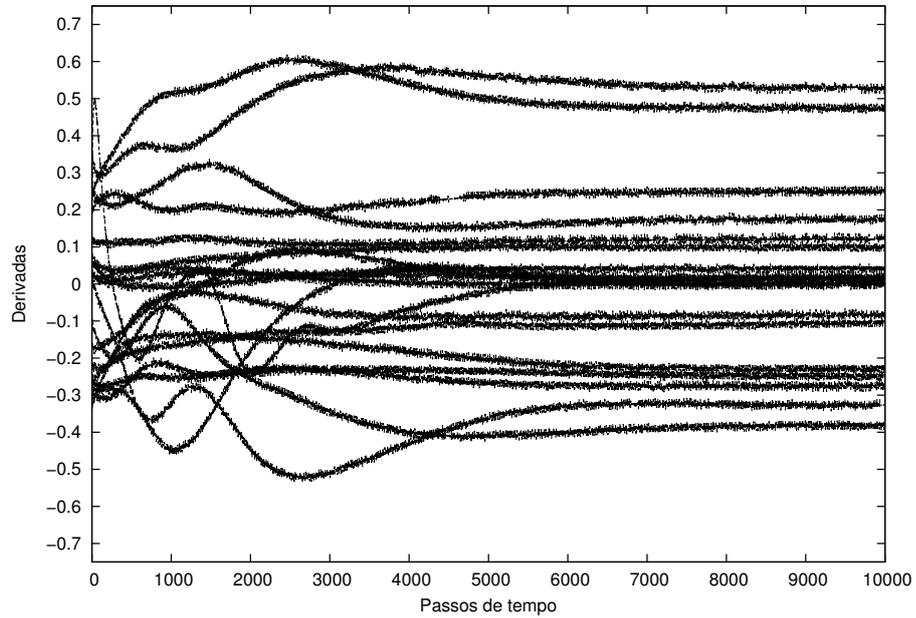


Figura 7.3: Convergência das derivadas - FD - CFL = 0.05.

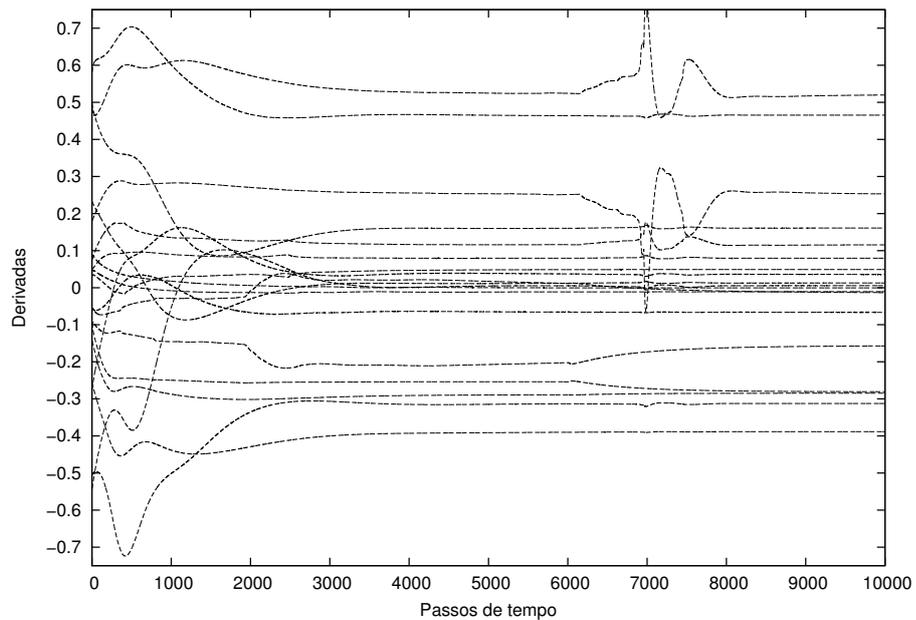


Figura 7.4: Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.10.

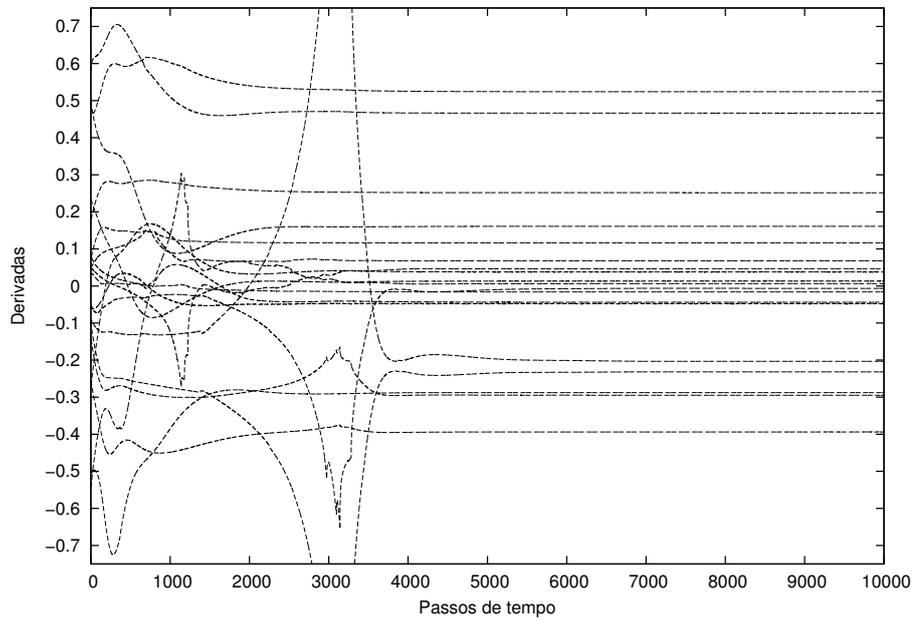


Figura 7.5: Convergência das derivadas - AD - CFL = 0.15.

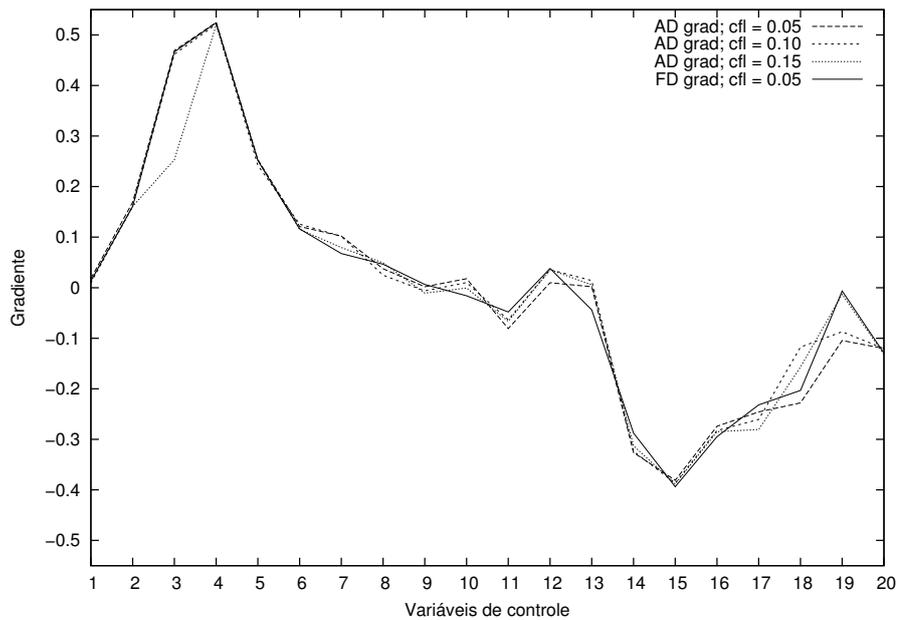


Figura 7.6: Gradiente - AD - FD - CFL = 0.05, 0.10, 0.15.

convergência das derivadas, quanto pode ser afetada a convergência das derivadas em função do CFL, e principalmente, qual a diferença entre a precisão das derivadas avaliadas por AD e FD. Entretanto, antes de responder estas questões, surge uma questão anterior. Se para avaliar as derivadas utiliza-se a solução do problema físico, não deveriam as derivadas ser obtidas apenas com uma iteração? A partir dos gráficos apresentados nas Figuras 7.2, 7.4 e 7.5 observa-se claramente que: mesmo tendo como ponto de partida a solução convergida do problema físico, as derivadas necessitam uma série de iterações a mais.

No que concerne ao valor do incremento de tempo, i.e., o CFL, observa-se que para $CFL = 0.05$ as derivadas convergem após 7500 iterações, enquanto que para os $CFL = 0.10, 0.15$ necessitam-se 9000 e 6000 iterações, respectivamente. Além do comportamento das derivadas não ser proporcional ao CFL, este também não é monótono, infelizmente.

Da Figura 7.3 é possível observar que as derivadas, avaliadas por diferenças finitas avante de primeira ordem, possui uma convergência totalmente deteriorada.

No que concerne à comparação entre diferentes métodos, AD e FD, é possível observar que as diferenças são mínimas, em geral, menores a 1%. Ainda, ao que sugere a Figura 7.6, a derivada é mais sensível ao CFL do que ao método que se utiliza para avaliar as derivadas. Este é outro fato infeliz, uma vez que se deseja obter uma derivada independente de parâmetros numéricos.

No que segue do trabalho, é adotado um $CFL = 0.15$ e as derivadas serão avaliadas por AD.

7.4 Aplicações numéricas

Nesta seção são apresentados problemas de otimização de forma aerodinâmica, para escoamentos viscosos transônicos e supersônicos sobre o aerofólio NACA0012 e para escoamento não viscoso supersônicos sobre uma esfera, em problemas bidimensionais e tridimensionais, respectivamente.

Os campos apresentados são os campos relativos às variáveis de conservação, ρ , $\rho \underline{v}$, ρE e

os campos de pressão, p e número de Mach, M .

7.5 NACA0012

A seguir são apresentados três exemplos de otimização aerodinâmica realizados sobre o aerofólio NACA0012 imersos em escoamentos viscosos à um número de Reynolds $Re = 100$, para um ângulo de ataque de $\alpha = 1.25$ graus, na Tabela 7.1.

Como função objetivo utilizou-se:

- $\mathcal{F} = C_D/C_L$

enquanto que as restrições utilizadas foram

- volume constante
- perfil máximo: 1.25 do aerofólio NACA0012;
- perfil mínimo: 0.75 do aerofólio NACA0012;
- corda constante;
- continuidade geométrica G^1 e paramétrica C^0 no bordo de ataque;
- continuidade geométrica G^0 e paramétrica C^0 no bordo de fuga;

Tabela 7.1: Compilação das características dos escoamentos analisados na otimização

Análise	Re	α	ρ_∞	$\ u_\infty\ _2$	p_∞	M_∞	T_∞	γ	CAF	CS
NACA0012-01	100	1.25	1.0	1.0	0.714280	0.8	300	1.4	0.15	0.1
NACA0012-02	100	1.25	1.0	1.0	0.714280	1.2	300	1.4	0.15	0.1
NACA0012-03	100	1.25	1.0	1.0	0.714280	2.0	300	1.4	0.15	0.1

Pretende-se com esta série de otimizações, observar a influência do número de Mach sobre o aerofólio ótimo.

Na Figura 7.7 são apresentadas as curvas limites, superior e inferior, que limitam o movimento do aerofólio no processo de otimização. Estes limites representam um

movimento vertical de 50%, i.e., as curvas internas representam as coordenadas verticais do aerofólio NACA0012 reduzidas em 25%, enquanto que as curvas externas representam as coordenadas do mesmo aumentadas em 25%.

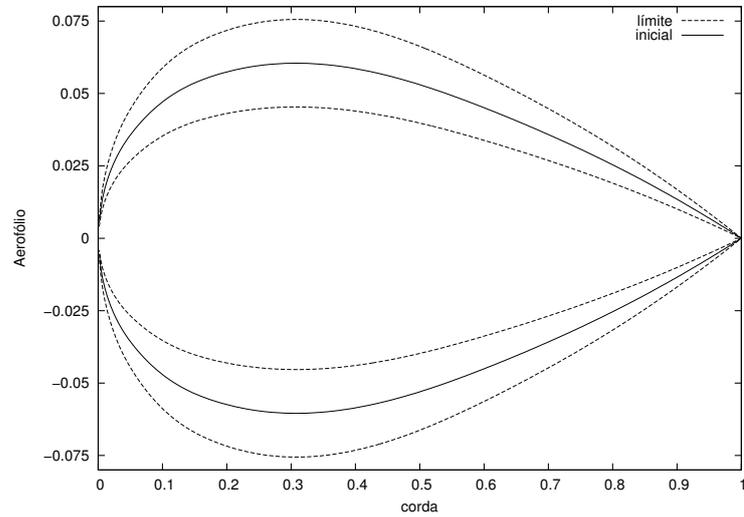
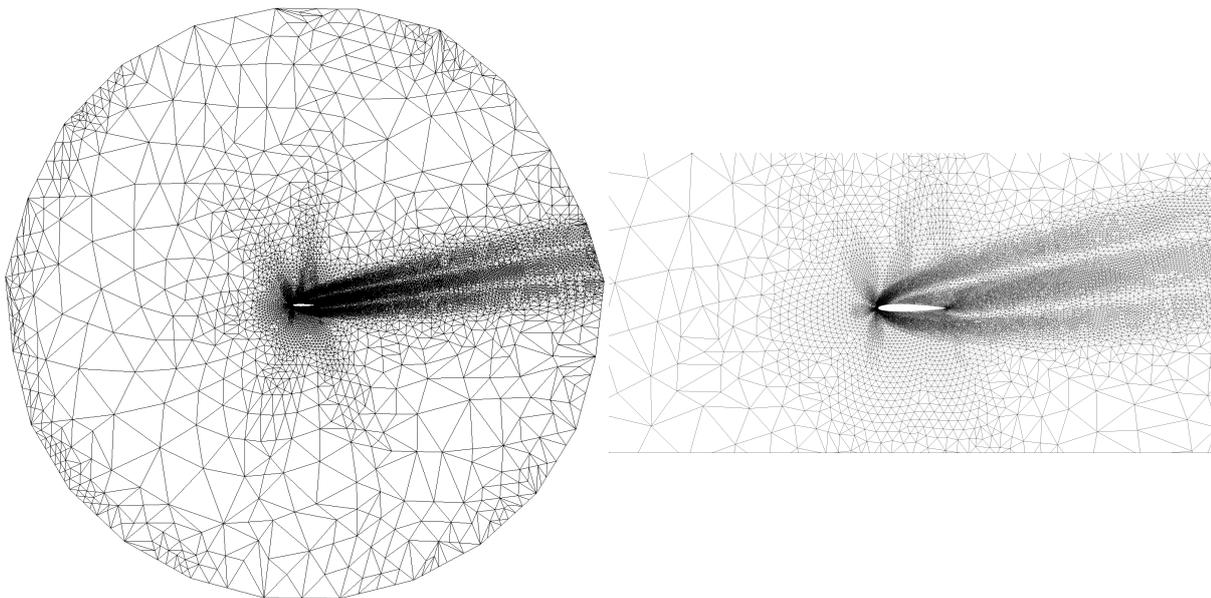


Figura 7.7: Limites superior e inferior das variáveis de otimização.

7.5.1 NACA0012-01 - $M = 0.8$

A malha final adaptada sobre a geometria ótima é apresentada na Figura 7.8, na qual o número de elementos é $n_{el} = 46381$ e o número de nós é $n_{cp} = 23357$. Nas Figuras 7.10 são apresentados os campos obtidos após o processo de otimização, enquanto que na Figura 7.9 são apresentados os coeficientes de pressão ao longo do aerofólio inicial e ótimo. Na Figura 7.11 é comparado o perfil inicial NACA0012 com o aerofólio ótimo.



(a) Malha adaptada

(b) Detalhe da malha adaptada

Figura 7.8: Malha final para o aerofólio ótimo - $M = 0.8$.

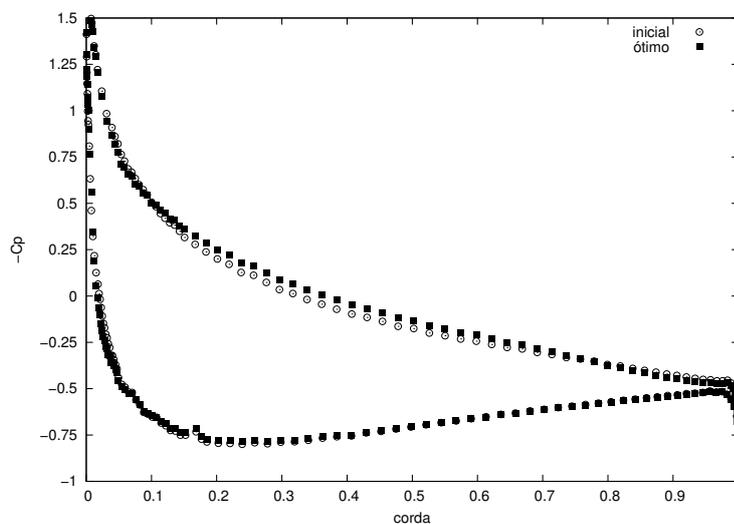


Figura 7.9: Coeficiente de pressão $-C_p$ - $M = 0.8$.

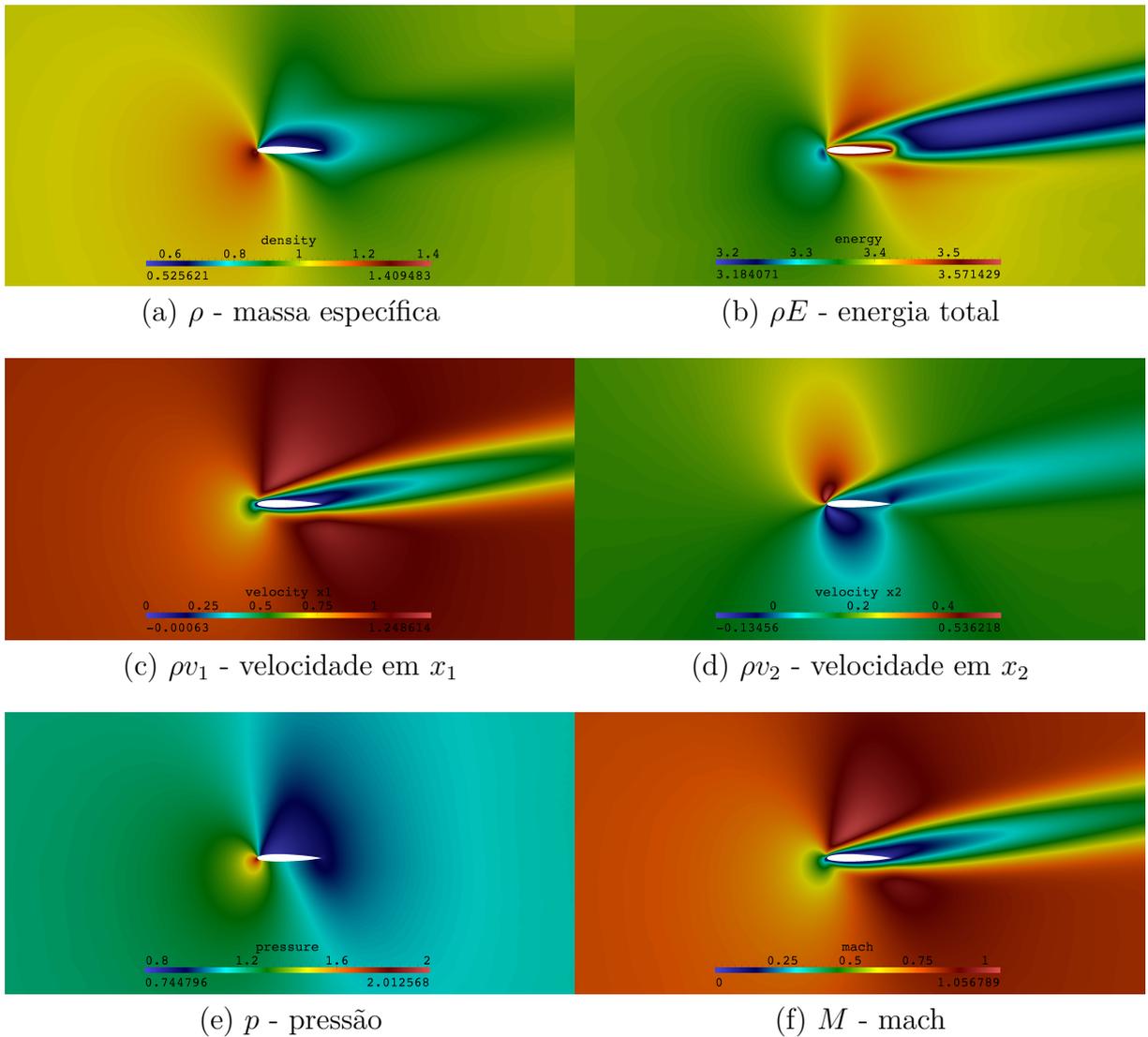


Figura 7.10: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 0.8$.

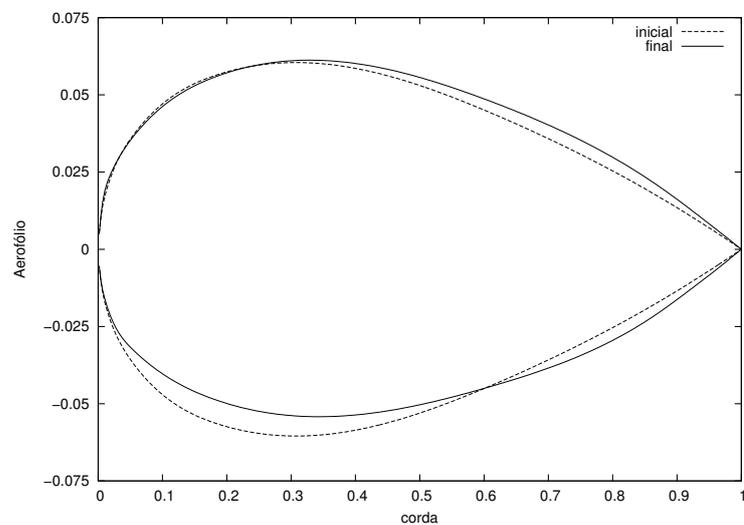


Figura 7.11: Geometria ótima e perfil de referência - $M = 0.8$.

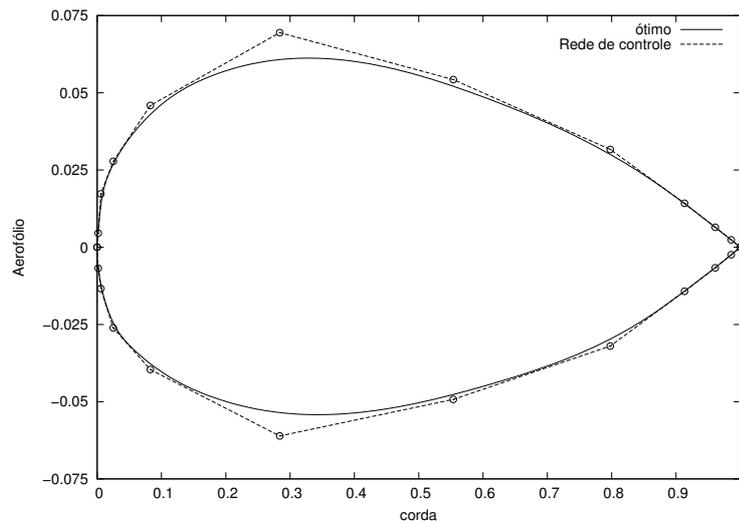
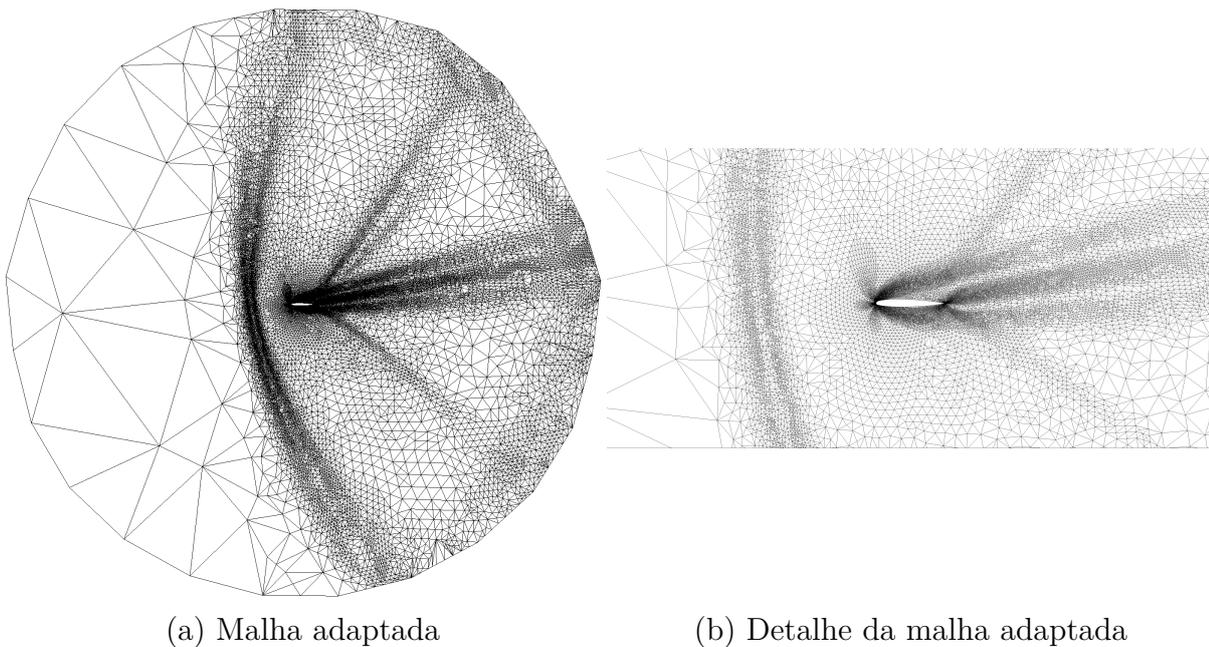


Figura 7.12: Geometria ótima e rede de controle - $M = 0.8$.

7.5.2 NACA0012-02 - $M = 1.2$

A malha final adaptada sobre a geometria ótima é apresentada na Figura 7.8, na qual o número de elementos é $n_{el} = 51324$ e o número de nós é $n_{cp} = 25826$. Nas Figuras 7.15 são apresentados os campos obtidos após o processo de otimização, enquanto que na Figura 7.14 são apresentados os coeficientes de pressão ao longo do aerofólio inicial e ótimo. Na Figura 7.16 é comparado o perfil inicial NACA0012 com o aerofólio ótimo.



(a) Malha adaptada

(b) Detalhe da malha adaptada

Figura 7.13: Malha final para o aerofólio ótimo - $M = 1.2$.

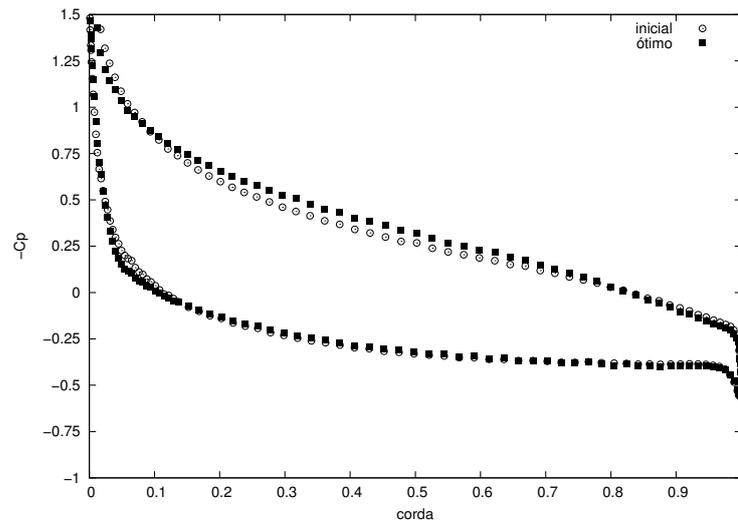
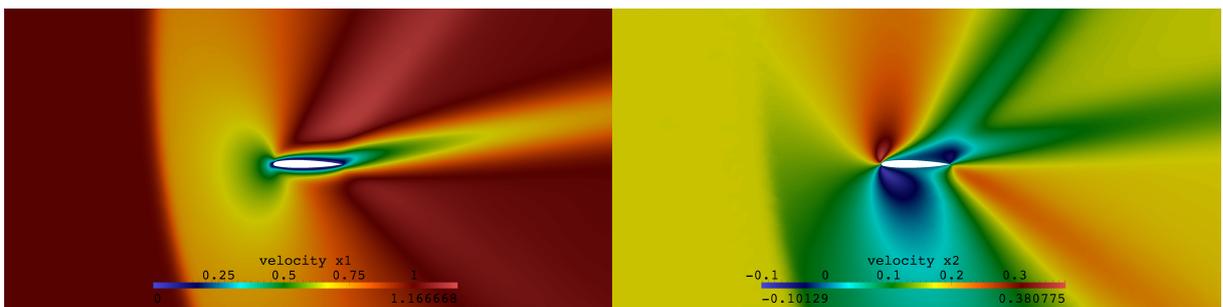


Figura 7.14: Coeficiente de pressão $-C_p$ - $M = 1.2$.



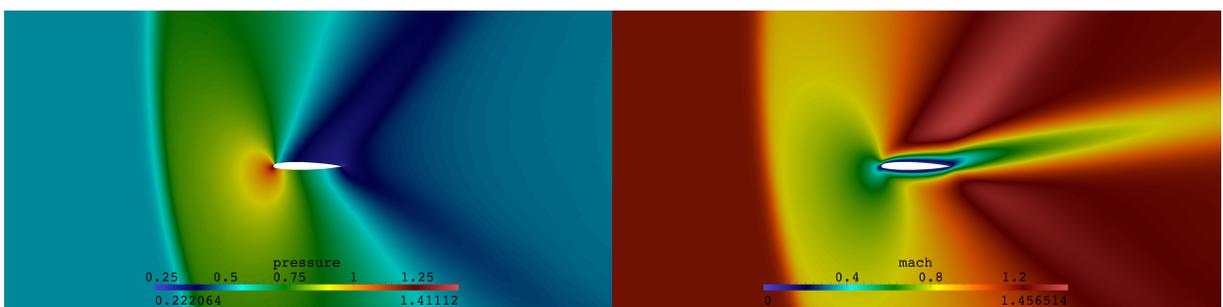
(a) ρ - massa específica

(b) ρE - energia total



(c) ρv_1 - velocidade em x_1

(d) ρv_2 - velocidade em x_2



(e) p - pressão

(f) M - mach

Figura 7.15: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 1.2$.

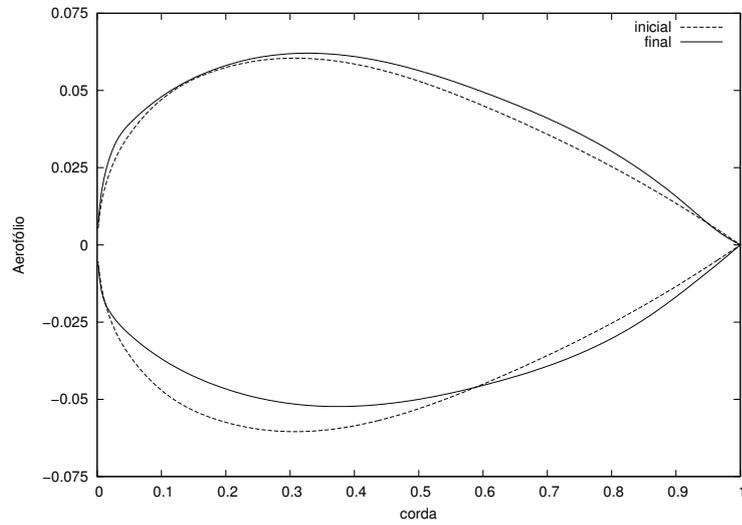


Figura 7.16: Geometria ótima e perfil de referência - $M = 1.2$.

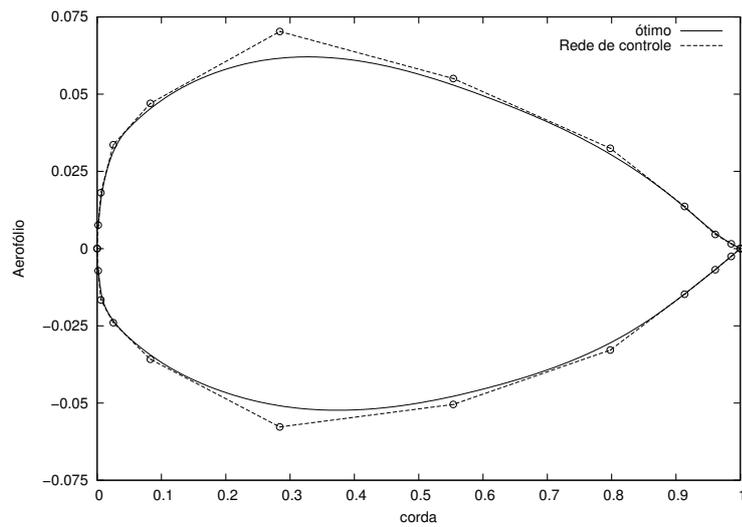


Figura 7.17: Geometria ótima e rede de controle - $M = 1.2$.

7.5.3 NACA0012-03 - $M = 2.0$

A malha final adaptada sobre a geometria ótima é apresentada na Figura 7.8, na qual o número de elementos é $n_{el} = 49031$ e o número de nós é $n_{cp} = 24647$. Nas Figuras 7.20 são apresentados os campos obtidos após o processo de otimização, enquanto que na Figura 7.19 são apresentados os coeficientes de pressão ao longo do aerofólio inicial e ótimo. Na Figura 7.21 é comparado o perfil inicial NACA0012 com o aerofólio ótimo.

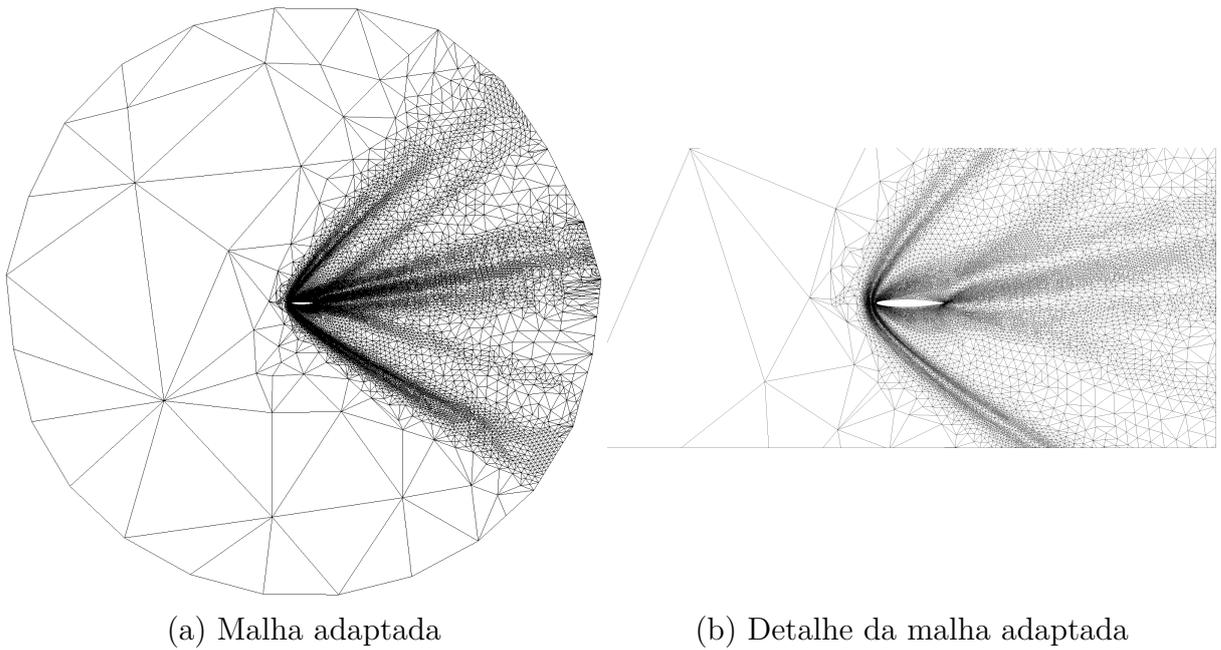


Figura 7.18: Malha final para o aerofólio ótimo - $M = 2.0$.

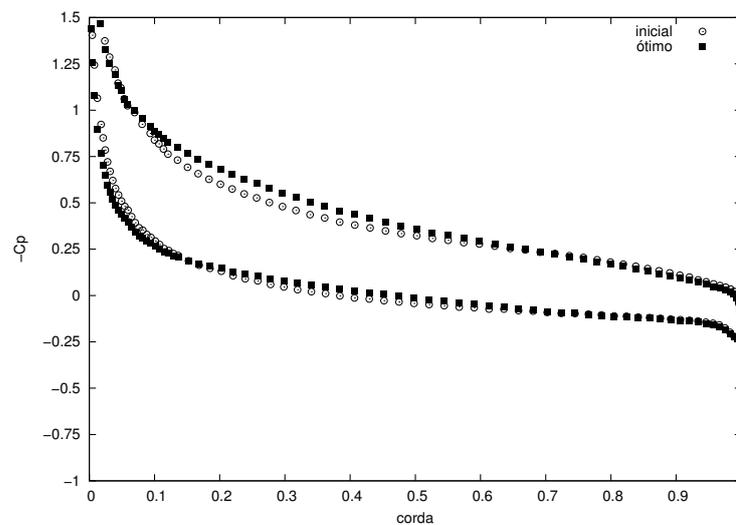


Figura 7.19: Coeficiente de pressão $-C_p$ - $M = 2.0$.

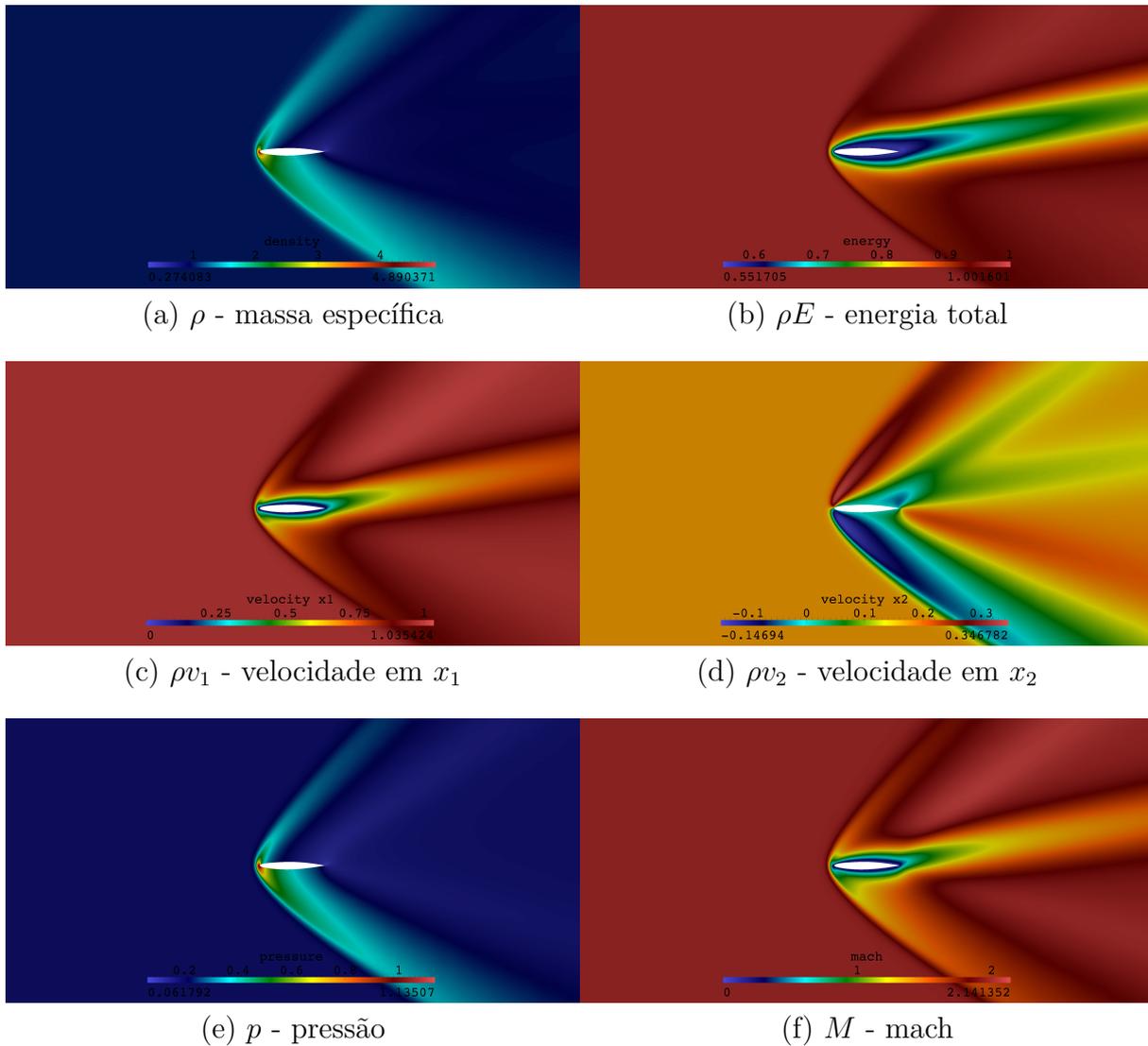


Figura 7.20: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 , p , M da geometria ótima - $M = 2.0$.

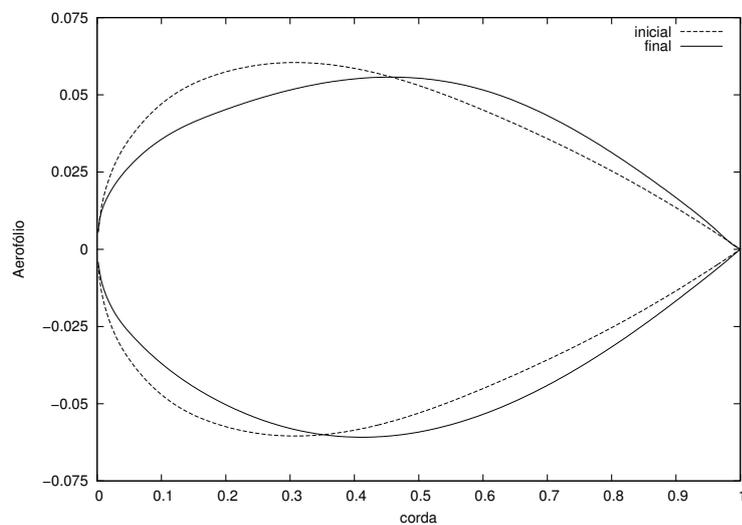


Figura 7.21: Geometria ótima e perfil de referência - $M = 2.0$.

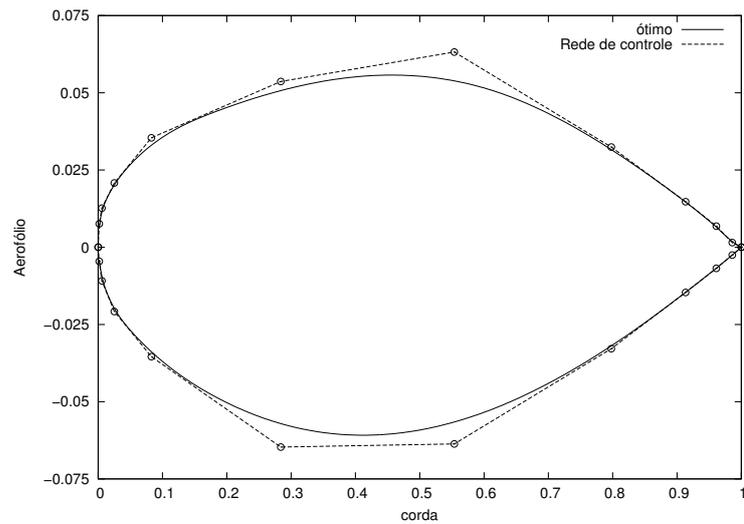


Figura 7.22: Geometria ótima e rede de controle - $M = 2.0$.

7.5.4 Resultados

Na Tabela 7.2 são apresentados os resultados em termos dos coeficientes aerodinâmicos na otimização.

Tabela 7.2: Compilação dos resultados

Análise	\mathcal{F}_{ini}	\mathcal{F}_{opt}	$(C_D)_{ini}$	$(C_D)_{opt}$	$(C_L)_{ini}$	$(C_L)_{opt}$
NACA0012-01	1.0	0.9493 (↓ 5.07%)	0.5767	0.5672 (↓ 1.64%)	0.5290	0.5480 (↑ 3.61%)
NACA0012-02	1.0	0.9367 (↓ 6.33%)	0.5925	0.5858 (↓ 1.14%)	0.5070	0.5350 (↑ 5.54%)
NACA0012-03	1.0	0.8949 (↓ 10.51%)	0.5037	0.4840 (↓ 3.92%)	0.3172	0.3405 (↑ 7.37%)

Embora a diminuição do coeficiente de arrasto C_D , nos três exemplos, não foi muito significativa, cabe lembrar que a geometria inicial adotada é aerodinâmica. O mesmo vale salientar para o aumento do coeficiente de sustentação C_L .

7.5.5 Esféra em escoamento não viscoso supersônico - 3D

A esfera é estudada no regime supersônico laminar não viscoso. Na tabela 7.3 são apresentados os parâmetros físicos e numéricos utilizados. Na expectativa de evitar

Tabela 7.3: Compilação das características do escoamento analisado

Análise	Re	α	ρ_∞	$\ u_\infty\ _2$	p_∞	M_∞	T_∞	γ	CAF	CS
Esféra-3D	–	0	1.0	1.0	1.785714	2.0	300	1.4	5.0	0.1

demasiado esforço computacional, apenas uma iteração do processo de otimização é levada a cabo.

No que concerne à otimização, utiliza-se como função objetivo o arrasto sujeito à restrição de volume constante. Ao todo foram utilizadas 6 variáveis, apresentadas em vermelho na Figura 7.23. Na Figura 7.24 são apresentadas as geometrias inicial e final, e suas respectivas redes de controle.

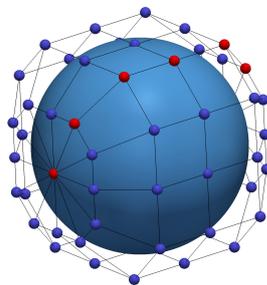


Figura 7.23: Variáveis do problema de otimização.

Nas Figuras 7.25a e 7.25b são apresentadas duas perspectivas do campo de pressão e isosuperfície da massa específica para o valor $\rho = 0.95$ para a geometria inicial e após uma iteração. Enquanto que na Figura 7.25c é apresentado o campo de pressão em conjunto com a isosuperfície do número de Mach para o valor $M = 1.0$ para a geometria inicial e após uma iteração. Na malha adaptada na geometria inicial o número de elementos é $n_{el} = 24471760$ e o número de nós é $n_{cp} = 4189250$, enquanto que após a primeira iteração tem-se que o número de elementos é $n_{el} = 25605849$ e o número de nós é $n_{cp} = 4387243$. Nas Figuras 7.26 e 7.27 são apresentados os campos do escoamento, a esquerda sobre a geometria inicial e a direita após uma iteração do processo de otimização.

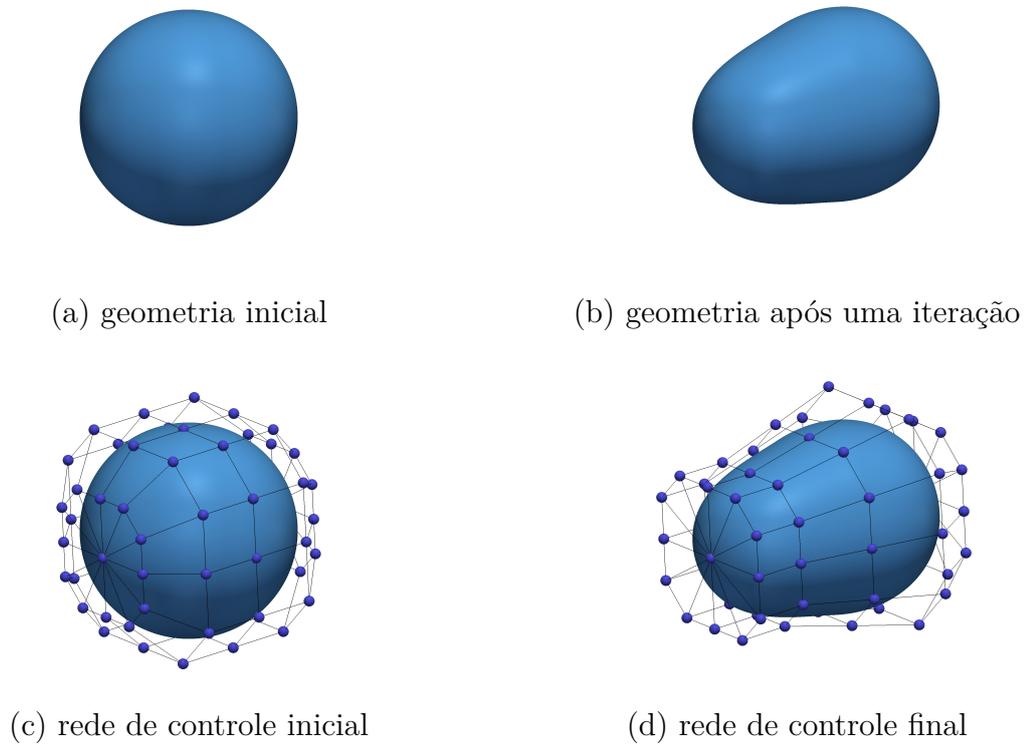


Figura 7.24: Geometrias e redes de controle inicial e final.

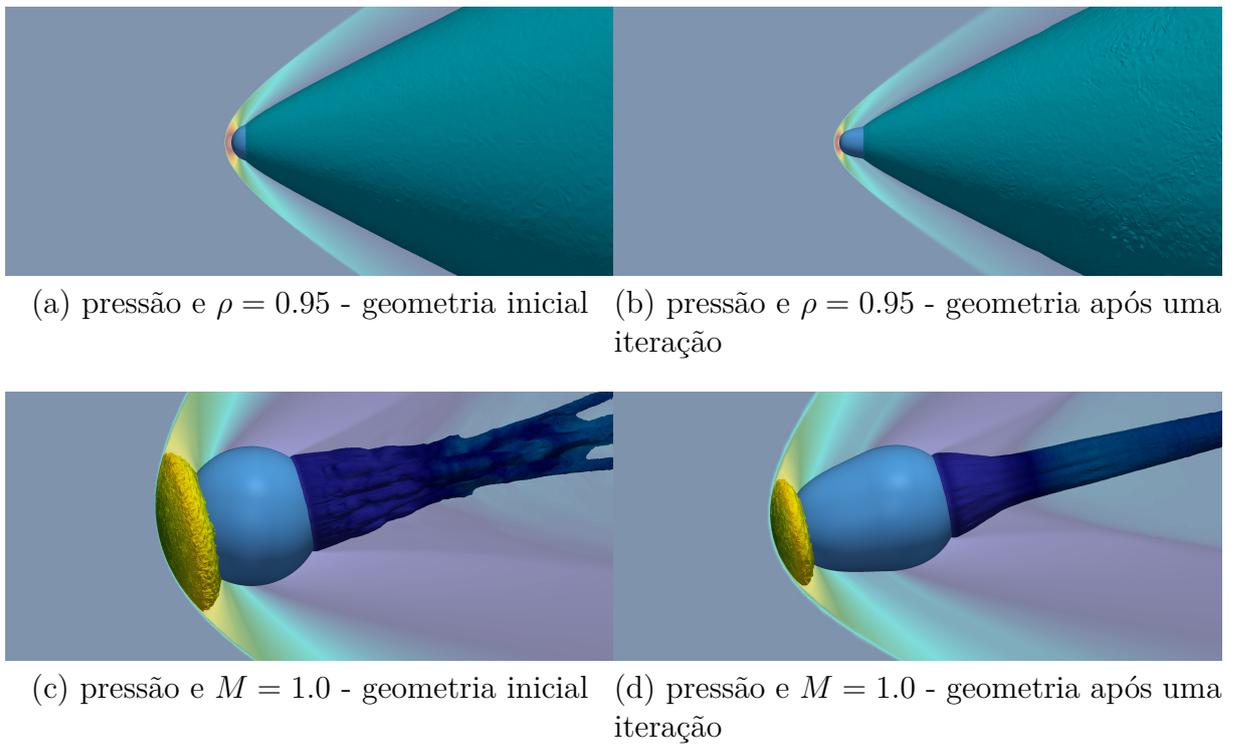
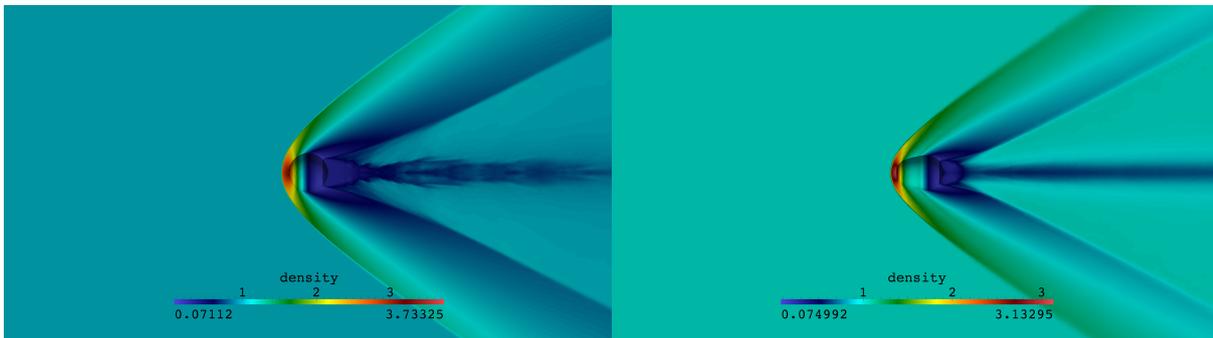
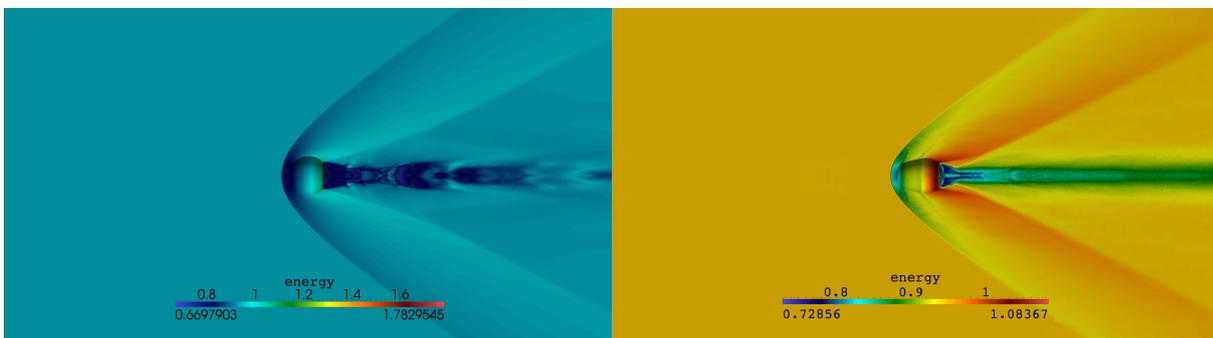
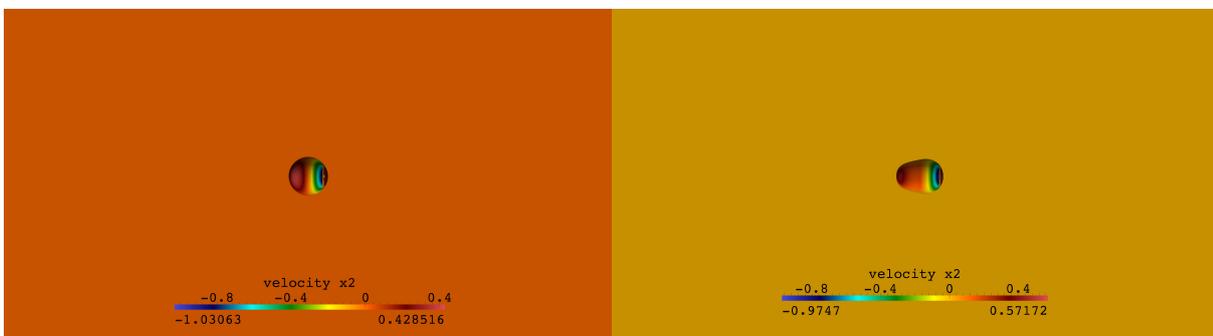
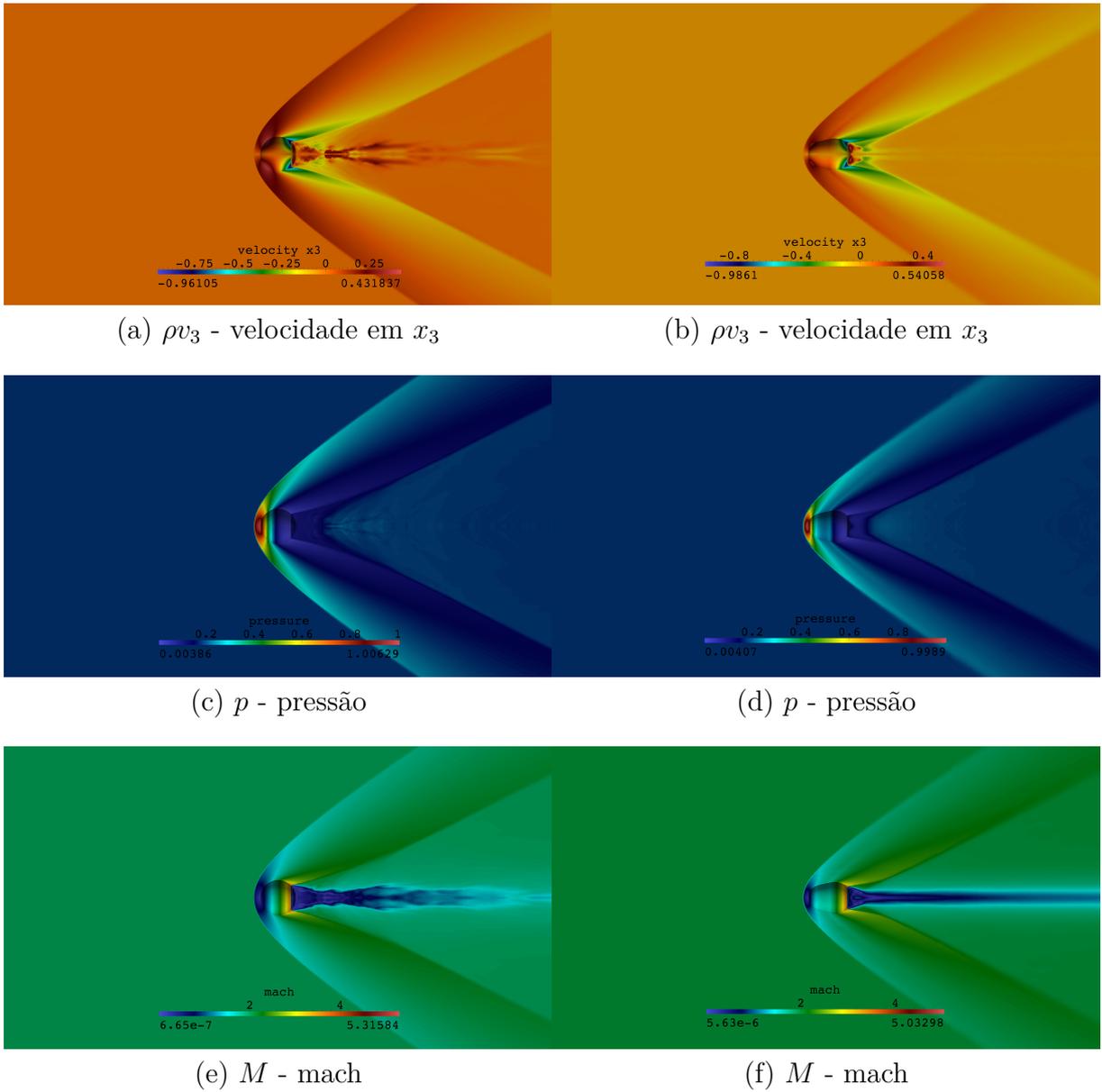
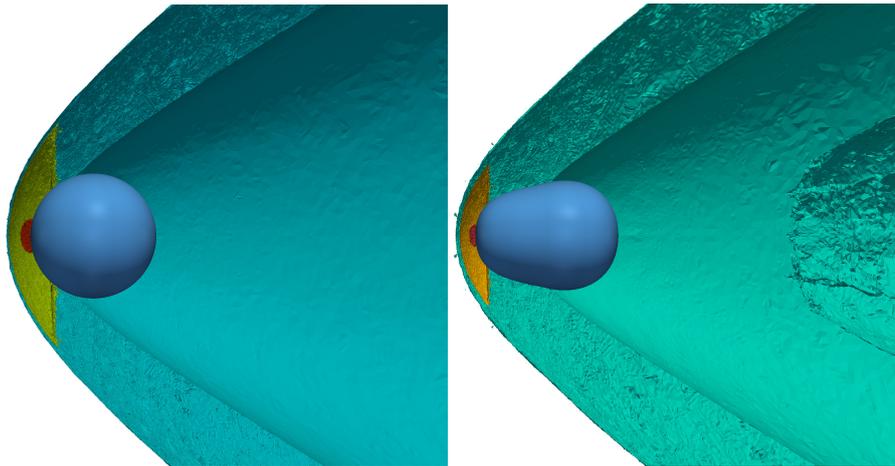


Figura 7.25: Campos de pressão e isosuperfícies de ρ e M .

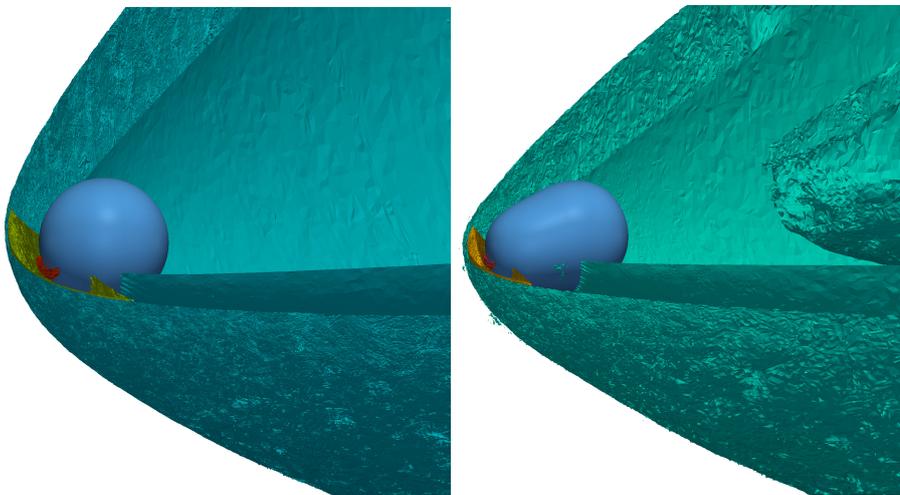
(a) ρ - massa específica(b) ρ - massa específica(c) ρE - energia total(d) ρE - energia total(e) ρv_1 - velocidade em x_1 (f) ρv_1 - velocidade em x_1 (g) ρv_2 - velocidade em x_2 (h) ρv_2 - velocidade em x_2 Figura 7.26: Campos ρ , ρE , ρv_1 , ρv_2 .

Figura 7.27: Campos ρv_3 , p , M .

Na Figura 7.28 são apresentadas isosuperfícies da massa específica, para valores $\rho = 1.01, 2.0, 3.0$ a esquerda para a geometria inicial e a direita para a geometria após uma iteração. No que concerne ao coeficiente de arrasto (para a geometria inicial) obteve-se um



(a) isosuperfícies - geometria inicial e final



(b) isosuperfícies - geometria inicial e final

Figura 7.28: Isosuperfícies $\rho = 1.01, 2.0, 3.0$.

valor igual à $C_D = 1.020$, enquanto que Spearman e Brawell (1993); Nazarov e Hoffman (2012) obtiveram os valores iguais à $C_D = 1.008, 1.035$, respectivamente. Já na geometria obtida após uma iteração do processo de otimização, obteve-se uma valor $C_D = 0.58$ para o coeficiente de arrasto, implicando em uma redução de 43.01% do arrasto.

7.5.6 Compilação dos resultados dos exemplos de otimização de forma aerodinâmica

No que concerne aos casos bidimensionais, vale lembrar que a geometria inicial é uma geometria aerodinâmica, logo todos os progressos realizados no processo de otimização foram poucos. Entretanto, do ponto de vista da engenharia, qualquer progresso é significativo, uma vez que um avião viaja longas distâncias. Deste modo, uma pequena diminuição do arrasto e um pequeno aumento da sustentação, podem representar uma grande economia de energia.

Na Tabela 7.4 são apresentados os números de avaliações da função objetivo necessárias e o número de iterações do processo de otimização em cada caso.

Tabela 7.4: Número de avaliações da função objetivo e de iterações

Caso	nº it	nº \mathcal{F}
1	17	85
2	15	83
3	11	25

O número de iterações necessária para atingir o ponto de ótimo é significativamente inferior quando comparado com os problemas de otimização na mecânica de sólidos. Isto ocorre basicamente por razões: a geometria é muito próxima à geometria ótima; as variáveis são da mesma espécie, apresentando derivadas da mesma ordem de grandeza.

Embora o número de iterações no processo de otimização seja relativamente baixo, cada análise aerodinâmica, necessita de um número excessivo de iterações até que a convergência seja alcançada. Esta limitação computacional faz com que seja indispensável algum mecanismo de aceleração da convergência, tal como técnicas de multi-malha.

No caso tridimensional, apenas uma iteração foi realizada por razões de alto esforço computacional. Entretanto, como a geometria inicial não é aerodinâmica, este caso foi o que apresentou o melhor progresso dentre os problemas de aerodinâmica apresentados.

Capítulo 8

Conclusões e Sugestões

8.1 Introdução

As conclusões apresentadas são divididas de acordo com o tema analisado. Deste modo, avaliaram-se diversas características da análise estrutural IsoGeométrica, geometricamente lineares, não lineares, estáticos e dinâmicos, assim como análise de escoamentos compressíveis subsônicos, transônicos e supersônicos, não viscosos e viscosos. Também são apresentadas as conclusões no que concerne à otimização de forma de cascas bem como a otimização de forma aerodinâmica. Concluindo o capítulo são apresentadas sugestões para trabalhos futuros.

8.2 Quanto à análise estrutural

Resultados para diversas configurações estruturais foram analisadas, tanto para problemas estáticos quanto para os dinâmicos, lineares e não lineares. Estes apresentaram-se suficientemente precisos quando comparados com as referências. Cabe salientar que uma cinemática co-rotacional baseada na exata decomposição polar é proposta. Quanto à análise estática, o modelo proposto lidou facilmente com problemas altamente não lineares, assumindo geometrias complexas, evitando o efeito de travamento por corte, permitindo análises para grandes deslocamentos e grandes rotações. Quanto à análise dinâmica, o modelo proposto apresenta-se estável, conservando as quantidades de momento linear e angular, bem como a energia total, permitindo analisar problemas

onde, usualmente, o método dos elementos finitos falha. Finalmente são apresentados os espectros de potência de Fourier e Ondas (Wavelets) para a correta avaliação do efeito da dissipação numérica introduzida pelo raio espectral. Os dois integradores temporais empregados são incondicionalmente estável (no caso linear), de segunda ordem de acurácia e dissipação controlada em altas frequências. Ainda, contra toda expectativa, para elementos de alta ordem, como os propostos nesta tese, mostra-se que o método, castigado na literatura, $G\alpha$ é mais fiel à física quando comparado com $GEMM+\xi$. Embora $GEMM+\xi$ apresenta resultados mais estáveis, o custo computacional é consideravelmente mais alto. Ainda, conclui-se que a conservação da energia total e dos momentos angular e linear não dependem da classe de continuidade adotada. Já a estabilidade numérica apresenta forte dependência da classe de continuidade.

8.3 Quanto à análise de escoamentos

O método CBS foi aplicado com sucesso para problemas subsônicos, transônicos e supersônicos em escoamentos compressíveis não viscosos e viscosos. A adaptação de malhas do tipo refinamento e desrefinamento- h apresenta-se como uma ferramenta extremamente adequada para lidar com ondas de choque. Os resultados obtidos apresentam campos coerentes quando comparados às referências. O método proposto possui diversas vantagens quando comparados à métodos clássicos como Taylor-Galerkin. O fato de se trabalhar sobre uma linha característica, as equações podem ser descritas por um operador auto-adjunto, fazendo com que a aplicação Bubnov-Galerkin se torna ótima. Ainda, a separação da equação de momento linear, aumenta a razão de convergência em problemas estacionários e aprimora a precisão da integração temporal em problemas transientes.

8.4 Quanto à otimização de formas estruturais

Obtiveram-se cascas com desempenho mecânico ótimo com respeito à energia interna de deformação dado pela distribuição de espessura e forma ótima das mesmas. Para lidar de forma conveniente com a possível falta de convexidade na função objetivo, empregou-se

uma convolução espacial, radial, assim definindo um filtro. Cabe salientar que no presente trabalho não investigou-se se a falta de convexidade é oriunda da função objetivo adotada e/ou dos erros numéricos. No que concerne à função objetivo, em todos os casos obteve-se uma redução extremamente significativa.

Neste trabalho, foi utilizado um critério de convergência de $\mathbf{O}(\times 10^{-8})$ sobre as condições de *KKT*, visto que se um critério menos rigoroso for adotado, a geometria “ótima” ainda resulta muito distante da “ótima” real. Ainda, por esta razão foram empregadas geometrias de grau 6 e 10 sobre a superfície, visando obter a melhor precisão possível.

8.5 Quanto à otimização de formas aerodinâmicas

Obtiveram-se perfis aerodinâmicos ótimos segundo a relação do arrasto/sustentação para diferentes números de Mach a baixo número de Reynolds em problemas bidimensionais. Visto que as derivadas e a função objetivo apresentam uma convergência precária, os tempos computacionais resultaram muito altos. Mesmo com uma convergência não satisfatória, a adaptação de malhas foi incorporada ao processo de otimização a fim de obter uma alta precisão na obtenção dos coeficientes aerodinâmicos. A adaptação é indispensável ao processo de otimização. No que concerne à otimização tridimensional, apenas uma iteração do processo de otimização foi levada a cabo, pelo alto custo computacional. Embora a limitação computacional apresentou-se como uma grande restrição, a forma final obteve uma significativa redução da função objetivo, visto que a geometria inicial não é aerodinâmica.

A adaptação de malhas incorporada ao processo de otimização possibilitou um caminho mais confiável, uma vez que para se obter uma otimização bem sucedida, o requerimento de se ter uma função objetivo precisa é indispensável. Entretanto, a falta de uma boa convergência, produz efeito contrário.

Um fato bastante inoportuno, apresentado na seção 7.3, acerca da convergência das derivadas da forma, é a forte dependência de parâmetros dos esquemas numéricos no valor ao qual converge a derivada. Isto implica em que um ponto de ótimo resulta condicionado à parâmetros numéricos utilizados nos esquemas numéricos. Se uma derivada apresenta

dependência em relação ao incremento de tempo em um problema estacionário, também haverá a dependência com outros parâmetros numéricos, tais como a difusão artificial.

8.6 Contribuições da tese

Nesta seção são apresentadas as contribuições que foram realizadas por meio desta tese.

- Uma descrição cinemática abrangente e de ótima acurácia, com uma abordagem co-rotational, que se baseia na decomposição polar exata para elementos sólidos de classe de continuidade e ordem qualquer;
- Cinemática co-rotacional no contexto da análise isogeométrica;
- Mostra-se que a integração temporal na elasto-dinâmica não linear possui uma forte dependência da classe de continuidade adotada na análise (mais do que o próprio integrador temporal), influenciando a estabilidade numérica, embora esta dependência não seja monótona. Ainda, na literatura, o método de integração temporal $G\alpha$ é apresentado como um método dissipativo e instável. Fato que apresentou-se falso quanto utilizado com elementos de classe maior que C^0 na análise IsoGeométrica. De fato, com o método $G\alpha$ obtiveram-se resultados mais fiéis à conservação da energia total do que com o método GEMM+ ξ ;
- O emprego da massa diagonalizada não deteriorou a integração temporal, como sugere a literatura em esquemas implícitos quando são utilizados elementos de classe C^0 ;
- Apresentam-se espectros de potência na elasto-dinâmica evidenciando que o raio espectral apenas afeta as altas frequências, não afetando o fenômeno físico, apenas estabilizando a integração temporal;
- Emprego da Diferenciação Automática AD na mecânica dos sólidos, no que concerne a otimização estrutural;
- Otimização de problemas de cascas modeladas como sólidos em conjunto da utilização da análise IsoGeométrica na otimização de forma de cascas;

- Análise da convergência de derivadas de forma de Fréchet em esquemas explícitos, evidenciando que não basta ter a solução convergida para obter a convergência das derivadas.

8.7 Sugestões à trabalhos futuros

Acerca da otimização estrutural, seria de grande interesse da industria aeroespacial, realizar otimização de formas de cascas de materiais compósitos. Para tal é necessário a utilização de um algoritmo de otimização misto, que lide com variáveis inteiras e reais; uma vez que o número de lâminas e a orientação discreta das fibras podem ser variáveis do tipo inteiro.

No que concerne à otimização aerodinâmica, seria muito interessante realizar estudos mais fundamentais, como: realizar o cálculo dos coeficientes aerodinâmicos, bem como suas derivadas de modo que os parâmetros numéricos tenha mínima influência sobre estes. Observar que os coeficientes aerodinâmicos não necessariamente são calculados como nesta tese, pode-se realizar um balanço de momento para a determinação destes. Otimização de funções objetivo da aeroacústica são pouco exploradas, a tentativa é válida. No que diz respeito à otimização, seria extremamente importante a incorporação de métodos multi malhas para tornar o processo viável computacionalmente.

No que concerne aos problemas transientes, definir uma abordagem de otimização continua sendo um tópico principal no meio científico.

Como ponto final, o acoplamento fluido-estrutura na otimização, continua sendo muito desafiador e sem precedentes.

Referências Bibliográficas

- Almeida, F. e Awruch, A. (2011). Corotational nonlinear dynamic analysis of laminated composite shells. *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 47pp. 1131–1145.
- Alonso, J., Kroo, I., e Jameson, A. (2002). Advanced algorithms for design and optimization of qsp. Em *AIAA Pap. 2002-0144. Reno, NV*.
- Anderson, W. K. e Venkatakrisnan, V. (1999). Aerodynamic design optimization on unstructures grids with a continuous adjoint formulation. *Computer and Fluids*, Vol. 28pp. 443–480.
- Andreoli, M., Janka, A., e Désidéri, J.-A. (2003). Free-form-deformation parameterization for multilevel 3d shape optimization in aerodynamics. Technical report n° 5019, Center for Aerospace Structures, University of Colorado, INRIA, FR.
- Arian, E. e S., T. (1995). Shape optimization in one-shot. Em *In Optimal Design and Control*, ed. J Boggaard, J Burkardt, M Gunzburger, J Peterson, pp. 273–294. Boston: Birkhauser.
- Armero, F. e Petocz, E. (1998). Formulation and analysis of conserving algorithms for frictionless dynamic contact-impact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 158pp. 269–300.
- Armero, F. e Romero, I. (2001a). On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. part i: low order methods for two model problems and nonlinear elastodynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190pp. 2603–2649.
- Armero, F. e Romero, I. (2001b). On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. part ii: high order methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190pp. 6783–6824.
- Aubert, P. e Rousselet, B. (1998). Sensitivity computation and shape optimization for a non-linear arch model with limit-points instabilities. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 42pp. 15–48.
- Balah, M. e Al-Ghamedy, H. N. (2005). Energy–momentum conserving algorithm for nonlinear dynamics of laminated shells based on a third-order shear deformation theory. *Journal Of Engineering Mechanics ASCE*, Vol. 131pp. 12–22.
-

- Baron, F. e Pironneau, O. (1993). Multidisciplinary optimal design of a wing prole, in structural optimization 93. Em *The World Congress on Optimal Design of Structural Systems*, ed. J Herskovits, Vol. 2, pp. 61–68, Rio de Janeiro, Brazil: UFRJ Press.
- Bathe, K. J. (1995). *Finite Element Procedures*. Prentice Hall, 2th edition.
- Bathe, K.-J. e Baig, M. M. I. (2005). On a composite implicit time integration procedure for nonlinear dynamics. *Computers and Structures*, Vol. 83pp. 2513–2524.
- Bazilevs, Y., Calo, V., Cottrell, J., Hughes, T., Reali, A., e Scovazzi, G. (2007). Variational multiscale residual-based turbulence modeling for large eddy simulation of incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 197pp. 173–201.
- Becache, E., Chaigne, A., Derveaux, G., e Joly, P. (2001). Numerical simulation of a guitar. Em *Numerical simulation of a guitar. Proc. Eur. Conf. Comput. Mech. Krakow, Poland. In press.*
- Belytschko, T. e Hsieh, B. (1973). Nonlinear transient finite element analysis with convected coordinates. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 7pp. 255–271.
- Belytschko, T. e Hsieh, B. (1983). *An overview of semidiscretization and time integration operators, Chapter 1, in: Computational Methods for Transient Analysis*, T. T. Belytschko and T.J.R. Hughes (eds.), North-Holland, Amsterdam, 1–66 edition.
- Belytschko, T., Liu, W., e Moran, B. (2000). *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Willey and Sons, West Sussex, England.
- Belytschko, T. e Schoeberle, D. (1975). On the unconditional stability of an implicit algorithm for nonlinear structural dynamics. *ASME Journal of Applied Mechanics*, Vol. 17pp. 865–869.
- Benson, D., Bazilevs, Y., Hsu, M., e Hughes, T. (2010). Isogeometric shell analysis: The reissner-mindlin shell. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 276–289.
- Bernstein, S. N. (1912). Démonstration du théorème de weierstrass fondée sùr le calcul dès probabilités. *Commun. Soc. Math*, Vol. 12, No. 2, pp. 1–2.
- Beux, F. e Dervieux, A. (1993). Aircraft multidisciplinary design optimization using design of experiments theory and response surface modeling. Technical report, Inria Rapports de Recherche 1868.
- Bletzinger, K.-U., Firl, M., Linhard, J., e Wüchner, R. (2008). Optimal shapes of mechanically motivated surfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199, No. 5-8, pp. 324 – 333.
- Bono, G. (2008). *Simulação numérica de escoamentos em diferentes regimes utilizando o método dos elementos finitos*. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

- Braun, A. e Awruch, A. (2008). Geometrically non-linear analysis in elastodynamics using the eight-node finite element with one-point quadrature and the generalized- α method. *Latin American Journal of Solids and Structures*, Vol. 5pp. 17–45.
- Brezillon, J. e Gauger, N. R. (2004). 2d and 3d aerodynamic shape optimisation using the adjoint approach. *Aerospace Science and Technology*, Vol. 8pp. 715–727.
- Bryson, A. E. e Ho, Y. C. (1975). *Applied Optimal Control*. Hemisphere, Washington, DC.
- Butterfield, K. R. (1976). The computation of all the derivatives of a b-spline basis. *Inst. Math. Applic.*, Vol. 17, No. 1, pp. 15–25.
- Bézier, P. (1972). *Numerical Control: Mathematics and applications*. John Wiley, New York.
- Bézier, P. E. (1966). Définition numérique des courbes et surfaces i. *Automatisme*, Vol. XIpp. 625–632.
- Bézier, P. E. (1967). Définition numérique des courbes et surfaces ii. *Automatisme*, Vol. XIIpp. 17–21.
- Camprubí, N., Bischoff, M., e Bletzinger, K.-U. (2004). Shape optimization of shells and locking. *Computer & Structures*, 82, No. 29-30, pp. 2551 – 2561.
- Cardoso, R., Yoon, J., Mahardika, M., Choudhry, S., Souza, R., e Valente, R. (2008). Enhanced assumed strain (eas) and assumed natural strain (ans) methods for one-point quadrature solid-shell elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 75pp. 156–187.
- Carpentieri, G., Koren, B., e van Tooren, M. J. L. (2007). Adjoint-based aerodynamic shape optimization on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 224pp. 267 — 287.
- Cho, S. e Ha, S.-H. (2009). Isogeometric shape design optimization: exact geometry and enhanced sensitivity. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 38, No. 1, pp. 53–70.
- Choi, H., Moin, P., e Kim, J. (1992). Turbulent drag reduction: studies of feedback control and flow over riblets. Ctr rep. tf-55, Stanford, CA.
- Chung, J. e Hulbert, G. (1993). A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: the generalized- α method. *Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME*, Vol. 60pp. 371–375.
- Cottrell, J., Hughes, T., e Bazilevs, Y. (2009). *Isogeometric Analysis: Towards Integration of CAD and FEA*. Wiley.
- Cox, M. (1972). The numerical evaluation of b-spline. *Inst. Math. Applic.*, Vol. 10, No. 1, pp. 134–149.
- Crisfield, M., Galvanetto, U., e Jelenic, G. (1997). Dynamics of 3-d co-rotational beams. *Computational Mechanics*, Vol. 20pp. 507–519.

- deBoor, C. (1972). On calculating with b-spline. *Approx. theory*, Vol. 6, No. 1, pp. 50–72.
- DeCasteljau, P. (1959). Outillages méthodes calcul. Technical report, A. Citroën, Paris, FR.
- Delfour, M. e Zolezio, J. (2001). Shapes and geometries: Analysis, differential calculus and optimization. Em *Advances in Design and Control 4*. SIAM, Philadelphia.
- Dwight, R. P. e Brezillon, J. (2006). Effect of various approximations of the discrete adjoint on gradient-based optimization. Em *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 9-12 Jan 2006, Reno NV*.
- Désidéri, J.-A. e Janka, A. (2004). Multilevel shape parameterization for aerodynamic optimization – application to drag and noise reduction of transonic/supersonic business jet. Em *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2004)*, E. Heikkola et al eds., Jyväskylä, 24-28 July 2004.
- Echter, R. e Bischoff, M. (2010). Numerical efficiency, locking and unlocking of nurbs finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 374–382.
- Elliott, J. e Peraire (1996). Aerodynamic design using unstructured meshes. Em *AIAA 96:1941*.
- Epstein, B., Jameson, A., Peigin, S., Roman, D., Harrison, N., e Vassberg, J. (2009). Comparative study of three-dimensional wing drag minimization by different optimization techniques. *Journal Of Aircraft*, Vol. 46, No. 2, pp. 526–541.
- Erlicher, S., Bonaventura, L., e Bursi, O. (2002). The analysis of the generalized- α method for non-linear dynamic problems. *Computational Mechanics*, Vol. 28pp. 83–104.
- Espath, L. (2009). Otimização de forma de cascas via deformação livre de forma baseado em nurbs. Master's thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- Espath, L., Linn, R., e Awruch, A. (2011). Shape optimization of shell structures based on nurbs description using automatic differentiation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 88pp. 613–636.
- Felippa, C. (2000a). A systematic approach to the element-independent corotational dynamics of finite elements. Technical report n^o cu-cas-00-03, Center for Aerospace Structures, University of Colorado, Colorado, USA.
- Felippa, C. (2000b). A systematic approach to the element-independent corotational dynamics of finite elements. Em *Proc. IASS-IACM 2000, Fourth International Colloquium on Computation of Shell and Spatial Structures, Chania-Crete, Greece, June 4–7*.
- Felippa, C. e Haugen, B. (2005a). Unified formulation of small-strain corotational finite elements: I. theory. Technical report n^o cu-cas-05-02, Center for Aerospace Structures, University of Colorado, Colorado, USA.

- Felippa, C. e Haugen, B. (2005b). A unified formulation of small-strain corotational finite elements: I. theory. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 194pp. 2285–2336.
- Firl, M. (2010). *Optimal Shape Design of Shell Structures*. PhD thesis, Lehrstuhl für Statik der Technischen Universität München.
- Galilei, G. (1638). Discorsi e dimonstrazioni matematiche intorno à due nuove scienze. *attenenti alla Mecanica & i Movimenti Locali*, 0pp. 112p.
- Giering, R. e Kaminski, T. (1996). Recipes for adjoint code construction. Technical report, Internal Report 212 from Max-Plank Institute für Meteorologie. Hamburg, Germany.
- Giles, M. B. e Pierce, N. A. (2000). An introduction to the adjoint approach to design. Em *Flow, Turbulence and Combustion* 65.
- Giunta, A. (1997). Aircraft multidisciplinary design optimization using design of experiments theory and response surface modeling. Technical report, M.A.D. center rep. 97-05-01. Virginia Tech.
- Gonzalez, G. (2000). Exact energy and momentum conserving algorithms for general models in nonlinear elasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190pp. 1763–1783.
- Goudreau, G. e Taylor, R. (1973). Evaluation of numerical methods in elastodynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 2pp. 69–97.
- Griewank, A. e Walther, A. (2008). *Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation*. Philadelphia, SIAM, 2nd edition.
- Hamalainen, J., Malkamaki, T., e Toivanen, J. (1999). Genetic algorithms in shape optimization of a paper machine headbox. Em *Evolutionary Algorithms in Engineering and Computer Science*, ed. K Miettinen, M Makela, P Neittaanmaki, J Periaux, pp. 435–43. Wiley.
- Haslinger, J. e Makinen, R. (2003). *Introduction to Shape Optimization*. SIAM Series on Advances in Design Control, Vol. 7.
- Hauptmann, R. e Schweizerhof, K. (1998). A systematic development of ‘solid-shell’ element formulations for linear and non-linear analyses employing only displacement degrees of freedom. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, Vol. 42pp. 49–69.
- Hazra, S. B. (2004). An efficient method for aerodynamic shape optimization. Em *10th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference, 30 August - 1 September 2004, Albany, New York, 2004-4628*.
- Herskovits, J., Dias, G., Santos, G., e Soares, C. M. (2000). Shape structural optimization with an interior point nonlinear programming algorithm. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 20pp. 107–115.
- Hicks, R. M. e Henne, P. A. (1978). Wing design by numerical optimization. *Journal of Aircraft*, Vol. 15, No. 7, pp. 407–412.

- Hicks, R. M., Murman, E. M., e Vanderplaats, G. N. (1974). An assessment of airfoil design by numerical optimization. TM X-3092, NASA Ames Research Center, Moffett Field, California, USA.
- Hilber, H., Hughes, T., e Taylor, R. (1977). Improved numerical dissipation for the time integration algorithms in structural dynamics. *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, Vol. 5pp. 283–292.
- Hiriart-Urruty, J. B. e Lemaréchal, C. (1993). *Convex Analysis and Minimization Algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, New York, 6th edition.
- Hirsch, C. (1988). *Numerical Computation of Internal and External Flows. Volume 1, Fundamentals of Numerical Discretization*. Wiley, 1st edition.
- Hu, Y. e Nagy, L. (1997). A one-point quadrature eight-node brick element with hourglass control. *Computers and Structures*, Vol. 65pp. 893–902.
- Hughes, T., Caughey, T., e Liu, W. (1978). Finite element methods for nonlinear elastodynamics which conserve energy. *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 45pp. 366–370.
- Hughes, T., Cottrell, J., e Bazilevs, Y. (2005). Isogeometric analysis: Cad, finite elements, nurbs, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 194pp. 4135–4195.
- Hughes, T., Reali, A., e Sangalli, G. (2010). Efficient quadrature for nurbs-based isogeometric analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 301–313.
- Hughes, T. e Winget, J. (1980). Finite rotations effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large deformation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 15pp. 1862–1867.
- INRIA (2002). *Tapenade AD*. <http://tapenade.inria.fr:8080/tapenade/index.jsp>.
- Iollo, A., Ferlauto, M., , e Zannetti, L. (2001). An aerodynamic optimization method based on the inverse problem adjoint equations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 173pp. 87–115.
- Jameson, A. (1988). Aerodynamics design via control theory. *Journal of Scientific Computing*, Vol. 3pp. 233–260.
- Jameson, A. (2003a). Aerodynamic design and optimization. Em *16th AIAA Comput. Fluid Dynamics Conf., AIAA Pap. A-2003-3438, Orlando, FL, June 23–26*.
- Jameson, A. (2003b). *Aerodynamic Shape Optimization Using the Adjoint Method*. VKI Lecture Series on Aerodynamic Drag Prediction and Reduction, von Karman Institute of Fluid Dynamics, Rhode St Genese.
- Jameson, A. e Martinelli, L. (1998). Optimum aerodynamic design using the navier–stokes equations. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, Vol. 10pp. 213 – 237.

- Jameson, A., Reuther, J., e Martinelli, L. (1994). Computational algorithms for aerodynamic analysis and design. Technical report, Annual rept. 1 Oct 93-30 Sep 94.
- Jansen, K., Whiting, C., e Hulbert, G. (1999). A generalized- α method for integrating the filtered navier-stokes equations with a stabilized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190pp. 305–319.
- Kegl, M. e Brank, B. (2006). Shape optimization of truss-stiffened shell structures with variable thickness. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195, No. 19-22, pp. 2611 – 1634.
- Khosravi, P., Ganesan, R., e Sedaghati, R. (2008). Optimization of thin-walled structures with geometric nonlinearity for maximum critical buckling load using optimality criteria. *Thin-Walled Structures*, 46pp. 1319 – 1328.
- Kiendl, D., Bazilevs, Y., Hsu, M., Wüchner, R., e Bletzinger, K. (2010). The bending strip method for isogeometric analysis of kirchhoff-love shell structures comprised of multiple patches. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 2403–2416.
- Kim, S., Alonso, J., e Jameson, A. (1999). A gradient accuracy study for the adjoint-based navier-stokes design method. Em *37th AIAA Aerospace Sciences Mtg. & Exhibit, AIAA Pap. 99-0299, Reno, NV, January*.
- Kuhl, D. e Crisfield, M. (1999). Energy-conserving and decaying algorithms in non-linear structural dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 45pp. 569–599.
- Kuhl, D. e Ramm, E. (1996). Constraint energy momentum algorithm and its application to nonlinear dynamics of shells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 136pp. 293–315.
- Kuhl, D. e Ramm, E. (1999). Generalized energy-momentum method for non-linear adaptive shell dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 178pp. 343–366.
- Lamousin, H. e Waggenspack, W. (1994). Nurbs-based free-form deformation. *IEEE Computer Graphics and Applications*, Vol. 14, No. 6, pp. 1–9.
- Laursen, T. e Meng, X. (2001). A new solution procedure for application of energy-conserving algorithms to general constitutive models in nonlinear elastodynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190pp. 6309–6322.
- Lemarchand, G., Pironneau, O., e Polak, E. (2002). A mesh refinement method for optimization with ddm. Em *In Domain Decomposition Methods in Science and Engineering. pp421-428 N. Debit, M. Garbey et al ed. CIMNE handbooks, Barcelona (2002)*.
- Leung, T. M. e Zingg, D. W. (2009). Single- and multi-point aerodynamic shape optimization using a parallel newton-krylov approach. Em *19th AIAA Computational Fluid Dynamics 22 - 25 June 2009, San Antonio, Texas*.

- Lindgaard, E. e Lund, E. (2010). Nonlinear buckling optimization of composite structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 2319–2330.
- Linn, R., Espath, L., e Awruch, A. (2013). Optimal shape of axisymmetric solids using nurbs and automatic differentiation. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. –pp. –.
- Linn, R. V. (2013). Simulação de escoamentos compressíveis utilizando adaptação de malhas anisotrópica. Master's thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- Lions, J. (1968). *Contrôle Optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*. Dunod-Gauthier Villars.
- Lions, J.-L. (1971). *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York. Translated by S.K. Mitter.
- Liu, W., Guo, Y., Tang, S., e Belytschko, T. (1998). A multiple-quadrature eight-node hexahedral finite element for large deformation elastoplastic analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 154pp. 69–132.
- Lund, E., Møller, H., e Jakobsen, L. A. (2001). Shape design optimization of steady fluid–structure interaction problems with large displacements. Em *American Institute of Aeronautics and Astronautics Paper, AIAA 2001–1624*.
- Löhner, R. (2008). *Applied CFD Techniques. An Introduction Based on Finite Element Methods*. Wiley, 2nd edition.
- Löhner, R., Soto, O., e Yang, C. (2003a). An adjoint-based design methodology for cfd optimization problems. Em *40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 14-17 January 2002, Reno, NV*.
- Löhner, R., Soto, O., e Yang, C. (2003b). A mixed adjoint formulation for incompressible turbulent problems. Em *40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 14-17 January 2002, Reno, NV*.
- Löhner, R., Soto, O., e Yang, C. (2004). An adjoint-based design methodology for cfd problems. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Vol. 6pp. 734–759.
- Makinen, R., Periaux, J., e Toivanen, J. (1999). Multidisciplinary shape optimization in aerodynamics and electromagnetics using genetic algorithms. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 30pp. 149–159.
- Malvern, L. (1969). *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Prentice Hall.
- Manzoni, A., Quarteroni, A., e Rozza, G. (2011). Shape optimization for viscous flows by reduced basis methods and free-form deformation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. –pp. –.
- Marrocco, A. e Pironneau, O. (1978). Optimum design of a magnet with lagrangian finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 15, No. 3, pp. 512–545.

- Duarte Filho, L. e Awruch, A. (2004). Geometrically nonlinear static and dynamic analysis of shells and plates using the eight-node hexahedral element with one-point quadrature. *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 40pp. 1297–1315.
- Parente Jr., E. e Vaz, L. (2003). On evaluation of shape sensitivities of non-linear critical loads. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 56, No. 6, pp. 809–846.
- Mohammadi, B. (2002). Optimization of aerodynamic and acoustic performances of supersonic civil transports. Technical report, Proc. CTR Summer Program 2002, Stanford, CA. In press.
- Mohammadi, B. e Pironneau, O. (2004). Shape optimization in fluid mechanics. *Annual Review Fluid Mechanics*, Vol. 36pp. 11.1–11.25.
- Mohammadi, B. e Pironneau, O. (2009). *Applied Shape Optimization for Fluids*. Oxford Science Publications, 2nd edition.
- Nadarajah, S., Jameson, A., e Alonso, J. (2002). Sonic boom reduction using an adjoint method for wing-body configurations in supersonic flow. Em *AIAA-2002-5547, 9th AIAA/ISSMO Symp. Multidisciplinary Analysis and Optimization Conf., Atlanta, GA. September 4–6*.
- Nadarajah, S. K. e Jameson, A. (2000). A comparison of the continuous and discrete adjoint approach to automatic aerodynamic optimization. *AIAA - American Institute of Aeronautics and Astronautics*, Vol. 0667pp. 1–20.
- Nagy, A. P., Abdalla, M. M., e Gürdal, Z. (2010). Isogeometric sizing and shapeoptimisation of beam structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 1216–1230.
- Nazarov, M. e Hoffman, J. (2012). An adaptative finite element method for inviscid compressible flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 64, No. 10, pp. 1102–1128.
- Newmark, N. (1959). A method of computation for structural dynamics. *Journal of Engineering Mechanics ASCE*, Vol. 85-EM3pp. 67–94.
- Nguyen, Manh, D., Anton, E., Roulund, G. A., e Jens, G. (2012). Isogeometric shape optimization of vibrating membranes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 200pp. 1343–1353.
- Nithiarasu, P., Codina, R., e Zienkiewicz, O. (2006). The characteristic-based split (cbs) scheme - a unified approach to fluid dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 66, No. 10, pp. 1514–1546.
- Nithiarasu, P., Zienkiewicz, O. C., e Sai, B. V. K. S. (1998). Shock capturing viscosities for the general fluid mechanics algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 28, No. 9, pp. 1325–1353.
- Nocedal, J. e Wright, S. J. (1999). *Numerical Optimization*. Springer, 2nd edition.

- Noels, L., Stainier, L., e Ponthot, J. (2004). An energy-momentum conserving algorithm for non-linear hypoelastic constitutive models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 59pp. 83–114.
- Obayashi, S. (1997). Aerodynamic optimization with evolutionary algorithms. Em *Inverse Design and Optimization Methods, Lecture Series 1997-05*. R. A. Van den Braembussche and M. Manna, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Brussels, Belgium.
- Ortiz, M. (1986). A note on energy conservation and stability of nonlinear time-stepping algorithms. *Computer and Structures*, Vol. 24pp. 167–168.
- Patterson, R. R. (1985). Projective transformations of the parameter of a bernstein-bézier curve. *ACM TOG*, Vol. 4, No. 4, pp. 276–290.
- Peigin, S. e Epstein, B. (2008). Multiconstrained aerodynamic design of business jet by cfd driven optimization tool. *Aerospace Science and Technology*, 12pp. 125—134.
- Peri, D. e Campana, E. (2003). High fidelity models in the multi-disciplinary optimization of a frigate ship. Em *Second M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*. Cambridge, MA, June.
- Peter, J. E. e Dwight, R. P. (2010). Numerical sensitivity analysis for aerodynamic optimization: A survey of approaches. *Computers & Fluids*, Vol. 39pp. 373–391.
- Piegl, L. A. e Tiller, W. (1997). *The Nurbs Book*. Springer, 2nd edition.
- Pironneau, O. (1974). On optimum design in fluid mechanics. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 64pp. 97 – 110.
- Pironneau, O. (1984). *Optimal Shape Design for Elliptic Systems*. Springer-Verlag, New York.
- Qian, X. (2003). Full analytical sensitivities in nurbs based isogeometric shape optimization. Il 60062, Illinois Institute of Technology, Chicago, USA.
- Quagliarella, D. e Vicini, A. (1997). Coupling genetic algorithms and gradient based optimization techniques. Em *In Genetic Algorithms and Evolution Strategies in Engineering and Computer Science*, ed. D Quagliarella et al., p. 289–309. Chichester: Wiley.
- Ramm, E., Bletzinger, K. U., e Reitinger, R. (1993). Shape optimization of shell structures. *IASS Bulletin of the international association for shelland spatial structures*, Vol. 34, No. 112, pp. 103–121.
- Ramm, E. e Wall, W. A. (2004). Shell structures – a sensitive interrelation between physics and numerics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 60pp. 381–427.
- Reitinger, R. e Ramm, E. (1995). Buckling and imperfection sensitivity in the optimization of shell structures. *Thin-Walled Structures*, Vol. 23, No. 1-4, pp. 159–177.

- Reuther, J., Jameson, A., Farmer, J., Martinelli, L., e Saunders, D. (1996). Aerodynamic shape optimization of complex aircraft configurations via an adjoint formulation. Em *34th AIAA, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV*.
- Riesenfeld, R. F. (1981). Homogeneous coordinates and projective planes in computer graphics. *IEEE Comput. Graph. and Appl.*, Vol. 1, No. 1, pp. 50–55.
- Roberts, D. F. (1965). Homogeneous matrix representation and manipulation of n -dimensional constructs. Technical report ms-1405, Lincoln Laboratory, MIT, Cambridge, MA.
- Romero, I. (2012). An analysis of the stress formula for energy-momentum methods in nonlinear elastodynamics. *Computational Mechanics*, Vol. 50pp. 603–610.
- Samareh, J. A. (2004). Aerodynamic shape optimization based on free-form deformation. Em *42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 5-8 January, 2004, Reno, NV*.
- Schlichting, H. (1979). *Boundary-Layer Theory*. McGraw-Hill, 6th edition.
- Schmitt, V. e Charpin, F. (1979). Pressure distributions on the onera-m6-wing at transonic mach numbers, experimental data base for computer program. Technical report, Report of the Fluid Dynamics Panel Working Group 04, AGARD AR 138.
- Schoenberg, I. (1946). Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions. *Quarterly of Applied Mathematics*, Vol. 4pp. 45–99.
- Sederberg, T. e Parry, S. (1986). Free-form deformation of solid geometric objects. *Comput. Graph.*, Vol. 20, No. 4, pp. 151–160.
- Seo, Y.-D., Kim, H.-J., e Youn, S.-K. (2009). Shape optimization and its extension to topological design based on isogeometric analysis. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47pp. 1618–1640.
- Sherman, L. L., III, A. C. T., Green, L. L., Newman, P. A., Hou, G. W., e Korivi, V. M. (1996). First- and second-order aerodynamic sensitivity derivatives via automatic differentiation with incremental iterative methods. *Journal Of Computational Physics*, Vol. 129pp. 307–331.
- Simo, J. e Tarnow, N. (1992). The discrete energy-momentum method, conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, Vol. 43pp. 757–792.
- Sokolowski, J. e Zolezio, J. (1991). *Introduction to shape optimization. Shape sensitivity analysis*. Springer Series Computational Mathematics Vol. 16, 2th edition.
- Spearman, M. L. e Brawell, D. O. (1993). Aerodynamics of a sphere and an oblate spheroid for mach numbers from 0.6 to 10.5 including some effects of test conditions. im-109016, Nasa technical memorandum, NASA, Hampton, Virginia, USA.
- Spellucci, P. (2001). *DONLP2*. <http://www.mathematik.tu-darmstadt.de/fb Bereiche/numerik/staff/spellucci/DONLP2/index.html>.

- Stück, A., Camelli, F. F., e Löhner, R. (2010). Adjoint-based design of shock mitigation devices. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 64pp. 443–472.
- Sze, K., Liu, X., e Lo, S. (2004). Popular benchmark problems for geometric nonlinear analysis of shells. *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 40pp. 1551–1569.
- Sze, K. Y., Chan, W. K., e Pian, T. H. H. (2002). An eight-node hybrid-stress solid-shell element for geometric non-linear analysis of elastic shells. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, Vol. 55pp. 853–878.
- Tartar, L. (1974). Control problems in the coefficients of pde. Em *In Control Theory, Numerical Methods and Computer Systems Modelling (Internat. Sympos., IRIA LABORIA, Rocquencourt, 1974)*, pp. 420–426. *Lecture Notes in Econom. and Math. Systems*, 107. Berlin: Springer.
- Tetsushi, T. (2008). *Aerodynamic Design Applying Automatic Differentiation And Using Robust Variable Fidelity Optimization*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology.
- Thomas, C. G. e Nithiarasu, P. (2005). Influences of element size and variable smoothing on inviscid compressible flow solution. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, Vol. 15, No. 5, pp. 420–428.
- Valente, R. A. F. (2004). *Developments on Shell and Solid-Shell Finite Elements Technology in Nonlinear Continuum Mechanics*. PhD thesis, Universidade do Porto, Faculdade de Engenharia.
- Verma, S. (2009). *Investigation Of Adjoint Based Shape Optimization Techniques In Nascart-Gt Using Automatic Reverse Differentiation*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology.
- Wall, W. A., Frenzel, M. A., e Cyron, C. (2008). Isogeometric structural shape optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 197pp. 2976–2988.
- Wang, D. e Xuan, J. (2010). An improved nurbs-based isogeometric analysis with enhanced treatment of essential boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199pp. 2425–2436.
- Wempner, G. (1969). Finite elements, finite rotations and small strains of flexible shells. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 5pp. 117–153.
- White, F. W. (1991). *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill, 2th edition.
- Wood, W., Bossak, M., e Zienkiewicz, O. (1980). An alpha modification of newmark's method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 15pp. 1562–1566.
- Yang, Y.-B. e Shieh, M.-S. (1990). Solution method for nonlinear problems with multiple critical points. *AIAA Journal*, Vol. 28pp. 2110–2116.
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., e Nithiarasu, P. (2011). *The Finite Element Method For Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 6th edition.