

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE OTIMIZAÇÃO PARA CARACTERIZAÇÃO MECÂNICA DE MATERIAIS NÃO-LINEARES

Lino Umberto Marques Junior

linoumberto@gmail.com

***Resumo.** O projeto propõe estudar o método da otimização para caracterização de materiais não-metálicos de estruturas com geometrias complexas, as quais apresentam distribuição de tensão e deformação não-uniforme. Para isso, foram realizados testes experimentais em PVC, cujos dados foram utilizados no modelamento inverso desse polímero e, assim, possibilitar a identificação dos parâmetros que descrevem o comportamento mecânico desse material. Os testes experimentais foram do tipo compressão e tração (ambos quasi-estáticos). O método de otimização estudado obteve os parâmetros ótimos de três modelos de materiais implementados no código comercial de elementos finitos LS-Dyna e assim, pôde ser definido aquele cuja resposta numérica mais se adequa ao comportamento do material escolhido.*

***Palavras chave:** otimização matemática, método dos elementos finitos, polímeros (materiais).*

1. Introdução

Em diversas ocasiões se faz necessária a caracterização mecânica de peças ou objetos dos quais não é possível obter um corpo de prova normalizado.

Em grande parte dos casos, isso ocorre devido a restrições provenientes do processo de fabricação.

Assim, diversos trabalhos propõem métodos de caracterização de um material com geometria complexa sem precisar produzir um corpo de prova normalizado.

Mahnken et al (1996a) diz que o desenvolvimento de modelos de materiais consiste de duas partes: primeiro, um modelo matemático é formulado de acordo com os fenômenos físicos observados em um experimento. E segundo, a identificação das constantes do material em estudo baseada nos dados experimentais se torna imprescindível, o que na terminologia matemática é chamada de problema inverso.

Recentemente, a identificação desses parâmetros vem sendo auxiliada pelo uso de simulações com elementos finitos e uma aproximação comum para a solução do problema inverso é considerar a identificação dos parâmetros como um problema de otimização.

Mahnken et al (1996b) centrou seu trabalho na identificação de parâmetros para modelos de materiais inelásticos. Para se estimar possíveis não-uniformidades nas distribuições de tensão e deformação, a identificação é desempenhada se utilizando do método dos elementos finitos. Procedimentos de linearização são descritos de maneira sistemática para casos de modelos de materiais complexos junto a uma teoria linear geométrica. Assim, essa aproximação permite aplicar o método de Newton para resolver o problema direto associado e a aplicar os métodos dos gradientes para resolver problemas inversos associados.

Kajberg et al (2004) apresentou um método de caracterização de materiais submetidos a grandes deformações, cujos níveis de instabilidade plástica são superiores aos registrados em testes de tração normalizados. O processo de deformação dos corpos de prova (chapas finas de aço laminado) é registrado através da técnica de Fotografia de Pontos Digitais (digital speckle photography - DSP).

Kajberg et al (2007) mostrou um método de obtenção estimada de parâmetros de materiais viscoplásticos sob condições de alta taxa de deformação. Para isso, realiza ensaios de impacto com a barra de Hopkinson em espécimes de aço-carbono e, através do método dos mínimos quadrados, minimiza a diferença dos valores experimentais e dos obtidos por simulação.

O seguinte trabalho propõe um procedimento de obtenção de parâmetros ótimos de leis constitutivas para modelos de materiais a partir de engenharia reversa.

Primeiramente, serão definidos alguns conceitos básicos da teoria de otimização. Depois serão apresentados alguns métodos de otimização probabilísticos.

Em seguida, serão definidos quais materiais serão utilizados nesse projeto. Após essa escolha, são realizados testes quasi-estáticos para a caracterização dos materiais.

São explicados o conceito de modelamento inverso e o funcionamento do algoritmo de otimização. São detalhadas as hipóteses adotadas no modelo de elementos finitos e o modo que foram estimados os valores iniciais dos modelos.

Por fim, será feita a identificação paramétrica do material em três modelos distintos de material e serão verificadas dentre as respostas aquela que melhor representa o comportamento do material.

2. Otimização

No cotidiano, as pessoas se deparam com problemas que demandam a melhor solução possível afim de diminuir tempo, recursos, etc. Para se chegar a tal solução é necessário analisar os parâmetros dos quais o problema depende.

Uma possível abordagem seria analisar os resultados de todas as combinações prováveis desses parâmetros e assim obter a solução desejada. Tal abordagem é factível para problemas simples, com uma pequena quantidade de parâmetros. Caso se tenha um problema complexo, com milhares de parâmetros por exemplo, torna-se inviável executar essa abordagem.

Assim, para tais casos complexos, utiliza-se outra abordagem, denominada *síntese* ou *otimização*. Essa abordagem consiste em realizar uma busca sistemática da solução ótima entre as diversas configurações possíveis, através de um algoritmo numérico, e assim tornar o resultado independente do analista, além de reduzir drasticamente o tempo despendido em encontrar tal solução.

Para a formulação de um problema de otimização, é importante entender os seguintes conceitos:

- Variáveis de projeto: são os parâmetros do problema cuja alteração modifica a solução do sistema. Exemplo: diâmetro de um tubo de aço. Podem ser classificadas como contínuas e discretas. Voltando ao tubo como exemplo, só é possível encontrar certos valores de diâmetro no mercado (variável discreta), enquanto pode-se cortá-lo em qualquer comprimento (variável contínua).
- Função objetivo: quantifica o que se quer otimizar e é função das variáveis de projeto escolhidas. Pode ser simples (há apenas um objetivo) ou multi-objetivo (otimizam-se dois ou mais objetivos de uma só vez).
- Restrições: são as limitações impostas para se obter a solução otimizada.
- Domínio viável e inviável: domínio é definido como a região em que se localizam as soluções do problema. Domínio viável é a parte do domínio em que as restrições são respeitadas, enquanto que domínio inviável, a parte em que alguma restrição não é respeitada.
- Ponto ótimo: é definido pelo vetor das variáveis de projeto que otimizam a função objetivo satisfazendo as restrições do modelo. O valor ótimo é o valor da função objetivo no ponto ótimo. A solução ótima é o par ordenado ponto ótimo e valor ótimo. A solução ótima pode ser local ou global, dependendo das condições de optimalidade a serem satisfeitas numa vizinhança do ponto ou em toda a região de factibilidade.

De forma resumida, a otimização pode ser definida como o objetivo de encontrar a combinação ótima de parâmetros que melhor satisfaça a função objetivo e ao mesmo tempo as restrições. Matematicamente, o problema de otimização pode ser colocado como:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar ou Maximizar } f(x) \\ & \text{tal que } \begin{cases} h_k = 0 \\ h_k \leq 0 \\ h_k \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

onde $f(x)$ - é a função objetivo que se deseja maximizar ou minimizar, $h_k = 0$ - restrição de igualdade, $h_k \leq 0$ e $h_k \geq 0$ - restrições de desigualdade.

Num problema de otimização nem sempre todas as restrições estão ativas ou em alguns casos não há restrições.

Uma restrição é considerada ativa quando $h_k = 0$ e inativa quando $h_k > 0$.

Outra maneira de saber se uma restrição está ativa ou não está relacionada ao multiplicador de Lagrange, λ_i , que indica a importância de cada restrição. Dessa forma, se $\lambda_i = 0$ a restrição i é inativa (não necessária no problema) e se $\lambda_i \neq 0$, então a restrição i é ativa (necessária).

No final do processo de otimização, todas as restrições devem estar ativas, caso contrário as que estão inativas não seriam *a priori* necessárias ao problema. Há casos nos quais existem restrições ativas que podem ser eliminadas sem alterar o resultado final. Porém, é difícil saber antecipadamente quais restrições influenciam ou não no resultado e por isso todas devem ser mantidas.

2.1. Métodos probabilísticos

De acordo com Stander et al (2008), na abordagem de um projeto convencional, um projeto é melhorado através da análise de sua resposta e, baseado em experiência e intuição, sofre mudanças de projeto. Tal abordagem nem sempre conduz ao “melhor” projeto, visto que os objetivos de projeto são por vezes conflitantes entre si, além da falta de clareza de como se deve alterar o projeto para se alcançar o melhor ajuste desses objetivos. Uma abordagem mais sistemática pode ser obtida ao se usar um processo inverso de primeiro se especificar os critérios e depois computar o “melhor” projeto. O procedimento em que os critérios de projeto são incorporados como objetivos e restrições em um problema de otimização é chamado de projeto ótimo.

Dentre as diversas metodologias disponíveis para adaptar a otimização a este ambiente de projeto, a *Metodologia de Superfície de Resposta* (do inglês *Response Surface Methodology* - RSM), um método estatístico para a construção de aproximações suaves de funções pertencentes a um espaço multi-dimensional, alcançou grande destaque nos últimos anos. Em vez de recorrer a informações locais como um gradiente único, RSM seleciona projetos que estão otimamente distribuídos por todo o espaço de projeto para construir superfícies aproximadas ou “fórmulas de projeto”. Assim, o efeito local causado por “ruído” é atenuado e o método tenta achar uma representação da resposta de projeto com um espaço de projeto limitado ou uma região menor de interesse. Esta extração de informações globais permite ao projetista explorar o espaço de projeto utilizando formulações de projeto alternativas. Por exemplo, pode-se investigar o efeito de variação de um parâmetro enquanto se monitora a resposta de outro fator. Pode-se também restringir a resposta desse outro fator enquanto se minimiza ou se maximiza um terceiro parâmetro. Tais critérios podem receber pesos de acordo com suas importâncias e então o espaço de projeto pode ser explorado mais amplamente.

Parte do desafio em se desenvolver um programa de projeto reside no fato dos projetistas nem sempre serem capazes de definir o problema de projeto. Em alguns casos, os critérios de projeto podem ser regulamentados pela segurança ou por outras considerações e então uma resposta precisa ser restringida para um valor específico. Estes podem ser

facilmente definidos como equações matemáticas de restrição. Em outros casos, critérios fixos não são avaliados, mas o projetista sabe se a resposta deve ser minimizada ou maximizada.

Arquiteturas modernas de hardware freqüentemente apresentam múltiplos processadores e tudo indica que a demanda por processamento paralelo tende a ser reforçada no futuro. Tal fato está causando uma revolução na computação quando simples análises que demoravam dias para serem resolvidas poucos anos atrás podem agora ser feitas em poucas horas. RSM é eficaz, uma vez que cada projeto pode ser analisado independentemente durante uma iteração particular.

A Metodologia de Superfície de Resposta (RSM) demanda a análise de um pré-determinado espaço de projetos. Uma superfície de projeto é ajustada aos valores de resposta por meio de regressão. Aproximações dos mínimos quadrados são comumente utilizadas para esse propósito. As superfícies de resposta são então usadas para construir uma aproximação do “subproblema” de projeto o qual pode ser otimizado.

O método de superfície de resposta conta com o fato de o espaço de projeto no qual ele atua ser bem selecionado. Projetos selecionados aleatoriamente podem causar a construção de uma superfície imprecisa ou até mesmo anular a capacidade de construir uma superfície. Em virtude das simulações serem por vezes dispendiosas em tempo de processamento e poderem levar dias para processarem, a eficiência global do processo de projeto conta fortemente com a seleção apropriada de um espaço de projeto no qual possa fundamentar suas aproximações. Para o propósito de determinar os projetos individuais, a teoria de planejamento de experimentos (Delineamento de Experimentos, do inglês *Design of Experiments* - DOE) é necessária. Diversos critérios de planejamento de experimentos estão disponíveis sendo que um dos mais populares para um espaço de projeto arbitrariamente modelado é o critério de optimalidade-D (*D-optimality*). Este critério possui a flexibilidade de permitir qualquer número de projetos a ser alocado apropriadamente em um espaço de projeto com um contorno irregular. O entendimento do critério de optimalidade-D requer a formulação de um problema de mínimos quadrados.

3. Escolha do material

Como critério na seleção do material utilizado no projeto, ponderou-se em utilizar um material não-metálico de comportamento não-linear. Com esse intuito, foi escolhido um material polimérico termoplástico, o PVC, polímero considerado duro e tenaz.

Tal polímero é caracterizado por elevado limite de escoamento, elevada resistência à tração e elevado módulo de elasticidade. Usualmente apresenta alongamento considerável, na maior parte das vezes devido ao “empescoamento” do material.

3.1. Comportamento visco-elástico dos plásticos

De acordo com Higgins (1982), para um material perfeitamente elástico (Hookeano) a tensão, σ , é diretamente proporcional à deformação ε . Para tensão e deformação uniaxial, a relação pode ser apresentada por:

$$\sigma = E \cdot \varepsilon$$

onde E representa o *Módulo de Elasticidade* do material.

Já para um fluido perfeitamente viscoso (Newtoniano) a tensão cisalhante, τ , é diretamente proporcional à taxa de deformação $\dot{\gamma}$ e essa relação pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\tau = \mu \cdot \dot{\gamma}$$

sendo μ a viscosidade do fluido.

Os materiais poliméricos apresentam comportamento intermediário em relação aos dois casos acima citados. Portanto, eles são classificados como *visco-elásticos*. Nesses materiais, a tensão é função tanto da deformação quanto do tempo e é representada por uma função de forma:

$$\sigma = f(\varepsilon, t)$$

representando assim, um *comportamento visco-elástico não-linear*.

A característica mais peculiar dos materiais visco-elásticos é o fato de exibirem deformação dependente do tempo quando submetidos à tensão constante (fluência) e tensão dependente do tempo quando submetidos à deformação constante (relaxação). Tais materiais também possuem habilidade de retornar a seu estado inicial ao se remover a solicitação aplicada.

3.2. Poli cloreto de vinila (PVC)

O poli cloreto de vinila é produzido através do processo de polimerização por adição, onde diversas unidades de um composto orgânico simples (monômero) chamado cloreto de vinila reagem ente si. Nessa reação, há a ruptura de duplas

ligações e formação de duas novas ligações simples. Assim, não há formação de subprodutos.

O PVC exibe características peculiares como boa resistência a choques e a reagentes químicos, bom isolante térmico, acústico e elétrico, além de ser auto-extinguível.

Dentre as diversas áreas de aplicação do material, destacam-se a construção civil, segmento que necessita de produtos competitivos, econômicos energeticamente e de longa vida útil, e a médica, onde é utilizado há décadas em bolsas de sangue e soro, tubos endotraqueais e outros.

4. Caracterização quasi-estática

Para se validar uma lei constitutiva de um material quando este é submetido a um determinado carregamento, é necessário realizar ensaios experimentais com esse material para verificar se o seu comportamento real é descrito de maneira correta por essa lei.

Quando o carregamento é aplicado a uma velocidade constante ou com uma aceleração desprezível, diz-se que esse teste é *quasi-estático*.

Para a caracterização do PVC, foram realizados Testes de Tração e de Compressão.

4.1. Metodologia dos ensaios

Os ensaios de tração e compressão foram realizados na máquina de ensaios Instron pertencente ao Grupo de Mecânica dos Sólidos e Impacto em Estruturas (GMSIE) da Universidade de São Paulo.

Para cada configuração, foram preparados dois corpos de prova do material.

Durante os ensaios, um extensômetro é utilizado para se determinar a distância entre dois pontos do comprimento de estrição do corpo de prova. O extensômetro é de modelo estático GL 25, com gage length de 25 mm e um percurso de +12,5 mm / -2,5 mm.

O procedimento dos ensaios de tração e compressão foi baseado nas normas ASTM D 638 – 00 (2001) e ASTM D 695 – 96 (2001), respectivamente. De acordo com a origem do material do espécime, a norma de tração apresenta espécimes de seção transversal retangular (Figura (1)), circular ou tubular. A norma de compressão sugere que os corpos de prova tenham a forma de um cilindro (ou prisma) com altura igual a duas vezes o principal diâmetro (ou espessura). A partir de uma placa de 10 mm de espessura dos materiais, foram usinados espécimes com 6 mm de diâmetro e 12 mm de altura (Figura (1)).

O ensaio de tração consiste em fixar as extremidades do corpo de prova por meio de garras. A garra inferior é imóvel, enquanto a garra superior se desloca axialmente ao corpo com velocidade constante e sentido contrário à garra fixa, provocando assim a extensão do material. No ensaio de compressão, em vez de garras, há pratos planos que, em contato com as faces planas do corpo de prova cilíndrico, se movem um contra o outro. De modo análogo ao ensaio de tração, o prato inferior não se move. Já o prato superior se desloca agora no sentido do outro prato com velocidade constante e assim, comprime o corpo de prova.

No teste de tração o extensômetro é fixado diretamente no corpo de prova, mais precisamente no seu comprimento de estrição (região central – Figura (1)). Já nos testes de compressão, dois suportes de aço são fixados em cada prato da máquina de ensaio e neles é instalado o extensômetro com uma pré-extensão próxima ao seu valor máximo. Assim, no decorrer do experimento, sua extensão é diminuída até uma condição próxima de seu estado não-deslocado.

A velocidade do teste é designada como a taxa de deslocamento relativo entre as garras da máquina durante o ensaio. Para os ensaios de tração, foi adotada a velocidade de 5 mm/min e para os de compressão, 1,3 mm/min.

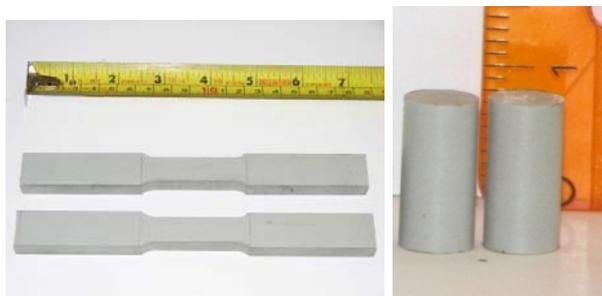


Figura 1. Corpos de prova de tração e de compressão.

4.2. Resultados dos ensaios

Em ensaios quasi-estáticos em que a deformação do material é pequena e assim, os efeitos de geometria podem ser desconsiderados, as diferenças entre as curvas de tensão \times deformação de engenharia e verdadeira são desprezíveis.

Entretanto, quando as mudanças de constantes geométricas (ex. área inicial) são suficientemente grandes, são introduzidos erros consideráveis nos resultados da curva de engenharia. Isso ocorre devido à utilização das áreas e

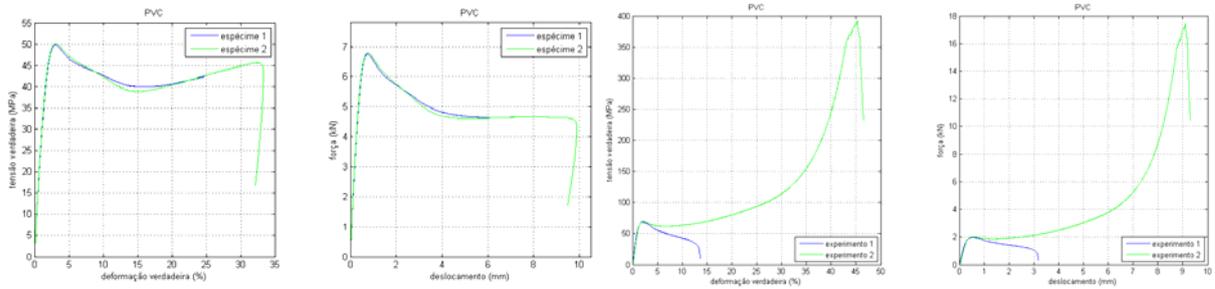
comprimentos iniciais em seus cálculos, sendo que na curva verdadeira se utilizam os correspondentes dados instantâneos.

Higgins (1982) demonstra que, considerando que o volume do material permanece constante durante o ensaio, a tensão real é relacionada com a de engenharia por:

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad \text{e} \quad \delta = \ln(1 + \varepsilon_0)$$

sendo ε_0 a deformação de engenharia e δ a deformação real.

A Figura (2) apresenta o gráfico obtido dos ensaios de tração e compressão do PVC.



(a) (b) (c) (d)

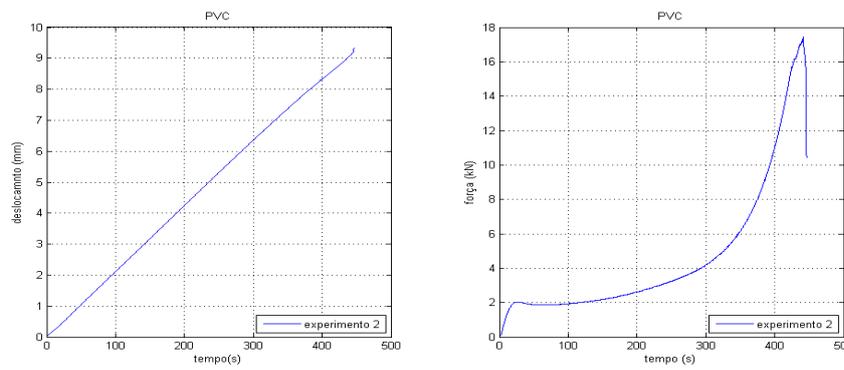
Figura 2. Gráficos de tração – (a) e (b) – e compressão – (c) e (d).

Os resultados obtidos nos testes de tração ocorreram conforme esperado, visto se tratar de um ensaio clássico e consagrado há muito tempo no meio acadêmico e industrial. Já nos testes de compressão, alguns problemas foram observados. Devido à dimensão pequena da espessura das placas que originaram os corpos de prova, foi difícil garantir o paralelismo e a planicidade das peças no processo de usinagem.

Como consequência, o corpo de prova do experimento 1 sofreu flambagem. Da Figura (2)c nota-se o início da flambagem, que leva ao desprendimento do corpo de prova dos pratos da máquina quando o deslocamento do corpo atinge 3 mm.

Além disso, observa-se uma queda abrupta da força aplicada no espécime 2 quando o tempo do experimento está em torno de 430 s (Figura (3)b). Tal queda ocorre devido ao rompimento do corpo de prova durante o ensaio.

Como o modelo do material em estudo não leva em conta mecanismos de falha, somente serão considerados os dados do espécime 2 contidos no intervalo de tempo [0; 400].



(a) (b)

Figura 3. Gráficos de deslocamento × tempo (a) e força × tempo (b). Experimento 2.

5. Simulação

Segundo Mahnken et al (1996a), o estudo do comportamento de materiais é comumente realizado em dois passos, sendo o primeiro a formulação de um modelo matemático no que diz respeito aos efeitos físicos considerando os estados estacionários de fluência, relaxação, endurecimento e ‘amolecimento’ (*softening*) cíclicos, efeitos de Bauschinger, efeitos de temperatura e danosos, etc. Em seguida, é realizada a identificação das constantes do material baseada em dados experimentais. Na terminologia matemática, tal identificação é chamada de *problema inverso*.

Assim, obtidos os dados experimentais do PVC, foi desenvolvido um modelo virtual do experimento pelo Método dos Elementos Finitos (MEF) e estimados valores iniciais das constantes do modelo.

Através da técnica de modelamento inverso, esses valores iniciais estimados são usados como ponto de partida no modelo virtual para a obtenção dos valores ótimos.

A seguir são apresentadas a técnica de modelamento inverso, o modelo virtual e as hipóteses adotadas, a obtenção dos valores iniciais das constantes dos modelos de material adotados e os resultados obtidos.

5.1. Definição de modelamento inverso

De acordo com Mahnken et al (1996a), os testes clássicos de caracterização procuram sempre produzir tensões e deformações que possam ser consideradas uniformes em todo o corpo de prova. Em aproximadamente todos os testes mecânicos, as deformações deixam de ser uniformes devido à localização, fratura e outros mecanismos de falha. E, quando consideradas estruturas complexas, a incorporação de tensões e deformações não-uniformes requerem a solução de equações de campo. Por tal razão, a identificação paramétrica é considerada no contexto do método dos elementos finitos (MEF).

Uma aproximação clássica para a solução do problema inverso é considerar a identificação paramétrica como um problema de otimização. Nesse aspecto, um funcional de mínimos quadrados é minimizado com o intuito de prover a melhor concordância entre os dados experimentais e os de simulação de acordo com uma norma específica (estratégia de aproximação ótima). Ademais, quando se considera a identificação paramétrica no contexto do método dos elementos finitos, esta aproximação é similar aos procedimentos de otimização de forma. Na terminologia correspondente os parâmetros do material são as *variáveis de projeto* do problema de otimização.

O procedimento de modelamento inverso é sintetizado na Figura (4).

Para o presente trabalho, foi escolhido o *software* LS-OPT para realizar a rotina de otimização. O procedimento empregado foi similar ao realizado por Stander et al (2008), no qual usa-se o Método da Superfície de Resposta para obter os valores ótimos do módulo de elasticidade e da tensão de escoamento para um modelo bilinear de uma espuma sobre compressão.

O algoritmo utilizado foi o *Standard Composite*, o qual permite minimizar o erro quadrático entre valores experimentais e de simulação de acordo com a seguinte equação:

$$\mathcal{F} = \sqrt{\sum_{j=1}^m W_j \left[\frac{f_j(x) - F_j}{\sigma_j} \right]^2 + \sum_{i=1}^m w_i \left[\frac{x_i - X_i}{\chi_i} \right]^2}$$

onde σ e χ são fatores de normalização, f_j e x_i são valores experimentais, F_j e X_i são valores obtidos numericamente, W e w são pesos.

Assim, com a equação acima, foi minimizado o erro entre os valores de força obtidos do experimento e aqueles obtidos da interface de contato entre o corpo de prova e o prato superior (modelo de elementos finitos) em intervalos de 1 segundo.

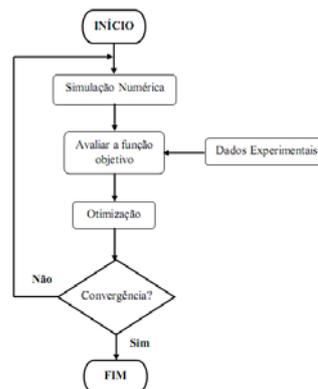


Figura 4. Diagrama de solução de um problema inverso. Retirado de Kajberg et al (2004). p 3450.

5.2. Algoritmo de otimização

O *software* LS-OPT disponibiliza algoritmos de otimização baseados em métodos probabilísticos além de algoritmos genéticos e outros.

No presente trabalho, foi utilizado o Método da Superfície de Resposta Sequencial (*Sequential Response Surface Method* – SRSM), cujo propósito é permitir a convergência da solução dentro de uma tolerância pré-estabelecida.

O SRSM utiliza uma região de interesse, um subespaço do espaço de projeto, para determinar um ótimo aproximado. Uma faixa é escolhida para cada variável a fim de determinar seu tamanho inicial. Uma nova região de interesse é centrada no último valor ótimo. Assim, progresso é feito ao se mover o centro da região de interesse como também ao reduzir o tamanho dessa região. Figura (5) ilustra as possíveis adaptações da subregião.

O ponto inicial $x^{(0)}$ formará o ponto central da primeira região de interesse. Os limites inferior e superior $(x_i^{rI,0}, x_i^{rS,0})$ da subregião inicial são calculados utilizando o valor da faixa inicial especificada r_i^0 de modo que

$$x_i^{rL,0} = x_i^{(0)} - 0,5r_i^{(0)} \text{ e } x_i^{rS,0} = x_i^{(0)} + 0,5r_i^{(0)}, \text{ com } i = 1, \dots, n$$

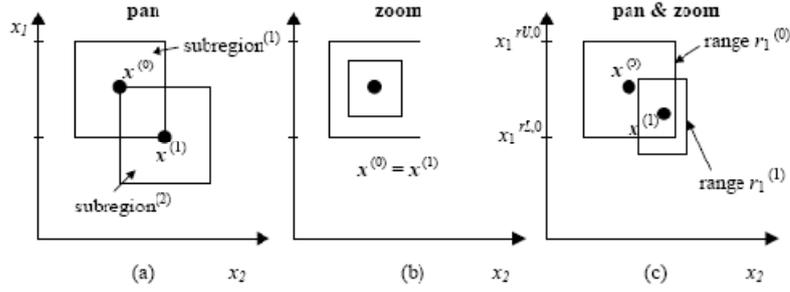


Figura 5. Adaptação da subregião no SRSM. a. puro deslocamento. b. pura redução. c. uma combinação de deslocamento e redução. Retirado de Stander et al (2008). p. 51

onde n é o número de variáveis de projeto. A modificação das faixas das variáveis para a próxima iteração depende da natureza oscilatória da solução e da exatidão do valor ótimo atual.

Oscilação: um parâmetro de contração γ é primeiramente determinado verificando se os valores atual e anterior $\mathbf{x}^{(k)}$ e $\mathbf{x}^{(k-1)}$ estão em lados opostos ou do mesmo lado da região de interesse. Assim, um *indicador de oscilação* c pode então ser determinado na iteração k

$$c_i^{(k)} = d_i^{(k)} d_i^{(k-1)}$$

onde

$$d_i^{(k)} = 2 \Delta x_i^{(k)} / r_i^{(k)} ; \Delta x_i^{(k)} = x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} ; d_i^{(k)} \in [-1; 1]$$

O indicador de oscilação (propositadamente se omite os índices i e k) é normalizado como \hat{c} onde

$$\hat{c} = \sqrt{|c|} \text{sign}(c)$$

O parâmetro de contração γ é então calculado como

$$\gamma = \gamma_{pan}(1 + \hat{c}) + \gamma_{osc}(1 - \hat{c})$$

Veja a Figura (6). O parâmetro γ_{osc} é tipicamente 0,5 – 0,7 representando a diminuição da oscilação amortecida, enquanto γ_{pan} representa o caso de puro deslocamento e assim, a unidade é normalmente escolhida.

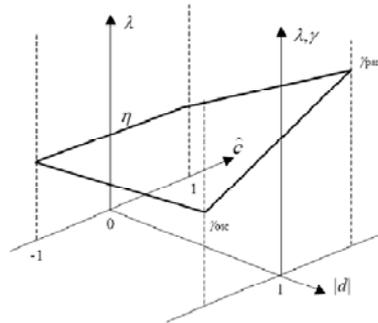


Figura 6. A taxa de contração γ da subregião como uma função do indicador de oscilação \hat{c} e a distância do movimento absoluto $|d|$. Retirado de Stander et al (2008). p. 52

Exatidão: a exatidão é estimada usando a proximidade do valor ótimo previsto na iteração corrente para o projeto inicial (anterior). Quanto menor a distância entre os projetos inicial e ótimo, mais rapidamente a região de interesse irá diminuir de tamanho. Caso a solução esteja no limite da região de interesse, o ponto ótimo é estimado a estar além da região. Assim, uma nova subregião, a qual é centrada no ponto atual, não muda de tamanho. Isso é chamado de *panning* (Figura (5)a). Caso o ponto ótimo coincida com o ponto anterior, a subregião é estacionária, mas reduz de tamanho (*zooming* – Figura (5)b). Ambos *zooming* e *panning* podem ocorrer se houver um movimento parcial (Figura (5)c). A faixa $r_i^{(k+1)}$ para a nova subregião na $(k+1)$ -ésima iteração é determinada por:

$$r_i^{(k+1)} = \lambda_i r_i^{(k)}, i=1, \dots, n; k=0, \dots, n_{iter}$$

onde λ_i representa a taxa de contração para cada variável de projeto. Para determinar λ_i , $d_i^{(k)}$ é incorporado por escalonamento ao parâmetro de modificação de zoom η que representa *zooming* puro e o parâmetro de contração γ para lidar com a taxa de contração

$$\lambda_i = \eta + |d_i^{(k)}|(\gamma - \eta)$$

para cada variável (ver Figura (6)).

Um tópico importante a ser considerado é a escolha dos pontos contidos na região de interesse que precisam ser analisados. Para isso, o LS-OPT conta com diferentes tipos de *planejamento experimental*, ou seja, procedimentos de seleção para achar esses pontos. Os planejamentos disponíveis são: fatorial, Koshal, composite, optimalidade-D e Hiper-cubo Latino. No presente trabalho o critério de optimalidade-D foi o utilizado.

Este método utiliza um subconjunto de todos os pontos possíveis de projeto como uma base para resolver

$$\max |X^T X|$$

O subconjunto é normalmente selecionado de um fatorial de ℓ^n projetos onde ℓ é escolhido *a priori* como um número de pontos de chegada em uma dimensão particular. Regiões de projeto de forma irregular, e qualquer número de pontos experimentais, podem ser considerados. Os experimentos são usualmente selecionados em uma subregião do espaço de projeto que se supõe conter o ponto ótimo.

Os números de planejamentos experimentais necessários para aproximações lineares, assim como quadráticas, são resumidos na Tabela (1). O valor para o critério de optimalidade-D é escolhido de modo a ser 1,5 vezes o valor do critério Koshal acrescido de 1. Este parece ser um valor intermediário que satisfaz tanto a exatidão prevista quanto o custo computacional.

Tabela 1. Número de pontos experimentais necessários para planejamentos experimentais.

Number of Variables n	Linear approximation			Quadratic approximation			Central
	Koshal	D-optimal	Factorial	Koshal	D-optimal	Factorial	Composite
1	2	4	2	3	5	3	3
2	3	5	4	6	10	9	9
3	4	7	8	10	16	27	15
4	5	8	16	15	23	81	25
5	6	10	32	21	32	243	43
6	7	11	64	28	43	729	77
7	8	13	128	36	55	2187	143
8	9	14	256	45	68	6561	273
9	10	16	512	55	83	19683	531
10	11	17	1024	66	100	59049	1045

E, finalmente, como função-objetivo de cada ponto de projeto a ser analisado optou-se pelo *erro quadrático médio* (*Mean Squared Error – MSE*) entre os dados numéricos de força provenientes do contato entre os pratos e o espécime e os dados experimentais de força.

Portanto, o algoritmo de otimização se resume a: a partir de um conjunto de parâmetros iniciais pré-estimados, é determinada uma subregião que contenha um ótimo (conjunto de parâmetros) aproximado através do SRSM; na subregião de interesse determinada acima, selecionam-se determinado número de pontos (cada ponto sendo um conjunto de parâmetros) com maior possibilidade de serem ou estarem próximos do valor ótimo do espaço de projeto de acordo com o critério de optimalidade-D; a função-objetivo (MSE) de cada ponto selecionado acima é minimizada; o ponto de menor valor (MSE) é o ponto ótimo aproximado e é considerado o novo conjunto de parâmetros iniciais; caso esse valor seja maior que a tolerância de projeto pré-estabelecida, inicia-se uma nova iteração. Caso contrário, o algoritmo é terminado e o valor ótimo do problema, encontrado.

5.3. Modelo em Elementos Finitos

A geração de malha do sistema foi feita no *software* Altair Hypermesh e a solução, obtida no LS-Dyna.

Para simular o teste de compressão, foi gerada a malha do sistema com as seguintes características (Figura (7)): pratos da máquina de testes considerados como dois corpos rígidos (cartão *MAT_RIGID no LS-DYNA); foi simulado um quarto do espécime de PVC (Figura (7)c) impondo condições de simetria aos planos recortados do espécime; coeficiente de atrito estático entre o corpo de prova e os pratos da máquina considerado igual a 0,1; foram adotados elementos sólidos hexaédricos tanto para o corpo de prova quanto para os pratos rígidos; tempo de simulação de 400 segundos (conforme seção 4.2.).

As propriedades do material podem ser conferidas na Tabela (2). Diante desses dados, os valores da massa específica e do coeficiente de Poisson foram utilizados como constantes dos Modelos de material adotados.

O comportamento mecânico dos materiais poliméricos é altamente dependente do tempo e da temperatura. Tentando descrever essa dependência dos polímeros, diversos estudos foram (e ainda são) desenvolvidos e, conseqüentemente, diversos modelos de materiais foram propostos, desde os modelos clássicos de Mooney (1940), Rivlin (1948) apud Arruda et Boyce (1993), até modelos mais recentes como de Arruda et Boyce (1993).

Com a representação correta desse comportamento, seria possível produzir materiais de acordo com as necessidades de um projeto em desenvolvimento ou de uma aplicação em especial, diminuindo extensivamente o trabalho de tentativa e erro. Apesar de todos os esforços, nenhum modelo universal foi desenvolvido até o momento embora notáveis avanços tenham sido reconhecidos.

O *software* LS-Dyna possui diversos modelos de materiais implementados em sua biblioteca que podem ser aplicados para materiais poliméricos. Dentre esses modelos, há dois tipos: o primeiro, cujo comportamento do material é descrito por uma lei constitutiva; o segundo, cujo comportamento do material é baseado em curvas de pontos dos dados experimentais.

Evidentemente, os modelos escolhidos e utilizados no presente trabalho são aqueles do primeiro tipo, devido a sua praticidade: caso o pesquisador X queira trabalhar com determinado material nas mesmas condições que o pesquisador Y havia trabalhado, basta saber quais os valores dos parâmetros da lei constitutiva foram usados pelo pesquisador Y. Enquanto os pontos das curvas experimentais podem ser da ordem de milhares, uma lei constitutiva extremamente complexa terá no máximo vinte parâmetros.

Assim, foram escolhidos três modelos de materiais baseados em leis constitutivas que melhor representam materiais poliméricos: o modelo elastoplástico com encruamento cinemático (cartão *MAT_PLASTIC_KINEMATIC), o modelo de elastômero incompressível de Mooney-Rivlin (cartão *MAT_MONEY-RIVLIN_RUBBER) e o modelo de elastômero hiperviscolástico (cartão *MAT_ARRUDA_BOYCE).

Tabela 2. Propriedades do PVC. Retirado de Chandra et al (1998).

Propriedade	PVC
Massa específica	1430 kg/m ³
Coefficiente de Poisson	0,48
Tensão de escoamento	53 MPa
Elongação no escoamento	3 %
Elongação na ruptura	20 %
Módulo de elasticidade	3000 MPa
Temperatura de operação mínima	-10 °C
Temperatura de operação máxima	60 °C
Coefficiente de expansão térmica médio	0.8·10 ⁻⁴ K ⁻¹

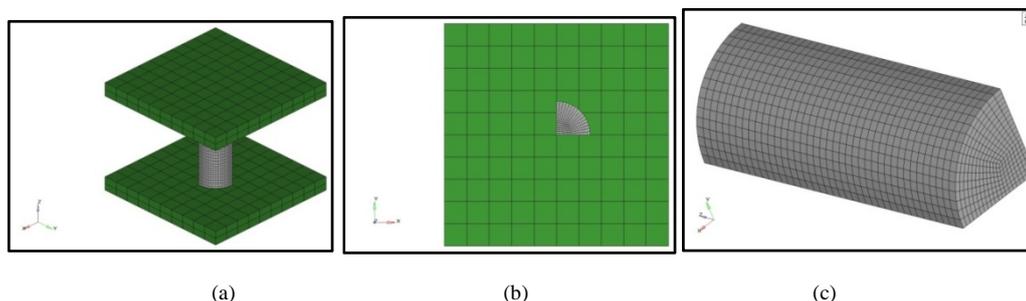


Figura 7. Malha da simulação do teste de compressão. a. vista isométrica. b. vista de topo. c. vista em perspectiva.

5.4. Análise dos resultados

Foram encontrados bons valores dos parâmetros dos modelos de materiais em estudo. Embora aparentemente os modelos de Mooney-Rivlin e de Arruda-Boyce não descrevam bem o comportamento do material escolhido (o PVC), observa-se que o procedimento de otimização conduz as variáveis de projeto a valores que aproximam a curva do modelo em análise à curva experimental.

A Figura (8) torna evidente a melhor adequação do modelo elastoplástico com encruamento cinético em relação aos outros dois modelos. Além desse modelo ser visualmente mais próximo do dado experimental, sua função-objetivo (o erro quadrático médio – MSE) tem o menor valor dentre os três modelos (0,040 perante 0,059 do modelo de Mooney-Rivlin e 0,057 do modelo de Arruda-Boyce) justificando quantitativamente sua escolha para descrever esse polímero.

6. Conclusões

O presente problema conseguiu apresentar uma metodologia para a aplicação de técnicas de otimização em materiais de comportamento mecânico não-linear. O PVC, um polímero dúctil que apresenta grande dependência do tempo, pôde ser razoavelmente caracterizado pelo modelo elastoplástico cinético implementado no código do LS-Dyna, embora não seja recomendado o uso desse modelo para aplicações industriais por não descrever todas as peculiaridades de um polímero dúctil que sofre empescoamento.

Os modelos de Mooney-Rivlin e de Arruda-Boyce são aproximações consagradas do comportamento de elastômeros, uma classe de polímeros com comportamento um pouco diferente do comportamento do PVC. Portanto, é

aceitável que esses modelos não consigam se ajustar de modo a representar o comportamento de um polímero dúctil como o PVC.

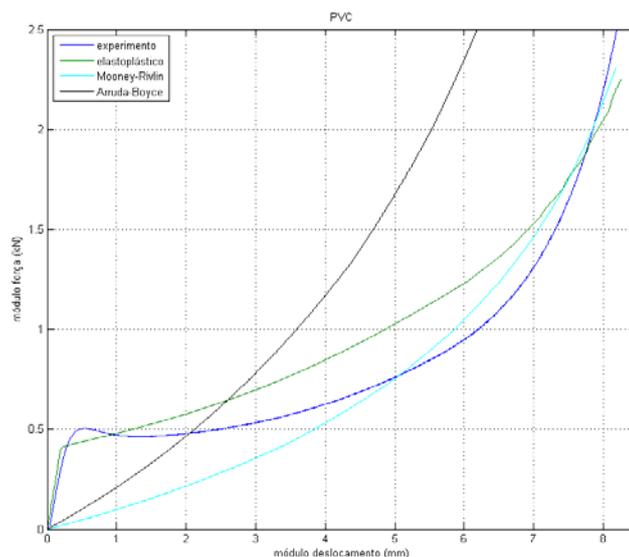


Figura 8. Curvas $|\text{força}| \times |\text{deslocamento}|$ experimental, elastoplástico com encruamento cinético, elastômero incompressível de Mooney-Rivlin e elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce.

7. Referências

- American Society for Testing and Materials. "D 638 – 00: Standard Test Method for Tensile Properties of Plastic", Pennsylvania, 2001. 13p.
- American Society for Testing and Materials. "D 695 – 96: Standard Method for Compressive Properties of Rigid Plastics", Pennsylvania, 2001. 7p.
- Arruda, E. M.; Boyce, M. C., 1993. "A three dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 41, 389 – 412.
- Chandra, M.; Roy, S. K.. "Plastic Technology Handbook: Third Edition, Revised and Expanded", 3ª Edição. New York: Ed. Marcel Dekker, 1998.
- Higgins, R. A.. "Propriedades e Estruturas dos Materiais em Engenharia", Tradução Joel Regueira Teodósio. São Paulo: Difel, 1982. 472p.
- Kajberg, J.; Lindkvist, G., 2004. "Characterisation of materials subjected to large strains by inverse modelling based on in-plane displacement fields", *International Journal of Solids and Structures*. 41, 3439 – 3459.
- Kajberg, J.; Wikman, B., 2007. "Viscoplastic parameter estimation by high strain-rate experiments and inverse modelling – Speckle measurements and high-speed photography", *International Journal of Solids and Structures*. 44, 145 – 164.
- Mahnken, R.; Stein, E., 1996. "A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method", *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 136, 225 – 258.
- Mahnken, R.; Stein, E., 1996. "Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations", *International Journal of Plasticity*. Vol. 12, No. 4, 451 – 479.
- Stander, N. et al."LS-OPT User's manual: A Design Optimization and Probabilistic Analysis Tool for the Engineering Analyst", California: Livermore Software Technology Corp, 2008. 451p.

APPLICATION OF OPTIMIZATION'S TECHNIQUES FOR MECHANICAL CHARACTERIZATION OF NON-LINEAR MATERIALS

Lino Umberto Marques Junior

linoumberto@gmail.com

Abstract. The project proposes to study the method of optimization for characterization of non-metallic materials for structures with complex geometries, which show non-uniform stress and strain distribution. Therefore, experimental tests were conducted on PVC, whose data were used in inverse modeling of this polymer and thus enabling the identification of the parameters that describe the mechanical behavior of this material. The experimental tests were compressive and tensile type (both quasi-static). The optimization methodology studied obtained the optimal parameters of three material models implemented in the commercial code of finite element LS-Dyna. And from an assesment of results, it could be defined the model whose numerical answers are best suited to the behavior of the material chosen.

Keywords. *mathematical optimization, finite element method, polymer (materials).*