LII Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional
João Pessoa - PB, 3 a 5 de novembro de 2020

# Sobre a implementação de elementos triangulares e hexaédricos regulares em um algoritmo de Otimização Topológica

**L. F. Bueno**
Universidade Federal de São Paulo
Avenida Cesare Mansueto Giulio Lattes, n° 1201 - São José dos Campos, SP,
lfelipebueno@gmail.com

**T. A. Senne, M. Aguiar, G. Quintero e N. Siqueira**
Unifesp, Unifesp/ITA, USP, MERCK
São José dos Campos, São José dos Campos, São Paulo, São Paulo
senne@unifesp.br, marilaaguiar1@gmail.com,
gustavoquintero9105@gmail.com, nicholas-sz@hotmail.com

**RESUMO**

Neste trabalho, são apresentadas extensões da implementação de um algoritmo de Programação Linear Sequencial para resolver problemas de Otimização Topológica. As possibilidades de empregar elementos hexaédricos regulares em 3D e também de elementos triangulares em 2D são incorporadas ao programa original, que usa elementos retangulares em 2D. Com estas adaptações é possível abordar problemas tridimensionais tradicionais e problemas bidimensionais com contorno irregular. Com intuito de exibir as novas funcionalidades, algumas estruturas deste tipo obtidas pela nova versão do algoritmo são apresentadas, bem como comentários sobre o desempenho computacional.

**PALAVRAS CHAVE. Otimização Topológica, Implementação Computacional, Elementos Finitos.**

**PM - Programação Matemática, POI - PO na Indústria, OA - Outras aplicações em PO**

**ABSTRACT**

In this work, extensions of the implementation of a Sequential Linear Programming algorithm to solve Topological Optimization problems are presented. The possibilities of employing 3D regular hexahedral elements as well as 2D triangular elements are incorporated into the original software that uses 2D rectangular elements. With these adaptations, it is possible to address traditional three-dimensional problems and two-dimensional problems with irregular contour. In order to show the new functionalities, some structures of this type obtained by the new version of the algorithm are presented, as well as comments on the computational performance.

**KEYWORDS. Topological Optimization, Computational Implementation, Finite Elements.**

**PM - Mathematical Programming, POI - OR in Industry, OA - Other applications in OR**

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

## 1. Introdução

Métodos de Otimização Topológica [Bendsøe e Kikuchi, 1988] são ferramentas computacionais que permitem, segundo algum critério, determinar a topologia ótima de uma estrutura em um domínio $\Omega$. Neste tipo de problema, é considerado um corpo elástico que deve ser mantido fixo em uma região $\Gamma_d$ do espaço, e que é submetido à aplicação de um carregamento $\mathbf{t}^1$ na região $\Gamma_{t^1}$, conforme mostra a Figura 1. O processo de resolução de um problema de Otimização Topológica consiste em decidir em quais pontos de $\Omega$ haverá material, de forma a conseguir atingir certo objetivo.

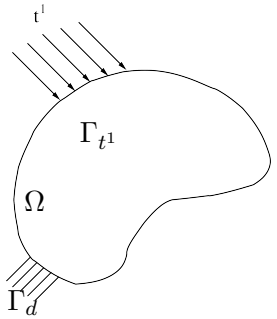



Figura 1: Corpo submetido à aplicação de um carregamento $\mathbf{t}^1$ e mantido fixo numa região $\Gamma_d$ de $\Omega$.

A maneira mais usual de abordar este problema é construir uma discretização de $\Omega$ usando o Método dos Elementos Finitos [Zienkiewicz et al., 2013]. Desta maneira, a cada elemento, é associada uma variável $\chi$ que assume o valor 1 se esse elemento contém material, ou o valor 0, caso contrário. Devido à grande dificuldade encontrada na resolução de um problema de programação não linear de grande porte com variáveis binárias, relaxações contínuas costumam ser utilizadas. Neste caso, $\chi$ é substituída por uma variável contínua $\rho \in [0,\, 1]$, que representa a densidade de material no elemento [Bendsøe, 1989].

O problema de Otimização Topológica mais tradicional consiste na minimização da flexibilidade média da estrutura, de modo que a estrutura esteja contida no domínio $\Omega$, satisfaça algumas condições de contorno e tenha um volume predeterminado [Bendsøe, 1989]. A restrição de equilíbrio físico impõe que o trabalho interno na estrutura seja igual àquele realizado pelas forças externas.

Denotando por $n$ o número de elementos do domínio, $\rho_i$ a densidade do $i-$ésimo elemento e $\mathbf{f}$ o vetor de forças nodais associado às cargas externas tem-se um vetor de deslocamentos nodais resultantes $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})$. Para pequenos deslocamentos, a Lei de Hooke é válida e, portanto, em cada elemento a força é uma função linear do deslocamento: $f_i = \mathbf{K}_i\mathbf{u}_i$. As entradas da matriz $\mathbf{K}_i$ dependem de alguns parâmetros do material naquele elemento, como o módulo de Young e o coeficiente de Poisson e o formato do elemento. Como só pode haver alguma uma resistência física se existir material no elemento, a relação entre força e deslocamento pode ser descrita como $f_i = \rho_i\mathbf{K}_i\mathbf{u}_i$. Isto equivale a dizer que elementos vazios são preenchidos com um material artificial cujo módulo de Young é nulo. Podemos redimensionar a matriz de rigidez de cada elemento para que possa ser multiplicada por um vetor que contemple todos os deslocamentos e não apenas os referentes aos elementos em questão. Isto é feito usando matrizes $\mathbf{P}_i$ que posicionam as linhas de

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

$\mathbf{K}_i$ em um sistema linear $n \times n$. Desta forma, é possível combinar todas as restrições de equilíbrio definido uma matriz de rigidez global $\mathbf{K}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{i=1}^{n} \rho_i \mathbf{P}_i \mathbf{K}_i \mathbf{P}_i^T$.

Assim, após a discretização de $\Omega$, o problema em Otimização Topológica abordado neste trabalho é escrito como

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\rho}} \quad & \mathbf{f}^T \mathbf{u} \\ \text{s. a} \quad & \mathbf{K}(\boldsymbol{\rho})\mathbf{u} = \mathbf{f} \\ & \sum_{i=1}^{n} v_i \, \rho_i \leq V \\ & 0 \leq \rho_i \leq 1 \,, \qquad i = 1, \ldots, n \,, \end{aligned} \tag{1}$$

em que $v_i$ é o volume do $i-$ésimo elemento e$V$ é o limitante superior para o volume da estrutura.

Para reduzir a ocorrência de densidades intermediárias, Bendsøe [1989] introduziu o método SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*), que substitui $\rho_i$ por $\rho_i^p$, $p > 1$, em parte do modelo a ser otimizado. O valor das variáveis é mantido na restrição de volume, mas é modificado na construção da matriz de rigidez global. A ideia central desta abordagem é que valores intermediários terão seu impacto reduzido ao serem penalizados. Desta forma, gasta-se o volume original de material para ter-se uma rigidez reduzida da estrutura. Com isto, é esperado que valores intermediários sejam evitados na solução do problema. Em [Martinez, 2005] é feito um estudo de modo a justificar teoricamente o uso do SIMP e são mostradas condições que asseguram que $\rho$ não assume valores intermediários para $p$ suficientemente grande.

Ao longo da resolução numérica de um problema de Otimização Topológica, pode acontecer um fenômeno indesejável: a formação de regiões com elementos totalmente preenchidos e elementos vazios, ordenados de maneira revezada, semelhante a um tabuleiro de xadrez. Uma maneira de evitar isto é aplicar um operador matemático denominado *filtro espacial*. Esse operador redistribui as densidades ao redor de cada elemento do domínio, acarretando em uma distribuição mais homogênea das densidades. Regiões onde ocorresse o fenômeno do "tabuleiro de xadrez" ficariam com vários elementos com densidade intermediária e isto seria evitado pelo SIMP.

Na literatura, podem ser encontrados vários tipos de filtros, alguns lineares e outros não. Neste trabalho será utilizado o filtro da média ponderada das densidades, proposto por Bruns e Tortorelli [2001]. Com esta escolha, a densidade original $\rho_i$ é substituída por $\bar{\rho}_i$, a média ponderada das densidades dos elementos contidos em sua vizinhança $B_i$, com diâmetro $r$, tanto na função objetivo como nas restrições. A escolha dos pesos no cálculo das novas densidades é feita de forma *Gaussiana*, limitada à $B_i$. Mesmo com a aplicação do filtro escolhido a restrição de volume mantém-se linear.

Caso $\mathbf{K}(\boldsymbol{\rho})$ seja não singular, é possível calcular o vetor de deslocamentos usando a restrição de equilíbrio. Uma maneira de garantir que $\mathbf{K}(\boldsymbol{\rho})$ seja definida positiva, portanto não-singular, é impondo que as densidades são todas estritamente positivas. Por este motivo, incluímos no modelo a restrição $\rho_i \geq \rho_{\min}$, em que $\rho_{\min}$ é uma constante positiva suficientemente pequena.

Com isto o problema que vamos resolver neste trabalho é

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\rho}} \quad & \mathbf{f}^T \mathbf{K}(\bar{\boldsymbol{\rho}}^p)^{-1}\mathbf{f} \\ S.a \quad & \sum_{i=1}^{n_{el}} v_i\, \bar{\rho}_i \leq V \\ & \rho_{min} \leq \rho_i \leq 1, \end{aligned} \quad . \tag{2}$$

O problema (2) é desafiador por se tratar de um problema não linear com uma grande quantidade de variáveis de decisão. O cálculo da função objetivo é bastante custoso, já que envolve a resolução de um sistema linear de grande porte. Já o gradiente da função objetivo pode ser obtido por meio de princípio variacional. Com isto, uma vez calculada a função objetivo em um dado ponto, o gradiente é determinado com pouco esforço adicional. Estas característica sugerem que métodos de primeira ordem devem ser boas escolhas para a resolução de (2). Nesta linha, uma versão globalmente convergente de Programação Linear Sequencial (PLS) foi apresentada por Gomes e Senne [2011] com a intenção de resolver problemas de Otimização Topológica. A ideia central é fazer aproximações lineares de (2) em busca de sua solução. Para assegurar a boa representação dos modelos lineares em relação ao problema original, é usada uma estratégia de região de confiança com a norma $l_\infty$, para manter a linearidade do subproblema.

Em [Gomes e Senne, 2011] os autores relatam bons resultados numéricos acerca do método proposto usando uma implementação que permite o emprego de malhas regulares compostas de elementos finitos retangulares para resolver problemas 2D. Neste trabalho, descrevemos como obter a formulação teórica do problema para o caso de elementos triangulares 2D e de paralelepípedos em 3D. Com isto, é possível obter a estrutura ótima para uma gama maior de aplicações. São apresentadas aqui as adaptações principais para o uso de elementos triangulares e hexaédricos que foram feitas no programa de Gomes e Senne [2011]. Além disto, são discutidos alguns pontos associados ao desempenho computacional das novas implementações do algoritmo.

## 2. Obtenção da matriz de rigidez usando o Método dos Elementos Finitos

O Método dos Elementos Finitos (MEF) tem como objetivo discretizar problemas que estão em dimensão infinita. O MEF é seguramente o processo que mais tem sido usado para a discretização de meios contínuos, já que pode ser aplicado não somente aos problemas clássicos da mecânica estrutural elástico-linear, para os quais foi o método inicialmente desenvolvido, mas também para problemas não lineares, estáticos ou dinâmicos; mecânica dos fluídos; eletromagnetismo; transmissão de calor; filtração de meios porosos; campo elétrico; acústica, entre outros. Existem várias referências sobre o MEF, por exemplo [Zienkiewicz et al., 2013].

Para obtenção da matriz de rigidez de um elemento, deve-se analisar a relação entre o trabalho interno e externo naquele elemento. Para fazer isto, é necessário que o deslocamento de um ponto no interior de um elemento seja aproximado por uma combinação linear dos deslocamentos nodais. Os deslocamentos apresentam dois graus de liberdade em estruturas 2D e três em estruturas 3D. Da mesma forma, a posição de um ponto interior também depende de dois ou três parâmetros, que será denotado simplesmente por $\mathbf{x}$. Sendo assim temos que

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x})\hat{\mathbf{u}}, \tag{3}$$

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

em que $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ é o deslocamento no ponto com posição $\mathbf{x}$, $\hat{\mathbf{u}}$ são os deslocamentos nodais do elemento e $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ é uma matriz cujas entradas são os coeficientes da combinação linear usada para aproximar os deslocamentos no ponto $\mathbf{x}$. Observe que $\hat{\mathbf{u}}$ e $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ dependem de qual elemento está sendo considerado, mas vamos suprimir esta informação porque nossa análise será feita com um elemento fixo e assim é possível simplificar a notação.

Ao aplicar um carregamento externo, a estrutura sofrerá uma deformação causada pelos deslocamentos. Pode-se definir o campo de deformações resultante $\boldsymbol{\varepsilon}$, composto pelas componentes em cada direção e as componentes angulares, usando um operador diferencial $\mathbf{L}$ de forma que

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{L}\mathbf{u}(\mathbf{x}). \tag{4}$$

Respectivamente para estruturas 2D e 3D, tem-se que $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, \gamma_{xy})$, $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}, \gamma_{yz})$ e valem as seguintes expressões para o operador diferencial

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 \\ 0 & \partial/\partial y \\ \partial/\partial y & \partial/\partial x \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{L} = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 \\ 0 & \partial/\partial y & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & \partial/\partial z & \partial/\partial y \\ \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial x \\ \partial/\partial y & \partial/\partial x & 0 \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Sob certas condições, que fisicamente são conhecidas como material isotrópico e regime linear elástico, a relação entre tensões $\sigma$ e deformações $\boldsymbol{\varepsilon}$ é dada pela *Lei de Hooke*, isto é

$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \tag{6}$$

em que $\mathbf{C}$ é um tensor de elasticidade simétrico associado às propriedades do material que compõe a estrutura. O tensor $\mathbf{C}$ não depende de $\mathbf{x}$ e é determinado apenas pelo módulo de Young $E$ e o coeficiente de Poisson $\nu$ do material utilizado. Respectivamente para estruturas 2D e 3D, tem-se

$$\mathbf{C} = \frac{E}{1-\nu^2}\begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)}\begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1-2\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1-2\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1-2\nu)} \end{bmatrix}.$$

Combinando (3), (4) e (6) obtemos que

$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbf{C}\mathbf{L}\mathbf{N}(\mathbf{x})\hat{\mathbf{u}}. \tag{7}$$

O trabalho interno em um elemento é obtido pela integral do produto interno das tensões com as deformações sobre $\Omega_i$, o domínio correspondente ao elemento considerado. Deste modo, usando (3), (4) e (7),

$$\int_{\Omega_i} \sigma(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})\, d\Omega_i = \hat{\mathbf{u}}^T \left[ \int_{\Omega_i} \left( \mathbf{N}(\mathbf{x})^T \mathbf{L}^T \mathbf{C}\mathbf{L}\mathbf{N}(\mathbf{x}) \right)\, d\Omega_i \right] \hat{\mathbf{u}}.$$

Com isto, fazendo uma análise variacional sobre a conservação da energia, a matriz de rigidez do elemento $i$ é dada por

$$K_i = \int_{\Omega_i} \left( \mathbf{N}(\mathbf{x})^T \mathbf{L}^T \mathbf{C}\mathbf{L}\mathbf{N}(\mathbf{x}) \right) d\Omega_i. \tag{8}$$

### 2.1. Problemas de Otimização Topológica 3D com elementos hexaédricos regulares

A discretização mais imediata em problemas 3D consiste em usar elementos hexaédricos. Este tipo de elemento pode ser eficiente quando considerarmos estruturas em domínios mais simples.

Para problemas 3D, temos que $\mathbf{x} = (x, y, z)$ e $\mathbf{u} = [u\ v\ w]^T$. Como um paralelepípedo possui oito vértices, pode-se usar cada um deles para determinar coeficientes das funções aproximadoras para aquele elemento. Desta forma, é natural escolher as funções que possuem também oito parâmetros livres. Isto justifica a escolha dos polinômios trilineares da forma

$$\begin{aligned} u(x,y,z) &= a_1 + a_2x + a_3y + a_4z + a_5xy + a_6xz + a_7yz + a_8xyz, \\ v(x,y,z) &= b_1 + b_2x + b_3y + b_4z + b_5xy + b_6xz + b_7yz + b_8xyz, \\ w(x,y,z) &= c_1 + c_2x + c_3y + c_4z + c_5xy + c_6xz + c_7yz + c_8xyz. \end{aligned} \tag{9}$$

Assim como feito em Gomes e Senne [2011] para elementos retangulares, o cálculo de $\mathbf{K}_i$ para elementos hexaédricos regulares pode ser feito considerando um sistema auxiliar de coordenadas local. Ou seja, em vez de considerar a posição $\mathbf{x} = (x, y, z)$ vamos assumir que o sistema de coordenadas $\boldsymbol{\xi} = (\xi,\ \eta,\ \zeta)$ está no centro $(c_x, c_y, c_z)$ do paralelepípedo de lados $2a$, $2b$ e $2c$, de modo que

$$\xi = \frac{x - c_x}{a},\ \eta = \frac{y - c_y}{b},\ \text{e}\ \zeta = \frac{z - c_z}{c}.$$

Com isto, as posições dos oito vértices do paralelepípedo $(\bar{u}_i, \bar{v}_i, \bar{w}_i)$ são associados a $(\pm1, \pm1, \pm1)$.

Usando polinômios de Lagrange para garantir a interpolação dos deslocamentos conhecidos nos vértices, obtemos

$$u(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i=1}^{8} N_i(\boldsymbol{\xi})\bar{u}_i, \quad v(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i=1}^{8} N_i(\boldsymbol{\xi})\bar{v}_i, \quad w(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i=1}^{8} N_i(\boldsymbol{\xi})\bar{w}_i, \tag{10}$$

em que $N_i(\xi,\eta,\zeta) = \dfrac{1}{8}(1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta)$. Portanto,

$$\mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}) = [\mathbf{N}_1(\boldsymbol{\xi})\ \cdots\ \mathbf{N}_8(\boldsymbol{\xi})], \quad \text{com} \quad \mathbf{N}_i(\boldsymbol{\xi}) = \operatorname{diag}(N_i(\boldsymbol{\xi}),\ N_i(\boldsymbol{\xi}),\ N_i(\boldsymbol{\xi})).$$

Com isto, obtemos

$$\mathbf{K}_i = abc \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi})^T\mathbf{L}^T\mathbf{C}\mathbf{L}\mathbf{N}(\boldsymbol{\xi})\, d\xi\, d\eta\, d\zeta \in \mathbb{R}^{24\times24},$$

a qual pode ser calculada analiticamente sem dificuldades e é a mesma para elementos idênticos. Desta maneira, a implementação do caso 3D com elementos hexaédricos é muito semelhante à feita em Gomes e Senne [2011]. Porém, o número de variáveis do problema é substancialmente maior.

Para montar a matriz de rigidez global, é preciso ter uma ordenação dos nós e dos elementos além de, por causa do filtro, uma determinação de quais são os elementos vizinhos. Para isto, foi usada a extensão natural para 3D da estratégia usada em [Gomes e Senne, 2011] em relação a elementos retangulares, ou seja, seguindo a ordem de primeiro o eixo $x$, depois o $y$ e aqui incluindo finalmente o eixo $z$. Já a vizinhança $B_i$ foi definida como o conjunto dos elementos que estão situados a no máximo $r$ posições anteriores ou posteriores ao elemento $i$ em relação a todos os eixos, para algum valor de $r$ dado.

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

## 2.2. Problemas de Otimização Topológica 2D com elementos triangulares

Em boa parte dos problemas de Otimização Topológica, o formato do contorno da estrutura de interesse não é simples o suficiente para se adequar a malhas homogêneas em todo o domínio. Neste caso, é preciso gerar uma malha heterogênea. Com esta perspectiva, foi feita a adaptação do código original de Gomes e Senne [2011] para tratar de elementos triangulares.

Como o problema de interesse desta subseção está em 2D, a posição de um ponto será dada por $\mathbf{x} = (x, y)$ e os deslocamentos têm componentes na vertical e na horizontal, ou seja, $\mathbf{u} = [u \;\; v]^T$. Considerando então um elemento triangular, seus nós podem ser denotados por $(\bar{x}_{11}, \bar{x}_{12}), (\bar{x}_{21}, \bar{x}_{22}), (\bar{x}_{31}, \bar{x}_{32})$. Como cada um destes três nós têm deslocamentos na horizontal e na vertical, o vetor de deslocamentos nodais pode ser escrito como $\hat{\mathbf{u}} = [\bar{u}_1, \bar{v}_1, \bar{u}_2, \bar{v}_2, \bar{u}_3, \bar{v}_3]^T$.

Analogamente a (9), os deslocamentos em um ponto serão dados por uma interpolação bilinear dos deslocamentos nodais. Como agora apenas três vértices definem o elemento, as funções aproximadoras são

$$u(x, y) = a_1 + \; a_2\, x + \; a_3\, y \quad \text{e} \quad v(x, y) = b_1 + \; b_2\, x + \; b_3\, y. \tag{11}$$

Mais uma vez, pode-se utilizar funções $N_i(x, y)$ e os deslocamentos nodais para determinar os coeficientes em (11). Com isto, as funções de aproximação são escritas como

$$u(x, y) = N_1(\mathbf{x})\bar{u}_1 + N_2(\mathbf{x})\bar{u}_2 + N_3(\mathbf{x})\bar{u}_3 \quad \text{e} \quad v(x, y) = N_1(\mathbf{x})\bar{v}_1 + N_2(\mathbf{x})\bar{v}_2 + N_3(\mathbf{x})\bar{v}_3. \tag{12}$$

Como o polinômio bilinear em (11) não apresenta o termo cruzado $xy$, não é possível usar polinômios de Lagrange para encontrar $N_i(x, y)$. Desta forma é necessário de fato resolver o sistema resultante da interpolação para obter a expressão. Para fazer isto, pode-se considerar apenas os deslocamentos na horizontal.

Ao efetuar, em (11), a substituição das variáveis $x$ e $y$ pelas coordenadas dos nós do elemento, obtém-se

$$\begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, \quad \text{em que} \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_{11} & \bar{x}_{12} \\ 1 & \bar{x}_{21} & \bar{x}_{22} \\ 1 & \bar{x}_{31} & \bar{x}_{32} \end{bmatrix}. \tag{13}$$

Uma vez que a matriz $\mathbf{Q}$ é quadrada e supõe-se não singular (pois, para formar um triângulo, os vértices são não colineares), pode-se reescrever (13) na forma

$$\mathbf{a} = \mathbf{Q}^{-1}\bar{\mathbf{u}}. \tag{14}$$

Substituindo (14) em (11), tem-se

$$u(x, y) = \begin{bmatrix} 1 & x & y \end{bmatrix} \mathbf{Q}^{-1}\bar{\mathbf{u}} \tag{15}$$

Comparando (12) e (15) e usando o fato de que o vetor de deslocamentos nodais $\bar{u}$ é arbitrário, conclui-se que

$$\begin{bmatrix} N_1(x, y) & N_2(x, y) & N_3(x, y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x & y \end{bmatrix} \mathbf{Q}^{-1}. \tag{16}$$

Designando por $q_{ij}$ os elementos da transposta de $\mathbf{Q}^{-1}$, a qual pode-se calcular simbolicamente sem dificuldades, tem-se por (16) que

$$N_i(x, y) = q_{i1} + q_{i2}x + q_{i3}y. \tag{17}$$

A interpolação da componente vertical do campo de deslocamentos é efetuada de uma maneira análoga e independente do que foi feito. Com isso, obtém-se, as mesmas expressões de $N_1, N_2$ e $N_3$. Desta forma,

$$\mathbf{N}(x, y) = \begin{bmatrix} N_1(x,y) & 0 & N_2(x,y) & 0 & N_3(x,y) & 0 \\ 0 & N_1(x,y) & 0 & N_2(x,y) & 0 & N_3(x,y) \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Usando a matriz $\mathbf{L}$ para problemas em 2D, dada em (5), tem-se que

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{LN}(x, y) = \begin{bmatrix} q_{12} & 0 & q_{22} & 0 & q_{32} & 0 \\ 0 & q_{13} & 0 & q_{23} & 0 & q_{33} \\ q_{13} & q_{12} & q_{23} & q_{22} & q_{33} & q_{32} \end{bmatrix}. \tag{19}$$

Observando a definição da matriz de rigidez local em (8) e a definição de $\mathbf{B}$ tem-se que $\mathbf{K}_i = \int_{\Omega_i} \mathbf{B}^T\mathbf{CB}d\Omega_i$. Como o integrando não depende de $(x, y)$, $\mathbf{K}_i = V_i\mathbf{B}^T\mathbf{CB}$ em que $V_i$ é a área do elemento $i$, a qual vale metade do determinante de $\mathbf{Q}$.

As malhas utilizadas tanto na implementação de Gomes e Senne [2011] quanto na adaptação 3D com elementos hexaédricos regulares são ditas estruturadas. Ou seja, existe uma ordem natural para numeração dos elementos. A vantagem disto é que é possível determinar os vértices de uma dado elemento e de seus vizinhos por meio de operações algébricas simples. Além disto, estas malhas são regulares, o que significa que seus elementos são divididos em (poucos) grupos uniformes (apenas um grupo nos casos em questão). O maior benefício disto é que os elementos possuem a mesma matriz de rigidez.

Já aqui foram consideradas malhas triangulares não estruturadas e irregulares. Com isto, é necessário o cálculo e o armazenamento da matriz de rigidez de cada elemento separadamente. Além disto, a definição de vizinhança do elemento $i$ para aplicação do filtro também não é tão simples. Uma alternativa é definir como $B_i$ o conjunto dos elementos cujos centroides distam do centroide do elemento $i$ menos do que um certo $r$ fixado. Desta maneira é necessária a priori a construção de uma matriz de identificação dos vizinhos. Todos estes aspectos aumentam a complexidade de implementação e também o custo computacional do algoritmo. Em contrapartida, a aplicação deste tipo de malha permite superar limitações do algoritmo original com relação ao formato externo da estrutura de interesse.

## 3. Resultados Computacionais

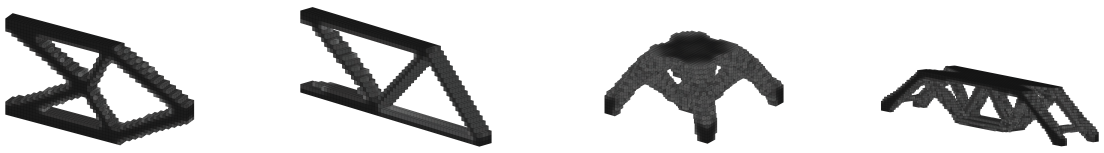
Os resultados para os problemas tridimensionais foram obtidos por meio da implementação em $MATLAB$, versão $2017a$, em um computador pessoal com processador Intel Core $i5$ de $2.0$ GHz, memória RAM de $8$ GB $1867$ MHz LPDDR3, placa de vídeo Intel Iris Graphics $5401536$ MB, e sistema operacional macOS Mojave versão $10.14.2$, com arquitetura de $64$ bits. Já os resultados para os casos bidimensionais foram obtidos através da implementação em $MATLAB$, versão $2016$, em um computador pessoal com processador Intel Core $i5 - 3337U$ de $1.8GHz, 4GB$ de memória RAM e $64$ bits, usando sistema operacional Windows.

### 3.1. Resultados Tridimensionais

Para o caso tridimensional, foram testados alguns problemas clássicos da literatura. Os testes foram inspirados fortemente nos trabalhos de Gomes e Senne [2011] e Liu e Tovar [2014]. Considerou-se em todos os problemas testados o módulo de Young $E = 1$ e coeficiente de Poisson $\nu = 0,3$. A intensidade da força aplicada foi sempre de $1N$ para baixo. O ponto inicial em todos os casos consistiu em distribuir uniformemente no domínio o material disponível, considerando elementos cúbicos de lado unitário. O valor do parâmetro de penalidade utilizado no método SIMP foi $p = 3$. A tolerância usada como critério de parada da PLS e raio inicial da região de confiança foram, respectivamente, $10^{-5}$ e $0,1$. Para a solução dos sistemas lineares $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ utiliza-se o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado considerando uma tolerância tolgc $= 10^{-8}$ e um número máximo de iterações igual a $8000$. As colunas da Tabela 1 descrevem os testes realizados. Na Figura 2 são apresentadas as estruturas resultantes das soluções encontradas pelo algoritmo. Para melhor visualização das estruturas ótimas projetadas, não são considerados os elementos finitos com densidade estritamente menor que $0,4$.

| | $(a,b,c)$ | PF | PA | $\%V^*$ | $r$ | T(h) | FO |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Problema 1 | $(4,60,30)$ | $(x,60,15)$ | $(x,0,z)$ | 40 | 2 | $1,5$ | $562,03$ |
| Problema 2 | $(4,60,20)$ | $(x,60,0)$ | $(x,0,z)$ | 30 | 2 | $3,0$ | $2522,92$ |
| Problema 3 | $(40,40,20)$ | $(20,20,0)$ | $(0,0,0)$<br>$(0,40,0)$<br>$(40,0,0)$<br>$(40,40,0)$ | 20 | 3 | $3,6$ | $4,25$ |
| Problema 4 | $(20,120,20)$ | $(10,60,20)$ | $(0,0,0)$<br>$(0,120,0)$<br>$(20,0,0)$<br>$(20,120,0)$ | 20 | 2 | $14,5$ | $12,30$ |

Tabela 1: Dados dos problemas 3D testados. O domínio considerado é um paralelepípedo com dimensões $a \times b \times c$, as forças aplicadas nas posições PF, as posição apoios da estrutura são indicadas em PA, a porcentagem máxima do volume a ser preenchido é dada em $\%V^*$. Para os Problemas 1 e 2, PF e PA apresentam valores livres de $x$ e $z$, indicando que valem em todo o domínio. Já os dados referentes à implementação são o valor $r$ do raio do filtro, o tempo de execução T e o valor da função objetivo na solução FO.



(a) Solução do Problema 1. (b) Solução do Problema 2. (c) Solução do Problema 3. (d) Solução do Problema 4.

Figura 2: Representações das estruturas obtidas das soluções dos problemas descritos pela Tabela 1 por meio do algoritmo implementado.

A escolha do método dos gradientes conjugados para resolver os sistemas lineares $\mathbf{Ku} =$

$\mathbf{f}$, ao contrário da fatoração de Cholesky do programa original para estruturas 2D, foi motivada pela análise da porcentagem do tempo total gasto em cada etapa da resolução do problema. Para esta análise foi utilizada a ferramenta *Profiler* do MATLAB ao resolver o problema utilizando a fatoração de Cholesky. Isto foi feito ao obter a viga em balanço do Problema 1 com três discretizações, envolvendo 3600, 4800 e 7200 elementos. As estruturas obtidas por cada discretização foram essencialmente as mesmas e a proporção dos tempos para obtê-las são mostrados na Tabela 2.

| **Viga em balanço (Problema 1)** | **Discretização** | | |
|---|---|---|---|
| | 3600 | 4800 | 7200 |
| Matriz de rigidez do elemento | $0,43\%$ | $0,64\%$ | $0,15\%$ |
| Montagem da matriz de rigidez global $\mathbf{K}$ | $95,5\%$ | $94,8\%$ | $96,6\%$ |
| Fatoração de Cholesky da matriz $\mathbf{K}$ | $2,75\%$ | $2,54\%$ | $2,2\%$ |
| Resolução do sistema $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ | $0,15\%$ | $0,13\%$ | $0,12\%$ |
| Resolução dos subproblemas de PL | $0,43\%$ | $0,44\%$ | $0,27\%$ |
| Aplicação do filtro | $0,1\%$ | $0,1\%$ | $0,05\%$ |

Tabela 2: Resultado do *profiler* do MATLAB aplicado ao Problema 1 com três discretizações em elementos finitos: 3600, 4800 e 7200.

A Tabela 2 indica que a rotina que constrói a matriz de rigidez global é, de longe, a que consume maior porcentagem do tempo total gasto na resolução do problema de Otimização Topológica. Uma vez encontrada a matriz, a maior parte do tempo é empregada para encontrar a Fatoração de Cholesky. Pelo fato da matriz $\mathbf{K}$ ser de grande porte e bastante esparsa parece que o uso de um método iterativo pode ser interessante.

Para obter uma comparação do desempenho da Fatoração de Cholesky e o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado, considera-se a estrutura do Problema 2, com uma discretização de 4800 elementos finitos, e a viga MBB do Problema 4, discretizada em 48000 elementos finitos. Para o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado, foi adotado como precondicionador a matriz $\mathbf{M} = diag(\mathbf{K})$. A Tabela 3 mostra os resultados do tempo gasto na resolução dos sistemas lineares após 10 iterações da PLS e após a convergência do método.

| **Problema** | **It.** | **Cholesky** | | **G. Conjugados** | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Tempo (s) | F. objetivo | Tempo (s) | F. objetivo |
| V. Cant. | 10 | $14,90839$ | $4881,519$ | $27,14924$ | $4881,519$ |
| | 313 | $366,7461$ | $2522,927$ | $996,6867$ | $2522,927$ |
| V. MBB | 10 | $8671,15$ | $10,03048$ | $394,4547$ | $10,03048$ |
| | 16 | $14362,74$ | $12,19890$ | $798,0284$ | $12,19890$ |

Tabela 3: Resultados da comparação da fatoração de Cholesky e o Método dos Gradientes Conjugados para os Problemas 2 e 4.

Observe que, para a viga em balanço, a fatoração de Cholesky teve um melhor desem-

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

penho do que o Método dos Gradientes Conjugados, pois precisou de aproximadamente $30\%$ do tempo total gasto para resolver os sistemas lineares em questão. No caso da viga MBB, o desempenho do Método dos Gradientes Conjugados foi muito melhor do que o da Fatoração de Cholesky. Considerando as $10$ primeiras iterações da PLS, precisou somente $4,5\%$ do tempo gasto pela fatoração de Cholesky, e na otimalidade, os sistemas lineares foram resolvidos empregando apenas $5,6\%$ do tempo total usando a fatoração de Cholesky. Os resultados obtidos aqui sugerem que, à medida em que o número de elementos do domínio discretizado cresce, o desempenho do Método dos Gradientes Conjugados é superior ao da fatoração de Cholesky.

### 3.2. Resultados bidimensionais

Antes de serem realizados testes com a implementação com elementos triangulares em estruturas com formato irregulares, para as quais foram desenvolvidas, é analisado o comportamento do algoritmo para os casos em que a resolução com elementos retangulares é conhecida. Para os testes iniciais foram adaptados os domínios retangulares de modo que os triângulos foram obtidos por meio da divisão dos retângulos em sua diagonal principal. Com isto, a malha obtida ainda é estruturada e composta por apenas dois tipos de elementos, um referente à parte superior e outro à parte inferior do retângulo original. Com isto a estrutura do código não precisa ser muito modificada e a principal diferença em relação à implementação original é o calculo das, agora, duas matrizes de rigidez dos elementos. Posteriormente, considerou-se o uso de malhas irregulares e não estruturadas também para problemas já resolvidos com o programa original. Neste caso foi verificado que obter os vizinhos de cada elemento, bem como armazenar a matriz de rigidez deles poderia ser feito no início do programa e usado sempre que necessário, sem que isso gerasse problemas relacionados ao uso de excessiva memória da máquina. As estruturas obtidas são condizentes com as obtidas com elementos retangulares, validando a implementação.

No último resultado apresentado, é considerado o perfil resultante de um corte da asa de uma aeronave. Os dados do contorno da asa, bem como a força em cada ponto do mesmo, quando numa situação aerodinâmica, foram cedidos pelo Dr. Alexandre Pequeno Antunes (EMBRAER). Para resolver este problema foram utilizados $7060$ elementos triangulares irregulares e um limitante de $50\%$ do volume total do domínio. Foram considerados os dados $E = 1$ e $\nu = 0,3$ e foram usados $r = 0,05$ e $p = 10$. Considerou-se que a estrutura tem apoios nas longarinas, as duas barras verticais que geralmente estão presentes nos projetos aeronáuticos conectando as asas ao corpo da aeronave. A Figura 3 ilustra o resultado obtido.

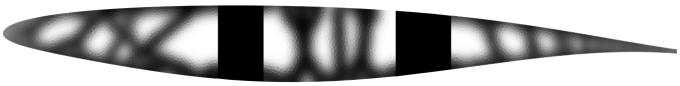


Figura 3: Resultado do problema de Otimização Topológica cujo domínio é definido por uma asa de aeronave.

## 4. Conclusões

Neste trabalho, foram apresentados os conceitos principais necessários para a extensões do programa de PLS relacionado ao algoritmo proposto por Gomes e Senne [2011]. Foram considerados aspectos para lidar com elementos hexaédricos regulares, para que assim seja possível

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings

abordar problemas tridimensionais, e triangulares, permitindo a análise de problemas de estruturas 2D não uniformes. A extensão para problemas 3D usando elementos hexaédricos regulares é mais imediata e uma análise computacional mostra que as etapas mais custosas ao resolver estes problemas são a montagem da matriz de rigidez global, com cerca de 95% do esforço total, e a resolução dos sistemas lineares $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$, com cerca de $2,5\%$. Foi mostrado que o uso do Método dos Gradientes Conjugados pode ser mais eficiente do que a fatoração de Cholesky ao resolver os maiores problemas abordados. Além disto, o uso do Método dos Gradientes Conjugados permite implementações livres de matrizes, o que pode ter um impacto muito significativo na redução de tempo de execução do problema. Este é um ponto que será explorado em pesquisa futura.

Para malhas com elementos triangulares irregulares e não estruturados, a complexidade de implementação é consideravelmente maior. O cálculo das matrizes de rigidez devem ser feitos individualmente, bem como a identificação dos vizinhos de cada elemento. Foi verificado que estas informações podem ser armazenadas e utilizadas sem comprometer o desempenho de um computador pessoal usando $MATLAB$. Com esta estratégia, foi resolvido o problema de Otimização Topológica associada a uma asa de aeronave utilizando dados reais fornecidos pela EMBRAER. Os resultados obtidos encorajam que uma parceria mais estrita da universidade com a indústria possa gerar bons frutos em problemas mais realísticos no futuro.

## 5. Agradecimentos

Os autores agradecem ao Prof. J. Azevedo por seu intermédio junto ao Dr. A. Pequeno, a quem também externamos toda nossa gratidão pela parceria no projeto. Agradecemos por fim à CAPES, ao CNPq e à FAPESP (2018/24293-0) pelo auxílio financeiro para realização do trabalho.

## Referências

Bendsøe, M. P. (1989). Optimal shape design as a material distribution problem. *Structural Optimization*, 1:193–202.

Bendsøe, M. P. e Kikuchi, N. (1988). Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 71:197–224.

Bendsøe, M. P. e Sigmund, O. (1999). Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of Applied Mechanics*, 69:635–654.

Bruns, T. E. e Tortorelli, D. A. (2001). Topology optimization of non-linear elastic structures and compliant mechanisms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:26–27.

Gomes, F. A. M. e Senne, T. A. (2011). An SLP algorithm and its application to topology optimization. *Computational Applied Mathematics*, 30:53–89.

Liu, K. e Tovar, A. (2014). An efficient 3d topology optimization code written in MATLAB. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 50:1175–1196.

Martinez, J. M. (2005). A note on the theoretical convergence properties of the SIMP method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 29:319–323.

Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., e Shu, J. Z. (2013). *The finite element method: Its basis and fundamentals*. Butterworth-Heinemann.

Galoá { Este trabalho foi publicado utilizando o **Galoá** proceedings