ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

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

Lino Umberto Marques Junior

São Paulo 2008

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

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

Trabalho de formatura apresentado à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Graduação em Engenharia

Lino Umberto Marques Junior

Orientador: Prof. Dr. Marcílio Alves

Área de Concentração: Engenharia Mecânica

São Paulo 2008

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

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

Trabalho de formatura apresentado à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Graduação em Engenharia

Lino Umberto Marques Junior

Orientador: Prof. Dr. Marcílio Alves

Área de Concentração: Engenharia Mecânica

São Paulo 2008

FICHA CATALOGRÁFICA

Marques Junior, Lino Umberto Aplicação de técnicas de otimização para caracterização mecânica de materiais não-lineares / L.U. Marques Junior. -- São Paulo, 2008. 85 p. Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica. 1.Otimização matemática 2.Método dos elementos finitos 3. Polímeros (materiais) I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais, Lino e Emília, e às minhas irmãs, Verônica e Beatriz.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meus pais, Lino e Emilia, por sempre me amarem e me instigarem a ser uma pessoa melhor.

Às minhas irmãs, Verônica e Beatriz, por serem pacientes comigo durante todos esses anos.

Ao professor Marcílio, pela oportunidade e auxílio em desenvolver o presente trabalho, tanto cedendo seu tempo para esclarecer minhas diversas dúvidas quanto disponibilizando as instalações de seu laboratório para realização dos experimentos e simulações.

A todos os amigos que me acompanharam durante essa longa jornada de cinco anos.

Aos amigos do Grupo de Mecânica dos Sólidos e Impacto em Estruturas da Universidade de São Paulo.

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).

ABSTRACT

The project proposes to study the method of optimization for characterization of non-metallic materials for structures with complex geometries, which show nonuniform 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 quasistatic). 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 assessment 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).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: batente plástico utilizado como absorvedor de impacto em sistema de suspensão
de compressores de refrigeradores domésticos1
Figura 2: esquema de uma rede neural com duas entradas e uma camada intermediária de
4 neurônios com função de ativação f 11
Figura 3: função de transferência sigmóde $y = 11 + e - x$ tipicamente usada junto a redes
com controle antecipatório 12
Figura 4: tipos de diagrama tensão-deformação para os diferentes grupos de polímeros
(segundo Carswell e Nason). Retirado de [7]p. 284 15
Figura 5: Variação esquemática do Módulo de Elasticidade de um polímero linear de acordo
com a temperatura. Retirado de [17]. p. 97 17
Figura 6: Resposta linear Newtoniana (tensão proporcional à taxa de deformação), resposta
não-linear e resposta plástica (tensão independente da taxa de deformação). Retirado de
[17]. p. 99
Figura 7: Gráficos de tensão-deformação para: a. comportamento elástico; b.
comportamento viscoelástico. Retirado de [17]. p. 100 20
Figura 8: Esquema dos diferentes tipos de curvas de tensão-deformação em um polímero.
Retirado de [17]. p 139 21
Figura 9: Efeito de taxa de deformação e temperatura nas curvas de tensão-deformação.
Retirado de [17]. p. 139 21
Figura 10: esquema de empescoçamento e estiramento em um polímero semi-cristalino.
Retirado de [17]. p. 140 23
Figura 11: a. propagação de empescoçamento em uma chapa de polietileno linear. b.
formação e propagação em um espécime, mostrado de maneira esquemática. Retirado de
[17]. p. 141
Figura 12: polimerização do PVC 25
Figura 13: máquina de ensaios 26
Figura 14: exemplo de corpo de prova de tração – seção transversal retangular 28
Figura 15: detalhes de fixação em teste de tração28
Figura 16: corpos de prova de tração 29
Figura 17: corpos de prova de compressão 30
Figura 18: configuração de um ensaio de compressão 30
Figura 19: barra submetida a esforço de tração 32
Figura 20: corpos de prova de PVC após ensaios de tração
Figura 21: gráficos de tensão verdadeira × deformação verdadeira (a) e força ×
deslocamento (b) para tração 33
Figura 22: gráficos de <i>tens</i> ão verdadeira × deformação verdadeira (a) e força ×
deslocamento (b) para a compressão 34
Figura 23: gráficos de <i>deslocamento</i> × tempo (a) e <i>for</i> ç <i>a</i> × tempo (b). Experimento 2. 35
Figura 24: estudo científico de um sistema físico. Retirado de [8]. p 3448 37
Figura 25: diagrama de solução de um problema inverso. Retirado de [8]. p 3450 39

Figura 26: adaptação da subregião no SRSM. a. puro deslocamento. b. pura redução. c. uma				
combinação de deslocamento e redução. Retirado de [19]. p. 51				
Figura 27: a taxa de contração γ da subregião como uma função do indicador de oscilação c				
e a distância do movimento absoluto d . Retirado de [18]. p. 52 42				
Figura 28: malha da simulação do teste de compressão. a. vista isométrica. b. vista de topo.				
c. vista em perspectiva				
Figura 29: construção de Considère para um material polimérico 57				
Figura 30: gráficos - curva $\sigma \mathbf{R} imes \lambda$ e ampliação da mesma. Construção de Considère 59				
Figura 31: MSE = MSE (E, σ_y)				
Figura 32: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. E. b. σ_{y} c. E _t . d. MSE				
Figura 33: curvas <i>for</i> ç <i>a</i> × <i>deslocamento</i> experimental, iteração 1, iteração 2 e valor				
ótimo. Modelo elastomérico 65				
Figura 34: MSE = MSE (A, B) – rotina zero 65				
Figura 35: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Rotina zero 66				
Figura 36: MSE = MSE (A, B) – segunda rotina67				
Figura 37: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Segunda rotina 68				
Figura 38: MSE = MSE (A, B) – terceira rotina				
Figura 39: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Terceira rotina				
Figura 40: curvas força × deslocamento experimental, iteração 1, iteração 2 e valor				
ótimo. Modelo elastômero incompressível71				
Figura 41: MSE = MSE (K, G, N) – rotina zero72				
Figura 42: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. K. b. G. c. N. d. MSE. – rotina zero				
Figura 43: curvas força × deslocamento experimental, iteração 1, iteração 2 e valor				
ótimo. Modelo elastômero hiperviscoelástico				
Figura 44: MSE = MSE (K, G, N) – segunda rotina74				
Figura 45: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as				
iterações: a. K. b. G. c. N. d. MSE. – segunda rotina				
Figura 46: curvas força × deslocamento experimental, iteração 1, iteração 2 e valor				
ótimo. Modelo do elastômero hiper-viscoelástico76				
Figura 47: curvas força × deslocamento experimental, elastoplástico com encruamento				
cinético, elastômero incompressível de Mooney-Rivlin e elastômero hiperviscoelástico de				
Arruda-Boyce				

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: constantes elásticas de alguns polímeros	. 16
Tabela 2: especificações técnicas do extensômetro	. 27
Tabela 3: número de pontos experimentais necessários para planejamentos experimenta	iis.
	. 44
Tabela 4: propriedades do PVC. Retirado de [18]	. 45
Tabela 5: propriedades mecânicas estimadas, segundo Construção de Considère	. 58
Tabela 6: dados de entrada do modelo plástico cinemático	. 59
Tabela 7: dados de entrada do modelo de elastômero incompressível	. 60
Tabela 8: dados de entrada do modelo de elastômero hiperviscoelastico	. 61
Tabela 9: características do método de otimização de cada modelo de material	. 62
Tabela 10: valores ótimos do modelo elastoplástico	. 63
Tabela 11: valores ótimos da rotina zero. Modelo elastômero incompressível	. 66
Tabela 12: valores iniciais da segunda rotina. Modelo elastômero incompressível	. 67
Tabela 13: valores ótimos da segunda rotina. Modelo elastômero incompressível	. 67
Tabela 14: valores iniciais da terceira rotina. Modelo elastômero incompressível	. 68
Tabela 15: valores ótimos da terceira rotina. Modelo elastômero incompressível	. 70
Tabela 16: valores ótimos da rotina zero. Modelo elastômero hiperviscoelástico	. 73
Tabela 17: valores iniciais da segunda rotina - modeo de Arruda-Boyce	. 73
Tabela 18: valores ótimos da segunda rotina. Modelo elastômero hiper-viscoelástico	. 75

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA	. iv
AGRADECIMENTOS	v
RESUMO	.vi
ABSTRACT	vii
LISTA DE FIGURAS	/iii
LISTA DE TABELAS	x
SUMÁRIO	.xi
1. INTRODUÇÃO	. 1
1.1. Motivação	. 1
1.2. Objetivos	. 3
1.3. Organização do texto	. 3
2. OTIMIZAÇÃO	. 4
2.1. Definições básicas	. 4
2.2. Métodos probabilísticos	. 6
2.2.1. Metodologia de Superfície de Resposta (RSM)	. 7
2.2.2. Redes neurais	10
2.2.3. Kriging	13
3. ESCOLHA DOS MATERIAIS	15
3.1. Propriedades elásticas dos polímeros	15
3.2. Viscoelasticidade	17
3.3. Deformação plástica de polímeros	20
3.3.1. Curvas de tensão-deformação	20
3.3.2. Polímeros vítreos	22
3.3.3. Polímeros semi-cristalinos	22
3.3.4. Escoamento viscoso	23
3.3.5. Aquecimento adiabático	24
3.4. Poli cloreto de vinila (PVC)	24
4. CARACTERIZAÇÃO QUASI-ESTÁTICA DO MATERIAL	26
4.1. Metodologia dos ensaios	26
4.1.1. Ensaios de tração	27
4.1.2. Ensaios de compressão	29

4.2.	Res	ultados dos ensaios	30
4.2	.1.	Ensaios de tração	32
4.2	.2.	Ensaios de compressão	34
4.3.	Dise	cussão dos resultados	34
5. SIN	1ULA	ÇÃO	36
5.1.	Def	inição de modelamento inverso	36
5.2.	Alg	oritmo de otimização	40
5.3.	Мо	delo em Elementos Finitos	45
5.4.	Мо	delos de material	47
5.4	.1.	Modelo elastoplástico com encruamento cinemático	48
5.4	.2.	Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin	51
5.4	.3.	Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce	55
5.5.	Esti	mativa dos parâmetros iniciais	56
5.5	.1.	Modelo elastoplástico com encruamento cinemático	59
5.5	.2.	Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin	60
5.5	.3.	Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce	60
5.6.	Res	ultados numéricos	61
5.6	.1.	Modelo elastoplástico com encruamento cinemático	62
5.6	.2.	Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin	65
5.6	.3.	Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce	71
5.7.	Aná	álise dos resultados	76
6. CO	NCLU	SÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	78
ANEXO / ESTÁTIC	A. [:OS 7	DESENHOS DE FABRICAÇÃO DOS CORPOS DE PROVA PARA TESTES QUASI- 79	
ANEXO I	B. F	ROTINA EM MATLAB PARA CONSTRUÇÃO DE CONSIDÈRE	80
REFERÊN	NCIAS	BIBLIOGRÁFICAS	82
BIBLIOG	RAFI	A RECOMENDADA	85

1. INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

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.

Como exemplo, tem-se a caracterização de um batente plástico absorvedor de impacto no sistema de suspensão de compressores de refrigeradores domésticos (Figura 1 - [14]). Nesse caso, a peça produzida é obtida a partir da extrusão de pequenos grãos de um polímero, o que inviabiliza a construção de um molde para se obter alguns corpos de prova, devido a seu alto custo.



Figura 1: batente plástico utilizado como absorvedor de impacto em sistema de suspensão de compressores de refrigeradores domésticos.

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

[12] 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.

[11] 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 dos gradientes para resolver o problema direto associado e a aplicar os métodos dos gradientes para resolver problemas inversos associados.

[12] apresentou uma estratégia unificada de identificação de parâmetros de material de equações constitutivas viscoplásticas a partir de dados de um teste uniaxial. Métodos dos gradientes reduzidos são usados para a minimização de um funcional mínimo quadrado, dessa forma requerindo o gradiente associativo.

Em [13], a identificação de parâmetros de materiais também é o foco de pesquisa, em especial de um modelo hiperelástico isotrópico. Nesse caso, também foi utilizada a minimização de um funcional de mínimos quadrados através de métodos dos gradientes reduzidos.

Já [10] propôs um algoritmo para identificação paramétrica de modelos de danos baseado em gradientes aprimorados, na qual distribuições não-lineares de estado das variáveis tais como tensões, deformações e variáveis de dano são levadas em conta.

[8] 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).

[9] 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.

1.2. Objetivos

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 probabilísticos de otimização.

Em seguida, será definido qual material será utilizado nesse projeto. Após essa escolha, são realizados testes quasi-estáticos para a caracterização do material.

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.

1.3. Organização do texto

Os capítulos desse trabalho estão dispostos da seguinte maneira:

• <u>Capítulo 2</u>: são apresentados os conceitos básicos de otimização e alguns métodos de otimização probabilística, com ênfase no método de superfícies de resposta.

• <u>Capítulo 3</u>: é definido o material em estudo e é feita uma descrição do comportamento mecânico dos polímeros.

• <u>Capítulo 4</u>: é descrito o procedimento empregado nos testes experimentais e são apresentados os resultados provenientes desses testes.

• <u>Capítulo 5</u>: é definido o modelamento inverso, são apresentados o algoritmo de otimização utilizado, o modelo em elementos finitos e os modelos de material empregados. Por fim, são mostrados os resultados dos processos de otimização.

• <u>Capítulo 6:</u> são descritas as conclusões do projeto e sugestões para trabalhos futuros.

2. OTIMIZAÇÃO

No cotidiano, as pessoas se deparam com problemas que demandam a melhor solução possível afim de diminuir gastos, 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, cuja quantidade de parâmetros seja relativamente pequena. Caso se tenha um problema complexo, por exemplo, com milhares de parâmetros, torna-se inviável executar essa abordagem.

Assim, para tais casos complexos, deve se utilizar de 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.

2.1. Definições básicas

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

• <u>Variáveis de projeto:</u> são os parâmetros do problema cuja alteração modifica a solução do sistema. Exemplo: diâmetro de um tubo de aço. Essas variáveis podem ser classificadas como contínuas (podem assumir qualquer valor) e discretas (estão limitadas a valores isolados). 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).

• <u>Função-objetivo:</u> quantifica o que se quer otimizar e é função das variáveis de projeto escolhidas. Pode ser simples (há apenas um objetivo) ou multi-objetivo (deseja-se otimizar dois ou mais objetivos de uma só vez).

• <u>Restrições:</u> são as limitações impostas para se obter a solução otimizada.

• <u>Domínio viável e inviável</u>: 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.

• <u>Ponto ótimo:</u> 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 definido pelo ponto ótimo e valor ótimo. Pode-se ter a solução ótima 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 (variáveis de projeto) que melhor satisfaça a função objetivo e ao mesmo tempo as restrições. Matematicamente, o problema de otimização pode ser colocado como:

$$\begin{array}{l} \text{Minimizar ou Maximizar } f(x) \\ (h_{1} = 0) \end{array}$$

$$tal que \begin{cases} h_k = 0\\ h_k \le 0\\ h_k \ge 0 \end{cases}$$

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. Na medida do possível, deve-se evitar uma grande quantidade de restrições no problema, pois isso encarece consideravelmente o custo computacional da otimização.

2.2. Métodos probabilísticos

De acordo com [19], 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 resultado desejado, ou seja, o "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 (o qual é então resolvido) 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 capaz 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 há 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.

2.2.1. Metodologia de Superfície de Resposta (RSM)

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.

Considerando uma variável de resposta *y* dependente de um número de variáveis *x*, tem-se que a relação funcional exata que há entre ambos é

$$y = \eta(x)$$

A relação funcional exata é agora aproximada (e. g. aproximação polinomial) como

$$\eta \approx f(\mathbf{x})$$

Assumindo que a função aproximada é a somatória de funções-base:

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{L} a_i \phi_i(\boldsymbol{x})$$

onde L é o número de funções-base ϕ_i usadas para aproximar o modelo.

A constante $\boldsymbol{a} = [a_1, a_2, ..., a_L]^T$ tem de ser determinada para, assim, minimizar a soma do erro quadrado:

$$\sum_{p=1}^{P} \left\{ \left[y(\boldsymbol{x}_{p}) - f(\boldsymbol{x}_{p}) \right]^{2} \right\} = \sum_{p=1}^{P} \left\{ \left[y(\boldsymbol{x}_{p}) - \sum_{i=1}^{L} a_{i} \phi_{i}(\boldsymbol{x}_{p}) \right]^{2} \right\}$$

sendo *P* o número de pontos experimentais e y é a resposta exata do funcional dos pontos experimentais x_i .

A solução dos coeficientes desconhecidos é dada por:

$$\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{X}^T \cdot \boldsymbol{X})^{-1} \cdot \boldsymbol{X}^T \cdot \boldsymbol{y}$$

onde X é a matriz

$$\boldsymbol{X} = [X_{ui}] = [\phi_i(\boldsymbol{x}_u)]$$

O próximo passo crítico é escolher as funções-base apropriadas. Uma escolha comum é a seguinte aproximação quadrática:

$$\phi = [1, x_1, \dots, x_n, x_1^2, x_1 \cdot x_2, \dots, x_1 \cdot x_n, \dots, x_n^2]^T$$

embora qualquer função apropriada possa ser considerada.

Dentre os diversos fatores determinantes na exatidão de uma superfície de resposta, os principais são:

• <u>O tamanho da sub-região:</u> para problemas com respostas suavizadas, quanto menor o tamanho da sub-região, maior a exatidão. Para o problema geral, há um tamanho mínimo no qual não há ganho maior de acuidade. Além desse tamanho, a variabilidade na resposta pode se tornar indistinguível devido à presença de ruído.

• <u>A escolha da função aproximada:</u> funções de alta ordem são geralmente mais precisas que as funções de baixa ordem. Teoricamente, superestimar essas funções (com o uso de funções de complexidade muito alta) pode ocorrer e resulta em uma exatidão sub-ótima, embora não haja evidência que isso seja significante para polinômios até segunda ordem.

 <u>O número e distribuição dos pontos de projeto</u>: para problemas suavizados, a exatidão prevista da superfície de resposta melhora ao se aumentar o número de pontos. Entretanto, isso só é verdade até aproximadamente 50% de excesso de pontos.

As vantagens desse método são:

• <u>Exploração do projeto:</u> como o projeto é um processo, muitas vezes exigindo retroalimentação e modificações, os projetistas estão predominantemente interessados em formulações adequadas de projeto, ao invés de um projeto específico. Se tal formulação pode ser conseguida e os parâmetros de projeto apropriados foram utilizados, o projeto permanece flexível e modificações podem ainda ser feitas em um último estágio antes da verificação do projeto final. Isso ainda permite que o projeto multidisciplinar proceda com um pequeno risco em precisar repetir simulações.

• <u>Otimização global:</u> superfícies de resposta possuem uma tendência em capturar regiões de ótimo global devido a suas propriedades de suavização e de aproximação global. Mínimos locais causados por ruído são, portanto, evitados.

2.2.2. Redes neurais

Métodos neurais são extensões naturais e generalizações de métodos de regressões. Redes neurais são conhecidas desde a década de 1940, porém somente com os drásticos avanços ocorridos nos computadores que foi possível torná-los aplicáveis. O modelo de redes neurais – assim como técnicas de regressão – se relaciona entre um conjunto de variáveis de entrada e um resultado. Eles podem ser imaginados como um mecanismo computacional de unidades numéricas (neurônios), cujas entradas e saídas são conectadas de acordo com uma topologia específica. Um modelo neural é definido pelos seus parâmetros livres – as resistências das conexões inter-neurais (pesos) e influências. Estes parâmetros são tipicamente *aprendidos* dos dados de formação por algum algoritmo de otimização apropriado. O conjunto de formação consiste de pares de vetores de entrada (projeto) e saídas associadas (respostas). O algoritmo de formação tenta dirigir os parâmetros de rede a fim de minimizar alguma medida de distância, normalmente a média do erro quadrático (*mean squared error* - MSE) do modelo computado nos dados de formação.

Vários fatores determinam a exatidão prevista de uma aproximação de rede neural e, caso não devidamente encaminhada, pode afetar de modo adverso a solução. Para uma rede neural, assim como para qualquer outro modelo baseado em dados, o fator mais crítico é a qualidade dos dados de formação. Em casos práticos, o sistema se limita a um conjunto de dados e o problema central é a insuficiência desses dados. O número mínimo de pontos de dados necessários para a formação de redes é relacionado à complexidade (desconhecida) de uma função inerente e à dimensionalidade do espaço de projeto. Na verdade, quanto mais variáveis de projeto, mais amostras de formação são necessárias. Na literatura estatística e de redes neurais este problema é conhecido como 'maldição de dimensionalidade'. A maior parte das redes neurais (em particular redes com pró-alimentação) de fato sofre menos da maldição de dimensionalidade que outros métodos, por poderem se concentrar em uma seção dimensionalmente menor de um espaço dimensionalmente maior. Por exemplo, ao agrupar pesos de saída provenientes de uma entrada particular para zero, uma rede pode ignorar inteiramente aquela entrada (Figura 2). Contudo, a maldição de dimensionalidade é ainda um problema, e o desempenho de uma rede pode certamente ser melhorado eliminando variáveis de entrada desnecessárias.



Figura 2: esquema de uma rede neural com duas entradas e uma camada intermediária de 4 neurônios com função de ativação *f*.

Está claro que, caso um número de parâmetros livres de rede seja suficientemente grande e o algoritmo de otimização de formação seja executado durante tempo suficiente, é possível guiar o erro de formação MSE o mais próximo que se queira do zero. Entretanto, também é claro que direcionar o MSE sempre na direção do zero não é algo desejável de se fazer. Para dados com ruído, isto pode indicar superestimar o modelo em vez de boa modelagem. Para dados de formação altamente discrepantes, MSE zero não faz sentido algum. Regularização indica que algumas restrições são aplicadas para a construção do modelo neural com a intenção de reduzir o *erro generalizado*, ou seja, a capacidade de predizer (interpolar) a resposta não-observada para pontos de dados novos que são gerados por um mecanismo parecido àquele dos dados observados. Um problema fundamental em dados com ruído e/ou incompletos é balancear a "firmeza" das restrições com a "boa qualidade do ajuste" adotado nos dados observados. Esta permuta é chamada de *permuta viés-variância (bias-variance tradeoff*) na literatura da ciência estatística.



Figura 3: função de transferência sigmóde $y = 1/(1 + e^{-x})$ tipicamente usada junto a redes com controle antecipatório.

Uma rede multi-camada com pró-alimentação e uma rede de funções de base radial são duas das mais comuns arquiteturas neurais utilizadas como funções aproximadas. Redes de ambos os tipos possuem uma topologia superposta distinta no âmbito que suas unidades processadoras (neurônios) estão divididas em diversos grupos (camadas), as saídas de cada camada de neurônios sendo entradas da próxima camada (Figura 2). Em uma rede com pró-alimentação, cada neurônio desempenha uma soma com pesos propensos de suas entradas e passam este valor por uma função de transferência (ativação) para produzir uma saída. A função de ativação de camadas intermediárias (escondidas) é geralmente uma função sigmóide (Figura 3), enquanto as camadas de entrada e saída de rede são geralmente lineares (transparentes). Em teoria, tais redes podem modelar funções de, exceto alguns casos, qualquer complexidade. Todos os parâmetros em uma rede pró-alimentada são determinados ao mesmo tempo através de uma estratégia de otimização única (não-linear) baseada em algoritmos padrões de gradiente (*steepest descent*, RPROP, Levenberg-Marquardt, etc.). Para redes pró-alimentadas, a regularização pode ser feita controlando-se o número de pesos da rede (seleção modal), impondo penalidades nos pesos ou várias combinações de estratégias.

2.2.3. Kriging

Este método é nomeado em homenagem a D. G. Krige, o qual aplicou métodos empíricos para a determinação das distribuições reais de grau de minérios através de distribuições baseadas em amostras de graus de minérios. Mais recentemente, o método Kringing encontrou uma aplicação mais ampla como um método de prognóstico espacial no projeto de engenharia.

O postulado básico dessa formulação é:

$$y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x})$$

onde y é a função desconhecida de interesse, f(x) é um polinômio desconhecido e Z(x) o componente estocástico com média e covariância:

$$Cov[Z(\mathbf{x}^{i}), Z(\mathbf{x}^{j})] = \boldsymbol{\sigma}^{2}\boldsymbol{R}([R(\mathbf{x}^{i}, \mathbf{x}^{j})])$$

Sendo L o número de pontos amostrais, R é a matriz de correlação L × L com $R(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j)$ a função de correlação entre os pontos $\mathbf{x}^i \in \mathbf{x}^j$. R é uma matriz diagonal unitária positiva-definida.

Duas funções de correlação comumente utilizadas são:

exponencial:
$$R = \prod_{k=1}^{n} e^{-\Theta_k |\mathbf{d}_k|}$$

$$Gaussiana: R = \prod_{k=1}^{n} e^{-\Theta_k d_k^2}$$

onde *n* é o número de variáveis e $d_k = x_k^i - x_k^j$, a distância entre o $k^{\acute{esimo}}$ componente dos pontos x^i e x^j . Há, portanto, *n* valores de θ a serem determinados.

Uma vez que a função de correlação foi selecionada, a estimativa da resposta $\hat{y}(x)$ é dada por:

$$\hat{y} = \hat{\beta} + \boldsymbol{r}^{T}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f}\hat{\beta})$$

Onde $\mathbf{r}^{T}(\mathbf{x})$ é o vetor de correlação (comprimento *L*) entre o ponto \mathbf{x} e os pontos de amostra *L*, \mathbf{y} representa as respostas nos pontos *L* e \mathbf{f} é um vetor unitário de dimensão igual a *L*. O vetor \mathbf{r} e o escalar $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ são dados por:

$$\boldsymbol{r}^{T}(\boldsymbol{x}) = [R(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^{1}), R(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^{2}), \dots, R(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^{L})]^{T}$$
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{f}^{T} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{f})^{-1} \boldsymbol{f}^{T} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{y}$$

A estimativa de variância do modelo global subjacente é:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{2} = \frac{\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)^{T} \boldsymbol{R}^{-1} \left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)}{L}$$

A máxima estimativa provável para Θ_k , k = 1,...,n pode ser encontrada ao resolver o seguinte problema de maximização com restrições:

$$Max \, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{-[L \ln(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^2) + \ln|\boldsymbol{R}|]}{2}, com \, \boldsymbol{\Theta} > 0$$

Onde ambos $\hat{\sigma}$ e $|\mathbf{R}|$ são funções de Θ . Isto é o mesmo que minimizar:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^2 |\boldsymbol{R}|^{1/n}, com \, \boldsymbol{\Theta} > 0$$

3. ESCOLHA DOS MATERIAIS

Como critério na seleção dos materiais utilizados no projeto, ponderou-se em utilizar um material não-metálico de comportamento não-linear. Com esse intuito, foi escolhido um material polimérico termoplástico, 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 elongamento considerável, na maior parte das vezes devido ao "empescoçamento" do material. Na Figura 4 pode-se observar os diagramas de tensão-deformação de diferentes tipos de polímeros, sendo o diagrama (v) correspondente ao comportamento do material do presente trabalho.



Figura 4: tipos de diagrama tensão-deformação para os diferentes grupos de polímeros (segundo Carswell e Nason). Retirado de [7]p. 284.

3.1. Propriedades elásticas dos polímeros

Polímeros possuem constantes elásticas que oscilam desde o menor valor das constantes elásticas de metais a valores ainda menores em diversas ordens de

magnitude. Como exemplo, melaminas possuem constantes elásticas entre 6 e 7 GPa, enquanto a constante elástica de espumas poliméricas é entre 3 e 10 MPa.

A Tabela 1 fornece uma comparação de constantes elásticas de diversos polímeros.

material	E (GPa)
Fenolformaldeído	8
Melaminas	6 – 7
Poliimidas	3 – 5
Poliésteres	1,3 - 4,5
Acrílicos	1,6 – 3,4
Nylon	2 - 4,5
PMMA	3,4
Poliestireno	3 – 3,4
Policarbonato	2,1
epóxis	2,1-5,5
Polipropileno	1,2 - 1,7
Polietileno, alta densidade	0,15 - 0,24
Espuma de poliuretano	0,01 - 0,06
Polietileno, baixa densidade	0,15 - 0,24
Borrachas	0,01 - 0,1
PVC	2,4 - 3,0
	$\cdot 1 (0 f 1 D$

Tabela 1: constantes elásticas de alguns polímeros.

Adaptado de M.F. Ashby e D. H. Jones, Engineering Materials (Oxford Pergamon Press, 1986), p. 31,

Tabela 3.1.

O comportamento elástico de materiais poliméricos é mais complexo em ser descrito que o comportamento de metais ou cerâmicos devido à sua forte dependência a temperatura e tempo. Este comportamento, chamado de *viscoelástico* ou *anelástico*, é detalhado na seção seguinte.

Em polímeros, observa-se uma grande mudança em E entre temperaturas de -20°C e 200°C e, portanto a temperatura de transição vítrea T_g desempenha um importante papel. Acima de T_g , E é consideravelmente baixo, e o comportamento do polímero é descrito como elástico (rubbery) e viscoso. Abaixo de T_g , o módulo de elasticidade é consideravelmente maior, e o comportamento se torna mais próximo ao elástico linear. A Figura 5 demonstra o comportamento de um polímero linear em função da temperatura. Nota-se que o módulo de elasticidade abrange de 10³ a 10⁻¹ MPa.



Figura 5: Variação esquemática do Módulo de Elasticidade de um polímero linear de acordo com a temperatura. Retirado de [17]. p. 97.

3.2. Viscoelasticidade

Materiais vítreos ou amorfos apresentam o fenômeno de deformação dependente do tempo, denominado *viscoelasticidade* ou *anelasticidade*. A deformação de um material amorfo não envolve deslocamentos atômicos em planos cristalográficos específicos, como para materiais cristalinos. Ao contrário, um deslocamento contínuo de átomos ou moléculas acontece no decorrer do tempo sob um carregamento constante. Este mecanismo de escoamento de materiais nãocristalinos é associado à difusão de átomos ou moléculas no material; ou seja, é um processo ativado termicamente e, portanto é descrito por uma equação de Arrhenius. Em temperaturas suficientemente altas, onde o fenômeno de difusão se torna importante, tanto materiais cristalinos como amorfos apresentam uma grande quantidade de escoamento plástico termicamente ativado. Os fluidos em geral apresentam uma resistência característica ao escoamento denominada de viscosidade. A viscosidade de um fluido resulta de uma perda de energia devido ao atrito, que aparece sob a forma de calor. Quanto mais viscoso o fluido, maior é a perda de energia devido ao atrito.

Para uma faixa de temperaturas, a viscosidade μ pode ser descrita pela seguinte relação de Arrhenius:

onde Q representa a energia de ativação do processo atômico ou molecular responsável pela viscosidade, R é a constante universal do gás e T é a temperatura absoluta (K). A unidade no SI para viscosidade é Nm⁻² ou Pa s.

Um material puramente viscoso apresenta tensão proporcional à taxa de deformação. Portanto, se uma tensão cisalhante τ é aplicada a um sólido cristalino exposto a uma temperatura superior a sua temperatura vítrea, pode-se definir a taxa de distorção como:

$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt} = \frac{\tau}{\mu} = \phi \cdot \tau$$
ou
$$\tau = \mu \cdot \dot{\gamma}$$

onde $\phi \notin a$ *fluidez* (inverso da viscosidade) do material.

Caso a viscosidade do material não mude com a taxa de deformação, ou seja, é linear, dá-se o nome de *viscosidade Newtoniana* e, assim, denomina-se esse material como *material Newtoniano*. A Figura 6 mostra uma curva de resposta Newtoniana. Caso a tensão não seja proporcional à taxa de deformação, tem-se uma resposta não-Newtoniana, que pode ser representada por:

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

Tal comportamento é indicado como não-linear na Figura 6. Caso a tensão seja independente da taxa de deformação, o material é dito plástico. Um caso especial é do material cuja viscosidade diminui quando é submetido a altas taxas de deformação. Tal material é denominado de *thixotrópico*, cujo exemplo mais emblemático é a tinta látex. Ao se aplicar a tinta em uma parede vertical, ela não escorre por sua viscosidade ser muito alta na parede. Entretanto, pode-se espalhar a

tinta facilmente porque sua viscosidade diminui quando submetida a uma tensão cisalhante na direção do movimento.



Figura 6: Resposta linear Newtoniana (tensão proporcional à taxa de deformação), resposta não-linear e resposta plástica (tensão independente da taxa de deformação). Retirado de [17]. p. 99.

Os polímeros apresentam viscosidades na faixa de 10^3 a 10^5 Pa s. Talvez a característica mais importante dos materiais viscoelásticos seja o quão dependente do tempo são suas propriedades reológicas. Tais características se manifestam com maior freqüência em materiais amorfos ou não-cristalinos tais como os polímeros.

Uma substância viscoelástica possui uma componente viscosa e outra elástica. A Figura 7a. mostra a curva tensão-deformação de um material elástico. As curvas de carga e descarga são as mesmas e a energia dissipada por calor por ciclo é zero nesse caso. Na prática, sempre há a presença de uma componente anelástica (ou seja, dependente do tempo), com a diferença que a curva de descarga não concorda com a curva de carga. A área sombreada da Figura 7b. é igual à energia dissipada em cada ciclo de carregamento. Este fenômeno é explorado no amortecimento de vibrações. Alguns polímeros e metais leves possuem uma alta capacidade de amortecimento, característica essa indesejada em materiais de fabricação de molas.



Figura 7: Gráficos de tensão-deformação para: a. comportamento elástico; b. comportamento viscoelástico. Retirado de [17]. p. 100.

3.3. Deformação plástica de polímeros

3.3.1. Curvas de tensão-deformação

Em um nível microscópico, a deformação em polímeros envolve o estiramento e a rotação das ligações moleculares. Usualmente, os mecanismos de deformação em polímeros são classificados em frágeis, dúcteis (com ou sem empescoçamento) e elastoméricos. A Figura 8 mostra as curvas correspondentes a cada um desses mecanismos. É evidente que fatores como taxa de deformação e temperatura afetam a forma das curvas de tensão-deformação, sendo muito mais visível em polímeros que em cerâmicos e metais. Esse fato é devido à viscoelasticidade desses materiais, ou seja, o comportamento tensão-deformação é dependente do tempo. Já a temperatura e a taxa de deformação causam efeito contrário. Ao aumentar a taxa de deformação (ou diminuir a temperatura) se obtêm níveis maiores de tensão, porém valores menores de deformação. A Figura 9 apresenta tal comportamento.

Polímeros (em especial aqueles lineares e semi-cristalinos), de uma maneira grosseira parecida com os metais, podem apresentar os fenômenos de escoamento e empescoçamento. A condição de empescoçamento, mais uma vez de modo similar aos metais, pode ser representada pela equação:



Figura 8: Esquema dos diferentes tipos de curvas de tensão-deformação em um polímero. Retirado de [17]. p 139.

Esta equação diz que o empescoçamento ocorre quando a taxa de encruamento $d\sigma_t/d\epsilon_t$ atinge um valor igual a σ_t . Nesse ponto, a resistência devido ao encruamento não pode ser compensada pela perda em resistência devido à diminuição da área transversal do corpo, e assim, o empescoçamento ocorre.



Figura 9: Efeito de taxa de deformação e temperatura nas curvas de tensão-deformação. Retirado de [17]. p. 139.

3.3.2. Polímeros vítreos

De maneira similar à ocorrência em metais, deformação plástica ocorre de modo não-homogêneo em polímeros. Duas formas de deformação não-homogênea são observadas em polímeros vítreos: bandas de cisalhamento (shear bands) e fissuras. Bandas de cisalhamento formam a um ângulo de 45° da maior tensão principal. As cadeias moleculares poliméricas são orientadas junto às bandas de cisalhamento sem haver variação de volume. O processo de formação das bandas de cisalhamento pode contribuir para a tenacidade do polímero por se tratar de um processo de dissipação de energia. O escoamento cisalhante pode tomar duas formas: escoamento cisalhante difuso e formação de bandas de cisalhamento localizada. No cisalhamento localizado, o cisalhamento é concentrado em regiões planas e o processo envolve um movimento "de cooperação" das cadeias moleculares. As bandas se formam a 45° do eixo de tensão. Fissuras são zonas estreitas de polímero altamente deformado contendo vãos; as zonas são orientadas perpendiculares ao eixo de tensão. Nas zonas com fissuras, as cadeias moleculares se alinham ao longo do eixo de tensão, porém elas são intercaladas com vazios. A região de vazios em uma fissura pode ser de até 55%. Ao contrário das bandas cisalhantes, a formação de fissuras não requer a condição de constância do volume. Geralmente, o fissuramento ocorre em polímeros frágeis. Também pode ocorrer em alguns casos com polímeros dúcteis, mas o modo de deformação predominante nesses polímeros é o escoamento cisalhante.

Como os cerâmicos, polímeros vítreos ou cristalinos apresentam comportamentos de tensão-deformação distintos na tensão e na compressão. A razão para isso é o fato que as falhas superficiais são muito mais perigosas em tensão que em compressão.

3.3.3. Polímeros semi-cristalinos

Polímeros semi-cristalinos contendo esferulitas apresentam um modo de deformação altamente complexo. Como característica, estes materiais exibem uma curva de tensão-deformação dúctil com empescoçamento. Um exemplo de tal comportamento está presente na Figura 10, assim como o processo de formação de uma estrutura esferulítica em uma estrutura fibrilar quando sob a ação de uma tensão

trativa. Tal orientação das cadeias poliméricas paralelas à direção de aplicação da tensão aumenta a resistência naquela direção. A Figura 11a. apresenta uma foto de um empescoçamento se propagando em um corpo de prova de tração linear de polietileno enquanto a Figura 11b. mostra um esquema da formação do empescoçamento e sua propagação.



Figura 10: esquema de empescoçamento e estiramento em um polímero semi-cristalino. Retirado de [17]. p. 140.



Figura 11: a. propagação de empescoçamento em uma chapa de polietileno linear. b. formação e propagação em um espécime, mostrado de maneira esquemática. Retirado de [17]. p. 141.

3.3.4. Escoamento viscoso

Sob altas temperaturas $(T \ge T_g)$, polímeros se submetem a um escoamento viscoso. Sob essas condições, a tensão possui uma maior relação com a taxa de deformação do que com a deformação em si. Ou seja,
$$\tau = \mu \cdot \frac{d\gamma}{dt}$$

O escoamento viscoso é um processo ativado termicamente e ocorre por movimento molecular, o qual aumenta assim que se aumenta a temperatura. Este escoamento viscoso envolve a quebra local e reconstrução da estrutura em rede do polímero. A energia térmica para isso é disponibilizada acima da temperatura de transição vítrea T_g . Abaixo de T_g , a energia térmica é tão baixa para a quebra e reconstrução das ligações que o material não escoa tão facilmente. Sob temperaturas extremamente altas, a viscosidade é dada pela relação de Arrhenius vista na seção 3.2.

3.3.5. Aquecimento adiabático

Há uma única característica associada com a deformação plástica de polímeros. A maioria do trabalho realizado durante a deformação de qualquer material é convertida em calor. Em metais, esse fenômeno não tem importância, porque metais são bons condutores e, exceto sob taxas de deformação extremamente altas, o calor gerado é dissipado no meio ambiente rapidamente, tal que o aumento de temperatura do metal é insignificante. Por outro lado, os polímeros são mal-condutores de calor. Portanto, qualquer calor gerado em regiões localizadas de um espécime devido à deformação plástica pode causar amolecimento local. No caso de fadiga, o calor pode ser dissipado até que facilmente sob baixas deformações e baixas freqüências, mesmo para polímeros. Uma quantia significativa de amolecimento, entretanto, pode ocorrer sob condições de altas taxas de deformação e altas freqüências de carregamento cíclico. Tal fenômeno é chamado de *aquecimento adiabático*.

3.4. 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 (Figura 12). Assim, não há formação de subprodutos.



Figura 12: polimerização do PVC.

O PVC exibe características peculiares como boa resistência a choques e a reagentes químicos, bom isolamento térmico, acústico e elétrico, além de ser autoextinguível.

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 DO MATERIAL

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 (Figura 13) 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.

A geometria dos corpos de prova é apresentada no ANEXO A.

Durante os ensaios, um extensômetro é utilizado para se determinar a distância entre dois pontos do comprimento de estricção do corpo de prova. As características do extensômetro utilizado são apresentadas na Tabela 2.



Figura 13: máquina de ensaios.

Modelo	Extensômetro estático GL 25 mm			
Gauge length	25 mm			
Percurso	+12,5 mm / -2,5 mm			
Repetibilidade	< 0,1% do Fundo de Escala			
Histerese	< 0,3% do F. E.			
Tara	< ± 2,5% do F. E.			
Sensibilidade	2,5 + 1% - 3% mV/V			
Resistência nominal	350 Ω			

Tabela 2: especificações técnicas do extensômetro.

4.1.1. Ensaios de tração

O procedimento dos ensaios de tração foi baseado na norma ASTM D 638 – 00 [1]. Essa norma cobre a determinação das propriedades de tração de plásticos não-reforçados e reforçados na forma de corpos de prova com geometria específica. De acordo com a forma de obtenção do corpo de prova, a norma apresenta corpos de prova com seção transversal retangular (Figura 14), circular ou tubular.

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. Detalhes de fixação são mostrados na Figura 15.

Como pôde ser observado, o extensômetro é fixado diretamente no corpo de prova, mais precisamente no seu comprimento de estricção (cota G - Figura 14).

Os corpos de prova antes do ensaio podem ser vistos na Figura 16.

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.



Figura 14: exemplo de corpo de prova de tração - seção transversal retangular.



Figura 15: detalhes de fixação em teste de tração.



Figura 16: corpos de prova de tração.

4.1.2. Ensaios de compressão

Para os ensaios de compressão, a norma ASTM D 695 – 96 [2] foi utilizada como base dos procedimentos a serem seguidos. Essa norma cobre a determinação das propriedades mecânicas de plásticos não-reforçados e reforçados quando submetidos a cargas de compressão.

A norma 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 17).

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.

A Figura 18 ilustra essa configuração.

Para a medição do deslocamento do espécime, 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 ensaio adotada foi de 1,3 mm/min.



Figura 17: corpos de prova de compressão.



Figura 18: configuração de um ensaio 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.

Considere uma barra de seção transversal uniforme A_0 e comprimento inicial L_0 (Figura 19), submetida a uma carga quasi-estática de tração F. A tensão de engenharia, σ_0 , produzida na barra é dada por:

$$\sigma_0 = \frac{F}{A_0}$$

Essa tensão provoca na barra uma deformação ε_0 . A carga *F* causa um aumento do comprimento L_0 para um valor final *L*. A deformação de engenharia é então definida por:

$$\varepsilon_0 = \frac{L - L_0}{L_0}$$

A tensão real (verdadeira) σ_R é definida como a razão entre a carga em qualquer instante e a área da seção transversal do corpo de prova no instante correspondente, A_i . Assim, tem-se:

$$\sigma_R = \frac{F}{A_i}$$

A deformação real (verdadeira) é baseada na mudança instantânea do comprimento com relação ao comprimento-base da medida. Assim, sob uma carga F_i , o comprimento inicial se alonga de L_0 para L_i . A deformação real unitária é então dada por:

$$d\delta = \frac{dL_i}{L_i}$$

Para um aumento da carga de 0 a F e correspondente aumento de L_0 para L, a



Figura 19: barra submetida a esforço de tração.

deformação real $\delta \acute{e}$ dada por:

$$\delta = \int_{L_0}^{L} \frac{dL_i}{L_i} = \ln \frac{L}{L_0}$$

Considerando a definição de deformação de engenharia, tem-se:

$$\delta = \ln(1 + \varepsilon_0)$$

e, considerando que o volume do material permanece aproximadamente constante, a tensão real é relacionada com a de engenharia por:

$$\sigma_R = \frac{F}{A_i} = \frac{F}{A_i \cdot \frac{L_0}{L}} = \sigma_0 \cdot (1 + \varepsilon_0)$$

4.2.1. Ensaios de tração

Devido à limitação de percurso do extensômetro (12,5 mm) e também por se tratar de material dúctil, decidiu-se por ensaiar o primeiro corpo de prova do material até um ponto em que fosse garantida a obtenção precisa dos dados referentes ao seu comportamento linear.

Para o segundo espécime, o ensaio foi realizado até sua ruptura, sendo os

dados de deformação calculados a partir do deslocamento da garra superior da máquina de ensaio.

A Figura 20 mostra os corpos de prova do PVC após os ensaios.



Figura 20: corpos de prova de PVC após ensaios de tração.

A Figura 21 apresenta o gráfico obtido dos ensaios de tração do PVC. Nessa figura, são apresentados o gráfico *tensão verdadeira* × *deformação verdadeira*, (a), e o gráfico *força* × *deslocamento*, (b).



Figura 21: gráficos de tensão verdadeira × deformação verdadeira (a) e força × deslocamento (b) para tração.

4.2.2. Ensaios de compressão

Como o maior dos corpos de prova de compressão era menor que o limite máximo do percurso do extensômetro, esse instrumento foi utilizado em todos os ensaios de compressão.

Por se tratar de materiais dúcteis, os ensaios foram levados até que houvesse a ruptura do espécime ou até que a carga aplicada chegasse a 80% da carga limite da máquina de ensaio (*40kN*).

A Figura 22 apresenta os gráficos obtidos dos ensaios de compressão do PVC. Essa figura apresenta um gráfico |*tensão verdadeira*| × |*deformação verdadeira*|, (a), e outro gráfico |*força*| × |*deslocamento*|, (b).



Figura 22: gráficos de |*tensão verdadeira*| × |*deformação verdadeira*| (a) e |*força*| × |*deslocamento*| (b) para a compressão.

4.3. Discussão dos resultados

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.

Dos 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 conseqüência, o corpo de prova do experimento 1 sofreu flambagem. Da Figura 22 nota-se no início da deformação plástica desse espécime um comportamento anormal. Isso se deve ao 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 23b). 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].



Figura 23: gráficos de |*deslocamento*| × tempo (a) e |*força*| × tempo (b). Experimento 2.

5. SIMULAÇÃO

Segundo [11], 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 [11], 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.

[8] mostram que no estudo de um sistema físico \mathcal{M} , as propriedades elásticas de um material anisotrópico pode ser dividido em três passos (Figura 24):

- 1°. Parametrização do sistema descrição de \mathcal{M} usando um conjunto mínimo de parâmetros \mathcal{P} do modelo;
- 2°. Modelamento progressivo consiste em achar as leis físicas que, para um dado conjunto de parâmetros do modelo, estima as quantidades mensuradas pertencentes a *M*;
- 3°. Modelamento inverso quando as quantidades mensuradas pertencentes a \mathcal{M} são usadas para deduzir os valores dos parâmetros do modelo.



Figura 24: estudo científico de um sistema físico. Retirado de [8]. p 3448.

Ainda em relação a [8], os autores utilizaram o processo descrito acima para extrair os parâmetros A, B, C e n da Lei de Johnson-Cook para um aço testado quasi-estaticamente:

$$\bar{\sigma} = \left(A + B\bar{\epsilon}_p^n\right) \left(1 + \dot{\bar{\epsilon}}_p^*\right)^C \left(1 - T^{*m}\right)$$

A função-objetivo utilizada nesse trabalho foi:

$$\begin{split} \Phi_{1} &= \frac{1}{N-p} \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_{m}} \left[\left(\frac{u_{n}^{exp}(t_{m}) - u_{n}^{FE}(t_{m})}{\left|u_{n}^{exp}(t_{m})\right|_{max} - \left|u_{n}^{exp,mean}(t_{m})\right|} \right)^{2} \\ &+ \left(\frac{v_{n}^{exp}(t_{m}) - v_{n}^{FE}(t_{m})}{\left|v_{n}^{exp}(t_{m})\right|_{max} - \left|v_{n}^{exp,mean}(t_{m})\right|} \right)^{2} \\ &+ \left(\frac{\epsilon_{ep} n^{exp}(t_{m}) - \epsilon_{ep} n^{FE}(t_{m})}{\left|\epsilon_{ep}^{exp}(t_{m})\right|_{max} - \left|\epsilon_{ep}^{exp,mean}(t_{m})\right|} \right)^{2} \right] \end{split}$$

$$N = \sum_{m=1}^{M} N_m$$

$$\Phi_{1} = \frac{1}{M-p} \sum_{m=1}^{M} \left(\frac{F^{exp}(t_{m}) - F^{FE}(t_{m})}{\left|F^{exp}(t_{m})\right|_{max} - \left|F^{exp,mean}(t_{m})\right|} \right)^{2}$$

 $\Phi=\Phi_1+\Phi_2$

sendo:

 t_m - instante de tempo;

 $u^{exp}(t_m)$ – deslocamento na direção x, medido experimentalmente;

 $u^{FE}(t_m)$ – deslocamento na direção x, obtido através do método dos elementos finitos;

 $v^{exp}(t_m)$ - deslocamento na direção y, medido experimentalmente;

 $v^{FE}(t_m)$ – deslocamento na direção y, obtido através do método dos elementos finitos;

 $\epsilon_{ep}^{exp}(t_m)$ - deformação plástica efetiva, obtida experimentalmente;

 $F^{exp}(t_m)$ - força axial aplicada experimentalmente;

 $F^{FE}(t_m)$ – força axial aplicada, obtida através do método dos elementos finitos;

p – número de parâmetros do material;

 N_m – número de pontos de medidas em certos instantes de tempo t_m ;

M – número de instantes.

Ou seja, os parâmetros do material são obtidos minimizando o erro entre as medidas experimentais e obtidas através dos elementos finitos para os mesmos instantes. Tal procedimento é sintetizado na Figura 25.



Figura 25: diagrama de solução de um problema inverso. Retirado de [8]. p 3450.

Para o presente trabalho, foi escolhido o *software* LS-OPT para realizar a rotina de otimização. O procedimento empregado foi similar ao realizado por [20], 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.

5.2. Algoritmo de otimização

O *software* LS-OPT disponibiliza algoritmos de otimização baseados em métodos probabilísticos, tais como os citados na seção 2.2, 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 26 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

$$x_i^{rI,0} = x_i^{(0)} - 0.5r_i^{(0)} e x_i^{rS,0} = x_i^{(0)} + 0.5r_i^{(0)}$$
, com *i* = 1,..., *n*



Figura 26: adaptação da subregião no SRSM. a. puro deslocamento. b. pura redução. c. uma combinação de deslocamento e redução. Retirado de [19]. 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 $i \in k$) é normalizado como \hat{c} onde

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

O parâmetro de contração γ é então calculado como

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

Veja a Figura 27. 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 27: a taxa de contração γ da subregião como uma função do indicador de oscilação ĉ e a distância do movimento absoluto |d|. Retirado de [18]. 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 26a). Caso o ponto ótimo coincida com o ponto anterior, a subregião é estacionária, mas reduz de tamanho (*zooming* – Figura 26b). Ambos *zooming* e *panning* podem ocorrer se houver um movimento parcial (Figura 26c). A faixa $r_i^{(k+1)}$ para a nova subregião na (k+1)-ésima iteração é determinada por:

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

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

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

para cada variável (ver Figura 27).

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 Hipercubo 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

$max|X^TX|$

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 3. 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.

Number of	Linear approximation		Quadratic approximation			Central	
Variables n	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

Tabela 3: número de pontos experimentais necessários para planejamentos experimentais.

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:

- 1º. 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;
- 2º. 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;
- 3°. A função-objetivo (MSE) de cada ponto selecionado acima é minimizada;
- 4°. O ponto de menor valor (MSE) é o ponto ótimo aproximado e é considerado o novo conjunto de parâmetros iniciais;
- 5°. Caso esse valor seja maior que a tolerância de projeto préestabelecida, 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 com o auxílio do software Altair Hypermesh e a solução, obtida com o software LS-Dyna.

Para simular o teste de compressão, foi gerada a malha do sistema com as seguintes características (Figura 28):

• Os pratos da máquina de compressão foram considerados como dois corpos rígidos (cartão *MAT_RIGID no LS-DYNA);

Para diminuir o custo computacional, foi simulado um quarto do espécime de PVC (Figura 28c). Para manter a simetria do sistema, foram impostas restrições aos nós pertencentes aos planos de simetria de não se deslocarem na direção perpendicular aos planos em que estão contidos;

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 4.3);

As propriedades do material podem ser conferidas na Tabela 4. Diante desses dados, os valores da massa específica e do coeficiente de Poisson foram utilizados como constantes dos Modelos de material adotados. Já os valores da tensão de escoamento e do módulo de elasticidade serviram como valores de referência para os resultados da identificação paramétrica.

Propriedade	PVC	
Massa específica	1430 kg/m^3	
Coeficiente 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	
Coeficiente de expansão térmica médio	$0.8 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$	

Tabela 4: propriedades do PVC. Retirado de [18].

ciente de expansão termica medio | 0.8.10



(a)





Figura 28: malha da simulação do teste de compressão. a. vista isométrica. b. vista de topo. c. vista em perspectiva.

5.4. Modelos de material

Como visto na seção 3.3, 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, consequentemente, diversos modelos de materiais foram propostos, desde os modelos clássicos de Mooney (1940), Rivlin (1948), Valanis et Landel (1967) e Odgen (1984), apud Arruda et Boyce [3], até modelos mais recentes como de Arruda et Boyce (1993) [3] e de Bergström et Boyce (1998) [4].

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, segundo [16], 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 hiperviscoelástico (cartão *MAT_ARRUDA_BOYCE).

A seguir é apresentado um resumo de cada modelo, conforme [6].

5.4.1. Modelo elastoplástico com encruamento cinemático

Este modelo de material foi formulado por Krieg et Key (1976) apud [6] e pode apresentar o encruamento como isotrópico ($\beta = 1$), cinemático ($\beta = 0$) ou uma combinação de ambos ($0 < \beta < 1$).

No encruamento isotrópico, o centro da superfície de escoamento é fixo, mas o raio é uma função da deformação plástica. Já no encruamento cinemático, o raio da superfície de escoamento é fixo, mas o centro translada na direção da deformação plástica. Dessa forma, a condição de escoamento é:

$$\phi = \frac{1}{2}\xi_{ij}\xi_{ij} - \frac{\sigma_y^2}{3} = 0$$

onde

$$\xi_{ij} = s_{ij} - \alpha_{ij}$$
$$\sigma_y = \sigma_0 + \beta E_p \varepsilon_{eff}^p$$

A taxa co-rotacional de α_{ij} é

$$\alpha_{ij}^{\nabla} = (1 - \beta) \frac{2}{3} E_p \dot{\varepsilon}_{ij}^p$$

Portanto,

$$\alpha_{ij}^{n+1} = \alpha_{ij}^{n} + \left(\alpha_{ij}^{\nabla n+1/2} + \alpha_{ik}^{n}\Omega_{kj}^{n+1/2} + \alpha_{jk}^{n}\Omega_{ki}^{n+1/2}\right)\Delta t^{n+1/2}$$

Taxa de deformação é considerada com o uso do Modelo de Cowper-Symonds (Jones 1983 apud [6]) que modifica a tensão de escoamento com um fator dependente da taxa de deformação:

$$\sigma_{y} = \left[1 + \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{C}\right)^{\frac{1}{p}}\right] \left(\sigma_{0} + \beta E_{p} \varepsilon_{eff}^{p}\right)$$

onde $p \in C$ são constantes de entrada e $\dot{\varepsilon}$ é a taxa de deformação definida por

$$\dot{\varepsilon} = \sqrt{\dot{\varepsilon}_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}}$$

O raio corrente da superfície de escoamento, σ_y , é a soma da tensão de escoamento inicial, σ_0 , mais o crescimento $\beta E_p \varepsilon_{eff}^p$, onde E_p é o módulo de encruamento plástico

$$E_p = \frac{E_t E}{E - E_t}$$

e ε^p_{eff} é a deformação plástica efetiva

$$\varepsilon_{eff}^{p} = \int_{0}^{t} \left(\frac{2}{3}\dot{\varepsilon}_{ij}^{p}\dot{\varepsilon}_{ij}^{p}\right)^{1/2} dt$$

A taxa de deformação plástica é a diferença entre as taxas de deformação total e elástica

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \dot{\varepsilon}_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij}^e$$

Na implementação desse modelo de material, as tensões desviadoras são atualizadas elasticamente:

$$\sigma_{ij}^* = \sigma_{ij}^n + C_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}$$

Onde

 σ_{ij}^* é o tensor das tensões atuais;

 σ_{ij}^{n} é o tensor das tensões do passo de tempo anterior;

 C_{ijkl} é a matriz dos módulos elásticos tangentes;

 $\Delta \varepsilon_{kl}$ é o tensor das deformações incremental.

E, caso a função de escoamento é satisfeita, nada mais é feito. Se, entretanto, a função de escoamento é violada, um incremento na deformação plástica é computado, as tensões são diminuídas para a superfície de escoamento e a superfície de escoamento é atualizada.

Representando o estado de tensões elásticas desviadoras atuais no passo n+1por s_{ij}^*

$$s_{ij}^* = \sigma_{ij}^* - \frac{1}{3}\sigma_{kk}^*$$

e

$$\xi_{ij}^* = s_{ij}^* - \alpha_{ij}^*$$

Assim, a função de escoamento é definida por

$$\phi = \frac{2}{3}\xi_{ij}^*\xi_{ij}^* - \sigma_y^2 = \Lambda_y^2 - \sigma_y^2 \begin{cases} \leq 0 \text{ para carregamento elástico ou neutro} \\ > 0 \text{ para encruamento} \end{cases}$$

Então, para encruamento

$$\varepsilon_{eff}^{p n+1} = \varepsilon_{eff}^{p n} + \frac{\Lambda - \sigma_y}{3G + E_p} = \varepsilon_{eff}^{p n} + \Delta \varepsilon_{eff}^{p}$$

as tensões desviadoras são diminuídas

$$\sigma_{ij}^{n+1} = \sigma_{ij}^* - \frac{3G\Delta\varepsilon_{eff}^p}{\Lambda}\xi_{IJ}^*$$

e o centro é atualizado

$$\alpha_{ij}^{n+1} = \alpha_{ij}^* + \frac{(1-\beta)\Delta\varepsilon_{eff}^p}{\Lambda}\xi_{IJ}^*$$

Na simulação realizada, foi considerado encruamento cinético ($\beta = 0$) e desprezados os efeitos de taxa de deformação, por se tratar de um ensaio quasiestático.

5.4.2. Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin

O modelo de material Mooney-Rivlin é baseado em uma função da energia de deformação, *W*, como indicado

$$W = A(I_1 - 3) + B(I_2 - 3) + C\left(\frac{1}{I_3^2} - 1\right) + D(I_3 - 1)^2$$

Sendo $A \in B$ constantes de entrada, enquanto $C \in D$ são relacionados com $A \in B$ da seguinte forma

$$C = \frac{1}{2}A + B$$

$$D = \frac{A(5\nu - 2) + B(11\nu - 5)}{2(1 - 2\nu)}$$

Os componentes principais da tensão de Cauchy, σ_i , são dados por Odgen (1984) apud [6]

$$J\sigma_i = \lambda_i \frac{\partial W}{\partial \lambda_i}$$

Para dilatação uniforme

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda$$

assim, a pressão, p, é obtida

$$p = \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \frac{2}{\lambda^3} \left(\lambda^2 \frac{\partial W}{\partial I_1} + 2\lambda^4 \frac{\partial W}{\partial I_2} + \lambda^6 \frac{\partial W}{\partial I_3} \right)$$

O volume relativo, V, pode ser definido em termos dos estiramentos como:

$$V = \lambda^3 = \frac{volume \ novo}{volume \ antigo}$$

Para deformações volumétricas pequenas o módulo de compressibilidade, K, pode ser definido como a razão da pressão sobre a deformação volumétrica quando o volume relativo se aproxima da unidade:

$$K = \lim_{V \to 1} \left(\frac{p}{V - 1} \right)$$

As derivadas parciais de W levam a:

$$\frac{\partial W}{\partial I_1} = A$$
$$\frac{\partial W}{\partial W}$$

$$\overline{\partial I_2} = B$$

$$\frac{\partial W}{\partial I_3} = -2CI_3^{-3} + 2D(I_3 - 1) = -2C\lambda^{-18} + 2D(\lambda^6 - 1)$$

$$p = \frac{2}{\lambda^3} \{ A\lambda^2 + 2\lambda^4 B + \lambda^6 [-2C\lambda^{-18} + 2D(\lambda^6 - 1)] \}$$
$$= \frac{2}{\lambda^3} \{ A\lambda^2 + 2\lambda^4 B - 2C\lambda^{-12} + 2D(\lambda^{12} - \lambda^6) \}$$

No limite em que a razão de estiramento se aproxima da unidade, a pressão se aproxima de zero:

$$\lim_{\lambda \to 1} p = 0$$

Portanto, A + 2B - 2C = 0 e

$$\therefore C = 0,5A + B$$

Para resolver D, nota-se que:

$$K = \lim_{V \to 1} \left(\frac{p}{V-1}\right) = \lim_{\lambda \to 1} \frac{\frac{2}{\lambda^3} \{A\lambda^2 + 2\lambda^4 B - 2C\lambda^{-12} + 2D(\lambda^{12} - \lambda^6)\}}{\lambda^3 - 1}$$
$$= 2\lim_{\lambda \to 1} \frac{A\lambda^2 + 2\lambda^4 B - 2C\lambda^{-12} + 2D(\lambda^{12} - \lambda^6)}{\lambda^6 - \lambda^3}$$
$$= 2\lim_{\lambda \to 1} \frac{2A\lambda^1 + 8\lambda^3 B + 24C\lambda^{-13} + 2D(12\lambda^{11} - 6\lambda^5)}{6\lambda^5 - 3\lambda^2}$$
$$= \frac{2}{3}(2A + 8B + 24C + 12D) = \frac{2}{3}(14A + 32B + 12D)$$

Obtém-se assim:

$$14A + 32B + 12D = \frac{3}{2}K = \frac{3}{2}\left(\frac{2G(1+\nu)}{3(1-2\nu)}\right) = \frac{2(A+B)(1+\nu)}{(1-2\nu)}$$
$$D = \frac{A(5\nu-2) + B(11\nu-5)}{2(1-2\nu)}$$

Os invariantes I_1 , I_2 e I_3 são relacionados ao tensor direito de Cauchy-Green C:

$$I_{1} = C_{ii}$$
$$I_{2} = \frac{1}{2}C_{ii}^{2} - \frac{1}{2}C_{ij}C_{ij}$$

$$I_3 = det(C_{ij})$$

O segundo tensor de tensões de Piola-Kirchhoff, S, é encontrado ao se calcular a derivada parcial da função da energia de deformação pelo tensor de deformações de Green-Lagrange, E:

$$S_{ij} = \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} = 2\frac{\partial W}{\partial C_{ij}} = 2\left(A\frac{\partial I_1}{\partial C_{ij}} + B\frac{\partial I_2}{\partial C_{ij}} + \left(2D(I_3 - 1) - \frac{2C}{I_3^2}\right)\frac{\partial I_3}{\partial C_{ij}}\right)$$

sendo as derivadas dos invariantes

$$\frac{\partial I_1}{\partial C_{ij}} = \delta_{ij}$$

$$\frac{\partial I_2}{\partial C_{ij}} = I_1 \delta_{ij} - C_{ij}$$

$$\frac{\partial I_3}{\partial C_{ij}} = I_3 C_{ij}^{-1}$$

Assim, a segunda tensão de Piola-Kirchhoff se torna

$$S_{ij} = 2A\delta_{ij} + 2B(I_1\delta_{ij} - C_{ij}) - 4C\frac{1}{I_3^2}C_{ij}^{-1} + 4D(I_3 - 1)I_3C_{ij}^{-1}$$

E assim, se obtém a tensão de Cauchy:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{J} F_{ik} S_{kl} F_{jl}$$

onde $J = det(F_{ij})$.

5.4.3. Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce

Este modelo, descrito em [3], fornece um modelo de borracha que é opcionalmente combinado com viscoelasticidade linear. A borracha é normalmente considerada totalmente incompressível desde que o módulo de compressibilidade exceda consideravelmente o módulo de cisalhamento em magnitude. Assim, para se modelar a borracha como um material sem restrições, um termo de trabalho hidrostático, $W_H(J)$, é incluso no funcional da energia de deformação o qual está em função do volume relativo, J, (Ogden , 1984 apud [3]:

$$W(J_1, J_2, J) = nk\theta \left[\frac{1}{2} (J_1 - 3) + \frac{1}{20N} (J_1^2 - 9) + \frac{11}{1050N^2} (J_1^3 - 27) \right] + nk\theta \left[\frac{19}{7000N^3} (J_1^4 - 81) + \frac{519}{673750N^3} (J_1^5 - 243) \right] + W_H(J) J_1 = I_1 J^{-1/3} J_2 = I_2 J$$

O termo do trabalho hidrostático é expresso em termos do módulo de compressibilidade, K, e J, como

$$W_H(J) = \frac{K}{2}(J-1)^2$$

Efeitos de tempo são considerados na viscoelasticidade linear por uma integral de convolução de forma:

$$\sigma_{ij} = \int_{0}^{t} g_{ijkl}(t-\tau) \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial \tau} d\tau$$

ou em termos da segunda tensão de Piola-Kirchhoff, S_{ij} , e do tensor de deformações de Green, E_{ij} ,

$$S_{ij} = \int_{0}^{t} G_{ijkl}(t-\tau) \frac{\partial E_{kl}}{\partial \tau} d\tau$$

onde $g_{ijkl}(t - \tau)$ e $G_{ijkl}(t - \tau)$ são funções de relaxação para diferentes medidas de tensão. Esta tensão é adicionada ao tensor de tensões determinado do funcional da energia de deformação.

Caso se queira incluir somente efeitos simples de tempo, a função de relaxação é representada por uma série de Prony com seis termos:

$$g(t) = \alpha_0 + \sum_{m=1}^N \alpha_m e^{-\beta t} = \sum_{i=1}^N G_i e^{-\beta_i t}$$

Este modelo é efetivamente um fluido de Maxwell o qual consiste em um conjunto de amortecedores e molas em séries. Estes são caracterizados como entrada pelos módulos de cisalhamento, G_i , e constantes de decaimento, β_i . O comportamento viscoelástico é opcional e um número arbitrário de termos pode ser usado.

5.5. Estimativa dos parâmetros iniciais

A preocupação em se alimentar o processo de otimização com valores iniciais bem calibrados provém da escolha da subregião de interesse. Caso os valores iniciais estejam muito distantes do ponto ótimo global, a otimização pode levar a um valor ótimo local ou pior, pode levar o sistema a divergir de uma resposta ótima.

Com o intuito de se evitar uma má aproximação, considerou-se a *construção de Considère* [15]. Nesse tratamento elementar clássico, assume-se que o material é insensível ao tempo e não há a intenção de se desenvolver uma interpretação mecânica do escoamento. Considera-se novamente a Figura 19 no qual o espécime foi deformado de valores iniciais de comprimento L_0 e seção transversal A_0 até valores L e A cuja força nesse ponto corresponde a F. Como já visto na seção 4.2, a deformação de engenharia é dada por:



Figura 29: construção de Considère para um material polimérico.

$$\varepsilon_0 = \frac{L - L_0}{L_0} = \lambda - 1$$

sendo λ o elongamento do material. Considerando a deformação sob volume constante (uma aproximação grosseira para polímeros rígidos / vítreos, porém serve melhor para aqueles mais dúcteis), vem

$$A_0L_0 = AL$$

$$A_0 = A\lambda$$

Sendo a tensão verdadeira $\sigma_R = \frac{F}{A}$ e a tensão de engenharia $\sigma_0 = \frac{F}{A_0}$, segue então que

$$\sigma_0 = \frac{\sigma_R}{\lambda}$$

de modo que a inclinação da curva $\sigma_{0}\,\times\,\lambda$ é dada em qualquer ponto por

$$\frac{d\sigma_0}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda} \frac{d\sigma_R}{d\lambda} - \frac{\sigma_R}{\lambda^2}$$

Como $d\varepsilon_0 = d\lambda$, conclui-se que o escoamento, definido por

$$\frac{d\sigma_0}{d\varepsilon_0} = 0$$
, no escoamento

também pode ser definido por

$$\frac{d\sigma_0}{d\lambda} = 0$$
, no escoamento

Segue-se, como conseqüência

$$\frac{d\sigma_R}{d\lambda} = \frac{\sigma_R}{\lambda}$$
, no escoamento

Em uma traçagem de $\sigma_R \times \lambda$ (Figura 29), o escoamento ocorre, de acordo com a equação desenvolvida acima, no ponto M: significa que a curva tensãodeformação terá um máximo somente se uma reta tangente puder ser traçada a partir de $\lambda = 0$ até tangenciar a curva $\sigma_R \times \lambda$ em um ponto tal que M.

Aplicando esse conceito nos dados experimentais do teste de compressão, pôde-se obter os valores iniciais apresentados na Tabela 5. Esse procedimento foi implementado através de rotina desenvolvida no software Matlab®, apresentada no ANEXO B. A Figura 30 mostra a curva $\sigma_R \times \lambda$ proveniente do experimento e a reta tangente para a obtenção dos valores iniciais.

Tabela 5: propriedades mecânicas estimadas, segundo Construção de Considère.

σ_R	60,98 MPa
λ	2,1 %
δ	1,1 %



Figura 30: gráficos - curva $\sigma_{\rm R} \times \lambda$ e ampliação da mesma. Construção de Considère.

5.5.1. Modelo elastoplástico com encruamento cinemático

Para o pleno funcionamento desse modelo, é necessário informar seus parâmetros: massa específica, módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, tensão de escoamento, módulo tangente, parâmetro de encruamento, parâmetro C da taxa de deformação, parâmetro R da taxa de deformação, deformação de falha (para elementos erosivos) e inclusão de efeitos de tempo.

O seguinte modelo foi configurado de modo que o encruamento tenha comportamento cinemático ($\beta = 0$) e seus efeitos viscoelásticos fossem desprezados (R = C = 0).

Para a massa específica e o coeficiente de Poisson foram considerados os valores contidos na Tabela 4. Portanto, as variáveis de projeto a serem otimizadas são o módulo de elasticidade, E, a tensão de escoamento, σ_y e o módulo tangente, E_t .

Da construção de Considère, tem-se um valor bem estimado para ser considerado como parâmetro inicial para a tensão de escoamento. Fixando esse valor na curva tensão × deformação e traçando retas da origem da curva até esse ponto e do ponto de escoamento até o fim da curva, encontram-se valores razoáveis para uma estimativa inicial dos módulos de elasticidade e tangencial, respectivamente. A Tabela 6 mostra os valores obtidos.
Variável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
E (GPa)	4872,4	500	5000
σ_y (MPa)	60,98	54,18	67,08
E _t (MPa)	239,01	50	450

Por ser um valor muito próximo do ponto ótimo, a tensão de escoamento teve seu universo limitado a 10% de seu valor tanto para cima quanto para baixo. As outras variáveis tiveram um intervalo maior para possibilitar uma melhor varredura do espaço de projeto.

5.5.2. Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin

Os parâmetros de entrada desse modelo são: massa específica, coeficiente de Poisson, constante A, constante B.

Assim como no modelo anterior, os valores da massa específica e do coeficiente de Poisson foram aqueles da Tabela 4.

Embora tenham sido feitos esforços para entender o funcionamento do modelo desse material e a influência dos parâmetros A e B, não foi possível estimar bons valores iniciais.

Assim, ponderou-se em escolher aleatoriamente valores para esses parâmetros (ver Tabela 7) e impor um domínio abrangente para que a otimização possa ser feita. Caso o ponto ótimo obtido ao fim do processo não fosse satisfatório, novas fronteiras seriam impostas e uma nova otimização seria realizada.

Variável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
Α	10,45	0,5	100
В	5,22	0,5	100

Tabela 7: dados de entrada do modelo de elastômero incompressível.

5.5.3. Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce

Os parâmetros desse modelo hiperviscoelástico são: massa específica, módulo de compressibilidade, módulo de cisalhamento e número de ligações estatísticas.

Novamente, o valor da massa específica é aquele encontrado na Tabela 4.

Os valores iniciais dos módulos de compressibilidade e de cisalhamento foram obtidos através das seguintes relações

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} e K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$$

sendo os valores do módulo de elasticidade proveniente da estimativa da seção 5.5.1 e do coeficiente de Poisson, da Tabela 4.

O valor do número de ligações estatísticas foi obtido de [3]. Além disso, essa variável se trata de uma variável discreta por somente aceitar números inteiro como entrada, precisando assim, definir um domínio viável diferente do usual.

Variável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
K (GPa)	20800	10000	30000
G (MPa)	500	100	900
Ν	30	{5; 10; 15; 20; 25; 30; 35; 40; 45; 50;	

Tabela 8: dados de entrada do modelo de elastômero hiperviscoelastico

Suas condições iniciais são mostradas na Tabela 8. Por ser uma variável discreta, seu domínio foi limitado em alguns valores próximos ao valor inicial. Como no modelo de material incompressível, este modelo precisou simular mais de uma rotina de otimização. Os resultados são expostos a seguir.

5.6. Resultados numéricos

A rotina de otimização aplicada aos modelos de material utiliza o Método da Superfície de Resposta Sequencial com uma aproximação linear polinomial do funcional. O número de pontos experimentais em cada iteração da rotina foi determinado de acordo com o número de variáveis de projeto (critério de optimalidade-D – ver Tabela 3).

A partir das condições iniciais estimadas dos modelos de elastômero incompressível e hiperviscoelástico, foi executada uma *rotina zero* de verificação para garantir a adequação na escolha da região de projeto. A peculiaridade dessa rotina em relação à rotina comum é o tempo de simulação, reduzido de 400 para 100

segundos. Assim, da rotina zero foram retiradas as condições iniciais da rotina comum, agora com o tempo de simulação correto.

Foi determinado que todas as rotinas, seja zero ou comum, realizassem duas iterações para cada modelo. Caso a tolerância da função-objetivo após essas duas iterações não fosse atingida ou fosse indicado que o ponto ótimo estivesse fora dos limites da região analisada, seriam determinados novos limites para a região de projeto e uma nova rotina seria executada.

A Tabela 9 apresenta as características de otimização de cada modelo de material. O número de rotinas apresentado nessa tabela já inclui a rotina zero (com exceção do modelo elastoplástico).

Modelo	variáveis de projeto	n° de pontos experimentais	n° de iterações	n° de simulações em MEF	n° de rotinas executadas	tolerância da função- objetivo
Elastoplástico cinemático	E, σ_y, E_t	7	2	14	1	0,01
Elastômero incompressível	A, B	5	2	10	3	0,01
Elastômero hiperviscoelástico	K, G, N	7	2	14	2	0,01

Tabela 9: características do método de otimização de cada modelo de material.

5.6.1. Modelo elastoplástico com encruamento cinemático

A rotina do modelo elastoplástico realizou 14 simulações em elementos finitos até encontrar o ponto ótimo que satisfizesse a tolerância de projeto.

Na Figura 31, observa-se a função-objetivo *MSE* em função das variáveis *E* e σ_y (a superfície corresponde a $E_t = 50$ MPa). Os pontos verdes correspondem a todas as simulações realizadas e o ponto rosa, o valor ótimo encontrado.



Figura 31: MSE = MSE (E, σ_y).

A Tabela 10 mostra os valores do p	ponto ótimo do modelo.
------------------------------------	------------------------

Variável	Valor ótimo
E (GPa)	3262,2
$\sigma_y(MPa)$	57,16
E _t (MPa)	50,0
MSE	0,0040

Tabela 10: valores	ótimos	do modelo	elastoplástico.
--------------------	--------	-----------	-----------------





Figura 32: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. E. b. σ_{y_i} c. E_t . d. MSE.

A Figura 32 apresenta a evolução das variáveis de projeto e da funçãoobjetivo durante a rotina de otimização. No gráfico da Figura 33 são comparadas as curvas de cada iteração e aquela obtida experimentalmente.



Figura 33: curvas $|for ca| \times |deslocamento|$ experimental, iteração 1, iteração 2 e valor ótimo. Modelo elastomérico.

5.6.2. Modelo do elastômero incompressível de Mooney-Rivlin

A rotina zero apresentou resultados satisfatórios, indicando em que sentido deveriam estar localizados os parâmetros ótimos desse modelo. A Figura 34 mostra



Figura 34: MSE = MSE (A, B) – rotina zero.

que o valor ótimo de B está contido em uma faixa de valores inferior ao limite imposto. Já para o parâmetro A, nota-se que seu valor ótimo deve estar mais próximo de seu limite superior.

A Figura 35 ilustra melhor o comportamento das variáveis. Ao se analisar os resultados ótimos da rotina zero (ver Tabela 11), nota-se que a tolerância da funçãoobjetivo não foi atingida, o que evidencia a redefinição da região de interesse.

 Variável
 Valor ótimo

 A
 92,78

 B
 0,5

 MSE
 0,17

Tabela 11: valores ótimos da rotina zero. Modelo elastômero incompressível.



Figura 35: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Rotina zero.

Variável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
Α	92,8	50	130
В	0,5	0,01	20

Tabela 12: valores iniciais da segunda rotina. Modelo elastômero incompressível.

Para a segunda rotina, foram utilizados os valores presentes na Tabela 12.

A Figura 36 apresenta o gráfico da função-objetivo em função dos parâmetros dos materiais. Novamente, nota-se que o ótimo global ainda não foi atingido e será necessário fazer mais uma iteração.



Figura 36: MSE = MSE (A, B) – segunda rotina.

Os valores ótimos da segunda rotina são apresentados na Tabela 13. Mais uma vez, a tolerância da função-objetivo não foi atingida dentro de duas iterações.

Variável	Valor ótimo	
Α	50,0	
В	0,01	
MSE	0,143	

Tabela 13: valores ótimos da segunda rotina. Modelo elastômero incompressível.

Dos gráficos presentes na Figura 37, conclui-se que é necessário deslocar os limites dos parâmetros A e B para valores menores aos já adotados.





(b)



(c)

Figura 37: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Segunda rotina.

Para a terceira rotina, foram adotados os valores iniciais indicados na Tabela 14.

Tabela 14: valores iniciais da terceira rotina. Modelo elastômero incompressível.

Va	ariável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
Α		50	1	55
В		0,01	0,001	0,020

A Figura 38 mostra a influência dos parâmetros do modelo na função objetivo. Da Figura 38c, nota-se que nessa região analisada, quase não há influência de B e o valor ótimo de A é 24,46.





Figura 38: MSE = MSE (A, B) – terceira rotina.

São apresentados os valores ótimos da terceira rotina na Tabela 15. Ao contrário das outras rotinas executadas anteriormente, a tolerância da função objetivo é alcançada.

A Figura 39 mostra as variações dos valores dos parâmetros do modelo e a mudança dos limites desses valores. Nessa rotina, os limites foram respeitados, validando os resultados ótimos obtidos.

Variável	Valor ótimo
Α	24,46
В	0,00429
MSE	0,0059

Tabela 15: valores ótimos da terceira rotina. Modelo elastômero incompressível.



(a)

(b)



Figura 39: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. A. b. B. c. MSE. – Terceira rotina.

A Figura 1 mostra a curva $|força| \times |deslocamento|$ de cada iteração da última rotina executada junto com aquela obtida do teste experimental.



Figura 40: curvas |força| × |deslocamento| experimental, iteração 1, iteração 2 e valor ótimo. Modelo elastômero incompressível.

5.6.3. Modelo do elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce

Os resultados da rotina zero são ilustrados na Figura 41, em que é possível ver a relação entre os parâmetros de projeto do modelo e a função-objetivo. A superfície apresentada no espaço em análise representa a função MSE = MSE (K, G) quando N = 55. Dessa figura, pode ser observado que o ponto ótimo (cor-de-rosa) está abaixo da superfície, ou seja, está fora da região de projeto analisada. Portanto, provavelmente, será necessário ajustar os limites das variáveis de projeto para se alcançar o ponto ótimo.

Nos gráficos presentes na Figura 42 confirma-se a necessidade de se ajustar a região de projeto. Com exceção da variável *G*, as outras variáveis de projeto (módulo de compressibilidade e número de ligações estatísticas) aparentam ter seus valores ótimos fora dos limites impostos.



Figura 41: MSE = MSE (K, G, N) – rotina zero.





(b)



Figura 42: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. K. b. G. c. N. d. MSE. – rotina zero.

Variável	Valor ótimo
K	10000
G	179.498
Ν	55
MSE	0,0057

Tabela 16: valores ótimos da rotina zero. Modelo elastômero hiperviscoelástico.



Figura 43: curvas |força| × |deslocamento| experimental, iteração 1, iteração 2 e valor ótimo. Modelo elastômero hiperviscoelástico.

Para a segunda rotina, foram utilizados os valores iniciais presentes na Tabela 17.

Variável	Valor inicial	Valor mínimo	Valor máximo
K (GPa)	5000	3000	7000
G (MPa)	50	1,0	100
Ν	75	{55;60;65;70;75;80;85;90;95;100}	

Tabela 17: valores iniciais da segunda rotina - modeo de Arruda-Boyce.

Os resultados da segunda rotina são apresentados nas Figura 45 e Figura 47. A superfície de resposta ótima gerada na segunda rotina demonstra que a solução do problema é do tipo degenerada, ou seja, possui inúmeras soluções. Esse fato pode ser observado nas Figura 44 (b) e (c), onde se vê uma reta contendo as infinitas combinações de valores das variáveis de projeto que resultam no menor MSE possível.

A Figura 45 apresenta a variação das variáveis de projeto do problema. Notase que seria necessário realizar mais uma iteração para se obter valores que se aproximem mais da curva experimental. Porém, essa melhora nos valores não será significativa, razão pela qual não foi realizada uma terceira rotina.





Figura 44: MSE = MSE (K, G, N) – segunda rotina.

Variável	Valor ótimo	
K	10000	
G	179.498	
Ν	55	
MSE	0,0057	

Tabela 18: valores ótimos da segunda rotina. Modelo elastômero hiper-viscoelástico.

A Tabela 18 apresenta os valores ótimos da segunda iteração e a Figura 46 compara a evolução na aproximação da curva numérica com a experimental.



Figura 45: variações das variáveis de projeto e mudanças de seus limites durante as iterações: a. K. b. G. c. N. d. MSE. – segunda rotina.



Figura 46: curvas |força| × |deslocamento| experimental, iteração 1, iteração 2 e valor ótimo. Modelo do elastômero hiper-viscoelástico.

5.7. 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. Essa constatação pode ser verificada nas curvas *força × deslocamento* presentes nas Figura 33, Figura 40 e Figura 46.

A Figura 47 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.



Figura 47: curvas |força| × |deslocamento| experimental, elastoplástico com encruamento cinético, elastômero incompressível de Mooney-Rivlin e elastômero hiperviscoelástico de Arruda-Boyce.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

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 empescoçamento.

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.

O modelamento inverso foi realizado em uma geometria relativamente simples, um corpo de prova normalizado. Como um próximo passo desse projeto, é sugerido que o procedimento registrado nesse trabalho seja aplicado em uma geometria mais complexa, como um recipiente alimentício ou uma ferramenta manufaturada em PVC ou material similar.

Ainda que o foco desse projeto não tenha sido o estudo e desenvolvimento de uma lei constitutiva, essa é uma área também muito interessante a ser desenvolvida, visto o comportamento desses materiais não ser ainda entendido em todos os seus aspectos. Mesmo a implementação de algum modelo já existente ou em desenvolvimento seria de grande interesse tanto científico quanto industrial.

ANEXO A. DESENHOS DE FABRICAÇÃO DOS CORPOS DE PROVA PARA TESTES QUASI-ESTÁTICOS

A seguir são apresentados os desenhos de fabricação dos corpos de prova que foram utilizados em testes de tração e compressão.



PRODUCED BY AN AUTODE & EDUCATIONAL PRODUCT

PRODUCED BY AN AUTODESK EDUCATIONAL PRODUCT



PRODUCED BY AN AUTODE & EDUCATIONAL PRODUCT

PRODUCED BY AN AUTODESK EDUCATIONAL PRODUCT

ANEXO B. ROTINA EM MATLAB PARA CONSTRUÇÃO DE CONSIDÈRE

clear

```
clc
load('pvcCompressao.mat');
figure
hold
 for j = 1:length(TrueStress05_2);
    if CompStrain05_2(j)+1 > 2.1
        break
    end
 end
for k = 1:length(TrueStress05_2);
    if CompStrain05_2(k)+1 > 2.3
        break
    end
end
for l = j: k
    p = polyfit([0,CompStrain05_2(1)+1],[0,TrueStress05_2(1)],1);
    y = polyval(p, [0, CompStrain05_2(1)+11]);
    plot([0,CompStrain05_2(1)+11],y,'c')
end
plot(CompStrain05_2+1,TrueStress05_2,'k')
% xlim([1.1,1.3])
% ylim([6e6,6.3e6])
for m = 1:length(TrueStress05_2);
    if CompStrain05_2(m)+1 > 2.2
        TrueStress05_2(m)
        TrueStrain05 2(m)
        break
    end
end
figure
subplot(1,2,1)
hold
p = polyfit([0,CompStrain05_2(m)+1],[0,TrueStress05_2(m)*1e-6],1);
    y = polyval(p,[0,CompStrain05_2(m)+11]);
    plot([0,CompStrain05_2(m)+11],y,'k')
plot(CompStrain05_2+1,TrueStress05_2*1e-6)
xlim([0,40])
ylim([0,4e2])
grid
xlabel('elongação (%)')
ylabel('tensão verdadeira (MPa)')
title('PVC')
% figure
subplot(1,2,2)
hold
p = polyfit([0,CompStrain05_2(m)+1],[0,TrueStress05_2(m)*1e-6],1);
```

```
y = polyval(p,[0,CompStrain05_2(m)+11]);
plot([0,CompStrain05_2(m)+11],y,'k')
plot(CompStrain05_2+1,TrueStress05_2*1e-6)
xlim([0,10])
ylim([0,1e2])
grid
xlabel('elongação (%)')
ylabel('tensão verdadeira (MPa)')
title('PVC')
```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1]. AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. D 638
 – 00: Standard Test Method for Tensile Properties of Plastic. Pennsylvania, 2001. 13p.

 [2]. AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. D 695
 – 96 Standard Method for Compressive Properties of Rigid Plastics. Pennsylvania, 2001. 7p.

[3]. 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.

[4]. BERGSTRÖM, J. S.; BOYCE, M. C., 1998. Constutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 46, 931 – 954.

[5]. CHANDRA, M.; ROY, S. K.. **Plastic Technology Handbook:** Third Edition, Revised and Expanded. 3^a Edição. New York: Ed. Marcel Dekker, 1998.

[6]. HALLQUIST, J. O. (Comp.). **LS-DYNA® THEORY MANUAL**. California: Livermore Software Technology Corp, March 2006. 680 p.

[7]. HIGGINS, R. A.. **Propriedades e Estruturas dos Materiais em Engenharia**. Tradução Joel Regueira Teodósio. São Paulo: Difel, 1982. 472p.

[8]. KAJBERG, J.; LINDKVIST, G., 2004. Characterisation of materials subjected to large strains by inverse modelling base don in-plane displacement fields. International Journal of Solids and Structures. 41, 3439 – 3459.

[9]. 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.

[10]. MAHNKEN, R.; KUHL, E., 1999. **Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method.** The European Journal of Mechanics A/Solids. 18, 819 – 835.

[11]. 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.

[12]. 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.

[13]. MAHNKEN, R.; STEIN, E., 1997. Parameter identification for finite deformation elasto-plasticity in principal directions. Computer methods in applied mechanics and engineering. 147, 17 - 39.

[14]. MARTINS, D. L. **Modelamento inverso e otimização de forma de um absorvedor de impacto.** 2007. 130 p. Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2007.

[15]. McCRUM, N. G.; BUCKLEY, C. P.; BUCKNALL, C. B., Principles of Polymer Engineering. 2nd edition. Paperback, 1997.

[16]. MEIJER, H. E. H.; GOVAERT, L. E., 2005. Mechanical performance of polymer systems: The relation between structure and properties. Progress in polymer science. 30, 915 – 938.

[17]. MEYERS, M. A.; CHAWLA, K. K. Mechanical Behavior of Materials. Upper Saddle River-NJ: Prentice-Hall, 1999. 1680p.

[18]. MOURA, R. T.; CLAUSEN, A. H.; DUMOULIN, S.; ALVES, M.; 2008. Materials tests on PEHD and PVC using DIC. International Conference on Impact Loading of Light-Weight Structures, Trondheim.

[19]. 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. 451 p.

[20]. STANDER, N.; ROUX, W.. Introdutory LS-OPT Training Classes: **Optimization and Robust Design**. California: Livermore Software Technology Corp, 2005. 80 p.

BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA

 [1]. AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. D 4000
 – 00a. Standard Classification System for Specifying Plastic Materials. Pennsylvania, 2001. 18 p.

[2]. BAO, Y., WIERZBICKI, T., 2004. On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space. International Journal of Mechanical Sciences. 46, 81 - 98.