

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
BIBLIOTECA UNIVERSITÁRIA

André Demetrio de Magalhães

**OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA ESTRUTURAL
UTILIZANDO UM MODELO DE CAMPO DE FASE**

Florianópolis

2022

André Demetrio de Magalhães

**OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA ESTRUTURAL
UTILIZANDO UM MODELO DE CAMPO DE FASE**

Trabalho de Conclusão do Curso de graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Guilherme Henrique da Silva, M. Eng.

Coorientador: Olavo Mecias da Silva Júnior, Dr. Eng.

Florianópolis

2022

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Magalhães, André Demetrio de
Otimização topológica estrutural utilizando um modelo de
campo de fase / André Demetrio de Magalhães ; orientador,
Guilherme Henrique da Silva, coorientador, Olavo Mécias da
Silva Júnior, 2022.
75 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico,
Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2022.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Otimização topológica. 3.
Otimização estrutural. 4. Método de campo de fase. 5.
Elasticidade linear. I. da Silva, Guilherme Henrique. II.
da Silva Júnior, Olavo Mécias. III. Universidade Federal
de Santa Catarina. Graduação em Engenharia Mecânica. IV.
Título.

André Demetrio de Magalhães

**OTIMIZAÇÃO TOPOLOGICA ESTRUTURAL
UTILIZANDO UM MODELO DE CAMPO DE FASE**

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do Título de Engenheiro Mecânico e aprovado em sua forma final pelo Curso de Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 19 de dezembro de 2022.

Prof. Carlos Enrique Niño Bohórquez, Dr. Eng.
Coordenador do curso

Comissão Examinadora:

Guilherme Henrique da Silva, M. Eng.
Orientador

Prof. Arcanjo Lenzi, PhD.

Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr. Eng.

Dedico este trabalho a meus pais.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho contou com o apoio de várias pessoas e que foram imprescindíveis para sua realização. Gostaria de agraceder:

- Antes de tudo agradeço aos meus pais César Augusto e Josiane Maria que sempre me apoiaram incondicionalmente em todas minhas decisões.
- Ao meu irmão e amigo Marcelo, pela amizade e apoio.
- Ao Bruno, pelos bons momentos e parceria vividas nesses últimos anos.
- Ao meu amigo João Vitor, pelo apoio e confiança depositada.
- Ao meu orientador Guilherme, pelo suporte e apoio durante todos esses anos.
- Por final agradeço a todos do Laboratório de Vibrações e Acústica da UFSC, especialmente o Olavo, que me permitiram um pouco de seu tempo para me ajudar quaisquer fossem os problemas.

RESUMO

O uso de *softwares CAE* para auxiliar o projeto de novos produtos é cada vez mais comum à medida que o poderio computacional se torna mais acessível. Dentre às possibilidades presentes, uma das que mais se destaca é a de que, dadas restrições de projeto, obtenha-se uma estrutura com o mínimo possível de massa e, consequentemente, os recursos necessários para à manufatura sejam reduzidos. A otimização topológica estrutural surge com esse objetivo e é disseminada predominantemente com o método SIMP. Apesar de seu amplo uso, métodos clássicos de otimização estrutural têm suas próprias dificuldades e isso mostra a possibilidade de procurar-se métodos alternativos para solução de tal problema. Este trabalho tem como objetivo demonstrar a utilização da equação de Cahn-Hilliard, uma equação de separação de fases sem nucleação, acoplada à equação da elasticidade linear para obtenção de um resultado ótimo a esse problema. Aspectos da implementação computacional em elementos finitos são discutidos, assim como os resultados obtidos.

Palavras-chaves: Otimização topológica. Otimização estrutural. Método de campo de fase. Elasticidade linear. Método dos Elementos Finitos.

ABSTRACT

The use of CAE software to design new products has been gaining traction as it becomes easier to get hands on easily accessible computational power. Within the possibilities, one that has shown its potential is to, given project restrictions, obtain a final product with minimal mass and therefore minimize the costs of manufacturing. Structural topological optimization aims to solve these problems and is mainly present with the SIMP method. Even though with its ample presence, classic structural optimization methods have its own shortcomings and this shows the need to research new ways to solve this problem. The main objective of this work is to show the Cahn-Hilliard equation, which describes a specific process of phase transition, being used to obtain an optimum result to this issue as it is coupled to the linear elasticity equations. Computational aspects and its implementation within the scope of the Finite Element Method are discussed and results are shown.

Keywords: Topological optimization. Structural optimization. Phase-field model. Linear elasticity. Finite Element Method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Os tipos de otimização estrutural: (a) paramétrica, (b) forma e (c) topológica (2).	3
Figura 1.2 – Estrutura exemplo para a minimização da flexibilidade. Resultado da otimização para malhas (a) 20x120, (b) 40x240 e (c) 80x480 elementos (7).	4
Figura 1.3 – Estrutura exemplo para a minimização da flexibilidade com filtro. Resultado da otimização para malhas (a) 20x120, (b) 40x240 e (c) 80x480 elementos (7).	5
Figura 1.4 – Três diferentes técnicas de regularização (filtros) aplicadas no método SIMP ao problema da viga MBB (9).	6
Figura 1.5 – Representação de um domínio por um campo de fase (12). (a) domínio original, (b) sua representação por um campo de fase.	7
Figura 1.6 – Resultado de otimização por um método de campo de fase (13).	7
Figura 3.1 – Problema generalizado de distribuição de material (25).	22
Figura 3.2 – a) Problema da viga em balanço. b) Solução da otimização topológica utilizando 400 elementos, apresentando o fenômeno de tabuleiro. c) Solução da otimização topológica utilizando 6400 elementos, apresentando outro padrão de tabuleiro (8).	28
Figura 3.3 – Descrição de um campo de fase (31).	29
Figura 3.4 – Exemplo de resultado de otimização topológica por um modelo de campo de fase (32).	31

Figura 4.1 – Aproximação da função logarítmica por um polinômio de quarta ordem (35).	35
Figura 4.2 – Evolução no tempo da solução da equação de Cahn-Hilliard.	38
Figura 4.3 – Evolução no tempo da solução da equação de Cahn-Hilliard e regime permanente.	39
Figura 4.4 – Evolução da energia do sistema	40
Figura 4.5 – Concentração inicial para o problema da Figura 4.6.	46
Figura 4.6 – Solução de um problema genérico de otimização topológica estrutural com Cahn-Hilliard.	47
 Figura 5.1 – Componentes do <i>software</i> FEniCS (43).	49
Figura 5.2 – Viga engastada com força na extremidade.	50
Figura 5.3 – Evolução no tempo para a viga em balanço.	51
Figura 5.4 – Evolução da energia no tempo do problema da Figura 5.3. (a) Energia pelo tempo. (b) Energia pelo tempo ampliada e mínimo elástico.	52
Figura 5.5 – Viga engastada com força na extremidade.	53
Figura 5.6 – Evolução no tempo para a solução do problema da Figura 5.5.	53
Figura 5.7 – Evolução da energia no tempo do problema da Figura 5.6. (a) Energia pelo tempo. (b) Energia pelo tempo ampliada e mínimo elástico.	55
Figura 5.8 – Domínio considerado e condições de contorno.	56
Figura 5.9 – Evolução no tempo para a solução.	56
Figura 5.10 – Evolução da energia no tempo.	57
Figura 5.11 – Domínio considerado e condições de contorno.	57
Figura 5.12 – Evolução no tempo da solução do problema.	58
Figura 5.13 – Evolução da energia no tempo.	59
Figura 5.14 – Domínio considerado e condições de contorno.	59
Figura 5.15 – Evolução da energia no tempo.	60
Figura 5.16 – Evolução no tempo da solução.	61
Figura 5.17 – Comparação de solução intermediária e a mínima elástica.	62

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω	Domínio
\mathbb{R}^n	Espaço de coordenadas reais
L^p	Espaço L^p de Lebesgue
C^m	Conjunto de funções com m derivadas contínuas
H	Espaço de Sobolev
Γ	Contorno de Ω
dim	Dimensão de um espaço vetorial
σ	Tensor tensão de Cauchy
ϵ	Tensor deformação
D	Tensor de rigidez
c	Concentração
M	Mobilidade
$f(c)$	Função densidade de energia livre
λ	Parâmetro governante da largura da interface
$E(c)$	Funcional de energia de Cahn-Hilliard
μ	Potencial químico
$\partial\Omega$	Contorno de Ω
$\mathcal{O}(n)$	Notação grande O

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	OTIMIZAÇÃO ESTRUTURAL	2
1.2	MOTIVAÇÃO	3
1.3	OBJETIVO	8
1.4	ESTRUTURA DO TRABALHO	8
2	CONCEITOS MATEMÁTICOS	10
2.1	CONJUNTOS, ESPAÇOS E INTEGRABILIDADE	10
2.1.1	Continuidade de funções	11
2.1.2	Espaços L^p	11
2.1.3	A derivada fraca	12
2.1.4	Espaços de Sobolev	13
2.2	MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	14
2.2.1	Forma Variacional	14
2.2.2	Discretização da forma fraca	16
2.3	EQUAÇÕES NÃO-LINEARES	18
2.4	DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO	19
3	OTIMIZAÇÃO TOPOLOGICA	21
3.1	O PROBLEMA DE COMPLIÂNCIA MÍNIMA	22
3.1.1	Parametrização	23
3.2	ABORDAGEM SIMP	24
3.2.1	Condições de Optimalidade	25
3.2.2	Dificuldades típicas do SIMP	27
3.3	ABORDAGEM POR CAMPO DE FASE	29
4	EQUAÇÃO DE CAHN-HILLIARD	32
4.1	FUNÇÃO DENSIDADE DE ENERGIA	34
4.2	FORMA FRACA	35
4.2.1	Formulação Mista	36

4.2.2	Integração no Tempo	37
4.3	CAHN-HILLIARD COMO OTIMIZAÇÃO TOPO-	
	LÓGICA	42
4.3.1	Metodologia de solução do problema de otimização	45
5	IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS	48
5.1	IMPLEMENTAÇÃO	48
5.2	RESULTADOS	49
5.2.1	Viga em balanço	50
5.2.2	Viga em balanço assimétrica	52
5.2.3	Ponte	55
5.2.4	Viga MBB	57
5.2.5	Treliça de Michel	59
6	CONCLUSÃO	63
	CONCLUSÃO	63
	Referências	65
	APÊNDICE A – APÊNDICE A	71

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Em situações reais de engenharia, projetar novas peças é um trabalho de várias etapas cujo objetivo é escolher a configuração mais adequada para realizar determinada tarefa. Dadas inúmeras variáveis e restrições, cabe ao engenheiro definir o formato final dos componentes. No contexto da otimização topológica, busca-se definir tamanhos, formas e conexões ótimas dos componentes de maneira a minimizar uma função objetivo. Essa função pode ser escolhida como um conjunto de frequências naturais, coeficiente de transferência de calor, flexibilidade da estrutura, entre outros. Em relação à otimização estrutural, o caso clássico remete a minimizar a flexibilidade estrutural (também conhecida como compliância estrutural), equivalente a maximizar a rigidez dada certa restrição de volume. Diversos métodos podem ser encontrados na literatura, dentre eles o popular Material Isotrópico Sólido com Penalização (SIMP) (1), que determina a distribuição ótima de material dentro de um domínio a partir de condições de contorno pré-estabelecidas. Porém, este método apresenta alguns problemas inerentes aos procedimentos numéricos utilizados para sua adaptação prática.

1.1 OTIMIZAÇÃO ESTRUTURAL

Métodos de otimização estrutural podem ser classificados, de forma geral, em três grupos principais:

- Otimização paramétrica: a forma final da estrutura é conhecida, com dimensões e propriedades parametrizadas e definidas como variáveis de projeto. Por exemplo, os diâmetros de cada barra da treliça apresentada na Figura 1.1a podem variar para minimização de sua flexibilidade. Entretanto, a topologia da estrutura não é modificada.
- Otimização de forma: tem como variável de projeto o contorno, isto é, busca-se escolher o contorno ótimo que minimize certa função de desempenho. Em geral, o método é dependente de uma malha (de elementos finitos, de elementos de contorno, entre outros). Cada alteração do contorno requer uma reconstrução da malha para garantir precisão dos resultados. Uma ilustração esquemática deste método é apresentada na Figura 1.1b, na qual contornos externos e internos são modificados.
- Otimização topológica: neste método, vazios são inseridos em um domínio de projeto discretizado (através de uma malha), e novas topologias são criadas dependendo do objetivo pretendido e de uma restrição de volume. É considerado o mais geral dos métodos, porém é extremamente dependente do refino da malha e do problema físico estudado. Uma representação gráfica do método é apresentada na Figura 1.1c.

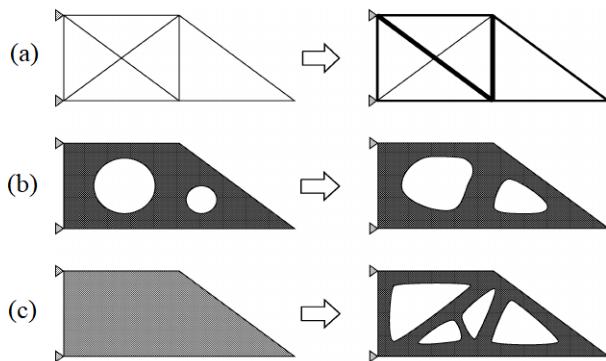


Figura 1.1 – Os tipos de otimização estrutural: (a) paramétrica, (b) forma e (c) topológica (2).

Como é um método mais geral, a otimização topológica permite encontrar estruturas muito mais complexas que as obtidas por otimização paramétrica ou de forma. Alterar a topologia está intrinsecamente ligado a adicionar *furos* à estrutura inicial. Isto é, o número de furos é uma invariante topológica. A forma mais comum de representar novas topologias, e portanto capturar a presença de novos furos, é colocar o problema de otimização sob a ótica de um problema de distribuição de material. A maioria dos problemas de otimização topológica segue esse enfoque, diferindo na forma como representam a presença ou não de material no domínio do problema.

1.2 MOTIVAÇÃO

Desde o método da homogenização (3), diversos métodos foram propostos na literatura para a solução de problemas de otimização topológica, tais como os baseados em modelos de material (1), em curvas de nível (4) e em derivadas topológicas (5). Dentre os métodos baseados em modelos de material, encontra-se o popular *Solid Isotropic Material with Penalization*, ou SIMP (traduzido neste trabalho como Material Isotrópico Sólido com Penalização).

Apesar de sua facilidade de implementação, o SIMP apresenta alguns problemas numéricos intrínsecos e necessita de técnicas de regularização para a obtenção de resultados com alta qualidade

(6). Um deles é a dependência do refino da malha: malhas muito refinadas permitem pequenos furos e, consequentemente, membros estruturais mais delgados; malhas mais grosseiras permitem furos mí-nimos maiores, dando origem a membros mais espessos. Resultados da otimização topológica de uma estrutura retangular bi-apoiada sujeita a uma carga central são apresentados na Figura 1.2. Na legenda, há detalhes dos refinos de malha utilizados considerando elementos finitos para estado plano de tensões. Diferentes topologias finais são observadas (em preto: existência de material; em branco: furo).

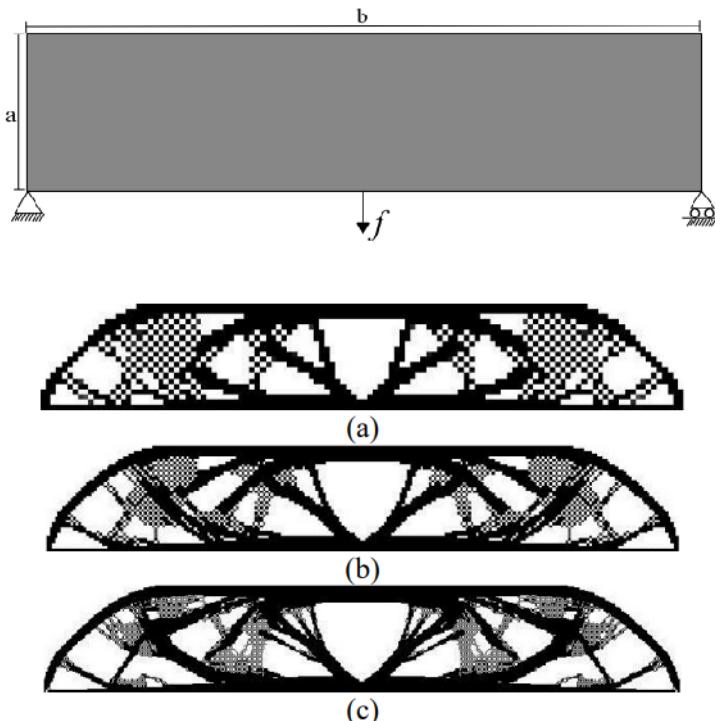


Figura 1.2 – Estrutura exemplo para a minimização da flexibilidade. Re-sultado da otimização para malhas (a) 20x120, (b) 40x240 e (c) 80x480 elementos (7).

A aplicação de filtros espaciais permite reduzir os efeitos

dessa dependência impondo raios mínimos para os furos originados ao longo da otimização. O mesmo exemplo da Figura 1.2 é reprocessado com o uso de três diferentes discretizações de malha e um único tamanho de filtro. Observa-se topologias similares nos resultados finais, conforme Figura 1.3.

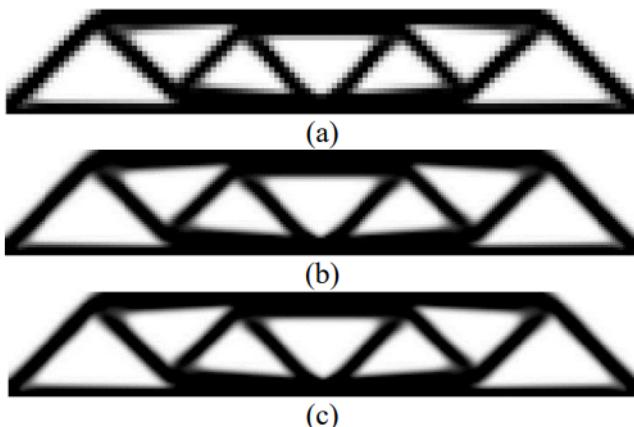


Figura 1.3 – Estrutura exemplo para a minimização da flexibilidade com filtro. Resultado da otimização para malhas (a) 20x120, (b) 40x240 e (c) 80x480 elementos (7).

Entretanto, o uso de filtros para regularização da otimização topológica causa, de maneira geral, indefinição da presença de material no contorno da estrutura, o que dificulta a geração de geometrias a serem enviadas para o processo de fabricação. Isso pode ser observado na Figura 1.4 onde três diferentes técnicas são aplicadas. Pode-se afirmar a partir de resultados da literatura que, para o método SIMP, quanto mais definida a estrutura final mais instabilidades ocorrem nos procedimentos numéricos envolvidos (8). A indefinição do material pode causar inconsistências físicas em problemas vibratórios, acústicos, e mesmo de transferência de calor.

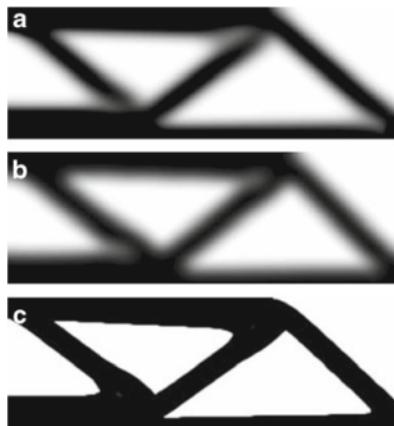


Figura 1.4 – Três diferentes técnicas de regularização (filtros) aplicadas no método SIMP ao problema da viga MBB (9).

Os métodos de otimização topológica baseados em modelos de campos de fase (10)(11) adotam modelos matemáticos utilizados para resolver problemas interfaciais. Um modelo de campo de fase descreve a evolução temporal de uma função conhecida por parâmetro de ordem, $\phi \in [a, b]$, que é usado para distinguir duas fases, com os valores do limite inferior e superior indicando fases distintas. Modelos de campos de fase descrevem uma *interface difusa* entre as fases, isto é, há uma noção de continuidade entre as fases a partir da interface entre elas, representada por valores intermediários de ϕ . A Figura 1.5 mostra um domínio D sendo representado por um campo de fase. Ω_0 , identificado por $\phi = 0$, representa a ausência de material, enquanto que Ω_1 , identificado por $\phi = 1$, representa sua presença. Quaisquer valores entre 0 e 1 representam a interface difusa indicada por ξ .

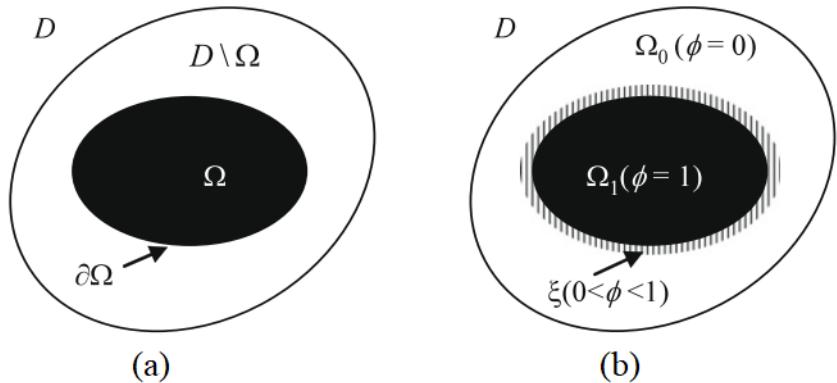


Figura 1.5 – Representação de um domínio por um campo de fase (12).
 (a) domínio original, (b) sua representação por um campo de fase.

O processo de otimização topológica é alcançado ao resolver a equação que descreve a evolução do parâmetro de ordem acoplada a alguma equação de estado. A região de interface difusa, que descreve a interface entre as fases do problema, serve para descrever o contorno que separa a presença ou não de material. Essa ideia de continuidade entre a presença e vazio de material evita problemas típicos de métodos baseados em densidade (12). Um exemplo de resultado obtido por este método é apresentado na Figura 1.6, considerando uma estrutura retangular em estado plano de tensões.

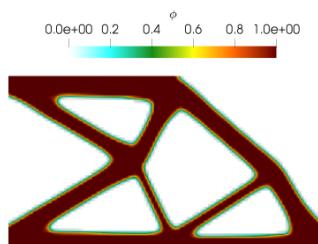


Figura 1.6 – Resultado de otimização por um método de campo de fase (13).

A otimização topológica feita por um método de campo de fase requer resolver a equação evolutiva do parâmetro de ordem. O processo de otimização é governado pela equação diferencial escolhida. No caso deste trabalho, adota-se a equação de Cahn-Hilliard (14) junto à equação de estado. A equação de estado do problema pode abranger diferentes problemas físicos, não apenas elasticidade linear, indicando que métodos baseados em modelo de campo de fase são métodos gerais para otimização topológica.

1.3 OBJETIVO

Esse trabalho tem como objetivo discutir a implementação de um modelo de otimização topológica estrutural utilizando o acoplamento das equações da elasticidade linear à equação de separação de fases de Cahn-Hilliard. Na contramão de métodos clássicos de otimização topológica, a principal característica desse método é o uso da solução do acoplamento anteriormente mencionado como resultado ótimo do problema de otimização estrutural. O objetivo deste trabalho é, portanto, uma análise comparativa da implementação do método com relação ao SIMP.

1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho está organizado de acordo com os seguintes capítulos:

- Capítulo 2: faz uma revisão de conceitos matemáticos necessários para a implementação computacional da equação de Cahn-Hilliard. São discutidos conceitos chaves como continuidade de funções, integrabilidade e derivadas, de forma a servirem de apoio aos requisitos necessários para introduzir o Método de Elementos Finitos.
- Capítulo 3: introduz e faz uma revisão sobre o problema de otimização topológica estrutural, abordando conceitos chaves do método SIMP e do método de campo de fase.
- Capítulo 4: nesse capítulo é apresentado formalmente a equa-

ção de Cahn-Hilliard, discutindo suas principais particularidades e requisitos para uma implementação em Elementos Finitos. Ao final desse é discutido o acoplamento das equações da elasticidade linear na equação de Cahn-Hilliard, de modo a resolver um problema de otimização equivalente ao da mínima compliância.

- Capítulo 5: são apresentados os resultados obtidos com a otimização topológica realizada pela equação de Cahn-Hilliard.
- Capítulo 6: o último capítulo é dedicado à discussão do desenvolvimento e dos resultados, além de sugestões de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

CONCEITOS MATEMÁTICOS

Este trabalho depende de ferramentas matemáticas do campo da *análise funcional*. Em especial, da noção de continuidade de funções dentro de um espaço, de integrabilidade de funções e de formas fracas de equações diferenciais. Este Capítulo aborda estes assuntos inicialmente, e, em seguida, descreve o método dos elementos finitos, técnica de aproximação da solução de equações diferenciais.

2.1 CONJUNTOS, ESPAÇOS E INTEGRABILIDADE

De maneira simplificada, pode-se definir um *conjunto* como uma coleção de objetos. Já os espaços são conjuntos que possuem estrutura, ou um conjunto de regras. Especificamente, este trabalho trata de *espaços de funções*, que são conjuntos de funções que possuem estrutura e regras.

Espaços vêm em grande variedade de tipos, com diversas regras diferentes. Para este trabalho, trata-se de três tipos específicos de espaços: o espaço das funções contínuas, os espaços L^p de funções cujas p -ésimas potências são integráveis e espaços de Sobolev.

2.1.1 Continuidade de funções

Considere uma função f definida num conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Diz-se que f é **contínua** no ponto $x_0 \in \Omega$ se, para cada número positivo ϵ , é possível encontrar um número positivo δ de forma que:

$$|f(x) - f(x_0)| < \epsilon \quad \text{sempre que } |x - x_0| < \delta. \quad (2.1)$$

Se a Equação 2.1 é válida para todos os pontos x_0 , a função f é dita *contínua em Ω* . Pode-se então definir o conjunto de funções contínuas em Ω , chamado de $C(\Omega)$. Define-se também os conjuntos $C^m(\Omega)$ e $C^\infty(\Omega)$, que são respectivamente os conjuntos de funções com m derivadas contínuas em Ω e o conjunto de funções infinitamente deriváveis em Ω . É comum encontrar na literatura de elementos finitos a noção do conjunto $C^{-1}(\Omega)$, que é o conjunto das funções que são descontínuas em Ω .

2.1.2 Espaços L^p

É de interesse da engenharia a integração de funções que não são integráveis na definição clássica de integral de Riemann (15). A integral de Lebesgue, que é uma generalização da integral de Riemann, é capaz de integrar classes de funções de interesse da engenharia. Definir-se-á, para fins deste trabalho, a integral de Lebesgue como, para funções *não negativas* (15):

$$\int_{\Omega} f dx = \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\Omega} s_k dx, \quad (2.2)$$

onde s_k são funções simples não-decrescentes que aproximam f . Desta forma, é possível obter a integral de Lebesgue como o limite de integrais de funções que aproximam f à medida que o limite se aproxima do infinito. Esta propriedade é que permite a definição de integrabilidade para uma gama maior de funções, mantendo o mesmo resultado de uma integral de Riemann quando a função também é Riemann-integrável. A integral de Lebesgue é, portanto, uma generalização da integral de Riemann. f é dita Lebesgue-integrável se:

$$\int_{\Omega} |f| dx < \infty. \quad (2.3)$$

A partir desta definição de integrabilidade, define-se o espaço $L^p(\Omega)$. Seja p um número real e $p > 1$. Uma função $f(x)$ definida em $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ pertence ao espaço $L^p(\Omega)$ se a integral de Lebesgue

$$\int_{\Omega} |f(x)|^p dx$$

existe. Ou seja:

$$\int_{\Omega} |f(x)|^p dx < \infty. \quad (2.4)$$

Um espaço de particular interesse é o espaço das funções *quadraticamente integráveis*, que é o espaço $L^2(\Omega)$.

2.1.3 A derivada fraca

Com a definição dos espaços $L^p(\Omega)$, pode-se estender a noção de uma derivada particular da integral de Lebesgue. Este conceito permite diferenciar uma função que não possui derivada formal, como a função de Heaviside ou o delta de Dirac. Considera-se duas funções diferenciáveis $u(x)$ e $v(x)$. A identidade de integração por partes diz que:

$$\int_a^b u(x)v'(x)dx = [u(x)v(x)]_a^b - \int_a^b u'(x)v(x)dx. \quad (2.5)$$

Uma função $u'(x)$ é dita uma *derivada fraca* se a identidade acima é válida para **todas** as funções $v(x)$ que desaparecem no contorno do domínio (isto é, $v(a) = v(b) = 0$). Ou seja, para que uma função seja fracamente diferenciável, é necessário que:

$$\int_a^b u(x)v'(x)dx = - \int_a^b u'(x)v(x)dx, \quad (2.6)$$

para todas as funções diferenciáveis $v(x)$ com $v(a) = v(b) = 0$. Esta definição permite a generalização da identidade da integração por partes para n dimensões:

$$u(D^\alpha v) = (-1)^\alpha \int_{\Omega} (D^\alpha u) v, \quad (2.7)$$

onde D é um operador linear derivativo e α é um multi-índice definido por $\alpha \in N^d$, $\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d\}$ e $|\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i$. Ou seja, D^α é definido como:

$$D^\alpha v = \frac{\partial^{|\alpha|} v}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}. \quad (2.8)$$

Com a definição de derivada fraca, pode-se definir os espaços de Sobolev, necessários para o desenvolvimento das formas fracas de equações diferenciais.

2.1.4 Espaços de Sobolev

O desejo de solucionar formas fracas de equações diferenciais implica na necessidade da integrabilidade não só da solução da equação, como também de suas derivadas. A classe de espaços que tange a integrabilidade de funções e suas derivadas fracas é chamada de espaço de Sobolev.

Os espaços de Sobolev são definidos como o espaço de funções $H^m(\Omega)$ tal que as funções e suas derivadas fracas até a ordem m pertencem a $L^2(\Omega)$. Em notação de conjuntos, isso significa:

$$H^m(\Omega) := \{u : D^\alpha u \in L^2(\Omega), \forall \alpha / |\alpha| < m\}. \quad (2.9)$$

Para a resolução de equações diferenciais na forma fraca, para que o problema seja solucionável, será requisito que a solução seja parte de um espaço de Sobolev de uma ordem particular. É possível mostrar que a ordem do espaço de Sobolev na qual a função precisa fazer parte é a ordem da equação diferencial forte dividida por dois. Isto é reflexo da propriedade da derivada fraca. Esta particularidade revela um dos principais motivos do uso da forma fraca das equações diferenciais para a resolução de problemas: os requisitos impostos sobre o espaço-solução são menos restritivos que aqueles da forma forte. Enquanto um problema de ordem 2 na forma forte requer existência e continuidade das derivadas até ordem 2, na forma fraca o problema requer apenas **integrabilidade** das *primeiras* derivadas do espaço-solução dentro do domínio Ω .

2.2 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O Método dos Elementos Finitos é um método numérico utilizado para a solução aproximada de equações diferenciais em algum domínio de interesse. Embora a fundação matemática e artifícios necessários já estavam presente no início do século XX com o método de *Galerkin*, os primeiros trabalhos que remetem ao método dos elementos finitos aparecem apenas na metade do século XX (16) (17). Os trabalhos de Turner (18), nos quais o termo *elementos finitos* aparece a primeira vez na literatura, junto com os trabalhos de Zienkiewicz (19) popularizam o método e dão forma à maneira que ele é conhecido nos dias atuais.

Uma de suas características essenciais está na discretização do domínio contínuo por meio de uma *malha* que é formada por um conjunto de sub-domínios chamados *elementos*. Com uma escolha razoável para as *funções de base*, a variável desconhecida (temperatura, deslocamento, etc) é aproximada pela solução de um sistema de equações, esse montado a partir da *forma fraca* da equação diferencial.

2.2.1 Forma Variacional

Como forma útil e de praxe para exemplificar o método dos elementos finitos, considera-se a equação de Poisson definida em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, com condições de contorno definidas no contorno $\partial\Omega$:

$$\mathcal{P} = \begin{cases} -\nabla^2 u = f, & \text{em } \Omega \\ u = \bar{u}, & \text{em } \partial\Omega \end{cases} . \quad (2.10)$$

Primeiramente multiplica-se a equação por uma *função de teste* v , cujo requisito é desaparecer no contorno $\partial\Omega$. Ao integrá-la sobre Ω obtém-se:

$$-\int_{\Omega} \nabla^2 u v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega, \quad \forall v \in H_0^1. \quad (2.11)$$

Um dos motivos de realizar tal procedimento é para que se torne possível aplicar o *teorema da divergência* ao lado esquerdo da equação e, dessa maneira, enfraquecer os requisitos quanto a continuidade da função u , como segue

$$\int_{\Omega} v \nabla^2 u \, d\Omega = \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} v \, d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot n. \quad (2.12)$$

Dessa forma, ao fazer as devidas substituições em 2.11, obtém-se a chamada *forma fraca ou variacional* da equação de Poisson,

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega, \quad \forall v \in V, \quad (2.13)$$

sendo $V \subset H_0^1$ o espaço que contém todas as funções admissíveis para escolha de v , com uma de suas restrições de ter o valor nulo no contorno de Ω .

O lado esquerdo da equação acima é conhecido por forma *bilinear* e contém todos os termos relacionados a *função teste* v e a *função candidata* u ¹. Enquanto o lado direito é a forma *linear* e contém somente os termos associados a *função teste* v . O problema equivalente pode ser posto também como encontrar $u \in V$ de modo que 2.13 é satisfeita para todo $v \in V$. A Equação 2.13 pode ser reescrita como

$$a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V, \quad (2.14)$$

em que

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega \quad (2.15)$$

e

$$L(v) = \int_{\Omega} f v \, d\Omega. \quad (2.16)$$

¹ Conhecidas na literatura por *test function* e *trial function* respectivamente, im-possibilitando uma fiel tradução ao português.

2.2.2 Discretização da forma fraca

Até esse momento foi considerado um espaço V de dimensão infinita. De forma a tornar possível a solução numérica da Equação 2.13, considera-se agora um subespaço de V , V^h , sendo $\dim(V^h) = n$.

Seja $\{\phi_i\}_{i=0}^{n-1}$ uma base para V^h . Consequentemente, ambas funções u podem ser aproximadas por uma combinação linear de coeficientes e funções de base, sendo agora chamadas de u^h e v^h , como segue

$$u^h = \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i u_j, \quad (2.17)$$

$$v^h = \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i v_i. \quad (2.18)$$

Percebe-se que as funções de base ϕ utilizadas para descrever tanto u^h como v^h são as mesmas, isso é uma escolha do Método de *Bubnov-Galerkin*. Agora substituindo na formulação fraca (Equação 2.13) e considerando $\Omega \subset \mathbb{R}^1$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla u^h \cdot \nabla v^h d\Omega &= \int_{\Omega} f v^h d\Omega, \quad \forall v^h \in V^h \\ \int_{\Omega} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} u_j \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} v_i dx &= \int_{\Omega} f \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i v_i dx, \quad \forall v^h \in V^h. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Como a Equação 2.19 deve valer para todo v_h , chega-se a:

$$\sum_{j=0}^{n-1} \left(\int_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} dx \right) u_j = \int_{\Omega} f \phi_i dx, \quad \forall i. \quad (2.20)$$

Define-se a forma matricial do problema por:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= [K_{ij}], & K_{ij} &= \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} dx \\ \mathbf{u} &= [u_j], & f_i &= \int_{\Omega} f \phi_i dx \end{aligned} \tag{2.21}$$

onde \mathbf{K} é comumente conhecida como *matriz de rigidez*². Ao considerarmos a discretização do domínio original Ω por meio de uma subdivisão em *elementos* tem-se o que se chama de *malha*. Normalmente, a subdivisão do domínio não é exata, levando a erros de aproximação geométrica.

Percebe-se que até agora nada foi comentando quanto às funções de base a serem utilizadas para aproximar as funções u e v . Um dos pré-requisitos essenciais do método dos elementos finitos é quanto ao suporte dessas funções (20). Elas devem ser não nulas somente em uma pequena porção do domínio e, dessa maneira, o produto $\phi_i \phi_j$ é nulo para sua maior parte. Isso implica em matrizes esparsas, fazendo com que a rotina de montagem da *matriz de rigidez* seja feita elemento a elemento, sendo representada por \mathbf{K}_e . Para problemas complexos, o sistema de equações lineares gerado normalmente é da ordem de milhões e, dessa maneira, métodos diretos como Eliminação Gaussiana ou variantes se mostram inefficientes ou impraticáveis mesmo com o uso de computadores modernos. Nesse caso, pode-se fazer uso de métodos iterativos para solução dos sistemas lineares gerados, como os métodos de Krylov, em que a solução é uma aproximação obtida através de sucessivas aproximações anteriores.

Embora o procedimento acima tenha sido formulado para a equação de Poisson, o mesmo procedimento pode ser realizado para outras equações:

² Embora associado às equações da elasticidade linear, é comum usá-lo de forma genérica.

- Multiplicar a forma forte da equação por uma função arbitrária apropriada.
- Integrar ao longo do domínio.
- Reduzir a ordem das derivadas associadas a partir da integração por partes.
- Aplicar as condições de contorno.
- Resolver o sistema gerado.

Percebe-se que nada foi comentado quanto aos esquemas de montagem das matrizes, geração das funções de base, quadratura e integração, entre outros aspectos clássicos de uma implementação de elementos finitos. Recomenda-se o livro de Zienkiewicz (19) para detalhes mais técnicos e de programação do método.

2.3 EQUAÇÕES NÃO-LINEARES

Ao contrário da equação de Poisson, que é linear, muitos problemas são não-lineares e necessitam de procedimentos especiais de solução. O método de Newton-Raphson é um método popular e simples para resolver equações não-lineares. Seja $R(u)$ uma função não-linear de uma variável qualquer u , e deseja-se encontrar as raízes de $R(u)$, ou seja, $R(u) = 0$. Supõe-se que $\bar{u} = u_0 + \delta u$, onde u_0 é uma aproximação inicial conhecida e δu é uma correção desconhecida. Para um δu suficientemente pequeno, uma expansão de $R(u)$ em série de Taylor em torno de \bar{u} leva a:

$$R(\bar{u}) = R(u_0 + \delta u) = R(u_0) + R'(u_0)\delta u + \mathcal{O}(\delta u^2). \quad (2.22)$$

Para $R(\bar{u}) \approx 0$ e desconsiderando os termos de segunda ordem, chega-se a

$$0 \approx R(u_0) + R'(u_0)\delta u \quad (2.23)$$

$$\delta u \approx -R(u_0)/R'(u_0). \quad (2.24)$$

Com δu agora determinado, cabe agora atualizar a estimativa inicial \bar{u} e sucessivamente repetir o procedimento até que $|\delta u| < \epsilon$, sendo ϵ um parâmetro suficientemente pequeno de tolerância. Para funções vetoriais o termo $R'(u_0)$ deve ser substituído pela matriz jacobiana J calculada em u_0 . O método de Newton-Raphson pode ser apresentado na forma de algoritmo como:

Algoritmo 1 Método de Newton-Raphson

Entrada: u_0 : Aproximação inicial e ϵ : máximo incremento

para $k = 0, 1, 2, \dots$ **faca**

Resolver $J_k \delta u_k = -R(u_k)$

$u_{k+1} = u_k + \delta u_k$

se $|\delta u_k| < \epsilon$ **então**

Parar

fim

fim

O método de Newton-Raphson não garante convergência e sua solução depende principalmente do palpite de solução inicial. Caso o palpite inicial implique em uma matriz jacobiana singular, o método não funcionará.

2.4 DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO

Seja a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}). \quad (2.25)$$

Deseja-se resolvê-la no tempo. Isto é, mesmo com a discretização espacial feita por algum método apropriado (diferenças finitas, elementos finitos) não se tem claro ainda como lidar com o termo dependente do tempo. Uma forma geral de solução numérica ao tornar o problema discreto no tempo dá-se por (21):

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t[\theta f_n + (1 - \theta)f_{n+1}], \quad \theta \in [0, 1], \quad (2.26)$$

onde u_n e f_n representam, respectivamente, as funções avaliadas no instante de tempo $t_n = n\Delta t$ e da mesma forma para u_{n+1} e f_{n+1} avaliadas em $t_{n+1} = (n + 1)\Delta t$. Atenta-se para três casos principais na escolha de θ :

- $u_{n+1} = u_n + \Delta t f_n, \quad \theta = 1.$
- $u_{n+1} = u_n + \Delta t f_{n+1}, \quad \theta = 0.$
- $u_{n+1} = u_n + \Delta t 0.5[f_n + f_{n+1}], \quad \theta = 0.5.$

A escolha de $\theta = 1$ leva ao chamado Método de Euler explícito. Isto é, deseja-se solucionar o problema para o instante $n + 1$ a partir de valores (já obtidos) do instante anterior. Já a escolha de $\theta = 0$ e $\theta = 0.5$ levam, respectivamente, ao Método de Euler implícito e ao Método de Crank-Nicolson. Esses são ambos métodos implícitos, ou seja, para obter a solução no próximo passo de tempo utiliza-se valores calculados no próximo passo de tempo (22)(23).

Como não dependem implicitamente da própria solução, métodos explícitos se tornam mais simples de se resolver. No entanto, eles requerem uma escolha de passos no tempo menores quando comparados a métodos implícitos, o que os torna impraticáveis para o trabalho aqui apresentado. Soluções do tipo apresentado em 2.26 são conhecidas também como métodos de passo simples. Métodos mais complexos e que utilizam mais passos para solução são utilizados quando a equação a ser solucionada apresenta elevada rigidez (24).

CAPÍTULO 3

OTIMIZAÇÃO TOPOLOGICA

A primeira publicação a apresentar, de maneira condensada, métodos para o projeto de topologias, formas e materiais ótimos em um meio sólido foi o livro "*Optimization of Structural Topology, Shape and Material*", de Martin Bendsøe, lançado em 1995 (25). À medida que o campo se tornou bem estabelecido e o uso da otimização topológica se tornou comum, diversos algoritmos amadureceram e foram listados na segunda edição do mesmo livro, lançada em 2003 (8). Neste Capítulo, será apresentada a formulação matemática da otimização topológica sob a ótica da compliância (flexibilidade) mínima, que é o problema base do campo de otimização estrutural. Nas seções seguintes, duas abordagens para a solução desse problema serão apresentadas: o modelo de Material Isotrópico Sólido com Penalização (SIMP) e o método de campo de fase. Explicam-se os desafios e problemas comuns nestas abordagens a fim de compará-los com o método proposto neste trabalho utilizando a equação de Cahn-Hilliard no próximo Capítulo.

3.1 O PROBLEMA DE COMPLIÂNCIA MÍNIMA

Quando se deseja projetar uma estrutura, o engenheiro requer conhecimento das cargas aplicadas, das condições de suporte disponíveis e alguma ideia de quanto a estrutura pode e deve pesar, além de restrições de *design* como um furo prescrito ou áreas sólida (8). Este é o mesmo ponto de partida de projetar uma estrutura algorítmicamente através de otimização, que éposta como um problema de *distribuição de material*. O modo mais simples de modelar este problema de distribuição é através do projeto para a *compliância mínima* ou *rigidez global máxima*(1). Este problema é apresentado de maneira generalizada na Figura 3.1.

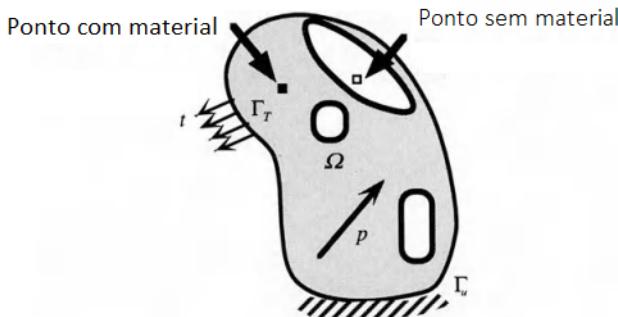


Figura 3.1 – Problema generalizado de distribuição de material (25).

Seja o problema de elasticidade linear:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma + \mathbf{f} &= \mathbf{0}, \\ \sigma &= 2\mu\varepsilon + \lambda \text{tr}(\varepsilon) \mathbf{I}, \\ \varepsilon(\mathbf{u}) &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde μ é o módulo de cisalhamento e λ é o primeiro parâmetro de Lamé do material. Considerando uma tração t sobre o contorno Γ do domínio, obtém-se a forma fraca:

$$\int_{\Omega} \varepsilon(\mathbf{v})^T \mathbf{D} \varepsilon(\mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} d\Gamma, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{D} = 2\mu + \lambda\mathbf{I}$ é o tensor de rigidez. A forma fraca é separada em um operador bilinear $a(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ e um operador linear $\ell(\mathbf{v})$:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \varepsilon(\mathbf{v})^T \mathbf{D} \varepsilon(\mathbf{u}) d\Omega, \quad (3.3)$$

$$\ell(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} d\Gamma. \quad (3.4)$$

Para modelar este problema sob a ótica de otimizar topologicamente a distribuição de material, há de se considerar que a massa do material ocupa um subconjunto de Ω , chamado Ω^{mat} , e a tarefa é encontrar a escolha ótima do tensor \mathbf{D} , que agora é tratado como variável do problema. Sob estas considerações, o problema de *compliance mínima* toma a forma de:

$$\begin{aligned} & \min_{u \in C^n(\Omega), \mathbf{D}_{\text{ad}}} \ell(\mathbf{u}), \\ & \text{tal que: } a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \forall v \in C^n(\Omega) \\ & \mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{ad}}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde n é uma continuidade arbitrária e aceitável para as funções de base do problema, e \mathbf{D}_{ad} é o conjunto de tensores \mathbf{D} admissíveis.

3.1.1 Parametrização

Como o interesse é definir a distribuição ótima de material no espaço, é intuitivo que se deve ter uma função cujos parâmetros sejam coordenadas espaciais e sua imagem seja 1 se há material ou 0 se há vazio. Para que este requisito seja cumprido, Bendsøe e Sigmund (8) propõem a definição do tensor \mathbf{D} como:

$$\mathbf{D} = 1_{\Omega^{\text{mat}}} \mathbf{D}^0, \text{ onde}$$

$$1_{\Omega^{\text{mat}}} = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in \Omega^{\text{mat}} \\ 0 & \text{se } x \in \Omega \setminus \Omega^{\text{mat}} \end{cases}, \quad (3.6)$$

com a restrição de massa adicional de:

$$\int_{\Omega} 1_{\Omega^{\text{mat}}} d\Omega = \text{Vol}(\Omega^{\text{mat}}) \leq V, \quad (3.7)$$

em que $\Omega \setminus \Omega^{\text{mat}}$ é a região do domínio que representa o vazio, $\text{Vol}(\Omega^{\text{mat}})$ é o volume de material e V é um limite de material que pode ser usado no problema, que pode ser utilizado como um volume fixo ou uma restrição do problema de otimização.

3.2 ABORDAGEM SIMP

Em um cenário de uso do método dos elementos finitos, funções com valores discretos como a anteriormente apresentada podem levar a problemas de concepção ou mesmo numéricos. Dada esta afirmação, o problema de compliância mínima é adaptado considerando a função $1_{\Omega^{\text{mat}}}$ como uma função penalizada que leva o valor para a proximidade de valores discretos 0 ou 1 (8). Desta forma, a matriz de rigidez depende de uma função contínua que é interpretada como a densidade “artificial” do material. O modelo de Material Isotrópico Sólido com Penalização (SIMP) é a mais popular dessas abordagens, e modela o tensor de rigidez como:

$$\mathbf{D} = c(\mathbf{x})^p \mathbf{D}^0 \quad , p > 1, \quad (3.8)$$

$$\int_{\Omega} c(\mathbf{x}) d\Omega \leq V; \quad 0 \leq c(\mathbf{x}) \leq 1, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.9)$$

onde a densidade normalizada $c(\mathbf{x})$ é a função de projeto do problema.

No método SIMP, a escolha de $p > 1$ é feita de modo que densidades intermediárias sejam penalizadas para que a rigidez obtida seja pequena comparada ao volume do material. É prática comum escolher $p > 3$ (8). Em termos abrangentes, o uso de um esquema de interpolação como o SIMP permite a conversão do problema de compliância mínima em um problema de *dimensionamento* em um domínio *fixo*. O SIMP permite a redução do número de restrições no problema de otimização para apenas uma: a de volume constante. Desta forma, condições de optimalidade do problema podem ser facilmente obtidas para a minimização da compliância.

3.2.1 Condições de Optimalidade

Reescrevendo o problema de compliância mínima em uma abordagem SIMP e introduzindo uma densidade normalizada mínima c_{\min} para a prevenção de singularidades, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{u} \in C^n(\Omega), c} \ell(\mathbf{u}), \\ & \text{tal que: } a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in C^n(\Omega), \\ & \mathbf{D}(\mathbf{x}) = c(\mathbf{x})^p \mathbf{D}^0, \\ & \int_{\Omega} c(\mathbf{x}) d\Omega \leq V; \quad 0 < c_{\min} \leq c \leq 1. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Usando as restrições do problema, pode ser escrita a função de Lagrange:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \ell(\mathbf{u}) - \{a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \ell(\mathbf{v})\} + \lambda_1 \left(\int_{\Omega} c(\mathbf{x}) d\Omega - V \right) + \dots \\ & \dots + \int_{\Omega} \lambda_2(\mathbf{x})(c(\mathbf{x}) - 1) d\Omega + \int_{\Omega} \lambda_3(\mathbf{x})(c_{\min} - c(\mathbf{x})) d\Omega, \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ são os multiplicadores de Lagrange. Nota-se que λ_2 e λ_3 são funções de \mathbf{x} , já que são multiplicadores ortogonais à densidade, que também é uma função espacial. As condições de optimalidade em relação ao deslocamento \mathbf{u} são que $\mathbf{v} = \mathbf{u}$. Para c , as condições de optimalidade são:

$$\varepsilon(\mathbf{u})^T \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial c} \varepsilon(\mathbf{u}) = \lambda_1 + \lambda_2(\mathbf{x}) + \lambda_3(\mathbf{x}), \quad (3.12)$$

com $\lambda_2, \lambda_3 \geq 0$, $\lambda_2(c_{\min} - c(x)) = 0$ e $\lambda_3(c(x) - 1) = 0$. Para densidades entre c_{\min} e 1, as condições da Equação 3.12 podem ser simplificadas em:

$$\varepsilon(\mathbf{u})^T p c(x)^{p-1} \mathbf{D}^0 \varepsilon(\mathbf{u}) = \lambda_1, \quad (3.13)$$

que implica que a energia de deformação é constante e igual a λ_1 para todas as densidades intermediárias (8). Dessa forma, a condição é similar à condição totalmente tensionada. É esperada que áreas de alta energia possuam baixa rigidez, portanto se cria um esquema de

atualização da densidade, como o esquema iterativo:

$$c_{i+1} = \begin{cases} \max\{(1 - \xi)c_i, c_{\min}\} & \text{se } c_i B_i^\eta \leq \max\{(1 - \xi)c_i, c_{\min}\}, \\ \min\{(1 + \xi)c_i, 1\} & \text{se } \min\{(1 + \xi)c_i, 1\} \leq c_i B_i^\eta, \\ c_i B_i^\eta & \text{se não,} \end{cases} \quad (3.14)$$

onde c_i é o valor da densidade no passo iterativo i e B_i é dado por:

$$B_i = \lambda_1^{-1} p c(\mathbf{x})^{p-1} \varepsilon(\mathbf{u}_i)^T \mathbf{D}^0 \varepsilon(\mathbf{u}_i), \quad (3.15)$$

onde \mathbf{u}_i é a solução do problema elástico no passo iterativo i , e é dependente de $c(\mathbf{x})$. A variável η é um parâmetro de ajuste e ξ um limite de movimentação por iteração. Ambas variáveis controlam as mudanças que podem acontecer a cada passo e são ajustáveis. Valores típicos usados são $\eta = 0,5$ e $\xi = 0,2$ (8).

Dado um código de elementos finitos, o Algoritmo 2 permite uma maneira rápida de realizar otimização topológica com poucas linhas de código. Diversas outras abordagens de SIMP existem, mas a forma geral é esta aqui apresentada. As formas diferentes divergem quanto às maneiras de interpolar dados e calcular o problema de minimização.

Algoritmo 2 Método SIMP com condições de otimalidade

Entrada: $c(\mathbf{x})$: Distribuição inicial de material

```

enquanto criterio_de_parada == FALSO faça
    i++
    Calcular  $u_i(c_i(\mathbf{x}))$  — Solução do problema de elasticidade
    Calcular  $\ell_i(\mathbf{u}_i)$  — Compliância da iteração
    se  $|\ell_i - \ell_{i-1}| <$  tolerância então
        criterio_de_parada = VERDADE
    fim
senão
    Atualizar  $c_{i+1}(\mathbf{x})$  de acordo com a Equação 3.15 e calcular  $\lambda_1$ 
fim
```

3.2.2 Dificuldades típicas do SIMP

Procedimentos como o SIMP, que dependem da distribuição de material, possuem duas principais dificuldades: o surgimento de tabuleiros de xadrez¹ e dependências de malha (8). Padrões de xadrez são regiões onde sólido e vazios se alternam em um padrão que remete ao tabuleiro do jogo. Este problema está relacionado à discretização do problema contínuo original. Dependência de malha é um fenômeno que, para tamanhos de malhas diferentes, soluções ótimas diferentes são obtidas. Matematicamente, pode-se atingir mínimos locais diferentes da função compliância alterando-se o tamanho de malha do problema, o que implica que a obtenção de um mínimo global pode ser difícil. O problema de dependência de malha está relacionado à existência de soluções do problema contínuo (8).

Refinamento de Malha e existência de soluções

A otimização de estruturas através do SIMP é difícil em um padrão geral pois, numa configuração contínua, a minimização da compliância carece da existência de soluções. A razão para isso é que, ao introduzir mais furos sem mudança do volume estrutural, a estrutura aumentará sua eficiência. No limite, isso mudará a microestrutura da distribuição material e a estrutura deixará de ser isotrópica. Desta forma, ela não pode ser representada pela formulação e descrição original do problema. Existe uma ausência de fechamento do conjunto de soluções admissíveis (8). Em computações numéricas, isso pode ser visto como uma instabilidade numérica onde um grande número de furos começam a surgir quando uma malha mais fina é empregada, e, portanto, a sensibilidade a esquemas de refinamento de malha. Refinamento de malha, no entanto, é fundamental para a convergência de métodos de Galerkin, sendo o principal preditor de erros na aproximação da solução. Portanto, na realização da otimização topológica é necessário estar ciente desta troca entre existência de solução e refinamento de malha. Felizmente, abordagens para mitigar este problema existem. Isso é geralmente feito através de uma redução no número de soluções admissíveis usando uma res-

¹ Tradução livre de *checkerboard*

trição local ou global na variação da densidade. Bendsøe sugere três técnicas para este procedimento: adicionar restrições no problema original, reduzir diretamente o espaço paramétrico para soluções ou a aplicação de filtros na implementação da otimização (8).

O problema do padrão de tabuleiro

Padrões de tabuleiro geralmente surgem em otimização topológica quando uma implementação direta do método de distribuição de material é usada em soluções baseadas em deslocamento usando o método dos elementos finitos. Dentro do tabuleiro, a densidade dos elementos finitos varia de forma periódica alternando entre elementos vazios e sólidos. Sabe-se que o problema de tabuleiro está relacionado a propriedades da aproximação da solução através de elementos finitos, e mais especificamente devido a uma má modelagem que superestima a rigidez dos tabuleiros(8). Similar à existência das soluções e problemas de refinamento de malha, o problema do tabuleiro pode ser controlado utilizando restrições. A Figura 3.2 mostra o problema de padrão tabuleiro em uma solução com diferentes refinos de malha.

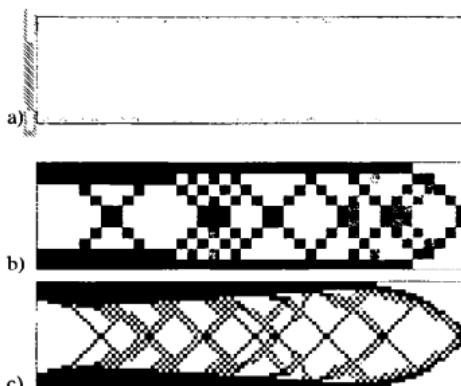


Figura 3.2 – a) Problema da viga em balanço. b) Solução da otimização topológica utilizando 400 elementos, apresentando o fenômeno de tabuleiro. c) Solução da otimização topológica utilizando 6400 elementos, apresentando outro padrão de tabuleiro (8).

3.3 ABORDAGEM POR CAMPO DE FASE

Modelos de campo de fase utilizam modelos matemáticos a fim de resolver problemas interfaciais tais como transformações de fase (26)(27), de mecânica da fratura (28), solidificação (29) e crescimento de dendritos (30). Um dos pontos principais é usar uma variável auxiliar, o parâmetro de ordem, para identificar diferentes fases no domínio. Em um modelo de campo de fase a interface entre as fases é tratada como um objeto de largura finita, tendo propriedades intermediárias. Caracterizar as interfaces dessa forma é considerar a interface como uma *interface difusa*. Isto é, há uma consideração de continuidade entre diferentes regiões no domínio. Seja $\phi \in [0, 1]$ o parâmetro de ordem, onde os extremos identificam fases A ou B presentes. A esquemática de um modelo de campo de fase é representada na Figura 3.3.

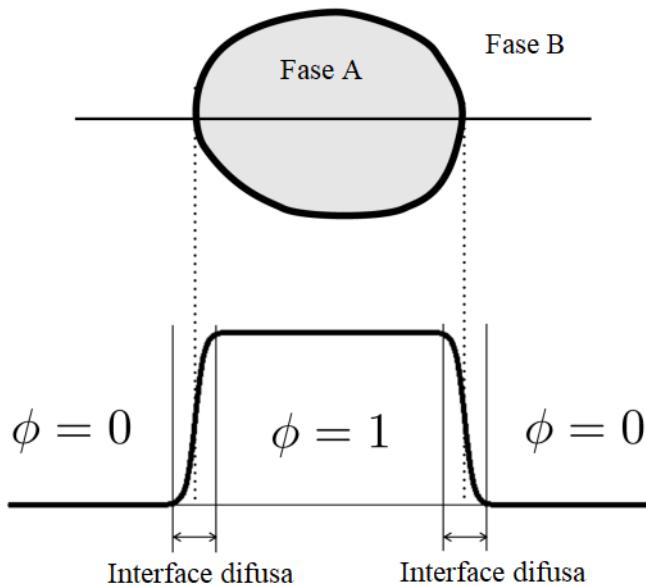


Figura 3.3 – Descrição de um campo de fase (31).

A maioria dos modelos de campo de fase são derivados a

partir de um funcional de energia livre dependente do parâmetro de ordem. A utilização de modelos de campo de fase para otimização topológica tem como princípio o decrescimento energético desse funcional no tempo. Considera-se um funcional energético da forma:

$$E(\phi) = \int_{\Omega} f(\phi) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \phi|^2 d\Omega, \quad (3.16)$$

onde $f(\phi)$ é uma função poço duplo² e λ é um parâmetro proporcional a largura da interface difusa.

Para a otimização estrutural, o que se deseja otimizar é a compliância da estrutura, definida por

$$\ell(\phi, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} d\Gamma = \int_{\Omega} \sigma(\phi, \mathbf{u}) : \epsilon(\mathbf{u}) d\Omega. \quad (3.17)$$

Percebe-se sua dependência do parâmetro de ordem, a qual é justificada pela consideração de que, como deseja-se otimizar topologicamente o domínio inicial, naturalmente para um modelo bifásico uma das fases deve representar a ausência e outra a presença de material e, portanto, as propriedades do tensor de rigidez devem ser dependentes do parâmetro de ordem. Desta maneira, o problema de otimização é abordado sob a ótica de se encontrar a distribuição ótima de fases no domínio. Agora, no entanto, deseja-se minimizar o seguinte funcional generalizado:

$$\begin{aligned} \min \tilde{E}(\phi, \mathbf{u}) &= E(\phi) + \eta \ell(\phi, \mathbf{u}) \\ \text{sujeito a: } \int_{\Omega} \phi d\Omega &= \phi_m |\Omega|, \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde η é a influência total da compliância e ϕ_m um valor médio de ϕ em Ω . Os termos adicionados de 3.16 à função objetivo 3.17 funcionam como uma penalização de perímetro (32), regularizando o problema de minimização e evitando problemas do tipo tabuleiro

² Double well function, do inglês.

de xadrez do método SIMP. A função $f(\phi)$ é uma função poço duplo e, portanto, valores intermediários são maiores do que quando $\phi = 0$ ou $\phi = 1$ e a penalização deve caminhar em direção a uma das fases, dispensando o uso de filtros para o resultado final. A ideia de continuidade da interface entre material e vazio (as duas fases do problema) é prontamente visualizada na Figura 3.4.

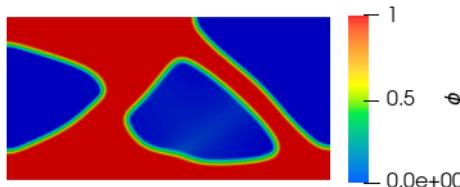


Figura 3.4 – Exemplo de resultado de otimização topológica por um modelo de campo de fase (32).

A fim de que a solução do problema evolua em direção a um mínimo de 3.18 é necessário definir uma equação evolutiva do parâmetro de ordem. As equações normalmente utilizadas são a equação de Cahn-Hilliard e a equação de Allen-Cahn (32), e a solução dessas em conjunto a uma equação de estado (as equações da elasticidade linear) deve minimizar $\tilde{E}(\phi, \mathbf{u})$. O processo de otimização não é tão simples como aparenta. A escolha dessas duas equações tem motivos que remetem ao cálculo variacional e convergência de funcionais (11)(32) e cada uma necessita de cuidados especiais para sua implementação. No próximo capítulo será introduzida a equação de Cahn-Hilliard, que modela o comportamento de misturas bifásicas sem nucleação, sendo utilizada como equação evolutiva do parâmetro de ordem de forma que minimize a função objetivo desejada.

CAPÍTULO 4

EQUAÇÃO DE CAHN-HILLIARD

A equação de Cahn-Hilliard descreve o processo de decomposição espinodal, no qual componentes de uma mistura binária termodinâmica instável se separam espontâneamente em duas fases distintas devido à redução da energia livre do sistema (14). Na decomposição espinodal uma mistura binária se move na direção contrária a gradientes de concentração e tende a formar componentes puros em cada fase. O processo é governado por dois tipos diferentes de energia, uma associada à energia de fases puras e outra à energia de superfície e que são, respectivamente, função da concentração e gradientes de concentração. Para um estudo mais detalhado recomenda-se o trabalho de Cahn (26) e Elliot (33).

De forma a apresentar suas principais características, seja c o parâmetro de ordem que representa a concentração de um dos componentes de uma mistura bifásica. A equação que modela o processo de separação de fase é dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot [M(c)\nabla(f'(c) - \lambda\Delta c)], \quad (4.1)$$

onde $M(c)$ é um parâmetro difusivo conhecido por mobilidade, $f(c)$ é a função densidade de energia livre e o parâmetro λ é responsável por determinar a largura da interface que separa as duas fases do sistema.

A equação de Cahn-Hilliard está associada a um funcional de energia livre de Ginzburg-Landau que descreve a energia total do sistema (33):

$$E(c) = \int_{\Omega} (f(c) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2) d\Omega. \quad (4.2)$$

O primeiro termo da Equação 4.2, $\int_{\Omega} f(c)$, tem influência direta na separação de fases e controla a capacidade de separação do processo, representando a energia livre por volume¹. Já o segundo termo está associado a energia de interface do sistema. A solução da equação de Cahn-Hilliard minimiza o seu funcional de energia associado. O que a torna equivalente a resolver o seguinte problema de minimização:

$$\begin{aligned} & \min E(c) \\ & \text{sujeito a: } \int_{\Omega} c(x) dx = c_m |\Omega|. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dada uma composição média c_m , a sua evolução no tempo deve levar a estados estacionários que serão minimizadores do funcional de energia $E(c)$. É comum representar o termo $f'(c) - \lambda \Delta c$ por μ , o potencial químico da mistura. Pela Lei de Fick o fluxo de massa para o sistema é dado por $J = -M(c) \nabla \mu$. Para um sistema fechado não há fluxo de massa, o que leva a seguinte condição de contorno:

$$M(\nabla \mu) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad \text{em } \partial\Omega, \quad (4.4)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é a normal apontando para fora do contorno $\partial\Omega$. A outra condição de contorno comumente utilizada se dá por

¹ Na literatura é conhecido por *bulk free energy*.

$$(\nabla c) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad \text{em } \partial\Omega. \quad (4.5)$$

Junto às condições de contorno 4.4 e 4.5 e uma concentração inicial $c(x, t = 0) = c_0$, o problema inicial de valor de contorno 4.1 para um sistema fechado se torna bem-posto:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot [M(c)\nabla(f'(c) - \lambda\Delta c)], && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ M(\nabla\mu) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ (\nabla c) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ c(\mathbf{x}, t = 0) &= c_0(\mathbf{x}), && \text{em } \Omega. \end{aligned} \quad (4.6)$$

O uso das condições de contorno de fluxo nulo leva às seguintes propriedades:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} c \, d\Omega = 0, \quad (4.7)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (f(c) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2) \, d\Omega \leq 0. \quad (4.8)$$

Elas representam, respectivamente, a conservação de massa do sistema e o decaimento de seu funcional energético. A futura implementação numérica para solução da equação de Cahn-Hilliard deve, em todo instante de tempo, possuir tais propriedades (34).

4.1 FUNÇÃO DENSIDADE DE ENERGIA

A escolha da função densidade de energia livre, $f(c)$, determina a capacidade do sistema de se separar em duas fases. Ao considerar uma temperatura fixa e menor que uma temperatura crítica, ela deve tomar o formato de uma função poço-duplo e qualquer oscilação na concentração da mistura deve diminuir a energia livre.

A sua derivação por meio da termodinâmica (35) implica que deve ser uma função logarítmica em função da concentração c . No entanto, de forma a facilitar a solução numérica, é comum aproximá-la por um polinômio de quarta ordem como visto na Figura 4.1.

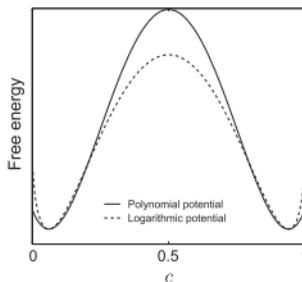


Figura 4.1 – Aproximação da função logarítmica por um polinômio de quarta ordem (35).

Pode-se modelar $f(c)$ através da Equação 4.9, onde α é um parâmetro que dita a influência total da função densidade de energia sobre o sistema e β e γ são parâmetros que controlam seus mínimos.

$$f(c) = \alpha(c - \beta)^2(c - \gamma)^2, \quad \alpha > 0 \text{ e } \gamma > \beta \geq 0. \quad (4.9)$$

4.2 FORMA FRACA

A derivação da forma fraca da Equação 4.1 é obtida ao ponderá-la por funções teste e integrá-la por partes. Seja o produto interno em $L^2(\Omega)$ denotado por (\cdot, \cdot) :

$$(u, v)_\Omega = \int_\Omega u v \, d\Omega, \quad (4.10)$$

junto à função teste $w \in H^2$ é obtido:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial c}{\partial t}, w \right)_\Omega + (M(c) \nabla f'(c), \nabla w)_\Omega + (\lambda \nabla M(c) \Delta c, \nabla w)_\Omega + \\ (\lambda M(c) \Delta c, \Delta w)_\Omega = 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Como são consideradas as condições de fluxo nulo, as integrais no contorno são nulas e foram omitidas.

4.2.1 Formulação Mista

A Equação 4.1 e subsequente forma fraca, Equação 4.11, implicam em derivadas de segunda ordem presentes e consequentemente para formulação em elementos finitos isso implica em pelo menos continuidade C^1 das funções de base. De forma a burlar essa restrição, a Equação 4.1 é separada em um sistema de duas variáveis desconhecidas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot [M(c) \nabla \mu], && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ \mu &= f'(c) - \lambda \Delta c, && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ M(\nabla \mu) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ (\nabla c) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ c(\mathbf{x}, t = 0) &= c_0(\mathbf{x}), && \text{em } \Omega. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Fazendo o mesmo procedimento anterior mas considerando funções teste $w, q \in H^1$, é possível obter a correspondente forma fraca para a formulação mista:

$$CH = \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial c}{\partial t}, w \right)_\Omega + (M(c) \nabla \mu, \nabla w)_\Omega = 0 \\ (\mu, q)_\Omega - (f'(c), q)_\Omega - (\lambda \nabla c, \nabla q)_\Omega = 0. \end{array} \right. \quad (4.13)$$

Ao considerarmos um espaço de dimensão finita de modo que $w^h, q^h \in W^h \subset H^1$ e consequentemente a discretização das

funções por $w^h = \sum_{i=1}^{N_{nós}} w_i \phi_i$, $q^h = \sum_{i=1}^{N_{nós}} q_i \phi_i$, $c^h = \sum_{i=1}^{N_{nós}} c_i \phi_i$ e $\mu^h = \sum_{i=1}^{N_{nós}} \mu_i \phi_i$. É obtido:

$$CH = \begin{cases} \left(\frac{\partial c^h}{\partial t}, w^h \right)_\Omega + \left(M(c) \nabla \mu^h, \nabla w^h \right)_\Omega = 0 \\ \left(\mu^h, q^h \right)_\Omega - \left(f'(c), q^h \right)_\Omega - \left(\lambda \nabla c^h, \nabla q^h \right)_\Omega = 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

Embora resolver a equação de Cahn-Hilliard por meio da formulação mista implique em resolvê-la para mais uma variável desconhecida em cada nó, e portanto resultando em maior custo computacional, ela se torna uma escolha útil pois as funções de base necessárias agora devem ser apenas C^0 contínuas. A facilidade de encontrar e lidar com funções de base presentes em pacotes de elementos finitos com continuidade C^0 , tal qual a usual função polinomial de Lagrange definida por partes, é o motivo principal de resolver o problema por tal maneira. A partir desse momento será considerada a utilização da forma mista e sua posterior implementação. Outro aspecto interessante é que, ao contrário da forma direta, resolver o problema a partir de duas equações de segunda ordem acopladas implica que as condições de contorno de fluxo nulo se tornam condições naturais homogêneas e, portanto, satisfeitas automaticamente.

Ainda assim, a formulação presente até o momento não é o bastante para resolver o problema com o método dos elementos finitos. Ela pode ser classificada como uma formulação *semidiscreta*, isto é, embora discretizada espacialmente, ela é contínua no tempo.

4.2.2 Integração no Tempo

Para equação de Cahn-Hilliard, a evolução do sistema no tempo acontece em duas etapas principais: inicialmente, observa-se a rápida separação de fase, minimizando a energia de densidade livre do sistema. Seja o domínio bidimensional limitado $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ e a concentração inicial $c_0 = 0.5 \pm \bar{p}$, onde \bar{p} é uma variação em torno do valor médio. A Figura 4.2 demonstra a solução da equação para diferentes intervalos no tempo.

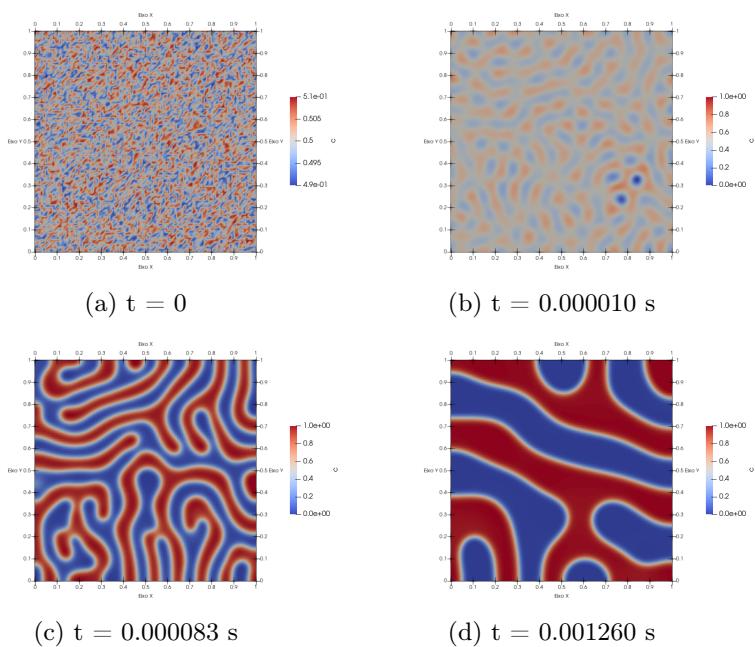


Figura 4.2 – Evolução no tempo da solução da equação de Cahn-Hilliard.

Em um segundo estágio as fases se tornam cada vez maiores, até que o sistema atinja o equilíbrio e minimize o funcional de energia. As partículas menores se dissolvem no domínio e se redepositam em partículas maiores, de modo que a energia de superfície é minimizada ao se reduzir o número de regiões com fases puras. Tal fenômeno é visto na Figura 4.3.

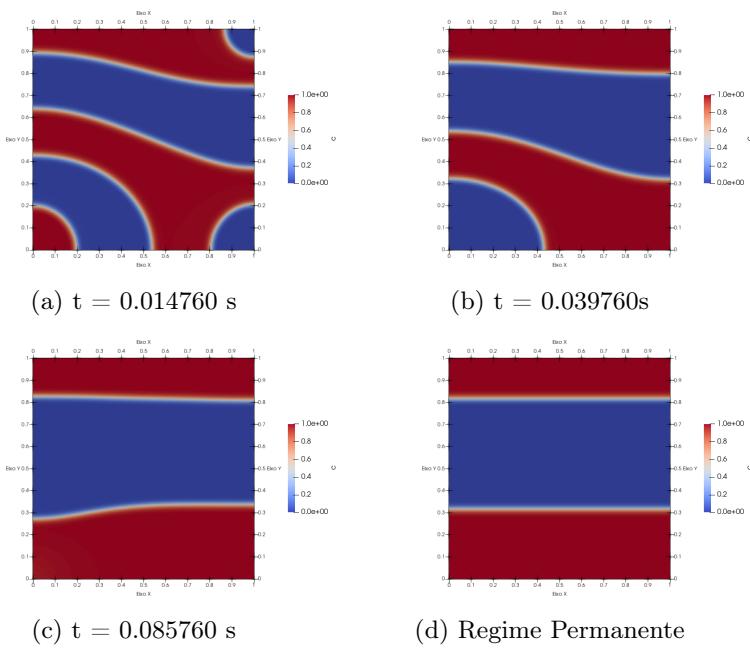
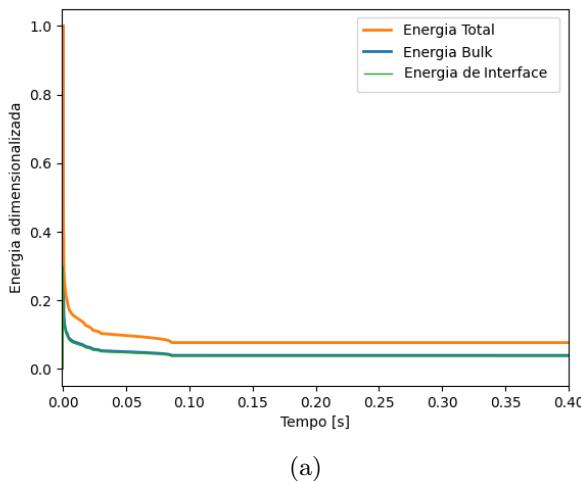
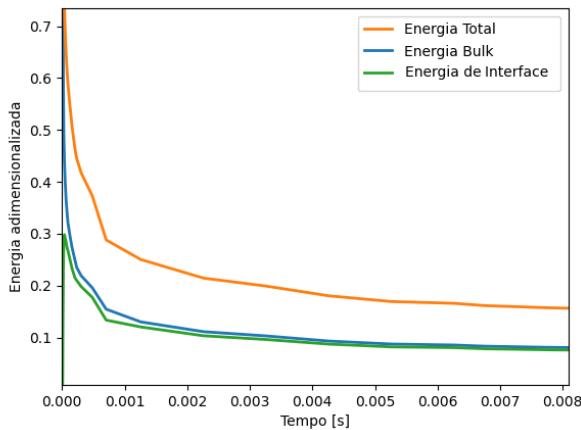


Figura 4.3 – Evolução no tempo da solução da equação de Cahn-Hilliard e regime permanente.

Embora governados pela mesma equação, o primeiro estágio é caracterizado por uma escala de tempo muito menor que o segundo. Pequenas variações nesse estágio inicial podem levar a resultados totalmente diferentes e, dessa forma, é necessário passos no tempo menores. A diminuição da energia livre do sistema acontece de forma muito mais rápida no estágio inicial, quando o número de regiões com fases puras é maior. Na Figura 4.4 é possível observar tal acontecimento. No início da separação praticamente toda energia do sistema é proveniente da energia de densidade livre, a energia de superfície aumenta durante o início devido a formação inicial de fases puras como visto na Figura 4.2b, posteriormente observa-se seu decaimento em conjunto com a energia de densidade livre. Subsequentemente o sistema caminha em direção ao regime permanente, mas de forma muito mais lenta que a observada durante o estágio inicial da separação de fase.



(a)



(b)

Figura 4.4 – (a) Energia pelo tempo. (b) Energia pelo tempo ampliada.

Um método de discretização no tempo para a equação de Cahn-Hilliard deve ser capaz de lidar com as diferentes escalas no tempo associadas, empregando valores razoáveis para passos no tempo junto à resolução da malha.

A escolha de esquemas para integração no tempo é muitas vezes trivial para equações lineares. Normalmente, quanto maior a ordem do método escolhido, mais rapidamente o erro diminui com menores passos de tempo Δt . Em relação a equação de Cahn-Hilliard, devido a natureza não-linear, a escolha do método deve ter principal preocupação com a estabilidade. Valores muito elevados para Δt farão com que a propriedade de decaimento energético 4.8 seja violada. Dessa maneira, qualquer seja o método de integração no tempo escolhido, sempre deverá ser respeitado o decaimento de energia livre do sistema e caso seja esse o caso, o método é considerado estável energeticamente.

Devido ao fato de que métodos explícitos necessitam de passos de tempo menores, $\mathcal{O}(\Delta x^4)$ (sendo Δx o tamanho mínimo de malha), as soluções para a equação de Cahn-Hilliard normalmente empregam métodos implícitos e semi-implícitos. Gómez faz uso do método alfa generalizado e adaptatividade no tempo com base em métodos de Runge-Kutta (36). Vignal faz uma comparação entre diversos métodos na literatura dentre eles o método implícito de Euler (34). Schaefer sugere um método de integração baseado em sucessivas linearizações de um método semi-implícito (37). O método de integração no tempo utilizado nas soluções deste trabalho foi o método semi-implícito de Crank-Nicolson (22). Aplicando-o em 4.14, o agora problema para o sistema totalmente discreto se torna: dado c_n^h, μ_n^h , encontre $c_{n+1}^h, \mu_{n+1}^h \in H^1, \forall w^h, q^h \in W^h$, de modo que seja satisfeito:

$$CH = \begin{cases} \left(\frac{\llbracket c \rrbracket}{\Delta t_{n+1}}, w^h \right)_\Omega + \left(M_{n+\frac{1}{2}} \nabla \mu_{n+\frac{1}{2}}^h, \nabla w^h \right)_\Omega = 0 \\ \left(\mu_{n+1}^h, q^h \right)_\Omega - \left(f'_{n+1}, q^h \right)_\Omega - \left(\lambda \nabla c_{n+1}^h, \nabla q^h \right)_\Omega = 0, \end{cases} \quad (4.15)$$

com $\llbracket c \rrbracket = c_{n+1}^h - c_n^h$, $\mu_{n+\frac{1}{2}}^h = \frac{1}{2}(\mu_{n+1}^h + \mu_n^h)$, $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$ e $M_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(M_{n+1} + M_n)$.

4.3 CAHN-HILLIARD COMO OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA

É possível fazer uso da propriedade de diminuição da energia total do sistema através da equação de Cahn-Hilliard para que ela funcione similar a um algoritmo de minimização. Zhou (38) se aproveita dessa propriedade para acoplar a energia elástica associada a um problema linear estático para a realização de otimização topológica usando a equação de Cahn-Hilliard como algoritmo de busca de mínimos da compliância usando um método multigrid. Dedè (39) aproveita os resultados de Zhou para mostrar que a abordagem funciona em uma formulação variacional. Já Bartels (40) também faz uso da equação de Cahn-Hilliard para analisar seu acoplamento em problemas da mecânica do contínuo.

Valendo-se da ideia de um modelo de campo de fase, considerase um modelo bifásico onde cada fase deve representar um material distinto. Seguindo a ideia do capítulo anterior, deseja-se minimizar um funcional energético da forma:

$$\tilde{E}(c, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} f(c) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 + \eta \sigma(c, \mathbf{u}) : \epsilon(\mathbf{u}) d\Omega, \quad (4.16)$$

onde $\sigma(c, \mathbf{u})$ é o tensor tensão de Cauchy, $\epsilon(\mathbf{u})$ o tensor deformação e \mathbf{u} é solução do problema de elasticidade linear:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \sigma(c, \mathbf{u}) &= \mathbf{f}, && \text{em } \Omega, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0}, && \text{em } \Gamma_D, \\ \sigma(c, \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \mathbf{h}, && \text{em } \Gamma_N, \end{aligned} \quad (4.17)$$

sendo Γ_D o contorno de Dirichlet em que os deslocamentos nulos são impostos e $\Gamma_N := \partial\Omega \setminus \Gamma_D$ a parte do contorno onde há a aplicação de tração. Sob a ótica de buscar a distribuição ótima das fases (que representam os distintos materiais), a solução da equação de elasticidade dependerá de uma distribuição de concentração e, similarmente ao método SIMP, o tensor de rigidez é penalizado por uma função interpoladora:

$$\mathbf{D}(c) = g(c)\mathbf{D}^0.$$

Deseja-se obter uma equação evolutiva para a concentração que sirva de minimizador do funcional energético, Equação 4.16. O potencial químico é, por definição (33), a variação de primeira ordem do funcional energético na direção de c :

$$\tilde{\mu}(c, \mathbf{u}) := \frac{\delta E(c, \mathbf{u})}{\delta c} = \frac{df(c)}{dc} - \lambda \Delta c - \eta \frac{d\sigma(c, \mathbf{u})}{dc} : \epsilon(\mathbf{u}). \quad (4.18)$$

O sistema de Cahn-Hilliard é reescrito para acomodar as mudanças feitas ao funcional energético, obtendo-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot [M(c) \nabla \tilde{\mu}], && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ \tilde{\mu} &= f'(c) - \lambda \Delta c - \eta \frac{d\sigma(c, \mathbf{u})}{dc} : \epsilon(\mathbf{u}), && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ -\nabla \cdot \sigma(c, \mathbf{u}) &= \mathbf{f}, && \text{em } \Omega \times [0, T], \\ M(\nabla \tilde{\mu}) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ (\nabla c) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= 0, && \text{em } \partial\Omega \times [0, T], \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0}, && \text{em } \Gamma_D \times [0, T], \\ \sigma(c, \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \mathbf{h}, && \text{em } \Gamma_N \times [0, T], \\ c(\mathbf{x}, t=0) &= c_0(\mathbf{x}), && \text{em } \Omega. \end{aligned} \quad (4.19)$$

A derivação matemática para se chegar em 4.19 é bem mais complexa do que a aqui apresentada (12)(38)(39), no entanto o importante é seu resultado final: resolver 4.19 significa minimizar o funcional 4.16 e a existência e unicidade de solução de sistemas de Cahn-Hilliard acoplados com termos elásticos é provada (41). Resolver a equação de Cahn-Hilliard com a adição de termos elásticos faz com que o problema se torne semelhante ao problema de otimização da compliância estrutural, salvo os termos energéticos extras que servem para regularizar o problema. Seguindo a ideia da abordagem de campo de fase e se valendo de que o considerado é um modelo bifásico, quando valores da concentração se aproximarem de 1, deve ser interpretado como a presença do material e, naturalmente, valores próximos a 0 indicam a não presença ou vazio.

O termo $\eta\sigma(c, \mathbf{u}) : \epsilon(\mathbf{u})$ da Equação 4.16 corresponde à energia elástica do sistema que está sendo acoplada ao funcional de energia livre. É útil para posterior análise que a energia do sistema seja separada em termos provenientes da equação de Cahn-Hilliard e da equação da elasticidade linear. São separados em energia de Cahn-Hilliard E_{cahn} , formada pelas parcelas de energia por volume E_{volume} e de interface $E_{interface}$, e pela energia elástica $E_{elastica}$, como segue:

$$E_{cahn} = E_{volume} + E_{interface},$$

$$E_{volume} = \int_{\Omega} f(c) d\Omega,$$

$$E_{interface} = \int_{\Omega} \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 d\Omega,$$

$$E_{elastica} = \int_{\Omega} \eta\sigma(c, \mathbf{u}) : \epsilon(\mathbf{u}) d\Omega.$$

A formulação variacional é dada como segue: dado $c_n^h, \tilde{\mu}_n^h$, encontre $c_{n+1}^h \in W^h, \tilde{\mu}_{n+1}^h \in Q^h, \mathbf{u}_{n+1}^h \in \mathbf{V}^h$, de modo que seja satisfeito:

$$TO = \begin{cases} R_c(c^h, w^h) = 0, & \forall w^h \in W^h, \\ R_{\tilde{\mu}}(\tilde{\mu}^h, q^h) = 0, & \forall q^h \in Q^h, \\ R_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) = 0, & \forall \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h, \end{cases} \quad (4.20)$$

com $W^h \subset W := \{w \in H^1 : \nabla w \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0\}$, $Q^h \subset Q := \{q \in H^1 : M\nabla q \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0\}$ e $\mathbf{V}^h \subset \mathbf{V} := \{\mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^d : \mathbf{v}|_{\Gamma_D} = 0\}$. Os resíduos de cada equação são representados por:

$$R_c(c^h, w^h) = \left(\frac{\llbracket c \rrbracket}{\Delta t_{n+1}}, w^h \right)_\Omega + \left(M_{n+\frac{1}{2}} \nabla \tilde{\mu}_{n+\frac{1}{2}}^h, \nabla w^h \right)_\Omega, \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} R_{\tilde{\mu}}(\tilde{\mu}^h, q^h) &= \left(\tilde{\mu}_{n+1}^h, q^h \right)_\Omega - \left(f'_{n+1}, q^h \right)_\Omega - \left(\lambda \nabla c_{n+1}^h, \nabla q^h \right)_\Omega + \dots \\ &\dots + \left(\eta \frac{d\sigma(c, \mathbf{u}_{\mathbf{n+1}}^h)}{dc} : \epsilon(\mathbf{u}_{\mathbf{n+1}}^h), q^h \right)_\Omega, \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$R_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) = \left(\sigma(c_{n+1}^h, \mathbf{u}_{\mathbf{n+1}}^h), \epsilon(\mathbf{v}^h) \right)_\Omega - \left(\mathbf{f}^h, \mathbf{v}^h \right)_\Omega - \left(\mathbf{h}^h, \mathbf{v}^h \right)_{\Gamma_N}, \quad (4.23)$$

onde a Equação 4.21 foi discretizada no tempo com o método de Crank-Nicolson e $\llbracket c \rrbracket = c_{n+1}^h - c_n^h$, $\tilde{\mu}_{n+\frac{1}{2}}^h = \frac{1}{2}(\tilde{\mu}_{n+1}^h + \tilde{\mu}_n^h)$, $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$ e $M_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(M_{n+1} + M_n)$.

4.3.1 Metodologia de solução do problema de otimização

No contexto da equação de Cahn-Hilliard, a solução da equação é também solução do problema de otimização topológica. Não há o uso de algum algoritmo de otimização específico associado à solução do problema de otimização. A otimização ocorre como consequência da solução do sistema de equações obtido. Os passos necessários a fim da obtenção de uma estrutura ótima se tornam:

1. Definir $f(c), \lambda, \eta$.
2. Definir condições de contorno e carregamentos.
3. Definir concentração inicial.
4. Resolver a Equação 4.20.

O problema de otimização agora se torna função dos parâmetros que governam a equação de Cahn-Hilliard: função densidade de energia livre e largura da interface, assim como função dos parâmetros que governam a equação da elasticidade linear. A escolha da função densidade de energia livre representa a capacidade do sistema se separar espontaneamente em duas fases. Valores de magnitude muito baixos resultam em um problema em que a separação

de fases é pouco importante, resultando em valores finais pouco aproveitáveis para a distribuição de material. A escolha do valor da largura da interface entre as fases é essencial para a estabilidade do sistema, além de influenciar diretamente nas dinâmicas de separação de Cahn-Hilliard. Já a escolha de η representa o percentual de energia elástica acoplada ao funcional de energia e deve ser feita de maneira que a ordem de magnitude da energia elástica seja similar com as energias de volume e interface, pois caso contrário o problema é dominado apenas pela separação de fases de Cahn-Hilliard pura.

Definir condições de contorno e carregamentos é um passo usual em qualquer problema de otimização estrutural, fazendo-se necessário para caracterizar diferentes problemas. Quanto a escolha da concentração inicial, é ela própria que serve de restrição volumétrica para o problema. Isso se deve às condições de contorno de fluxo nulo, que resultam que a integral $\int_{\Omega} c(x)dx$ tenha um valor constante em todo intervalo de tempo. Ao definir uma concentração inicial, portanto, uma restrição volumétrica é imposta automaticamente ao problema. Para este trabalho, a concentração inicial é definida como um valor médio acrescido de uma variação em torno deste: $c_0 = c_m \pm \bar{p}$, como visto na Figura 4.5.

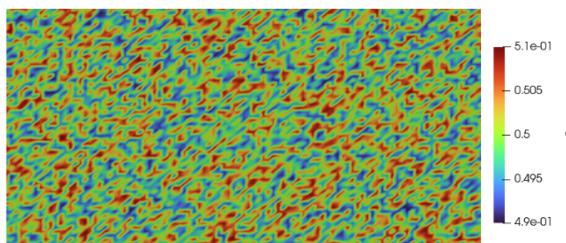


Figura 4.5 – Concentração inicial para o problema da Figura 4.6.

Após a definição desses parâmetros, resta somente resolver a equação evolutiva da concentração. Partindo do pressuposto que a Equação 4.19 é apresentada como uma equação de Cahn-Hilliard generalizada, sua solução segue os pontos abordados na Seção 4.2.2 quanto à integração no tempo e estabilidade energética. A Figura

4.6 mostra os diferentes estágios no tempo em que uma estrutura genérica é otimizada. É característico do método que em valores intermediários no tempo a estrutura formada seja desconexa como visto na Figura 4.6c. Tal fenômeno não é preocupante. Embora evidentemente seja um caso de pouca utilidade para o mundo real, a evolução no tempo da equação de Cahn-Hilliard tende a desaparecer com as regiões de fase puras desconexas de forma a minimizar a energia de interface e o resultado final é visto na Figura 4.6d.

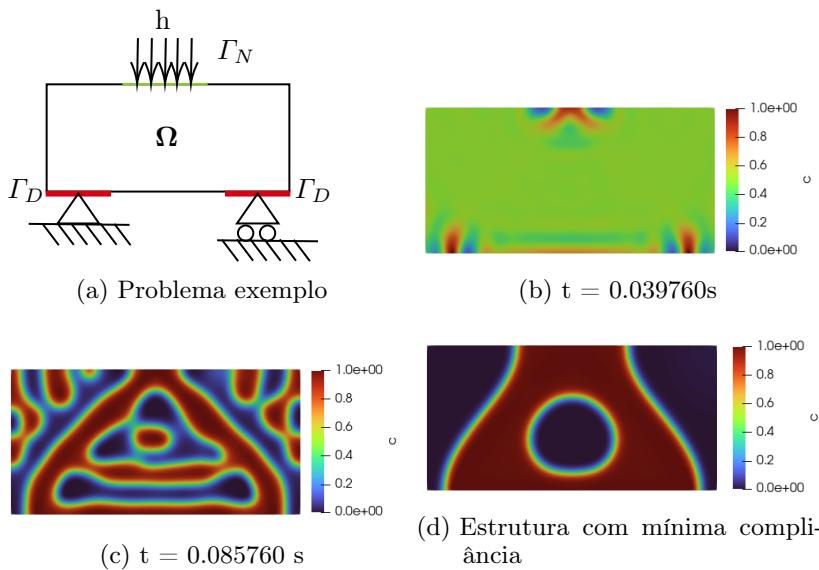


Figura 4.6 – Solução de um problema genérico de otimização topológica estrutural com Cahn-Hilliard.

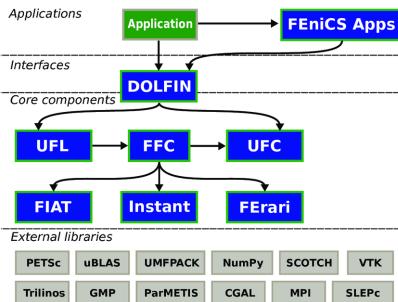
CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A fim de se estudar casos de otimização topológica estrutural utilizando a equação de Cahn-Hilliard, este Capítulo tem como objetivo discutir os resultados e aspectos de implementação de problemas selecionados.

5.1 IMPLEMENTAÇÃO

A implementação computacional se deu por meio do *software FEniCS*. É um projeto de pesquisa e *software* cujo objetivo é auxiliar na criação de métodos matemáticos para solução automatizada de equações diferenciais (42). Consiste em um conjunto de componentes, conforme a Figura 5.1, que são capazes de fornecer meios de trabalhar com formas variacionais, malhas, refinamento de malha, álgebra linear, entre outros. Escrito primariamente na linguagem de programação *C++* e com suporte secundário na linguagem *Python*, um de seus atrativos principais está na facilidade de implementação das formas variacionais.

Figura 5.1 – Componentes do *software* FEniCS (43).

O componente *Unified Form Language* (UFL) é responsável pela implementação de uma linguagem de domínio específica utilizada para declaração de discretizações em elementos finitos de formas variacionais. Com ela se torna possível definir expressões matemáticas para formas fracas de equações com notação quase idêntica à notação matemática (43). De forma geral, o *software* FEniCS é capaz de automatizar a implementação e solução em elementos finitos de equações diferenciais, de forma que não há necessidade de se preocupar com etapas antes trabalhosas como montagem das matrizes locais e globais, quadraturas para integração numérica e geração das funções de base. O alto nível de abstração torna simples e eficiente a escrita do código para solução de equações diferenciais.

5.2 RESULTADOS

Os parâmetros que governam a dinâmica de equação de Cahn-Hilliard foram escolhidos por $\lambda = 0,05$ e $f(c) = 75c^2(1 - c)^2$. Os parâmetros referentes a equação da elasticidade linear foram $E = 1000N/m^2$, coeficiente de Poisson $\nu = 0,3$ e $\eta = 0,5$. A escolha desses parâmetros seguiu uma abordagem iterativa a partir de sucessivos testes, visto que só há garantia para convergência para valores específicos desses (38)(39). Todos os exemplos são para o caso de estado plano de tensões. A função penalizadora do tensor de rigidez escolhida foi $g(c) = c^n$ e foi usado um valor mínimo para a concentração de $c_{min} = 10^{-4}$ para evitar problemas com instabilidades. A tolerância utilizada no Método de Newton foi de 10^{-5} com

um número máximo de 20 iterações.

5.2.1 Viga em balanço

O primeiro caso, representado na Figura 5.2, é uma viga engastada em uma extremidade e com força atuando no ponto médio da outra, em que L e H estão relacionados na razão 2:1. Como restrição volumétrica, o valor escolhido foi de $V = 0,5|\Omega|$ e $n = 3$ para a função penalizadora de rigidez.

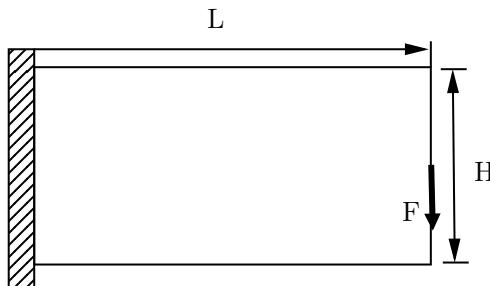


Figura 5.2 – Viga engastada com força na extremidade.

Os resultados da otimização obtidos com a equação de Cahn-Hilliard são apresentados na Figura 5.3 para passos sucessivos no tempo.

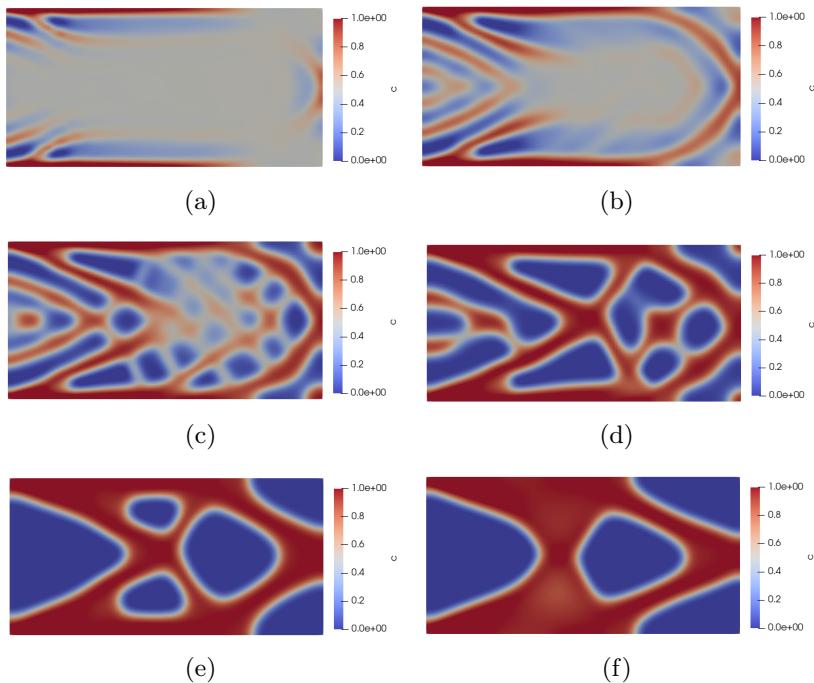


Figura 5.3 – Evolução no tempo para a viga em balanço.

É possível observar a tendência de formação de estruturas do tipo treliça como na Figura 5.3c, embora devido aos parâmetros escolhidos a equação caminha em direção a um mínimo energético que diminui o número de regiões com fases puras. A energia elástica acoplada serve como indicação da direção que deve se dirigir a separação de fases, de modo a minimizar a energia elástica, como visto nas Figuras 5.3a e 5.3b. Mesmo assim, como consequência de o funcional de energia 4.16 minimizar a energia como um todo, o mínimo elástico, representado na Figura 5.3e, é obtido em um intervalo de tempo anterior ao final e a energia de interface (superfície) continua a ser minimizada, em conjunto à energia total, até atingir o regime permanente na Figura 5.3f. A Figura 5.4 mostra a evolução da energia com o tempo, enquanto que na Figura 5.4a é possível ver sua evolução até o regime permanente, na Figura 5.4b é mostrado o ponto em que o mínimo elástico é atingido.

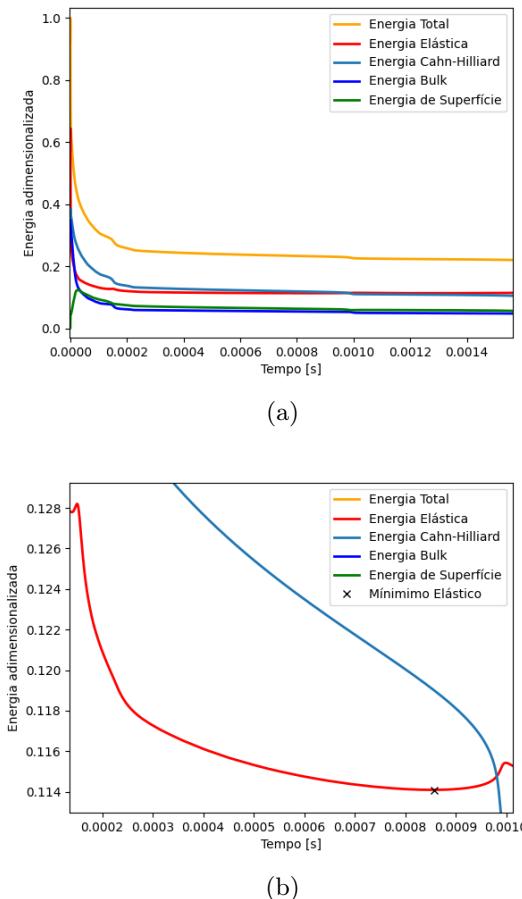


Figura 5.4 – Evolução da energia no tempo do problema da Figura 5.3.
 (a) Energia pelo tempo. (b) Energia pelo tempo ampliada e mínimo elástico.

5.2.2 Viga em balanço assimétrica

O mesmo problema anterior foi considerado, mas com força aplicada no ponto inferior da extremidade. A nova configuração está representada na Figura 5.5 e os resultados na Figura 5.6.

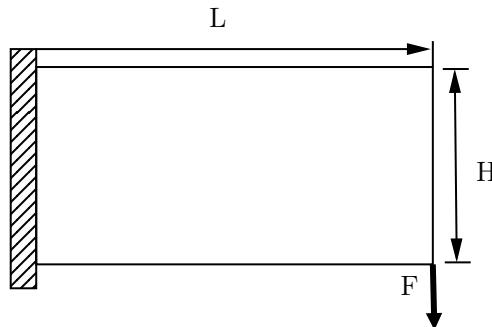


Figura 5.5 – Viga engastada com força na extremidade.

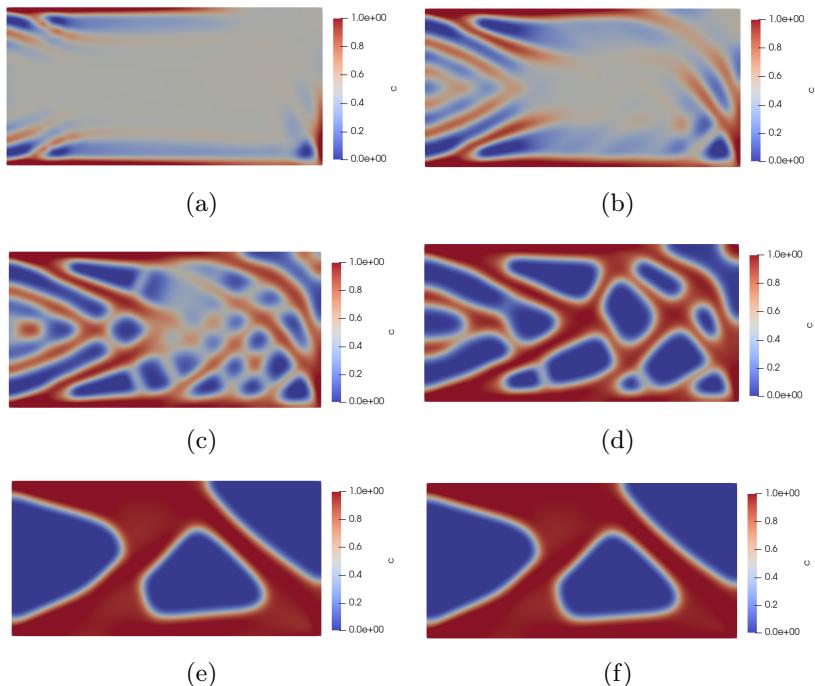


Figura 5.6 – Evolução no tempo para a solução do problema da Figura 5.5.

O motivo principal de apresentar um problema tão similar ao anterior é para demonstrar a influência da energia elástica sobre resultado final. Para a equação de Cahn-Hilliard pura, a energia por

volume, caracterizada pela função de densidade de energia livre, é a força motriz que dá início à separação de fases. Isto é, como a energia do sistema deve sempre diminuir, a única maneira de formar novas fases (e portanto gerar novas interfaces) é *consumir* a energia por volume em uma taxa maior que a energia gerada pelas interfaces. Agora, entretanto, ao considerar também a energia elástica do sistema, a energia elástica também deve se comportar como força motriz para a separação inicial de fases como visto nas Figuras 5.6a e 5.6b. O mínimo elástico é representado pela Figura 5.6e, enquanto que o mínimo global pela Figura 5.6f. Embora imperceptível, a Figura 5.6f apresenta uma leve variação em relação à Figura 5.6e devido à minimização da energia de interface. A Figura 5.7 mostra a evolução da energia do sistema no tempo, junto ao ponto em que o mínimo elástico é obtido.

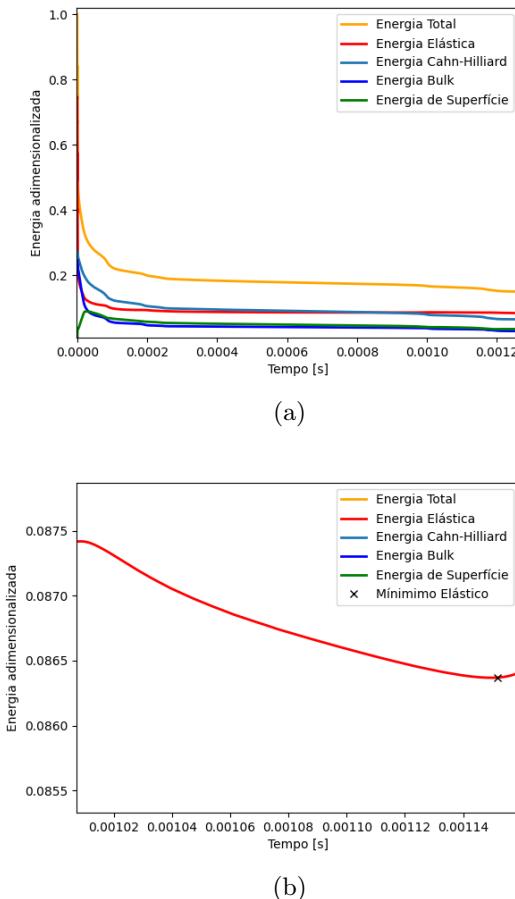


Figura 5.7 – Evolução da energia no tempo do problema da Figura 5.6.
 (a) Energia pelo tempo. (b) Energia pelo tempo ampliada e mínimo elástico.

5.2.3 Ponte

O problema a seguir é inspirado no trabalho de Dedè (39) e apresentado na Figura 5.8. São aplicadas 3 forças uniformemente separadas e de mesma magnitude. Na extremidade inferior esquerda há restrição total de deslocamentos, enquanto que no ponto oposto há restrição apenas em uma direção. A razão de L e H é de 4:1 e a

restrição de volume se dá por $V = 0,4|\Omega|$. Resultados sucessivos no tempo são apresentados na Figura 5.9.

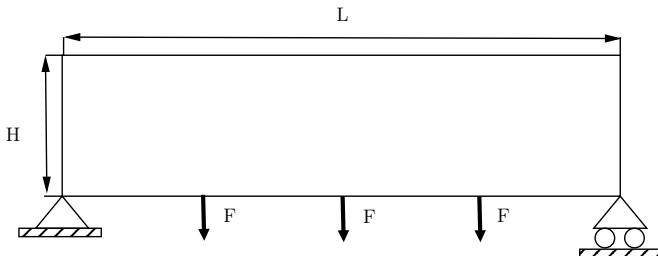


Figura 5.8 – Domínio considerado e condições de contorno.

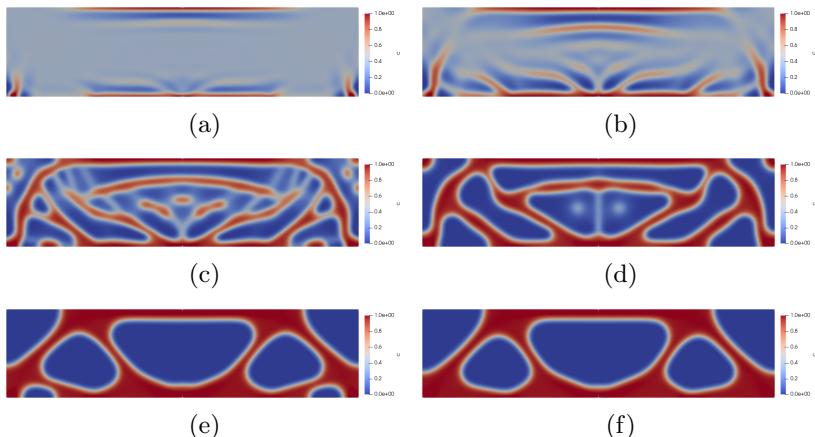


Figura 5.9 – Evolução no tempo para a solução.

Na Figura 5.9c o sistema aparenta que pode formar mais regiões nucleadas, o que acaba por não se concretizar como visto pela Figura 5.6d. A solução da Equação 4.20 minimiza a energia do sistema, independente se é elástica, de volume ou interface. Isso, portanto, demonstra a alta dependência e sensibilidade do problema de otimização quanto aos parâmetros selecionados como comentado no Capítulo anterior. O mínimo elástico é a Figura 5.9e e o mínimo global, Figura 5.9f, é uma configuração muito similar em que o sistema busca diminuir o número de regiões com fases puras, minimizando

a energia de interface total. Na Figura 5.10 é possível observar a evolução a energia do sistema no tempo.

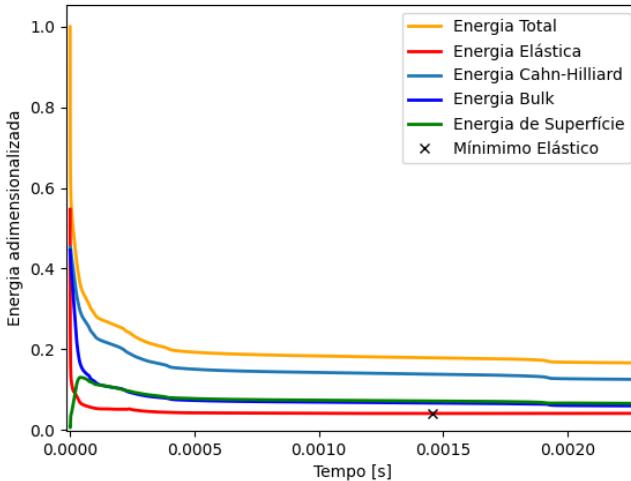


Figura 5.10 – Evolução da energia no tempo.

5.2.4 Viga MBB

O próximo caso considerado é a clássica viga MBB (44), sua configuração é representada na Figura 5.11. A razão de L e H é de 6:1 e a restrição de volume se dá por $V = 0,4|\Omega|$.

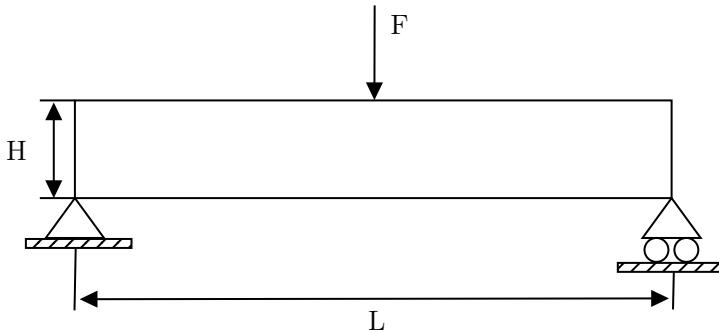


Figura 5.11 – Domínio considerado e condições de contorno.

Através da simetria do problema, o domínio utilizado para a simulação é reduzido à metade e os resultados para passos sucessivos no tempo são dados a seguir na Figura 5.12.

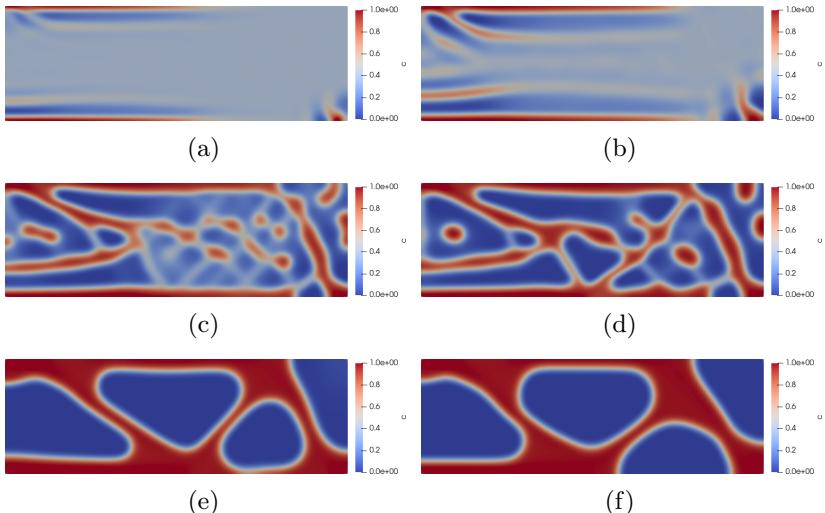


Figura 5.12 – Evolução no tempo da solução do problema.

Tanto na Figura 5.12c como Figura 5.12d pode ser observada de forma clara a dinâmica de evolução do sistema imposta pela equação de Cahn-Hilliard. A aparição de regiões com valores intermediários de concentração indica possíveis estruturas a serem formadas e o mínimo elástico é visto na Figura 5.12e junto ao mínimo global obtido na Figura 5.12f. A evolução da energia no tempo é dada na Figura 5.13.

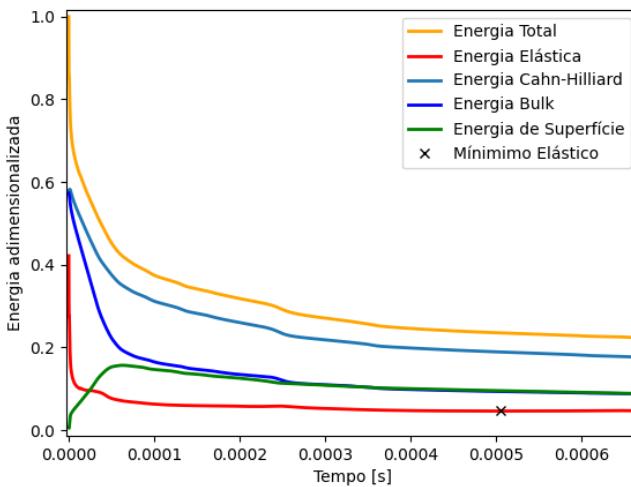


Figura 5.13 – Evolução da energia no tempo.

5.2.5 Treliça de Michel

O problema a seguir (45) é apresentado na Figura 5.14. Uma força é aplicada no ponto médio da extremidade inferior, enquanto que é biapoiada nos extremos inferiores. Aproveitou-se da simetria do problema para realizar a simulação, modelando-se apenas metade da estrutura. A restrição de volume utilizada se dá por $V = 0,35|\Omega|$.

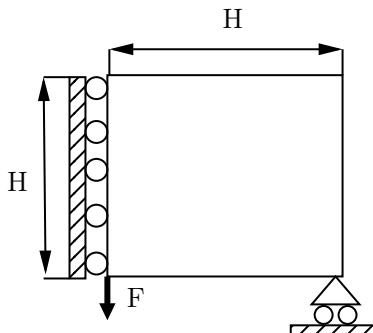


Figura 5.14 – Domínio considerado e condições de contorno.

A Figura 5.15 mostra a evolução da energia do sistema no tempo, junto ao ponto de mínimo elástico. O mínimo elástico é obtido em um período de tempo muito inferior ao total, seguindo portanto a tendência da minimização da energia de interface até atingir o mínimo energético total. A Figura 5.16 mostra a evolução no tempo da solução. Nas Figuras 5.16b, 5.16c e 5.16d é possível perceber que, embora há o aparecimento de regiões com valores intermediários que indicam possíveis caminhos que pode tomar a evolução da concentração, a minimização energética caminha em direção oposta. A Figura 5.17 demonstra tal acontecimento. O mínimo elástico obtido é representado na Figura 5.16e e o mínimo energético global pela Figura 5.16f.

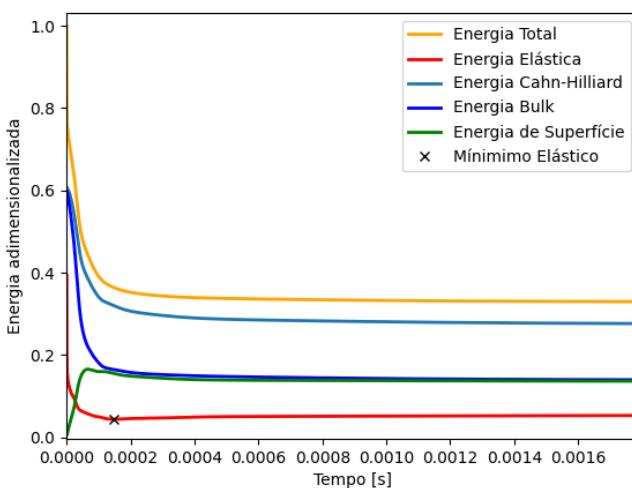


Figura 5.15 – Evolução da energia no tempo.

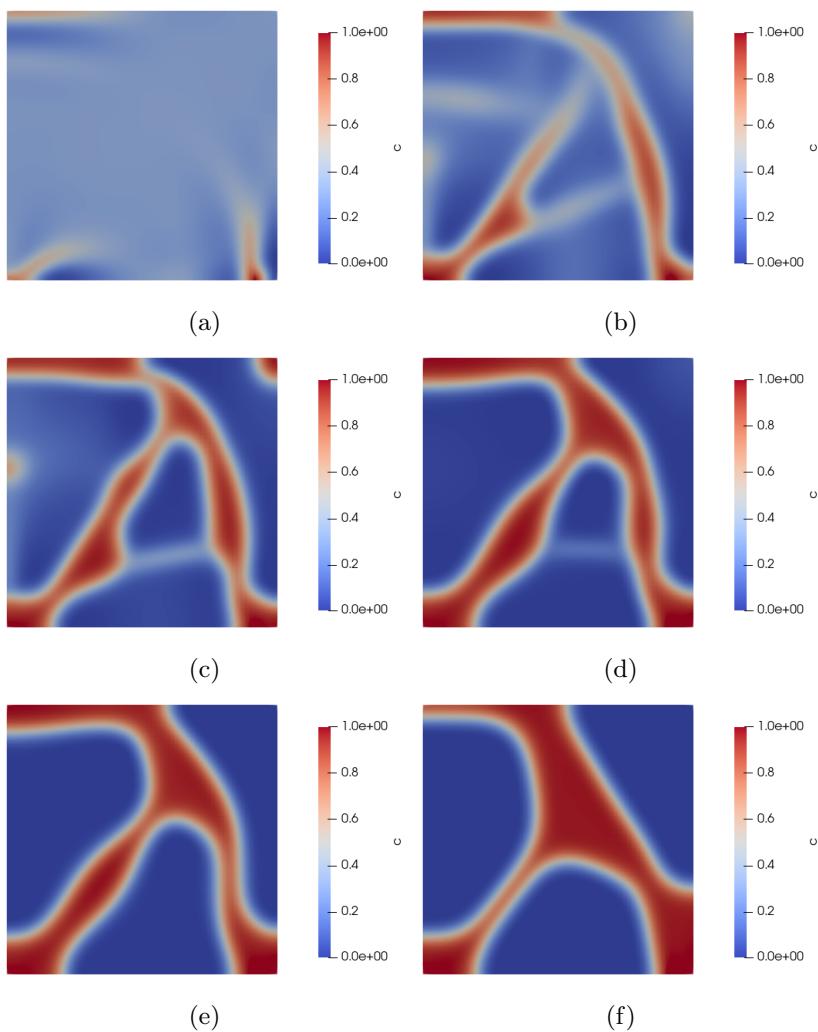


Figura 5.16 – Evolução no tempo da solução.

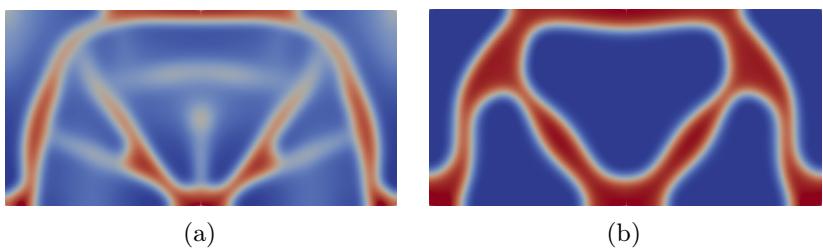


Figura 5.17 – Comparaçāo de solução intermediária e a mínima elástica.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi introduzida a abordagem por campo de fase de otimização topológica estrutural utilizando a equação de separação de fases de Cahn-Hilliard, uma equação não-linear que tem como propriedade o decaimento do funcional de energia associado. A equação de Cahn-Hilliard depende de vários aspectos de implementação que foram discutidos brevemente durante esse trabalho. Sob o contexto de otimização topológica estrutural, o problema se torna dependente não somente das condições de contorno e parâmetros vindos da equação da elasticidade, mas também dos parâmetros associados à dinâmica de separação de fases da equação de Cahn-Hilliard. Esses parâmetros devem garantir que haja um equilíbrio entre energia elástica e energias de interface e volumétrica, cabendo ao usuário defini-lo.

Como quem dita a dinâmica de separação de fases e otimização do problema é a equação de Cahn-Hilliard, as escalas de tempo associadas são totalmente diferentes. Isto é, a maior parte da minimização da energia elástica acontece em um intervalo de tempo muito pequeno quando comparado ao extenso período necessário para atingir o mínimo energético global. Isso leva à necessidade de ser implementada algum tipo de adaptatividade no tempo, o que

não foi feito neste trabalho. O método de discretização no tempo implementado foi o de Crank-Nicolson e que, embora de segunda ordem no tempo, tende a não amortecer erros de alta frequência tão rapidamente. Como a equação de Cahn-Hilliard é rígida, necessitando de passos de tempo menores para estabilidade, isso pode levar a problemas quando passos de tempo altos demais são empregados (46).

Devido à necessidade de funções de base com continuidade no mínimo C^1 e restrições presentes no *software* FeniCS, a equação de Cahn-Hilliard foi separada em um sistema de duas equações de segunda ordem acopladas. Embora seja uma solução de fácil implementação, ao inserir mais uma variável desconhecida no problema observa-se um custo computacional adicional desnecessário. Utilizar funções de base de maior continuidade como *B-splines* no contexto da Análise Isogeométrica é uma das soluções (36).

Ao contrário do método SIMP, o método de otimização topológica baseado na equação de Cahn-Hilliard não necessita de técnicas extras para regularizar o problema de otimização. Problemas típicos como dependência de malha e padrões tabuleiro não são presentes e o resultado é obtido como solução direta do acoplamento das equações da elasticidade linear na equação de Cahn-Hilliard. Mesmo assim, como deve ser resolvida uma equação de quarta ordem, não-linear e dependente do tempo, o custo computacional é um dos principais fatores que o limitam. Uma implementação inteligente, que leva em conta principalmente esquemas adaptativos de tempo, é imprescindível para ser competitivo com o método SIMP.

A natural continuidade desse trabalho é a expansão e implementação do método em problemas em três dimensões, assim como a implementação de um esquema de integração temporal mais robusto tal como o método alfa generalizado e utilizar funções de base com maior continuidade. Almeja-se futuramente analisar sua utilidade na aplicação de otimização de sistemas sob carregamentos dinâmicos.

REFERÊNCIAS

- 1 BENDSØE, Martin P. Optimal shape design as a material distribution problem. **Structural optimization**, Springer, v. 1, n. 4, p. 193–202, 1989.
- 2 GHABRAIE, Kazem. Applications of topology optimization techniques in seismic design of structure. **Structural Seismic Design Optimization and Earthquake Engineering: Formulations and Applications**, IGI Global, p. 232–268, 2012.
- 3 BENDSØE, Martin Philip; KIKUCHI, Noboru. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 71, n. 2, p. 197–224, 1988.
- 4 WANG, Michael Yu; WANG, Xiaoming; GUO, Dongming. A level set method for structural topology optimization. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 192, n. 1-2, p. 227–246, 2003.
- 5 NOVOTNY, Antonio André; SOKOŁOWSKI, Jan. **An introduction to the topological derivative method**. [S.l.]: Springer, 2020.
- 6 DEATON, Joshua D; GRANDHI, Ramana V. A survey of structural and multidisciplinary continuum topology optimization: post 2000. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 49, n. 1, p. 1–38, 2014.
- 7 SILVA JUNIOR, Olavo Mecias da. **Otimização topológica em problemas de vibrações harmônicas forçadas utilizando potência de entrada**. 2017. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Santa Catarina, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

- 8 BENDSØE, Martin Philip; SIGMUND, Ole. **Topology optimization: theory, methods, and applications.** [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2003.
- 9 ANDREASSEN, Erik et al. Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 43, n. 1, p. 1–16, 2011.
- 10 BOURDIN, Blaise; CHAMBOLLE, Antonin. Design-dependent loads in topology optimization. **ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations**, EDP Sciences, v. 9, p. 19–48, 2003.
- 11 WANG, Michael Yu; ZHOU, Shiwei. Phase field: a variational method for structural topology optimization. **CMES-Computer Modeling in Engineering and Sciences**, v. 6, n. 6, p. 547, 2004.
- 12 TAKEZAWA, Akihiro; NISHIWAKI, Shinji; KITAMURA, Mitsuru. Shape and topology optimization based on the phase field method and sensitivity analysis. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 229, n. 7, p. 2697–2718, 2010.
- 13 CARRATURO, Massimo et al. Graded-material design based on phase-field and topology optimization. **Computational Mechanics**, Springer, v. 64, n. 6, p. 1589–1600, 2019.
- 14 CAHN, John W.; HILLIARD, John E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial Free Energy. **The Journal of Chemical Physics**, v. 28, n. 2, p. 258–267, 1958.
- 15 REDDY, B. D. **Introductory functional analysis: with applications to boundary value problems and finite elements.** [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 27.
- 16 HRENNIKOFF, Alexander. Solution of problems of elasticity by the framework method. **Journal of Applied Mechanics**, American Society of Mechanical Engineers, 1941.
- 17 COURANT, Richard et al. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. **Lecture notes in pure and applied mathematics**, MARCEL DEKKER AG, p. 1–1, 1943.

- 18 TURNER, M. J. et al. Stiffness and deflection analysis of complex structures. **Journal of the Aeronautical Sciences**, v. 23, n. 9, p. 805–823, 1956.
- 19 ZIENKIEWICZ, Olgierd Cecil et al. **The finite element method**. [S.l.]: McGraw-hill London, 1977. v. 3.
- 20 COURANT, Richard. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. **Bulletin of the American mathematical Society**, American Mathematical Society, v. 49, n. 1, p. 1–23, 1943.
- 21 STUART, Andrew M; PEPLOW, AT. The dynamics of the theta method. **SIAM journal on scientific and statistical computing**, SIAM, v. 12, n. 6, p. 1351–1372, 1991.
- 22 CRANK, John; NICOLSON, Phyllis. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 1. MATHEMATICAL proceedings of the Cambridge philosophical society. [S.l.: s.n.], 1947. v. 43, p. 50–67.
- 23 BISWAS, BN et al. A discussion on Euler method: A review. **Electronic Journal of Mathematical Analysis and Applications**, v. 1, n. 2, p. 2090–2792, 2013.
- 24 CHUNG, J.; HULBERT, G. M. A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: the generalized- α method. **Journal of Applied Mechanics**, v. 60, n. 2, p. 371–375, 1993.
- 25 BENDSØE, Martin Philip. **Optimization of structural topology, shape, and material**. [S.l.]: Springer, 1995. v. 414.
- 26 CAHN, John W. On spinodal decomposition. **Acta metallurgica**, Elsevier, v. 9, n. 9, p. 795–801, 1961.
- 27 ALLEN, Samuel M; CAHN, John W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. **Acta metallurgica**, Elsevier, v. 27, n. 6, p. 1085–1095, 1979.
- 28 BORDEN, Michael J et al. A phase-field description of dynamic brittle fracture. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 217, p. 77–95, 2012.

- 29 BOETTINGER, William J et al. Phase-field simulation of solidification. **Annual review of materials research**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 32, n. 1, p. 163–194, 2002.
- 30 SUZUKI, Toshio et al. Phase-field model of dendritic growth. **Journal of Crystal Growth**, Elsevier, v. 237, p. 125–131, 2002.
- 31 KOBAYASHI, Ryo. A brief introduction to phase field method. In: AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS, 1. AIP Conference Proceedings. [S.l.: s.n.], 2010. v. 1270, p. 282–291.
- 32 BLANK, Luise et al. Phase-field approaches to structural topology optimization. In: CONSTRAINED optimization and optimal control for partial differential equations. [S.l.]: Springer, 2012. P. 245–256.
- 33 ELLIOTT, C. M. The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation. In: MATHEMATICAL models for phase change problems. [S.l.]: Springer, 1989. P. 35–73.
- 34 VIGNAL, Philippe et al. An energy-stable time-integrator for phase-field models. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 316, p. 1179–1214, 2017.
- 35 LEE, Dongsun et al. Physical, mathematical, and numerical derivations of the Cahn–Hilliard equation. **Computational Materials Science**, Elsevier, v. 81, p. 216–225, 2014.
- 36 GÓMEZ, Héctor; CALO, VM; HUGHES, TJR. Isogeometric analysis of phase-field models: Application to the cahn-hilliard equation. In: SPRINGER. ECCOMAS Multidisciplinary Jubilee Symposium. [S.l.: s.n.], 2009. P. 1–16.
- 37 SCHAEFER, Robert et al. A new time integration scheme for Cahn-Hilliard equations. **Procedia Computer Science**, Elsevier, v. 51, p. 1003–1012, 2015.
- 38 ZHOU, Shiwei; WANG, Michael Yu. Multimaterial structural topology optimization with a generalized Cahn–Hilliard model of multiphase transition. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, Springer, v. 33, n. 2, p. 89–111, 2007.
- 39 DEDÈ, Luca; BORDEN, Micheal J; HUGHES, Thomas JR. Isogeometric analysis for topology optimization with a phase

- field model. **Archives of Computational Methods in Engineering**, Springer, v. 19, n. 3, p. 427–465, 2012.
- 40 BARTELS, Alexander; KURZEJA, Patrick; MOSLER, Jörn. Cahn–Hilliard phase field theory coupled to mechanics: Fundamentals, numerical implementation and application to topology optimization. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 383, p. 113918, 2021.
- 41 GARCKE, Harald. **On Mathematical Models For Phase Separation In Elastically Stressed Solids**. [S.l.], 2000.
- 42 LANGTANGEN, Hans Petter; LOGG, Anders. **Solving PDEs in python: the FEniCS tutorial I**. [S.l.]: Springer Nature, 2017.
- 43 LOGG, Anders; MARDAL, Kent-Andre; WELLS, Garth. **Automated solution of differential equations by the finite element method: The FEniCS book**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 84.
- 44 BULMAN, S; SIENZ, J; HINTON, E. Comparisons between algorithms for structural topology optimization using a series of benchmark studies. **Computers & structures**, Elsevier, v. 79, n. 12, p. 1203–1218, 2001.
- 45 JOO, Younghwan; YU, Yonggyun; JANG, In Gwun. Unit Module-Based Convergence Acceleration for Topology Optimization Using the Spatiotemporal Deep Neural Network. **IEEE Access**, IEEE, v. 9, p. 149766–149779, 2021.
- 46 SHAHRIARI, Bobak. **The modified Cahn-Hilliard equation on general surfaces**. 2010. Tese (Doutorado) – Science: Department of Mathematics.

APÊNDICE A

PROGRAMA DA VIGA EM BALANÇO

```
1 #EXEMPLO VIGA EM BALANCO
2 #AUTOR: ANDRE DEMETRIO DE MAGALHAES
3
4 import random
5 from dolfin import *
6 from matplotlib import pyplot as plt
7
8 class d1_1(SubDomain):
9     def inside(self,x,on_boundary):
10         return (on_boundary and near(x[0],0.0))
11
12 class h1(SubDomain):
13     def inside(self,x,on_boundary):
14         return (on_boundary and near(x[0],2.0)
15             and x[1] > 0.4 and x[1] < 0.6)
16
17 class InitialConditions(UserExpression):
18     def __init__(self, **kwargs):
19         random.seed(2 + MPI.rank(MPI.comm_world))
20         super().__init__(**kwargs)
```

```
20     def eval(self,values, x):
21         values[0] = 0.5 +0.02*(0.5 - random.random())
22         values[1] = 0.0
23         values[2] = 0.0
24         values[3] = 0.0
25     def value_shape(self):
26         return (4,)
27
28 #we could've defined user expressions and then split c
29 #and mu, and interpolate
30 #or project it for initial conditions
31
32 #parameters
33 lmbdaa = 0.05 #interface
34 dt = 2.0e-07
35 theta = 0.5
36
37 E = 1e3
38 nu = 0.3
39 mu_lame = E/2/(1+nu)
40 lmbda = E*nu/(1+nu)/(1-2*nu) #lamè
41 n = 3
42
43 #compiler options
44 parameters["form_compiler"]["optimize"] = True
45 parameters["form_compiler"]["cpp_optimize"] = True
46
47 def eps(v):
48     return sym(grad(v))
49
50 def sigma(v):
51     return lmbda*tr(eps(v))*Identity(2) +
52             2.0*mu_lame*eps(v)
53
54 #mesh and function space
55 #quadrilateral or triangle for the mesh
```

```
55 NELx = 96
56 NELY = 60
57 mesh = RectangleMesh.create([Point(0.0,0.0), \
58 Point(2.0,1.0)], [NELx,NELY], \
59 CellType.Type.quadrilateral)
60 P1 = FiniteElement("Lagrange", mesh.ufl_cell(), 1)
61 PV = VectorElement("Lagrange", mesh.ufl_cell(), 1)
62 #we assign a mesh and a mixed elemnt to our function
       space
63 mixed = MixedElement([P1, P1, PV]) #0 and 1 for rho and
       mu, 3 for disp
64 ME = FunctionSpace(mesh, mixed)
65 #trial and test functons
66 du = TrialFunction(ME)
67 q, v, w = TestFunctions(ME)
68
69 #functions
70 u = Function(ME) #u = (c_n+1, mu_n+1, d_n+1)
71 u0 = Function(ME) #u_0 = (c_n, mu_n, d_n)
72
73 #split mixed functions, they are references to u!
74 dc, dmu, dd = split(du)
75 c, mu, d = split(u)
76 c0, mu0, d0 = split(u0)
77
78 u_init = InitialConditions(degree=1)
79 u.interpolate(u_init)
80 u0.interpolate(u_init)
81
82 #bcs
83
84 #dirichlet
85 bcl = DirichletBC(ME.sub(2), Constant((0.0,0.0)), d1_1())
86 bc = bcl
87
88 #neumann
89 boundaries = MeshFunction('size_t', mesh,
```

```
        mesh.topology().dim()-1,0)
90 boundaries.set_all(0)
91
92 h1b = h1()
93 h1b.mark(boundaries,1)
94 ds = ds(subdomain_data = boundaries)
95
96 #neumann load
97 g = Constant((0.0,-1))
98 f_ = Constant((0.0,0.0)) #there's no body loads
99
100 #chemical potential
101 c = variable(c)
102 f = 75*c**2*(1-c)**2 #see other functions
103 dfdc = diff(f,c) #we could differentiate it by hand as
104      well
105 #mu_(n+theta)
106 mu_mid = (1.0-theta)*mu0 + theta*mu #since theta is set
107      to 0.5, cranck-nicholson
108 hh = conditional(le(c0,0.0001),0.0001,c0)
109 L0 = c*q*dx - c0*q*dx + dt*dot(grad(10*mu_mid),
110      grad(q))*dx
111 L1 = mu*v*dx - dfdc*v*dx - lmbdaa*dot(grad(c),
112      grad(v))*dx \
113 + (0.5)*inner((n*c0** (n-1))*sigma(d),eps(d))*v*dx
114 L2 = inner((hh**n)*sigma(d), eps(w))*dx
115      -inner(g,w)*ds(1)
116 F = L0 + L1 + L2
117
118 mass_ = c*dx
119 t = 0.0
120 T = 3000*dt
121
122 x = 0
```

```
121 strainEnergy = 0.5*inner(c**n*sigma(d0),eps(d0))*dx
122 freeEnergy = (f + lmbdaa*inner(grad(c),grad(c)))*dx
123
124 cFile = File("cantilever/c.pvd")
125 while (t < T):
126     t += dt
127     u0.assign(u)
128     solve(F == 0, u, bc,
129           solver_parameters={"newton_solver":\
130           {"relative_tolerance":1e-5,"maximum_iterations":20}})
131     E = assemble(strainEnergy)
132     print(E)
133     E2 = assemble(freeEnergy)
134     print(E2)
135     mass = assemble(mass_)
136     print(mass)
137     x +=1
138     print(x)
139     cFile << u.split()[0]
```