

DÉBORA CRISTINA SANT'ANA

**UMA NOVA PROPOSTA UTILIZANDO MÉTODOS DE
LAGRANGEANO AUMENTADO COM PENALIDADES MODERNAS NA
RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTATO**

CURITIBA

2005

DÉBORA CRISTINA SANT'ANA

**UMA NOVA PROPOSTA UTILIZANDO MÉTODOS DE
LAGRANGEANO AUMENTADO COM PENALIDADES MODERNAS NA
RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTATO**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências, Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - Programação Matemática, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Doutor Luiz Carlos Matioli.

CURITIBA

2005

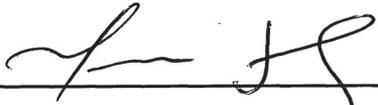
TERMO DE APROVAÇÃO

DÉBORA CRISTINA SANT'ANA

UMA NOVA PROPOSTA UTILIZANDO MÉTODOS DE LAGRANGEANO AUMENTADO COM PENALIDADES MODERNAS NA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONTATO

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Ciências, com área de concentração em Programação Matemática, no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, pela banca examinadora formada pelos professores:

Orientador:



Prof. Dr. Luiz Carlos Matoli
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ



Prof. Dr. Luiz Carlos de Abreu Rodrigues
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA - PR

Examinadores:



Prof. Dr. Ricardo Biloti
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Dedico a minha família e em especial a Simão Chwist, que sempre me incentivaram e apoiaram durante todo o curso, sempre partilhando as buscas e vitórias.

Agradecimento especial ao professor Luiz Carlos Matioli pela orientação, incentivo e dedicação. Agradeço também a todos os professores do curso, que de uma forma ou de outra contribuíram para a minha formação e para a realização deste trabalho.

***“Duvidar de tudo ou acreditar em tudo são atitudes
preguiçosas. Elas nos dispensam de refletir”.***

Henri Poincaré – matemático francês

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
1 INTRODUÇÃO	01
1.1 MOTIVAÇÃO	02
1.2 JUSTIFICATIVA.....	02
1.3 OBJETIVO.....	03
1.4 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO.....	03
1.5 NOTAÇÃO.....	04
2 CONCEITOS BÁSICOS	06
2.1 CÁLCULO E ÁLGEBRA LINEAR.....	06
2.2 CONVEXIDADE	12
3 PROBLEMA DE CONTATO.....	13
3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA.....	13
3.2 NOTAÇÃO.....	14
3.3 CONDIÇÕES DE CONTATO	16
3.4 EQUAÇÕES DE EQUILÍBRIO	17
3.5 FORMULAÇÃO VARIACIONAL DO PROBLEMA	18
4 INTRODUÇÃO AO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS.....	20
4.1 PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO UNIDIMENSIONAL.....	21
4.1.1 Formulação Clássica.....	21
4.1.2 Formulação Variacional.....	22
4.1.3 Formulação Variacional Simétrica.....	23
4.1.4 Aproximações de Galerkin	23
4.1.5 Funções Bases dos Elementos Finitos.....	26
4.1.6 Cálculos dos Elementos Finitos.....	29
4.1.7 Algumas Propriedades Fundamentais de S e F	30
4.1.7.1 Somatório de S	30
4.1.7.2 Esparsidade de S	31
4.1.7.3 Simetria de S	31
4.2 PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO BIDIMENSIONAL.....	32

4.2.1	Formulação Clássica.....	32
4.2.2	Formulação Variacional.....	33
4.2.3	Aproximação por Elementos Finitos	35
5	LAGRANGEANO AUMENTADO	37
5.1	MÉTODOS DE PENALIDADES.....	37
5.1.1	Métodos de Barreira.....	38
5.1.2	Métodos de Penalidades Externas	41
5.1.3	Métodos de Lagrangeano Aumentado.....	44
5.1.3.1	Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de igualdade	45
5.1.3.2	Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de desigualdade	48
5.1.3.3	Métodos de lagrangeano aumentado com penalidades coercivas.....	50
5.1.3.4	Construindo penalidades da família P	54
6	MÉTODOS DE LAGRANGEANO AUMENTADO APLICADOS AO PROBLEMA DE CONTATO.....	63
6.1	PROBLEMA DE CONTATO SEM ATRITO.....	63
6.1.1	Multiplicadores de Lagrange e Penalização Aplicados ao Problema de Contato sem Atrito.....	64
6.1.2	Método de Lagrangeano Aumentado Aplicado ao Problema de Contato sem Atrito	68
6.2	LAGRANGEANO AUMENTADO PARA O PROBLEMA DE CONTATO COM ATRITO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES	70
6.2.1	Multiplicadores de Lagrange e Penalização Aplicados ao Problema de Contato com Atrito.....	72
6.3	PROPOSTA DE NOVOS MÉTODOS DE LAGRANGEANO AUMENTADO PARA O PROBLEMA DE CONTATO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES	78
6.3.1	Uma Nova Proposta de Métodos de Lagrangeano Aumentado para o Problema de Contato sem Atrito.....	78
6.3.2	Uma Nova Proposta de Métodos de Lagrangeano Aumentado para o Problema de Contato com Atrito.....	81
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	87

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 3.1	- NOTAÇÃO PARA O PROBLEMA DE CONTATO.....	15
FIGURA 4.1	- PARTIÇÃO DE ELEMENTOS FINITOS DA REGIÃO $0 \leq x \leq 1$ COMPOSTA DE QUATRO ELEMENTOS COM NÓS NO PONTO FINAL DO ELEMENTO.....	27
FIGURA 4.2	- GRÁFICO DE $\varphi_i(x)$	28
FIGURA 4.3	- DECOMPOSIÇÃO DO DOMÍNIO DO PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO.....	33
FIGURA 5.1	- FUNÇÕES DE PENALIDADES DA FAMÍLIA P.....	52
FIGURA 5.2	- PENALIDADE DE ROCKAFELLAR COM $\mu = \eta = 1$	53
FIGURA 5.3	- PENALIDADE $\theta(\mu y)$ COM θ EXPONENCIAL E VALORES FIXOS DE μ	56
FIGURA 5.4	- PENALIDADE LOGARÍTMICA COM VALORES FIXOS DE μ	57
FIGURA 6.1	- DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO GAP NO ESPAÇO DOMINANTE.....	66
FIGURA 6.2	- REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO PARÂMETRO DE PENALIDADE ε_N	67
FIGURA 6.3	- NOTAÇÃO PARA O PROBLEMA DE CONTATO COM OBSTÁCULO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES	71
FIGURA 6.4	- COMPARAÇÃO ENTRE PENALIDADE CLÁSSICA E MODERNA.....	83

RESUMO

Os métodos de penalidade têm sido aplicados com sucesso na resolução de problemas de contato envolvendo atrito. As vantagens da penalidade aproximada são óbvias: a técnica é simples, não introduz equações adicionais e é rapidamente interpretada de um ponto de vista físico. Porém, existe também a desvantagem de mau-condicionamento que piora quando os valores penalizados são aumentados, enquanto restrições são satisfeitas exatamente no limite do valor penalizado. Neste caso, é desejável considerar a técnica de Lagrangeano aumentado como uma alternativa aproximada capaz de contornar essas dificuldades. O assunto do presente trabalho, problemas de contato com atrito, envolve inequações variacionais, que podem ser reduzidas a equações variacionais através de multiplicadores de Lagrange ou penalidades e podem ser manuseadas com a utilização do método dos elementos finitos. Devido a este fato, o uso de penalização neste tipo de problema é extremamente atrativo. Este trabalho tem como objetivo descrever o problema de contato com atrito no contexto de deformação finita do corpo com um obstáculo rígido e aplicar o Lagrangeano aumentado no lugar do tradicional multiplicador de Lagrange e técnicas de penalidade na elaboração de novos algoritmos que solucionem o problema em questão.

ABSTRACT

The penalty methods have been applied in the resolution of contact problems involving friction. The advantages of the penalty approach are obvious: the technique is simple, it introduces no additional equations and it is readily interpreted from a physical standpoint. However, there is disadvantage from ill-conditioning that worsens as penalty values are increased, too while constraints are satisfied exactly only for penalty values tending to infinite. In this case, it is desirable to consider the augmented Lagrangian technique as an alternative approach capable of circumventing these difficulties. The subject of the present work, contact problems involving friction, constitute variational inequalities, that may be reduced to variational equalities through Lagrange multipliers or penalty, such equalities may be handled using finite element methods. Due to this fact, the use of penalty in this type of problem is extremely comeliness. In this work will be characterize the contact problem involving in the context of finite deformation of the body with a rigid obstacle and to apply the augmented Lagrangeian to the wrong side of the traditional Lagrange multipliers and penalty techniques in the elaboration of the news augmented Lagrangian algorithms that solve the problem in discussion.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A formulação matemática do problema de contato na sua forma forte é composta pelas equações de equilíbrio e condições de contorno sujeitas a restrições de impenetrabilidade e as condições de Karush-Kuhn-Tucker para o atrito de Coulomb, no caso do problema de contato com atrito.

Diversas formulações têm sido propostas na literatura, como por exemplo, SIMO & LAURSEN (1990) E LAURSEN (1992), na tentativa de solucionar o problema de contato da melhor maneira possível. Em geral, aplicam-se os multiplicadores de Lagrange e penalização para eliminar as restrições de impenetrabilidade, o que causará, em alguns casos, mau-condicionamento do problema, e então, utiliza-se métodos de Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de desigualdade (ROCKAFELLAR, 1974) para fugir desse mau-condicionamento.

Sendo assim, o interesse da presente dissertação está voltado para a formulação do problema de contato, assim como, principalmente, para a aplicação de novos métodos de Lagrangeano aumentado na busca de uma solução, tanto para o problema de contato sem atrito quanto para o problema de contato com atrito. No entanto, é evidente que, para um bom entendimento do trabalho, é necessário antes explicitar, com maiores detalhes, técnicas e métodos que serão utilizados na busca da solução do problema. Portanto, uma importante parte do desenvolvimento deste trabalho encontra-se no Capítulo 5, onde os novos métodos de Lagrangeano aumentado são colocados de uma maneira mais geral.

1.1 MOTIVAÇÃO

O problema de contato pode ser encontrado em inúmeras situações físicas de interesse. Um exemplo de problema de contato que vale a pena ser mencionado é o sistema de dutos enterrados que estão sendo cada vez mais utilizados como meio de transporte. A introdução do contato, presente em grande parte dos problemas, acarreta em mais não-linearidades e conseqüentemente torna o problema ainda mais difícil de se resolver. Trabalhos envolvendo tais problemas têm sido desenvolvidos nos últimos anos com grande sucesso, especialmente utilizando métodos de Lagrangeano aumentado, utilizando penalidades clássicas. No entanto, penalidades modernas também foram desenvolvidas, e este trabalho, destina-se à aplicação destas penalidades, utilizando o método de Lagrangeano aumentado.

1.2 JUSTIFICATIVA

É reconhecido que os métodos de penalidades, defendidos por apresentarem uma técnica simples, não introduzirem equações adicionais e, também, por serem rapidamente interpretados do ponto de vista físico; sofrem de mau-condicionamento que piora quando os parâmetros de penalidade são aumentados, enquanto restrições são satisfeitas exatamente no limite do parâmetro de penalidade. Uma importante característica dos métodos de Lagrangeano aumentado é justamente a capacidade de sanar essas dificuldades. O método consiste no melhoramento iterativo de uma solução penalizada até os multiplicadores de Lagrange (exatos) serem obtidos. Este método tem sido aplicado com sucesso em problemas de contato com e sem atrito, mas com a utilização de penalidades clássicas. O surgimento de penalidades modernas fornece a possibilidade de um melhoramento na busca e aproximação da solução de problemas onde a técnica possa ser empregada.

1.3 OBJETIVO

Dois são os procedimentos numéricos largamente empregados para a solução de problemas de contato. O método empírico, que busca uma solução de forma iterativa pelo ajuste do estado de contato e o método de programação matemática, que busca a solução via a minimização de uma função sujeita a certas restrições. Comparado com o método empírico, o método de programação matemática apresenta a vantagem de uma convergência estável e uma formulação simples. Sendo assim, o objetivo principal, do presente trabalho, é a proposta de novos métodos de penalização tipo Lagrangeano aumentado na resolução de problemas de contato envolvendo atrito ou não.

1.4 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A estrutura do trabalho é compreendida pelos capítulos a seguir:

Capítulo 2: *Conceitos Básicos*. Neste capítulo serão definidos alguns conceitos básicos necessários durante o desenvolvimento do trabalho. Conceitos, estes, presentes no cálculo, álgebra linear e análise convexa.

Capítulo 3: *Problema de Contato*. Será apresentado, na seção 3.1, o problema de contato de uma forma geral, um pouco da parte histórica e os procedimentos numéricos utilizados na sua resolução. Na seção 3.2, algumas notações preliminares são introduzidas e o problema de contato a ser considerado é apresentado geometricamente. Na seção 3.3, as devidas condições de contato são estabelecidas e justificadas. A seção 3.4 apresenta as equações de equilíbrio juntamente com as condições de contorno – forma forte do problema de contato. E por fim, na seção 3.5, faz-se a formulação variacional do problema, ou seja, transforma-se a forma forte em forma fraca.

Capítulo 4: *Introdução ao método de Elementos Finitos*. Este capítulo dá uma breve explanação sobre o MEF, primeiro introduzindo os conceitos básicos do método na

resolução de um problema de valor de contorno unidimensional e depois na resolução de um problema bidimensional. Estes conceitos sobre o MEF estão presentes neste trabalho, pois serão utilizados na resolução do problema de contato.

Capítulo 5: *Lagrangeano Aumentado*. Serão apresentados os métodos de penalidades: métodos de barreira, métodos de penalidades externas e métodos de Lagrangeano aumentado, o assunto do presente capítulo. Na seção 5.1.3.1, é apresentado o método de Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de igualdade e na seção 5.1.3.2, para problemas com restrições de desigualdade. Na seção 5.1.3.3, é apresentado o método de Lagrangeano aumentado com penalidades coercivas e na seção 5.1.3.4, última deste capítulo, são construídas penalidades que utilizam uma função auxiliar de uma variável real, denominadas de penalidades da família P.

Capítulo 6: *Métodos de Lagrangeano Aumentado Aplicados ao Problema de Contato*. Neste capítulo, primeiramente, será novamente formulado o problema de contato sem atrito, na seção 6.1. Após a formulação, serão aplicados os multiplicadores de Lagrange e penalização ao problema, na seção 6.1.1. E em seguida, na seção 6.1.2, será aplicado o método de Lagrangeano aumentado para o problema de contato sem atrito. Na seção 6.2, será aplicado o método de Lagrangeano aumentado para o problema de contato com atrito. E, por fim, na seção 6.3 serão propostas novos métodos de Lagrangeano aumentado para o problema de contato sem atrito e com atrito.

Capítulo 7: *Considerações Finais*. Neste capítulo o trabalho é encerrado sendo apresentadas sugestões para futuros trabalhos.

1.5 NOTAÇÃO

A seguir, serão listadas algumas notações utilizadas com mais freqüência no decorrer do trabalho:

1. $x \in R^n$ é um vetor coluna em R^n ;

2. $x^T = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ - vetor transposto;
3. K^{-1} - inversa da matriz K ;
4. $[x] = x^{(+)} - x^{(-)}$ - diferença entre o fluxo que entra e o fluxo que sai;
5. $\|\cdot\|$ - norma Euclidiana;
6. $\langle \cdot \rangle$ - *Macauley bracket*;
7. $\text{dom } f$ - domínio da função f ;
8. $\text{int } \text{dom } f$ - interior do domínio da função f ;
9. $p'(\cdot, x)$ - derivada da função p em relação à primeira variável;
10. $\partial f(\cdot)$ - subdiferencial da função f ;
11. ∂X - fronteira do conjunto X ;
12. $R_+^m = \{x \in R^m : x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$;
13. $R_{++}^m = \{x \in R^m : x_i > 0, i = 1, 2, \dots, m\}$;
14. $D\varphi(X, t)$ = hessiana da função $\varphi(x, t)$.

CAPÍTULO 2

CONCEITOS BÁSICOS

Neste capítulo, serão apresentados alguns teoremas básicos e definições do cálculo e da álgebra linear e sobre análise convexa. No caso do cálculo, a maioria dos teoremas e definições pode ser encontrada nos livros de LEITHOLD (1994), GUIDORIZZI (1997) E McCALLUM (1997), da álgebra linear, no livro de GOLUB & VAN LOAN (1989) e da análise convexa, no livro de ROCKAFELLAR (1970).

2.1 CÁLCULO E ÁLGEBRA LINEAR

Definição 2.1.1 *Seja f uma função de duas variáveis, x e y . A derivada parcial de f em relação a x é a função denotada por $\frac{\partial f}{\partial x}$, tal que seus valores funcionais em qualquer ponto*

(x, y) no domínio de f sejam dados por

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}$$

se o limite existir. Da mesma forma, a derivada parcial de f em relação a y é a função,

denotada por $\frac{\partial f}{\partial y}$, tal que seus valores funcionais em qualquer ponto (x, y) no domínio de

f sejam dados por

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}$$

se o limite existir.

Definição 2.1.2 Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $x \in \text{dom } f$. Se $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\| = 1$, então a derivada direcional de f em x na direção $d \in \mathbb{R}^n$ é definida por

$$f'(x, d) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t}.$$

Definição 2.1.3 A norma euclidiana de um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ é definida por

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \sqrt{x^T x}.$$

Definição 2.1.4 O gradiente de uma função escalar f , denotado por $\text{grad } f$ ou ∇f , é um vetor, definido como

$$\nabla f = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T.$$

Definição 2.1.5 O conjunto de várias funções a valores reais f_1, f_2, \dots, f_m em \mathbb{R}^n , pode ser visto como uma função vetorial $f(x)$. Essa função determina o vetor $f(x)$ definido por $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, ou seja,

$$f(x) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)]^T.$$

Definição 2.1.6 Supondo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ uma função contínua com derivadas parciais contínuas. A matriz das derivadas parciais de f , é chamada de matriz Jacobiana, definida como

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Definição 2.1.7 A matriz das derivadas parciais de segunda ordem de $f : R^n \rightarrow R$ em um ponto x , é chamada de matriz hessiana, definida como

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Definição 2.1.8 Seja F um campo vetorial numa bola aberta B em R^3 tal que $F(x, y, z) = M(x, y, z)i + N(x, y, z)j + R(x, y, z)k$. Então o divergente de F , denotado por $\text{Div } F$, será definido por $\text{Div } F(x, y, z) = \frac{\partial M}{\partial x}i + \frac{\partial N}{\partial y}j + \frac{\partial R}{\partial z}k$ se essas derivadas parciais existirem.

Definição 2.1.9 Diz-se que um conjunto de funções com valores reais $\{\Phi_0(x), \Phi_1(x), \Phi_2(x), \dots\}$ é ortogonal em um intervalo $[a, b]$ se

$$(\Phi_m, \Phi_n) = \int_a^b \Phi_m(x) \Phi_n(x) dx = 0.$$

Definição 2.1.10 Dada uma série: $f(x) = C_0\Phi_0(x) + C_1\Phi_1(x) + \dots + C_n\Phi_n(x) + \dots$, onde temos a representação de uma série generalizada e queremos determinar os seus coeficientes, $C_0, C_1, \dots, C_n, \dots$. Se $\{\Phi_0(x), \Phi_1(x), \dots\}$ é um conjunto ortogonal, então a série $f(x) = C_0\Phi_0(x) + C_1\Phi_1(x) + \dots + C_n\Phi_n(x) + \dots$ é denominada série de Fourier generalizada.

Teorema de Green 2.1.1 Sejam M e N funções de duas variáveis x e y , de tal modo que tenham derivadas parciais primeiras contínuas em um disco aberto B em \mathbb{R}^2 . Se C for uma curva fechada simples seccionalmente suave, contida inteiramente em B , e se R for a região limitada por C , então

$$\oint_C M(x, y) dx + \oint_C N(x, y) dy = \iint_R \left(\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{\partial M}{\partial y} \right) dA.$$

Teorema da divergência 2.1.2 Sejam as funções M e N , a curva C e a região R idênticas àquelas que foram definidas no teorema de Green. Se $F(x, y) = M(x, y)i + N(x, y)j$ e $N(s)$ for o vetor normal exterior unitário de C em P , onde s unidades é o comprimento do arco medido no sentido anti-horário de um ponto particular P_0 em C até P , então

$$\oint_C F \cdot N ds = \iint_R \text{Div } F dA.$$

Definição 2.1.11 Uma matriz $n \times n$ A é dita inversível (ou não-singular) se existe uma matriz B $n \times n$ tal que $AB = BA = I_n$. A matriz B é chamada de inversa de A . Se não existir tal matriz B , dizemos que A é singular (ou não-inversível).

Definição 2.1.12 Se $A = [a_{ij}]$ é uma matriz $m \times n$, então a matriz $n \times m$ $A^T = [a_{ji}]$, onde $(1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m)$ é chamada de transposta de A . Portanto, a transposta de A é obtida trocando-se as linhas de A por suas colunas e vice-versa.

Definição 2.1.13 Uma matriz A é dita simétrica se $A^T = A$. Isto é, A é simétrica se é uma matriz quadrada onde $a_{ij} = a_{ji}$. Se A for simétrica, seus elementos são simétricos em relação à diagonal principal.

Definição 2.1.14 Um espaço vetorial real é um conjunto de elementos V munido de duas operações \oplus e \otimes tais que

(α) Se u e v são elementos de V , então $u \oplus v$ está em V (i.e., V é fechado em relação à operação \oplus).

(a) $u \oplus v = v \oplus u$ se u e v pertencem a V .

(b) $u \oplus (v \oplus w) = (u \oplus v) \oplus w$ se u, v e w pertencem a V .

(c) Existe um elemento 0 em V tal que

$$u \oplus 0 = 0 \oplus u = u, \text{ para todo } u \text{ em } V.$$

(d) Para cada u em V , existe um elemento $-u$ em V tal que

$$u \oplus -u = 0.$$

(β) Se u é um elemento qualquer de V e r é qualquer número real, então $r \otimes u$ está em V (i.e., V é fechado em relação à operação \otimes).

(e) $r \otimes (u \oplus v) = r \otimes u \oplus r \otimes v$, para todo número real r e todos os elementos u e v em V .

(f) $(r + s) \otimes u = r \otimes u \oplus s \otimes u$, para todos os números reais r e s e todo elemento u em V .

(g) $r \otimes (s \otimes u) = (rs) \otimes u$, para todos os números reais r e s e todo elemento u em

V .

(h) $1 \otimes u = u$, para todo elemento u de V .

Definição 2.1.16 Seja V um espaço vetorial e W um subconjunto não-vazio de V . Se W é um espaço vetorial em relação às operações em V , dizemos que W é um subespaço de V .

Definição 2.1.17 Os vetores v_1, v_2, \dots, v_K em um espaço vetorial V são ditos linearmente dependentes se existem constantes c_1, c_2, \dots, c_K , nem todas nulas, tais que

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_K v_K = 0.$$

Caso contrário, v_1, v_2, \dots, v_K são linearmente independentes, isto é v_1, v_2, \dots, v_K são linearmente independentes se, sempre que $c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_K v_K = 0$, temos $c_1 = c_2 = \dots = c_K = 0$.

Definição 2.1.18 Os vetores v_1, v_2, \dots, v_K em um espaço vetorial V formam uma base para V se

(a) v_1, v_2, \dots, v_K geram V ;

(b) v_1, v_2, \dots, v_K são linearmente independentes.

2.2 CONVEXIDADE

Definição 2.2.1 O conjunto $C \subset \mathbb{R}^n$ é chamado convexo se para todo $x_1, x_2 \in C$ e $\alpha \in [0,1]$, $\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2 \in C$.

Geometricamente, isto significa que o segmento de reta $[x_1, x_2] = \{\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2, \alpha \in [0,1]\}$ está inteiramente contido em C .

Definição 2.2.2 Uma função f definida em um convexo C é convexa se e somente se para todo $x_1, x_2 \in C$, $\alpha \in [0,1]$ se verifica que

$$f(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1-\alpha)f(x_2)$$

Se para todo $\alpha \in (0,1)$ e $x_1 \neq x_2$ vale que

$$f(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2) < \alpha f(x_1) + (1-\alpha)f(x_2),$$

diremos que f é estritamente convexa.

CAPÍTULO 3

PROBLEMA DE CONTATO

3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

O problema de contato é um tópico de extrema importância na mecânica dos sólidos, pois surge da interação entre corpos, forças e deformações locais elevadas, o que acarreta uma concentração de tensões. O fenômeno do contato pode ser encontrado em praticamente todas as estruturas civis ou mecânicas. Existem duas maneiras distintas onde o contato pode ocorrer em engenharia:

- Contato intencional: é aquele contato planejado para dar a devida sustentação ou solicitação a uma estrutura.

- Contato acidental: é aquele contato que ocorre em situações de acidente.

Enquanto que no contato intencional deseja-se que o efeito seja o mais eficiente possível, no acidental deseja-se minimizar os efeitos do contato, o que só é possível quando se conhece o fenômeno do contato.

A consideração do contato levará a um problema de elevado grau de complexidade, pois se trabalha com fenômenos de não-linearidade geométrica, causada pela variação da área de contato, desconhecida à priori. Além disto, o contato é acompanhado de outro fenômeno complexo, que se comporta também de forma não-linear, que é o atrito.

O tratamento analítico do problema de contato é uma tarefa extremamente difícil. Por esse motivo, tradicionalmente os importantes efeitos do contato sobre as estruturas não

eram considerados. Isto só começou a mudar recentemente com o desenvolvimento de técnicas numéricas de tratamento do contato e atrito (BITTENCOURT, 2002).

Historicamente, o tratamento do problema de contato originou-se com o trabalho de Heinrich Hertz (1882), que estudou o problema considerando pequenas deformações elásticas, sem atrito. Por esse motivo, às vezes, as tensões que surgem na zona de contato são denominadas tensões de Hertz. A análise de Hertz é ainda usada hoje como base para projetos em algumas situações industriais envolvendo contato elástico. A partir daí, o problema de contato passou a ser objeto de pesquisa (ZHOU *et al*, 2002).

O problema de contato pode ser solucionado através de dois procedimentos numéricos. O método empírico que busca a solução de forma iterativa pelo ajuste do estado de contato e o método de programação matemática, que busca a solução via minimização de uma função sujeita a restrições. Em relação ao primeiro método, o segundo possui convergência e uma formulação mais simples.

Aqui, neste capítulo, será feita a formulação do problema de contato sem atrito com detalhes. Apenas, no Capítulo 6, e sem muitos detalhes será dada a formulação do problema de contato com atrito.

3.2 NOTAÇÃO

A atenção nesta seção será voltada para a Figura 3.1 que mostra o problema de contato em um corpo com deformação finita restrito à presença de um obstáculo rígido e imóvel. A notação utilizada nesta seção será semelhante à utilizada por SIMO & LAURSEN (1990).

Como indicado na Figura 3.1, os pontos na configuração de referência em Ω (um subconjunto aberto do R^2 ou R^3) serão denotados por X . Os pontos na configuração corrente serão dados por $x = \varphi(X, t)$, sendo que φ tem a propriedade do $\det(D\varphi(X, t)) > 0$ para $t > 0$ (o que irá garantir que a matriz hessiana seja positiva definida e permitirá o

cálculo da matriz inversa), onde t é a variável tempo (que posteriormente será omitida). Será denotado por Γ a parte de $\partial\Omega$ (fronteira de Ω) que se considera incluir todos os possíveis pontos de contato, e γ será a imagem de Γ em φ (função que descreve o movimento admissível). Finalmente, define-se D , um subconjunto aberto do espaço ambiente que junto com ∂D (fronteira de D) compreende a região admissível para o movimento de Ω . O restante do espaço ambiente é então considerado ocupado pelo obstáculo rígido. D é considerado invariável em relação ao tempo.

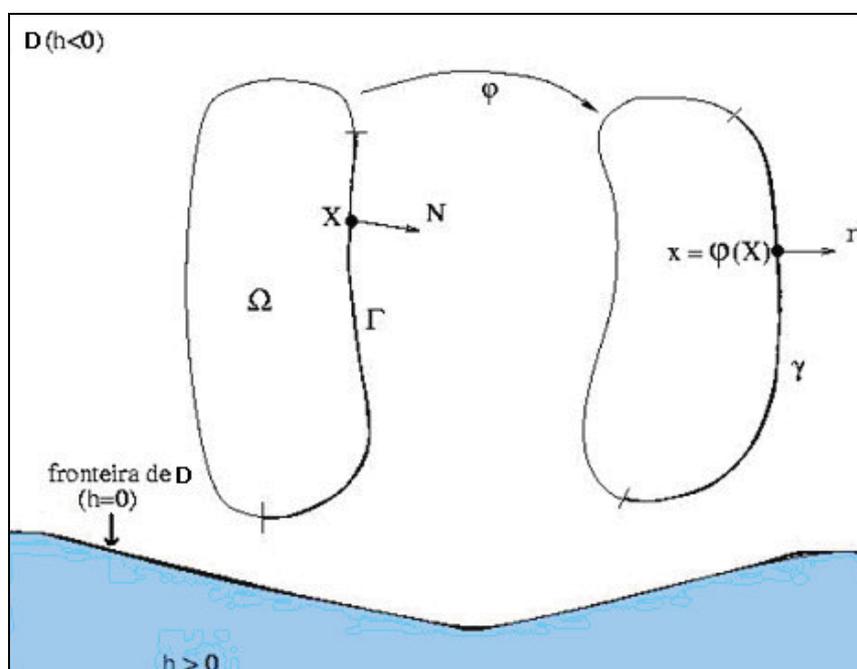


FIGURA 3.1 – NOTAÇÃO PARA O PROBLEMA DE CONTATO.

Será considerada uma função *gauge* h , definida no espaço ambiente, sendo que $h < 0$ em D , $h = 0$ em ∂D e $h > 0$ fora de D . Neste trabalho será assumido que D é um conjunto convexo (o motivo pelo qual se está admitindo D como um conjunto convexo será explicitado no Capítulo 6). A forma específica da função *gauge* não é crucial para o que segue, simplesmente será enfatizado que para todo ponto admissível x do espaço ambiente, $h \leq 0$.

3.3 CONDIÇÕES DE CONTATO

Estabelecidas as devidas notações, agora se torna possível a introdução das condições de contato. Ou seja, para todo $X \in \Gamma$, a deformação admissível $x = \varphi(X, t)$, deve satisfazer:

$$h(x) \leq 0 \quad (3.1)$$

$$t_N = -n(x) \cdot PN \geq 0 \quad (3.2)$$

$$t_N(x)h(x) = 0 \quad (3.3)$$

$$t_T = PN + t_N n = 0 \quad (3.4)$$

onde:

P = primeiro tensor força de Piola-Kirchhoff;

t_N = pressão de contato em X ;

n = normal a x na configuração corrente;

N = normal a X na configuração de referência.

A equação (3.1) representa a restrição de impenetrabilidade, ou seja, x não pode estar no interior do obstáculo rígido, onde $h > 0$; (3.2) representa a restrição da força superficial de contato em X ser sempre não negativa (pressão); e (3.3) a condição de complementaridade que admite que a pressão de contato t_N seja diferente de zero somente quando a função *gauge* for igual a zero ($h = 0$). As equações (3.1)-(3.3) são conhecidas como as condições de Karush-Kuhn-Tucker. A equação (3.4) apenas afirma que o atrito não está presente (SIMO & LAURSEN, 1990).

Nas equações (3.1)-(3.4), P é desconhecido e as demais variáveis são conhecidas.

3.4 EQUAÇÕES DE EQUILÍBRIO

Com as notações colocadas anteriormente pode-se estabelecer as equações de equilíbrio. A forma forte, juntamente com as condições de contorno e contato, é dada como segue:

$$\left. \begin{aligned} Div P + f &= 0 \text{ em } \Omega \\ PN &= \bar{t} \text{ em } \Gamma_\sigma \\ \varphi &= \bar{\varphi} \text{ em } \Gamma_\varphi \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

onde: Γ_σ e Γ_φ são partes da fronteira de Ω , P representa o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff e é a variável desconhecida, Div representa o operador divergente na geometria de referência, f é a força prescrita no corpo, N é a normal externa na configuração de referência, \bar{t} são forças distribuídas no contorno Γ_σ , φ é o campo de deslocamentos e $\bar{\varphi}$ são os deslocamentos prescritos no contorno Γ_φ (SIMO & LAURSEN, 1990).

Considerando as regiões de contorno especificadas, assume-se que Γ_σ e Γ_φ não variam com o tempo, e que segue as seguintes relações (LAURSEN, 1992):

$$\left. \begin{aligned} \Gamma \cup \Gamma_\sigma \cup \Gamma_\varphi &= \partial\Omega \\ \Gamma \cap \Gamma_\sigma &= \Gamma_\sigma \cap \Gamma_\varphi = \Gamma_\varphi \cap \Gamma = \emptyset \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

Em (3.5), $PN = \bar{t}$ representa as condições naturais de contorno e $\varphi = \bar{\varphi}$ as condições essenciais de contorno.

É importante observar que não foram feitas restrições para P , o que significa que a formulação deste problema segue para outros problemas elásticos ou inelásticos.

3.5 FORMULAÇÃO VARIACIONAL DO PROBLEMA

A forma forte das equações de equilíbrio em (3.5) serão agora convertidas para a forma fraca, ou seja, será feita a formulação variacional do problema em questão. Mas, primeiro, deve-se observar que as variações admissíveis para o movimento são restrições das condições de contato. Esta restrição tem a seguinte forma

$$\delta\varphi(X) \cdot n(\varphi(X)) \leq 0 \text{ em } \Gamma \text{ se } h(\varphi(X)) = 0 \quad (3.7)$$

onde $\delta\varphi(X)$ é uma variação admissível da deformação (supondo $\delta\varphi = 0$ em Γ_φ).

Mantendo este fato em mente, agora, pode-se converter a forma forte do problema (3.5) para a forma fraca. Para isso, multiplica-se a equação $Div P + f = 0$ por uma função teste suficientemente suave v definida em Ω , e integra-se o produto resultante no domínio Ω . O resultado é da forma $\int_{\Omega} (Div P + f)v d\Omega = 0, \forall v$, o que implica em

$$\int_{\Omega} (Div P)v d\Omega + \int_{\Omega} f v d\Omega = 0, \forall v \text{ (forma fraca). Mas } Div(S^T v) = S \cdot \nabla v + v Div S, \text{ ou seja,}$$

$$(Div S)v = Div(S^T v) - S \cdot \nabla v, \text{ então } \int_{\Omega} Div(P^T v) d\Omega - \int_{\Omega} P \cdot \nabla v d\Omega + \int_{\Omega} f v d\Omega = 0, \forall v.$$

Pelo Teorema da divergência de Green, $\int_V Div W dV = \int_{\partial V} W \cdot n d\partial V$, e sendo assim,

pode-se escrever que $-\int_{\partial\Omega} P^T v \cdot n d\partial\Omega + \int_{\Omega} P \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} f v d\Omega = 0 \forall v$, ou melhor, pode-se

escrever que $-\int_{\Gamma} P^T v \cdot n d\Gamma + \int_{\Omega} P \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} f v d\Omega = 0 \forall v$, o que resultará em

$$-\int_{\Gamma_\varphi} P^T v \cdot n d\Gamma_\varphi - \int_{\Gamma_\sigma} P^T v \cdot n d\Gamma_\sigma + \int_{\Omega} P \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} f v d\Omega = 0, \forall v.$$

Fazendo $v = \delta\varphi$ e como $\delta\varphi = 0$ em Γ_φ , tem-se

$-\int_{\Gamma_\sigma} P^T \cdot n(\delta\varphi) d\Gamma_\sigma + \int_{\Omega} P \cdot \nabla(\delta\varphi) d\Omega - \int_{\Omega} f(\delta\varphi) d\Omega = 0 \forall v$. Também, tem-se que pelas

equações de equilíbrio (3.5) $PN = \bar{t}$, então $-\int_{\Gamma_\sigma} \bar{t} v d\Gamma_\sigma + \int_{\Omega} P \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} f v d\Omega = 0, \forall v$, ou

melhor,

$$\int_{\Omega} P \cdot \text{Grad}(\delta\varphi) d\Omega - \int_{\Omega} f \cdot \delta\varphi d\Omega - \int_{\Gamma_\sigma} \bar{t} \cdot \delta\varphi d\Gamma_\sigma = 0 \quad (3.8)$$

$\forall \delta\varphi$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_φ e satisfazendo (3.7).

Investigando a natureza do problema variacional, nota-se que

$$t \cdot \delta\varphi = -t_N \delta\varphi \cdot n \text{ em } \Gamma. \quad (3.9)$$

Usando (3.7) e (3.9) juntas tem-se que

$$\int_{\Gamma} t \cdot \delta\varphi d\Gamma \geq 0. \quad (3.10)$$

E, sendo assim, a formulação variacional para o problema de contato sem atrito é descrita como

$$G(\varphi, \delta\varphi) = \int_{\Omega} P \cdot \text{Grad}(\delta\varphi) d\Omega - \int_{\Omega} f \cdot \delta\varphi d\Omega - \int_{\Gamma_\sigma} \bar{t} \cdot \delta\varphi d\Gamma_\sigma \geq 0 \quad (3.11)$$

onde tem-se que encontrar P que satisfaça (3.11)

para todo $\delta\varphi$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_φ e satisfazendo (3.7) (SIMO & LAURSEN, 1990).

CAPÍTULO 4

INTRODUÇÃO AO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Grande parte dos problemas das engenharias pode ser formulada através dos princípios da Mecânica do Contínuo, onde esses princípios são escritos sob a forma de equações diferenciais.

O processo de modelagem desses problemas é realizado em duas etapas: a primeira consiste na identificação dos fatores que influenciam de maneira relevante o problema, ou seja, consiste na escolha adequada dos princípios físicos e das variáveis dependentes e independentes que descrevem o problema, o que resultará em um modelo matemático constituído por equações diferenciais; a segunda consiste na obtenção da solução do modelo, tarefa esta atribuída aos métodos numéricos.

Um dos métodos utilizados na obtenção da solução deste tipo de modelo matemático é o Método dos Elementos Finitos (MEF), que teve suas origens na análise estrutural e um desenvolvimento maior na década de 50, com o surgimento dos computadores digitais. Na década de 70, o MEF teve suas aplicações estendidas a outros problemas e, desde então, vem se consolidando como um método mais geral de solução de problemas envolvendo equações diferenciais (RIBEIRO, 2004).

4.1 PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO UNIDIMENSIONAL

Os conceitos básicos do MEF serão introduzidos através de um problema unidimensional de valor de contorno, problema este que consiste em determinar a função que satisfaz a uma determinada equação diferencial em um dado domínio, conhecendo-se os valores que a função e/ou suas derivadas assumem no contorno do domínio.

4.1.1 Formulação Clássica

A situação mais geral de um problema de valor de contorno unidimensional linear e de segunda ordem é dada pela equação diferencial da forma

$$a_0(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + a_1(x) \frac{du(x)}{dx} + a_2(x) u(x) = f(x) \text{ em } (0,1)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0 \frac{du(0)}{dx} + \beta_0 u(0) &= \gamma_0 \\ \alpha_1 \frac{du(1)}{dx} + \beta_1 u(1) &= \gamma_1 \end{aligned} \right\} \text{ Condições de contorno}$$

onde os coeficientes a_0, a_1 e a_2 , assim como f , são funções de x no domínio dado e $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \alpha_1, \beta_1$ e γ_1 são constantes (BECKER *et al*, 1981).

No entanto, para facilitar o entendimento do método, será utilizado um exemplo de problema de contorno unidimensional bem mais simples, como segue.

Dada $f(x) = x$, determinar $u(x)$ tal que

$$\frac{-d^2 u}{dx^2} + u = x \text{ em } (0,1) \tag{4.1}$$

$$\left. \begin{aligned} u(0) &= 0 \\ u(1) &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ Condições de contorno} \tag{4.2}$$

É claro que, como o segundo membro da equação diferencial (4.1) é $f(x) = x$, a solução é fácil de ser encontrada. No entanto, existem vários problemas de contorno em que a solução não é tão simples, devido a este fato, necessita-se enfraquecer o problema, como será feito a seguir.

4.1.2 Formulação Variacional

A formulação variacional que corresponde ao problema (4.1)-(4.2) pode ser escrita na seguinte forma:

Dada $f(x)$, determinar $u(x) \in U$ tal que $\forall v(x) \in H_0^1$

$$\int_0^1 \left(\frac{-d^2u}{dx^2} + u \right) \cdot v \, dx = \int_0^1 x \cdot v \, dx \quad (4.3)$$

sendo o espaço das funções admissíveis,

$$U = \left\{ u(x) / u(1) = u(0) = 0 \text{ e } \int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx < \infty \right\}. \quad (4.4)$$

Escrevendo (4.3) de uma forma mais compacta, tem-se,

$$\begin{aligned} \int_0^1 \left(\frac{-d^2u}{dx^2} + u - x \right) \cdot v \, dx &= 0 \quad \forall v \in H_0^1 \\ u(0) &= 0 \\ u(1) &= 0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

¹ A notação H_0^1 será utilizada para descrever a classe de funções testes v , onde o sobrescrito "1" significa a derivada de ordem 1 de v ser quadrado-integrável no intervalo $0 < x < 1$ e o subscrito "0" indica que $v = 0$ para $x = 0$ e para $x = 1$.

4.1.3 Formulação Variacional Simétrica

Aplicando a técnica de integral por partes e as condições de contorno, tem-se que,

$$\int_0^1 -\frac{d^2u}{dx^2} \cdot v \, dx = \int_0^1 \frac{du}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} \, dx. \text{ Sendo assim, reformulando (4.6), tem-se,}$$

$$\int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} + uv - xv \right) dx = 0 \quad \forall v \in H_0^1. \quad (4.6)$$

4.1.4 Aproximações de Galerkin

O problema, agora, é encontrar $u \in H_0^1$ tal que

$$\int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} + uv \right) dx = \int_0^1 xv \, dx \quad \forall v \in H_0^1. \quad (4.7)$$

Existem duas propriedades fundamentais de H_0^1 que serão importantes no tipo de aproximação que se tem em mente. A primeira é que H_0^1 é um espaço linear de funções, e a segunda, com dimensão infinita.

Por ser um espaço vetorial então as combinações lineares das funções em H_0^1 também pertencem a H_0^1 , ou seja, se $v_1, v_2 \in H_0^1$ então $\alpha v_1 + \beta v_2 \in H_0^1$, α e β constantes.

Por possuir dimensão infinita, percebe-se que é necessário especificar um número infinito de parâmetros em ordem para definir unicamente uma função peso arbitrária no espaço. Mas, com algum conhecimento de séries de Fourier, não se tem dificuldade em entender este conceito. De fato, introduzindo-se o conjunto de funções

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2} \cdot \text{sen}(n\pi x), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.8)$$

e v uma função peso em H_0^1 , então pode ser verificado que v pode ser escrita na forma

$$v(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n(x) \quad (4.9)$$

onde o coeficiente escalar a_n é dado por

$$a_n = \int_0^1 v(x) \cdot \Psi_n(x) dx. \quad (4.10)$$

Será, suposto, dado um conjunto infinito de funções $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \dots\} \subset H_0^1$ que tem a propriedade que cada função teste $v \in H_0^1$ pode ser representada como uma combinação linear de $\phi_i(x)$ por uma série do tipo (4.10). É importante salientar que $\phi_i(x)$ não necessita ser uma função trigonométrica, mas que seja uma função suficientemente suave², devido ao fato de que as funções bases $\phi_i(x)$ precisam ter pelo menos primeira derivada (para o problema de contorno unidimensional). A única necessidade é que cada v seja representada como uma combinação linear de tais funções do tipo

$$v(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i \phi_i(x) \quad (4.11)$$

onde β_i são constantes e a série converge em um sentido apropriado para o espaço H_0^1 . As funções $\phi_i(x)$, são chamadas de funções bases.

Uma aproximação para v seria

$$v_N(x) = \sum_{i=1}^N \beta_i \phi_i(x). \quad (4.12)$$

As N funções bases $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ definem um subespaço N -dimensional $H_0^{(N)}$ de H_0^1 . O subespaço $H_0^{(N)}$ possui dimensão N porque cada função v_N em $H_0^{(N)}$ é determinada por uma combinação linear de N funções linearmente independentes $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ como em (4.13). $H_0^{(N)}$ é um subespaço de $H_0^{(1)}$ porque cada $\phi_i, i = 1, 2, \dots, N$, por definição pertence a H_0^1 . Por exemplo, $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$ definem o subespaço $H_0^{(3)}$ de H_0^1 , e assim por diante.

² Funções suaves são aquelas infinitamente diferenciáveis. Para o problema em questão, uma função suficientemente suave necessita ter pelo menos primeira derivada.

Com estas preliminares, pode-se, agora, considerar o método de Galerkin para construção de soluções aproximadas do problema variacional de valor de contorno (4.8).

O método de Galerkin consiste em buscar uma solução aproximada para (4.8) em um subespaço de dimensão finita $H_0^{(N)}$ de H_0^1 de funções admissíveis ao invés de todo o espaço H_0^1 . Então, busca-se uma solução aproximada u_N em $H_0^{(N)}$ da forma

$$u_N(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i(x) \quad (4.13)$$

que satisfaça (4.8). Em outras palavras, a formulação do problema aproximado é encontrar $u_N \in H_0^{(N)}$ tal que

$$\int_0^1 \left(\frac{du_N}{dx} \cdot \frac{dv_N}{dx} + u_N v_N \right) dx = \int_0^1 x v_N dx \quad \forall v_N \in H_0^{(N)}. \quad (4.14)$$

Como as ϕ_i são conhecidas, u_N será completamente determinado, uma vez que os N coeficientes α_i em (4.14) são determinados.

Para determinar α_i , substitui-se (4.13) e (4.14) em (4.15) que resulta em

$$\sum_{i=1}^N \beta_i \left(\sum_{j=1}^N S_{ij} \alpha_j - F_i \right) = 0 \quad \forall \beta_i \quad (4.15)$$

onde

$$S_{ij} = \int_0^1 [\phi_i'(x) \phi_j'(x) + \phi_i(x) \phi_j(x)] dx \quad (4.16)$$

e

$$F_i = \int_0^1 x \phi_i(x) dx \quad (4.17)$$

em que $i, j = 1, 2, \dots, N$. Sendo assim, a matriz de rigidez $S = [S_{ij}]$ é uma matriz quadrada de dimensão N e o vetor força $F = [F_i]$ possui dimensão $N \times 1$.

Sendo as ϕ_i conhecidas, S e F podem ser calculados. Para isso, faz-se $\beta_1 = 1, \beta_i = 0 (i \neq 1); \beta_2 = 1, \beta_i = 0 (i \neq 2); \beta_3 = 1, \beta_i = 0 (i \neq 3); \dots; \beta_N = 1, \beta_i = 0 (i \neq N)$.

Sendo assim, tem-se

$$\sum_{i=1}^N S_{ij} \alpha_j = F_i, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (4.18)$$

Como as ϕ_i são linearmente independentes, é possível mostrar que as equações (4.18) são linearmente independentes e S admite inversa, então

$$\alpha_j = \sum_{i=1}^N (S^{-1})_{ij} F_i, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (4.19)$$

A solução u_N é encontrada, substituindo-se (4.20) em (4.14) (BECKER *et al*, 1981). É importante salientar que, na prática, ou seja, quando se implementa o método, α é obtido pela resolução de um sistema linear e nunca pela inversão da matriz S .

4.1.5 Funções Bases dos Elementos Finitos

No método de Galerkin uma má escolha das ϕ_i pode resultar numa matriz mal condicionada, tornando o sistema de equações difícil de se resolver. Estas dificuldades podem ser sanadas usando-se o método dos elementos finitos.

A idéia principal do método é dividir o domínio em sub-regiões chamadas elementos finitos.

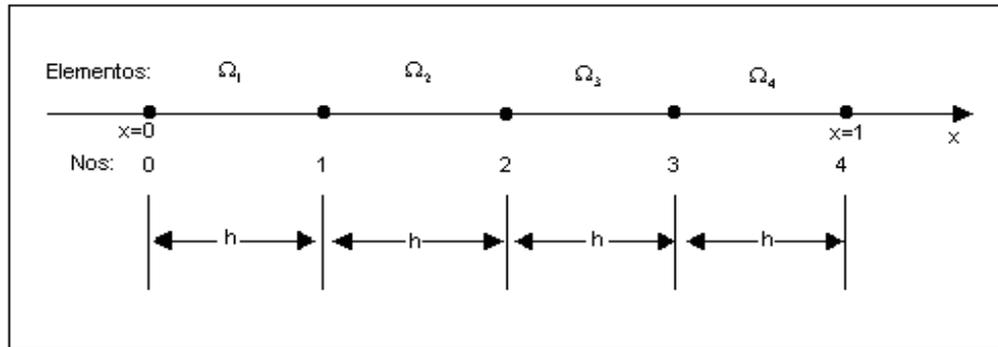


FIGURA 4.1 - PARTIÇÃO DE ELEMENTOS FINITOS DA REGIÃO $0 \leq x \leq 1$ COMPOSTA DE QUATRO ELEMENTOS COM NÓS NO PONTO FINAL DO ELEMENTO.

O tamanho de cada elemento finito Ω_i é denotado por h_i . Neste exemplo, será considerado que o comprimento de cada h_i é o mesmo, ou seja, h . No entanto, vale ressaltar que o comprimento de cada h_i pode ser diferente. Os nós são os pontos identificados. A coleção de elementos e nós do domínio é chamada de malha de elementos finitos.

No método de elementos finitos usa-se h no lugar de N . Pois, quanto menor o h , mais elementos Ω_i são introduzidos e, por isso, mais funções bases são necessárias para $H_0^{(N)}$. Então, será usada a notação v_h, u_h e H_0^h , no lugar de v_N, u_N e $H_0^{(N)}$.

Depois da construção da malha de elementos finitos para o problema em questão, deve-se construir o conjunto de funções bases, usando os seguintes critérios:

1. As funções bases são funções simples definidas em cada elemento sobre a malha.
2. As funções bases são suficientemente suaves, ou seja, para o caso unidimensional que se está considerando, as funções bases devem possuir pelo menos primeira derivada; e, pertencem a classe H_0^1 de funções.
3. As funções bases são escolhidas de tal maneira que o parâmetro α_i , definindo a solução aproximada u_h é precisamente o valor de $u_h(x)$ nos nós.

Se as coordenadas dos nós são denotadas x_i ($i = 0, 1, 2, 3, 4$), então as funções bases dadas por $i = 1, 2, 3$. Podem ser da forma

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{h_i} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1} - x}{h_{i+1}} & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0 & x \leq x_{i-1} \text{ e } x \geq x_{i+1} \end{cases} \quad (4.20)$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}$ é o tamanho do elemento Ω_i .

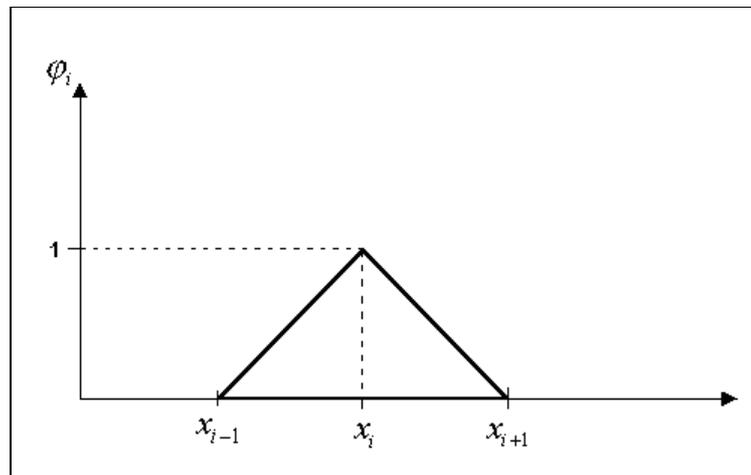


FIGURA 4.2 – GRÁFICO DE $\phi_i(x)$.

Pode-se observar na Figura 4.2 que existe um “bico” no gráfico. No entanto, como determinado no critério 1, as funções bases são definidas elemento por elemento, ou seja, entre os nós x_{i-1} e x_i definiu-se um elemento e entre os nós x_i e x_{i+1} definiu-se outro elemento, portanto, as funções bases possuem primeiras derivadas e elas são da forma

$$\phi_i'(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_i} & x_{i-1} < x < x_i \\ \frac{-1}{h_{i+1}} & x_i < x < x_{i+1} \\ 0 & x < x_{i-1} \text{ e } x > x_{i+1} \end{cases} \quad (4.21)$$

Para satisfazer o critério 3,

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (4.22)$$

No exemplo em questão, $i = 1, 2, 3$ e $j = 0, 1, 2, 3, 4$.

Acordando com (4.14) a nova notação será

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N \beta_i \phi_i(x)$$

Sendo v_j o valor da função v_h para um nó arbitrário, $v_j = v_h(x_j)$. Para o exemplo considerado,

$$v_j = \sum_{i=1}^3 \beta_i \phi_i(x_j) = \beta_j, \text{ de acordo com (4.23).}$$

Segue que a representação dos elementos finitos de v_h , é

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N v_i \phi_i(x), \quad v_i = v_h(x_i) \quad (4.23)$$

É importante entender como os termos em (4.24) somados dão uma representação contínua de v_h (BECKER *et al*, 1981).

4.1.6 Cálculos dos Elementos Finitos

Voltando a aproximação de Galerkin para o problema variacional de valor de contorno (4.8), usando as técnicas dos elementos finitos para construir as funções bases ϕ_i ,

o problema consiste em: encontrar $u_h \in H_0^h, H_0^h$ é sub-espço de H_0^1 definido pelas escolhas de ϕ_i , tal que

$$\int_0^1 (u_h' v_h' + u_h v_h) dx = \int_0^1 x v_h dx, \quad \forall v_h \in H_0^h \quad (4.24)$$

onde $u_h = \sum_{i=1}^N u_i \phi_i$ e $u_i = u_h(x_i)$.

De (4.19), tem-se que o sistema linear é

$$\sum_{j=1}^N S_{ij} u_j = F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.25)$$

onde S_{ij} e F_i são definidos, respectivamente, por (4.17) e (4.18) (BECKER *et al*, 1981).

4.1.7 Algumas Propriedades Fundamentais de S e F

4.1.7.1 Somatório de S

Como a operação de integração é aditiva

$$\begin{aligned} S_{ij} &= \int_0^1 (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx = \int_0^h (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx + \int_h^{2h} (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx \\ &+ \int_{2h}^{3h} (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx + \int_{3h}^1 (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx = \sum_{e=1}^4 \int_{\Omega_e} (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde $\Omega_1 = [0, h]$, $\Omega_2 = [h, 2h]$, $\Omega_3 = [2h, 3h]$, $\Omega_4 = [3h, 1]$.

Logo,

$$S_{ij}^e = \int_{\Omega_e} (\phi_i' \phi_j' + \phi_i \phi_j) dx \quad (4.27)$$

Então,

$$S_{ij} = \sum_{e=1}^4 S_{ij}^e \quad (4.28)$$

Similarmente,

$$F_i = \sum_{e=1}^4 F_i^e, \quad F_i^e = \int_{\Omega_e} x \phi_i(x) dx \quad (4.29)$$

(BECKER *et al*, 1981).

4.1.7.2 Esparsidade de S

Se os nós i e j não forem consecutivos (por exemplo, $i = 1$ e $j = 3$), então $S_{ij} = 0$.

Isto implica que em uma malha com muitos elementos, muitos deles serão zero. Matrizes com muitos zeros são chamadas de matrizes esparsas e é a escolha particular de funções bases ϕ_i que leva à esparsidade de S .

Se os elementos que não forem nulos estiverem perto da diagonal principal, esta matriz é chamada matriz de banda (BECKER *et al*, 1981).

4.1.7.3 Simetria de S

Trocando-se de lugar i e j na integral de S_{ij} o valor calculado não muda, ou seja,

$S_{ij} = S_{ji}$, o que torna a matriz de rigidez do problema tomado como exemplo simétrica.

Porém nem sempre tem-se simetria de S , embora em muitos problemas físicos baseados em leis de conservação, esta simetria apareça naturalmente na forma fraca. É importante salientar que a simetria de S não tem nada a ver com a escolha das funções bases ela é inteiramente dependente da forma variacional do problema a ser resolvido (BECKER *et al*, 1981).

4.2 PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO BIDIMENSIONAL

A grande popularidade do MEF se dá pelo fato deste resolver complexos problemas de duas e três dimensões, mesmo porque, a maioria dos problemas reais envolve, no mínimo, duas dimensões. O desenvolvimento do problema de valor de contorno descrevendo um fenômeno físico bidimensional segue as mesmas técnicas utilizadas no problema de valor de contorno unidimensional, diferenciando apenas na dimensão.

4.2.1 Formulação Clássica

Na formulação clássica para o problema de contorno bidimensional que será dada a seguir, as fronteiras $\partial\Omega_1$ e $\partial\Omega_2$, e a interface Γ (região do domínio onde $\partial\Omega_1 \equiv \partial\Omega_2$) definem as equações paramétricas $x = x(s)$, $y = y(s)$, $s \in \partial\Omega$ ou $s \in \Gamma$; $f = f(x, y)$ é a fonte de distribuição em $\Omega_i, i = 1, 2$; k e b são coeficientes materiais e $(x, y) \in \Omega_i, i = 1, 2$; $p(s)$ é um fator de proporcionalidade; e, $[\sigma_n(s)] = \sigma_n^{(+)}(s) - \sigma_n^{(-)}(s)$, fisicamente, $\sigma^{(-)}$ é o fluxo que sai e $\sigma^{(+)}$ o fluxo que entra.

Dados $k(x, y)$, $b(x, y)$, $f(x, y)$, determinar u tal que

$$-\nabla \cdot (k(x, y)\nabla u(x, y)) + b(x, y)u(x, y) = f(x, y), (x, y) \in \Omega_i, i = 1, 2 \quad (4.30)$$

$$[k\nabla u \cdot n] = [\sigma_n(s)] = 0, s \in \Gamma \quad (4.31)$$

$$u(s) = \hat{u}(s), s \in \partial\Omega_1 \text{ (condição essencial de contorno)} \quad (4.32)$$

$$-k(s)\frac{\partial u(s)}{\partial n} = p(s)[u(s) - \hat{u}(s)] = \hat{\sigma}(s), s \in \partial\Omega_2 \text{ (cond. natural de contorno)} \quad (4.33)$$

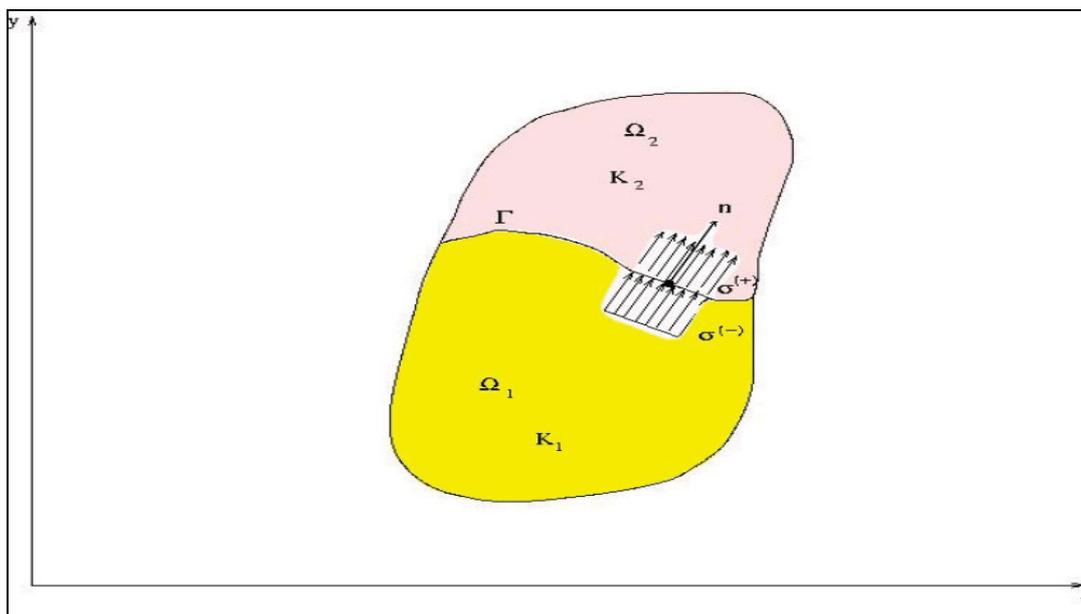


FIGURA 4.3 – DECOMPOSIÇÃO DO DOMÍNIO DO PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO.

4.2.2 Formulação Variacional

Primeiramente, constrói-se uma função residual r , onde

$$r(x, y) = -\nabla \cdot [k(x, y)\nabla u(x, y)] + b(x, y)u(x, y) - f(x, y).$$

Então, multiplica-se r por uma função teste v suficientemente suave definida no domínio Ω

e cujo produto rv seja integrável em cada subdomínio Ω_i e, finalmente, faz-se $\int_{\Omega} rv = 0$.

Como pode-se verificar na Figura 4.3, é necessário fazer a integração separadamente em

Ω_1 e Ω_2 , portanto, a segunda derivada de u não é integrável em Γ , o que resultará em

$$\int_{\Omega_1} [-\nabla \cdot (k\nabla u) + bu - f]v \, dx \, dy + \int_{\Omega_2} [-\nabla \cdot (k\nabla u) + bu - f]v \, dx \, dy = 0 \quad (4.34)$$

Sabe-se pela regra do produto de diferenciação, que

$$\nabla \cdot (vk\nabla u) = k\nabla u \cdot \nabla v + v\nabla \cdot (k\nabla u)$$

ou

(4.35)

$$v\nabla \cdot (k\nabla u) = \nabla \cdot (vk\nabla u) - k\nabla u \cdot \nabla v$$

Substituindo-se (4.36) em (4.35), tem-se

$$\int_{\Omega_1} (k\nabla u \cdot \nabla v + buv - fv) dx dy + \int_{\Omega_2} (k\nabla u \cdot \nabla v + buv - fv) dx dy - \int_{\Omega_1} \nabla \cdot (vk\nabla u) dx dy - \int_{\Omega_2} \nabla \cdot (vk\nabla u) dx dy = 0. \quad (4.36)$$

Utilizando-se nas duas últimas integrais em (4.37), o teorema da divergência, onde

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \sigma dx dy = \int_{\partial\Omega} \sigma \cdot n ds \text{ e utilizando } (vk\nabla u) \text{ no lugar de } \sigma, \text{ obtém-se}$$

$$- \int_{\Omega_1} \nabla \cdot (vk\nabla u) dx dy - \int_{\Omega_2} \nabla \cdot (vk\nabla u) dx dy = - \int_{\partial\Omega_1} k \frac{\partial u}{\partial n} v ds - \int_{\partial\Omega_2} k \frac{\partial u}{\partial n} v ds \quad (4.37)$$

onde, $\frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot n$.

Na Figura 4.3, as partes de $\partial\Omega_i$ que não coincidem com a interface Γ são denotadas $\partial\Omega_i - \Gamma, i = 1, 2$. Decompondo cada integral no contorno (as duas últimas integrais em (4.38)) em duas partes correspondentes, obtém-se

$$- \int_{\partial\Omega_1 - \Gamma} k \frac{\partial u}{\partial n} v ds - \int_{\partial\Omega_2 - \Gamma} k \frac{\partial u}{\partial n} v ds + \int_{\Gamma} \left(-k \frac{\partial u}{\partial n} \right)_1 v ds + \int_{\Gamma} \left(-k \frac{\partial u}{\partial n} \right)_2 v ds \quad (4.38)$$

onde a notação $\left(-k \frac{\partial u}{\partial n} \right)_i$ indica que $\left(-k \frac{\partial u}{\partial n} \right)$ está sendo avaliada na região $i, i = 1, 2$.

Sendo que, a normal n_1 na região Ω_1 é o negativo de n_2 para cada ponto em Γ , podendo-se escrever a soma das duas últimas integrais em (4.39) como

$$\int_{\Gamma} \left[-k^{(+)} \frac{\partial u^{(+)}}{\partial n} + k^{(-)} \frac{\partial u^{(-)}}{\partial n} \right] v ds. \quad (4.39)$$

Como $-k \frac{\partial u}{\partial n} = \sigma_n$, então $\int_{\Gamma} (\sigma_n^{(+)} - \sigma_n^{(-)}) ds = 0$.

Voltando em (4.39), nota-se que as duas primeiras integrais podem ser combinadas numa única integral na fronteira de $\partial\Omega$. Nota-se, também, que os integrandos das duas primeiras integrais em (4.37) possuem primeiras derivadas de u e v , então, se u e v forem suficientemente suaves, estas integrais podem ser combinadas numa única integral de domínio Ω , o que resultará em

$$\int_{\Omega} (k \nabla u \cdot \nabla v + buv - fv) dx dy - \int_{\partial\Omega} k \frac{\partial u}{\partial n} v ds = 0. \quad (4.40)$$

Substituindo a condição natural de contorno em (4.41), tem-se

$$\int_{\Omega} (k \nabla u \cdot \nabla v + buv - fv) dx dy + \int_{\partial\Omega} p(u - \hat{u})v ds = 0 \quad (4.41)$$

$\forall v$ e tal que $u = \hat{u}$ em $\partial\Omega_1$.

Sendo, $\int_{\partial\Omega} p(u - \hat{u})v ds = \int_{\partial\Omega_2} puv ds - \int_{\partial\Omega_2} \gamma v ds$, onde $\gamma = p\hat{u}$, o problema agora é

encontrar uma função u tal que $u = \hat{u}$ em $\partial\Omega_1$ e

$$\int_{\Omega} (k \nabla u \cdot \nabla v + buv) dx dy - \int_{\partial\Omega_2} puv ds = \int_{\Omega} fv dx dy - \int_{\partial\Omega_2} \gamma v ds, \forall v. \quad (4.42)$$

É importante lembrar que, assim como para o problema unidimensional, u e v devem pertencer a classe de funções $H^1(\Omega)$, isto é, as primeiras derivadas devem ser quadrado-integráveis e $v = 0$ em $\partial\Omega_1$. Portanto, de uma maneira geral, o problema é encontrar uma função $u \in H^1(\Omega)$ tal que $u = \hat{u}$ em $\partial\Omega_1$ e (4.43) seja satisfeita para todo $v \in H^1(\Omega)$ tal que $v = 0$ em $\partial\Omega_1$ (BECKER *et al*, 1981).

4.2.3 Aproximação por Elementos Finitos

A aproximação de (4.43) segue as técnicas utilizadas no caso unidimensional. Substitui-se o domínio Ω por um domínio Ω_h que consiste de uma coleção de E elementos finitos e N pontos nodais e define-se um sub-espaço N -dimensional H^h de $H^1(\Omega_h)$ para a construção de um conjunto apropriado de funções base $\phi_i, i = 1, 2, \dots, N$, usando os mesmos procedimentos utilizados no problema unidimensional.

Uma típica função teste em H^h pode ser da forma

$$v_h(x, y) = \sum_{j=1}^N v_j \phi_j(x, y) \quad (4.43)$$

onde $v_j = v_h(x_j, y_j)$.

A aproximação de (4.43) consiste em encontrar uma função u_h em H^h ,

$$u_h(x, y) = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(x, y) \quad (4.44)$$

tal que $u_j = \hat{u}_j$ em $\partial\Omega_{1h}$ e

$$\int_{\Omega_h} \left[k \left(\frac{\partial u_h}{\partial x} \frac{\partial v_h}{\partial x} + \frac{\partial u_h}{\partial y} \frac{\partial v_h}{\partial y} \right) + b u_h v_h \right] dx dy + \int_{\partial\Omega_{2h}} p u_h v_h ds = \int_{\Omega_h} f v_h dx dy + \int_{\partial\Omega_{2h}} \gamma v_h ds \quad (4.45)$$

$\forall v_h \in H^h$ tal que $v_h = 0$ em $\partial\Omega_{1h}$, onde $\partial\Omega_{1h}$ e $\partial\Omega_{2h}$ aproximam $\partial\Omega_1$ e $\partial\Omega_2$, respectivamente.

Substituindo (4.44) e (4.45) em (4.46) e simplificando os termos, obtém-se o sistema de equações

$$\sum_{j=1}^N S_{ij} u_j = F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.46)$$

onde S_{ij} são os elementos da matriz de rigidez do problema,

$$S_{ij} = \int_{\Omega_h} \left[k \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right) + b \phi_i \phi_j \right] dx dy + \int_{\partial\Omega_{2h}} p \phi_i \phi_j ds \quad (4.47)$$

e F_i são as componentes do vetor força,

$$F_i = \int_{\Omega_h} f \phi_i dx dy + \int_{\partial\Omega_{2h}} \gamma \phi_i ds \quad (4.48)$$

(BECKER *et al*, 1981).

CAPÍTULO 5

LAGRANGEANO AUMENTADO

Métodos de Lagrangeano Aumentado são aqueles baseados em penalização e são utilizados, em geral, para resolver problemas de programação não-linear com restrições. São métodos que buscam resolver o problema através de um processo iterativo de maneira que em cada iteração resolve-se um problema auxiliar irrestrito formado pela função objetivo e um múltiplo das restrições do problema original. O método será descrito com mais detalhes após a apresentação dos métodos de penalidades clássicos apresentados na seqüência.

5.1 MÉTODOS DE PENALIDADES

Os métodos de penalidades são utilizados para resolver problemas com restrições, são iterativos e cada iteração transforma o problema original em outro problema que é irrestrito. Eles servem tanto para problemas com restrição de igualdade como para restrições de desigualdade ou mesmo para aqueles que são formados por esses dois tipos de restrições. Por questões didáticas serão tratados dois tipos de métodos de penalidades: métodos de barreira, que são, também, conhecidos como penalidade interna e são mais utilizados em problemas com restrições de desigualdade e métodos de penalidade externa que são mais utilizados em problemas com restrições de igualdade.

NOTA 1: Como o objetivo aqui é a apresentação de métodos de penalização, não serão feitas hipóteses sobre as funções que formam o problema penalizado. Será suposto que elas satisfazem as condições exigidas pelos métodos que serão apresentados.

5.1.1 Métodos de Barreira

Os métodos de barreira são métodos de penalidade que, em geral, são utilizados para resolver problemas com restrições de desigualdade. Neste trabalho estes problemas têm a forma:

$$\begin{aligned} (P) \quad & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{s.a} \quad g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ & \quad x \in R^n \end{aligned}$$

em que $f : R^n \rightarrow R$ e $g_i : R^n \rightarrow R$ para $i = 1, 2, \dots, m$, são as funções que formam o problema (P) e f é chamada de função objetivo. Já as funções g_i , $i = 1, 2, \dots, m$, são chamadas de restrições e são estas que formam o conjunto viável.

Como descrito anteriormente na nota 1, não serão impostas restrições sobre estas funções, pois foge ao objetivo deste trabalho. A fundamentação teórica destes métodos pode ser encontrada na maioria dos livros de programação matemática disponíveis na literatura, NOCEDAL & WRIGHT (1999); FLETCHER (1986); GONZAGA (1989); MARTINEZ (1995) e outros.

A função penalizada em relação ao problema (P) é definida como

$$(x, \rho) \in R^n \times R_{++} \mapsto B(x, \rho) = f(x) + \rho p(x) \quad (5.1)$$

em que ρ é o parâmetro de penalidade e $p : R^m \rightarrow R$ é uma função de penalidade, a qual é chamada, neste caso, de função barreira. Existem dois tipos bastante conhecidos na literatura, a função barreira logarítmica e a função barreira inversa, as quais são definidas, respectivamente, por

$$x \in \mathbb{R}^n \mapsto p(x) = -\sum_{i=1}^m \ln(-g_i(x)) \quad (5.2)$$

e

$$x \in \mathbb{R}^n \mapsto p(x) = -\sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \quad (5.3)$$

em que g_i , para $i = 1, 2, \dots, m$ são as restrições do problema (P) .

Algoritmo 5.1: Métodos de barreiras

Dados $\rho^0 > 0$, $K = 0$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,

encontre:

$$x^{K+1} \in \text{Arg min} \{B(x, \rho^K) : x \in \mathbb{R}^n\}$$

faça: $\rho^{K+1} < \rho^K$ (por exemplo: $\rho^{K+1} = \frac{1}{2} \rho^K$)

$$K = K + 1$$

continue.

No algoritmo 5.1, B é a função barreira (5.1), que pode ser formada (neste trabalho) pela barreira logarítmica dada na relação (5.2) ou a barreira inversa dada na relação (5.3). O maior trabalho neste algoritmo é a resolução do subproblema gerado que consiste na minimização da função barreira. No entanto, este subproblema é irrestrito e, desta forma, podendo ser resolvido por qualquer método de programação não-linear irrestrita, como por exemplo: Newton, Gradiente Conjugado, Região de Confiança, entre outros.

A palavra critério que aparece no algoritmo 5.1 exige algumas explicações. O algoritmo está apresentado como um algoritmo conceitual, no caso da implementação deste, haveria a necessidade da fixação do critério. Um critério bastante utilizado para a parada dos algoritmos, para detectar a convergência do mesmo (ou uma solução para o problema)

é a norma do gradiente da função aproximadamente igual a zero, quando esta é possível de ser calculada. No caso do algoritmo 5.1, este critério seria $\|(\nabla_x B(x^{K+1}, \rho^K))\| \leq \varepsilon$, em que ε é um valor pré-fixado e $\nabla_x B$ é o gradiente da função penalizada B em relação à variável $x \in R^n$, no ponto x^{K+1} e $\rho^K > 0$ fixados a priori.

Uma dificuldade encontrada pelos métodos de barreira é quanto ao parâmetro de penalidade. Só se consegue mostrar a convergência do método quando o parâmetro de penalidade, no algoritmo 5.1, tende a zero, NOCEDAL (1999); MINOUX (1986); MARTINEZ (1995). Conseqüentemente, os subproblemas gerados pelo algoritmo de barreira 5.1 vão se tornando difíceis de resolver, no sentido que a matriz hessiana vai se tornando mal condicionada. Como exemplo, será considerado o seguinte problema (MARTINEZ, 1995)

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 1)^2 \\ & \text{s.a. } -x_1 \leq 0 \end{aligned}$$

que tem solução $x^* = [0, 1]^T$.

Neste caso a barreira $p(x) = -\ln(x_1)$ e a função penalizada (5.1)

$$B(x, \rho) = (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 1)^2 - \rho \ln(x_1). \quad (5.4)$$

Para verificar o que foi dito anteriormente sobre o mau-condicionamento da matriz hessiana dos subproblemas gerados pelo algoritmo 5.1, será calculado o gradiente e a hessiana de B dado na relação (5.4).

$$\nabla_x B(x, \rho) = \begin{pmatrix} 2(x_1 + 1) - \frac{\rho}{x_1} \\ 2(x_2 - 1) \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

$$\nabla_{xx}^2 B(x, \rho) = \begin{pmatrix} 2 + \frac{\rho}{x_1^2} & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Em (5.6) os pontos estacionários¹, com $x_1 > 0$ são da forma $x^* = \left[-\frac{1+\sqrt{1+2\rho}}{2}, 1 \right]^T$.

Como $\rho > 0$, tem-se em (5.6) que

$$\nabla_{xx}^2 B(x^*, \rho) = \begin{pmatrix} 2 + \frac{2\rho}{\rho+1-\sqrt{1+2\rho}} & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Como a convergência só é obtida fazendo ρ tender a zero, tem-se

$\lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{2\rho}{\rho+1-\sqrt{1+2\rho}} = \infty$. E, desta forma, a matriz $\nabla_{xx}^2 B(x^*, \rho)$ em (5.7) é mal condicionada.

Este foi um dos fatos que motivou, como será visto nas próximas seções, métodos de penalização, tipo, Lagrangeano aumentado.

5.1.2 Métodos de Penalidades Externas

Os métodos de penalizações externas são utilizados tanto para resolver problemas com restrições de desigualdade como para problemas com restrições de igualdade. Conseqüentemente, pode ser utilizado para resolver problemas no formato geral, ou seja, problemas que envolvam restrições de igualdade e desigualdade.

Neste trabalho, o problema com restrições de igualdade tem a seguinte forma

$$(P1) \quad \begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{s.a. } h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p. \\ & \quad x \in R^n \end{aligned}$$

em que f e h_i , para $i = 1, 2, \dots, p$, são funções definidas em R^n com valores em R .

Como foi feito anteriormente no caso da penalidade barreira logarítmica, não serão dados detalhes quanto as particularidades das funções, para isto ver nota 1, apresentada na seção anterior.

¹ Dada $f : R^n \rightarrow R$, x é um ponto estacionário de f se o gradiente da f em x for igual a zero.

Uma das características das penalidades externas é que os pontos gerados pelo algoritmo (a ser apresentado adiante) caminham pelo exterior (“fora”) do conjunto viável. Por isso, são bastante utilizados em problemas com restrições de igualdade como $(P1)$, em que é muito difícil satisfazer todas as restrições exatamente iguais a zero, ou seja, $h_i(x^*) = 0, i = 1, 2, \dots, p$, sendo x^* gerado pelo algoritmo. Mas nada impede que sejam utilizados também para problemas com restrições de desigualdade como (P) , apresentado anteriormente.

Para o problema $(P1)$ a penalidade externa mais utilizada na literatura é a seguinte

$$x \in R^n \mapsto E(x) = \|h(x)\|^2 = \sum_{i=1}^p h_i(x)^2. \quad (5.8)$$

Por outro lado, para o problema (P) pode ser utilizada a penalidade externa

$$x \in R^n \mapsto E(x) = \sum_{i=1}^p (\max\{0, g_i(x)\})^2. \quad (5.9)$$

Observa-se na relação (5.9) que somente os pontos inviáveis são penalizados. As componentes $g_i(x)$ positivas terão um peso na função penalizada $E(x)$. Caso contrário, as componentes correspondentes de $E(x)$ serão nulas.

No caso das penalidades externas a função penalizada é da forma

$$(x, t) \in R^n \times R_{++} \mapsto P(x, t) = f(x) + tE(x) \quad (5.10)$$

em que, f é a função objetivo do problema (P) ou $(P1)$, t é o parâmetro de penalidade e E é a função penalizada dada por (5.8) ou (5.9). Logicamente que existem outros tipos de penalidades externas. Neste trabalho, serão tratadas apenas estas duas por serem consideradas as mais importantes.

Algoritmo 5.2: Penalidade externa

Dados $t^0 > 0, K = 0$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,

encontre:

$$x^{K+1} \in \text{Arg min}\{P(x, t^K): x \in R^n\}$$

faça: $t^{K+1} > t^K$ (por exemplo: $t^{K+1} = 2t^K$)

$$K = K + 1$$

continue.

Neste caso, $P(x, t^K)$ é a função de penalidade externa (5.10). Da mesma forma que o algoritmo (5.1), este também é conceitual, pois o critério de parada não está definido no algoritmo. No caso da implementação deste, existe a necessidade de se fixar um critério.

Sobre a convergência deste algoritmo pode ser consultado NOCEDAL (1999), MARTINEZ (1995) E MINOUX (1986). Nas provas de convergência deste algoritmo é imposta a condição de que t^K deve crescer, ou simbolicamente, $t^K \rightarrow \infty$, e da mesma forma que no algoritmo de barreira (5.1), isto gera subproblemas difíceis de se resolver, no sentido que a matriz hessiana da função objetivo deste subproblema é mal condicionada.

Uma vez apresentada a penalidade barreira e a penalidade externa é possível, sem muitas dificuldades, apresentar um algoritmo mais geral, que pode ser utilizado na resolução de problemas com restrições de igualdade e desigualdade.

Como foi visto, os métodos de penalidade tipo barreira e externa geram subproblemas que vão se tornando mal condicionados à medida que os pontos gerados pelos algoritmos, determinados por estes métodos, vão se aproximando da solução do problema. Foi visto um exemplo muito simples, em que a condição da matriz hessiana do subproblema gerado pelo algoritmo de barreira (5.1) tende ao infinito quando o parâmetro de penalidade tende a zero. Isto torna os algoritmos muito lentos e na maioria das vezes impraticáveis. Atualmente existem métodos de penalização mais modernos e que são superiores, no sentido da rapidez de convergência e estabilidade, aos métodos clássicos. Estes métodos mais modernos envolvem um novo parâmetro que são os multiplicadores de Lagrange – também chamados de variáveis duais, como será visto nas próximas seções.

5.1.3 Métodos de Lagrangeano Aumentado

Os métodos de Lagrangeano aumentado foram inicialmente propostos por HESTENES (1969) E POWELL (1969), para problemas com restrições de igualdade, em meados da década de 60. Sendo chamados, nesta época, de métodos de multiplicadores. Mais tarde foram generalizados por ROCKAFELLAR (1974), para problemas com restrições de desigualdade.

Por questões didáticas serão tratados, em seções distintas, os métodos de Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de igualdade e restrições de desigualdade.

Com a introdução das variáveis duais, também chamadas de multiplicadores de Lagrange, a construção da teoria de convergência é feita via dualidade. Nos métodos de Lagrangeano aumentado mais modernos, desenvolvidos nos últimos anos, toda teoria de convergência é desenvolvida utilizando métodos de ponto proximal com quase-distâncias generalizadas tipo Bregman e φ -divergências (IUSEM & TEBoulLE, 1995). Por outro lado, a implementação destes métodos é feita no primal, isto é, os subproblemas resolvidos envolvem somente variáveis primais estando as variáveis duais fixas, como será visto adiante.

O objetivo principal deste trabalho é a aplicação do método de Lagrangeano aumentado, assim como a proposta de aplicação de novas metodologias de Lagrangeano aumentado, recentemente desenvolvidas, para problemas de contato. Maiores detalhes sobre este assunto serão apresentados no próximo capítulo. E o problema de contato foi apresentado no capítulo 3. Desta forma, não será apresentada a teoria sobre a convergência dos métodos de Lagrangeano aumentado, como é feito, geralmente, na literatura. O leitor interessado poderá consultar as referências que serão apresentadas no decorrer do capítulo.

5.1.3.1 Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de igualdade

Nesta seção será apresentado o método de Lagrangeano aumentado em sua forma clássica, ou seja, em sua formulação semelhante à proposta inicialmente por HESTENES (1969) E POWELL (1969).

O problema a ser tratado nesta secção é o problema (P1) já apresentado anteriormente e será reescrito novamente.

$$(P1) \quad \begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & \text{s.a } h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p \\ & x \in R^n \end{aligned}$$

em que $f : R^n \rightarrow R$ e $h_i : R^n \rightarrow R$, para todo $i = 1, 2, \dots, p$.

Em relação ao problema (P1) será definida a função Lagrangeana

$$(x, \lambda) \in R^n \times R^p \mapsto l(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T h(x) = f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i h_i(x) \quad (5.11)$$

As condições necessárias de 1ª ordem para o problema (P1) garantem que se x^* é uma solução deste problema, então existem multiplicadores de Lagrange $\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_p^*$, tal que $\nabla_x l(x^*, \lambda^*) = 0$, em que l é a função Lagrangeana (5.11).

Desta forma, os candidatos a pontos estacionários para o problema (P1) devem satisfazer o seguinte sistema de $n + p$ equações não-lineares por $n + p$ variáveis

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \lambda^T \nabla h(x) = 0 \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p \end{cases} \quad (5.12)$$

Será visto que os multiplicadores de Lagrange no método de Lagrangeano aumentado a ser apresentado nesta seção são atualizados de maneira que a primeira equação em (5.12) seja satisfeita.

Definição 5.1: Diz-se que dois problemas A e B são equivalentes quando toda solução de A é também uma solução de B e vice-versa.

No sentido da definição 5.1 é fácil verificar que o problema (P1) é equivalente ao seguinte problema

$$(P2) \quad \text{Minimizar } f(x) + \lambda^T h(x) \\ \text{s.a. } h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

Utilizando a penalidade quadrática apresentada na seção 5.1.2, tem-se a seguinte função penalizada para o problema (P2)

$$(x, \lambda, \rho) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}_{++} \mapsto L(x, \lambda, \rho) = f(x) + \lambda^T h(x) + \frac{\rho}{2} h^T(x)h(x) = \\ = f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i h_i(x) + \frac{\rho}{2} \sum_{i=1}^p (h_i(x))^2. \quad (5.13)$$

Neste caso, ρ é o parâmetro de penalidade e λ é o vetor de multiplicadores de Lagrange. Pode-se observar que o problema (5.13) muda para cada valor diferente de λ .

Logo, usa-se uma estimativa para os multiplicadores de Lagrange e os valores do parâmetro de penalidade para uma boa aproximação da solução do problema (P1) ou (P2) não precisam ser tão grandes como nos métodos clássicos de penalidades apresentados na seção 5.1.

Para determinar uma boa estimativa para os multiplicadores de Lagrange, deriva-se a função L dada na relação (5.13) em relação à variável x , com λ e ρ fixados, e iguala-se a zero, ou seja,

$$\nabla_x L(x, \lambda, \rho) = \nabla f(x) + \lambda^T \nabla h(x) + \rho h^T(x) \nabla h(x) = \\ = \nabla f(x) + (\lambda + \rho h(x))^T \nabla h(x) = 0. \quad (5.14)$$

Desta forma, uma boa estimativa para os multiplicadores é

$$\bar{\lambda} = \lambda + \rho h(x) \quad (5.15)$$

pois (5.14) teria a forma

$$\nabla f(x) + \bar{\lambda} \nabla^T h(x) = 0$$

e esta última equação é exatamente a primeira equação dada na relação (5.12), ficando apenas a segunda equação, $h(x) = 0$ ($h(x) = (h_1(x), \dots, h_p(x))^T$), para ser satisfeita.

Recapitulando: Pretende-se descrever um algoritmo que gere pontos candidatos à solução do problema (P1) (pontos candidatos são os pontos estacionários). Estes pontos devem satisfazer o sistema (5.12) e, por tabela, se o problema (P1) for penalizado através da função L dada em (5.13), bastará atualizar, neste algoritmo que se está procurando, os multiplicadores de Lagrange pela equação (5.15) que, então, pelo menos a primeira equação do sistema (5.12) estará satisfeita. A segunda equação do sistema (5.12) é forçada a ser satisfeita através do parâmetro de penalização.

Portanto, tem-se o seguinte algoritmo de Lagrangeano aumentado:

Algoritmo 5.3 : Lagrangeano aumentado para o problema com restrição de igualdade (P1).

Dados $\rho^0 > 0, \lambda^0 \in R^p, \alpha > 1, K = 0$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,

encontre:

$$x^{K+1} \in \text{Arg min} \{L(x, \lambda^K, \rho^K) : x \in R^n\} \quad (\text{S})$$

(L é a função apresentada na relação (5.13))

faça:

$$\lambda^{K+1} = \lambda^K + \rho^K h(x^{K+1})$$

$$\text{se } \|h(x^{K+1})\| > 0,1 \|h(x^K)\|$$

$$\text{faça } \rho^{K+1} = \alpha \rho^K \quad (\text{por exemplo: } \alpha = 2)$$

$$\text{senão } \rho^{K+1} = \rho^K$$

$$K = K + 1$$

continue.

Alguns comentários sobre o algoritmo: o subproblema (S), ou seja, $x^{k+1} \in \text{Arg min}\{L(x, \lambda^k, \rho^k): x \in R^n\}$ é chamado subproblema interno, que consiste na minimização de uma função irrestrita. A função L deste subproblema é conhecida como função Lagrangeano aumentado. Pode-se observar que a parte pesada do algoritmo é encontrar uma solução deste subproblema, o que pode ser executado por qualquer método de programação irrestrita, como Newton, Região de Confiança, dentre outros.

Após a resolução do subproblema (S) atualizam-se os multiplicadores de Lagrange λ , pela relação (5.15), em seguida faz-se uma verificação da viabilidade, $h(x) = 0$. Se houve pelo menos dez por cento de melhora do ponto x^k para o ponto x^{k+1} mantém-se o parâmetro de penalidade, caso contrário aplica-se uma penalização aumentando-se o parâmetro de penalidade. O processo é continuado até que o critério seja satisfeito. No caso de implementação, o critério poderia ser, por exemplo, $\|\nabla_x L(x^k, \lambda^k, \rho^k)\| \leq \varepsilon$, onde ε é uma precisão pré-fixada, mas podem ser outro (BERTSEKAS, 1992).

Como o parâmetro de penalidade só é atualizado se as restrições estiverem “pouco satisfatórias”, o que não ocorre nos métodos de penalidades clássicos apresentados nas seções precedentes, reduz-se a possibilidade de mau condicionamento dos subproblemas gerados pelo método, o que os torna vantajosos.

5.1.3.2 Lagrangeano aumentado para problemas com restrições de desigualdade

Nesta seção será apresentado o método de Lagrangeano aumentado proposto por ROCKAFELLAR (1974) para o problema com restrições de desigualdade. Generalizando desta forma o método de multiplicadores proposto por HESTENES (1969) E POWELL (1969), apresentado na secção anterior. Além disso, serão apresentados métodos de

Lagrangeano aumentado mais modernos desenvolvidos nos últimos anos cuja teoria de convergência é feita utilizando-se o método de ponto proximal aplicado ao problema dual com alguma quase-distância (Bregman ou φ -divergência) (IUSEM & TEBoulLE, 1995).

O problema tratado nesta secção possui restrições de desigualdade e foi apresentado anteriormente como problema (P) , ou seja:

$$(P) \quad \text{Minimizar } f(x) \\ \text{s.a. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ x \in R^n$$

em que f e g_i , para $i = 1, 2, \dots, m$, são funções definidas em R^n com valores em R .

A generalização proposta por ROCKAFELLAR (1974) dos métodos de Lagrangeano aumentado para o problema (P) foi através da introdução de variável de folga para as restrições de desigualdade $g(x) \leq 0$ ($g(x) = (g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x))^T$) (MINOUX, 1986) e (ROCKAFELLAR, 1974). Desta forma, o problema (P) com variáveis de folga $s_i \geq 0$ possui o formato

$$(P3) \quad \text{Minimizar } f(x) \\ \text{s.a. } g_i(x) + s_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ s_i \geq 0 \\ x \in R^n.$$

Pode-se observar que o problema $(P3)$ difere do problema com restrições de igualdade $(P1)$ apenas na não negatividade da variável de folga s , o que impede a aplicação do algoritmo de Lagrangeano aumentado (5.3) proposto na secção anterior.

Como foi feito na secção anterior, ao elaborar um algoritmo de Lagrangeano aumentado aplicado ao problema $(P3)$, o subproblema gerado teria a forma

$$\text{Minimizar} \left\{ f(x) + \sum_{i=1}^m \mu_i (g_i(x) + s_i) + \eta \sum_{i=1}^m (g_i(x) + s_i)^2 : x \in R^n, s \geq 0 \right\}. \quad (5.16)$$

Neste caso, μ é o vetor de multiplicadores de Lagrange e η é o parâmetro de penalidade.

Para o parâmetro de penalidade positivo, ROCKAFELLAR (1974) mostrou que o problema (5.16) reduz-se ao seguinte problema:

$$\text{Minimizar} \left\{ f(x) + \sum_{i=1}^m P(g_i(x), \mu_i, \eta) : x \in R^n \right\} \quad (5.17)$$

e neste caso, a função P é dada pela fórmula

$$P(g_i(x), \mu_i, \eta) = \begin{cases} \eta(g_i(x))^2 + \mu_i g_i(x) & \text{se } g_i(x) \geq -\frac{\mu_i}{2\eta} \\ -\frac{\mu_i^2}{4\eta} & \text{c.c.} \end{cases} \quad (5.18)$$

Pode-se observar que a variável de folga s não aparece em (5.17) e nem em (5.18). Portanto, o algoritmo de Lagrangeano aumentado desenvolvido por ROCKAFELLAR (1974) para o problema com restrições de desigualdade é o algoritmo 5.3 com subproblema interno dado por (5.17) e (5.18), que não será reescrito agora pelo fato que na seqüência serão apresentados algoritmos de Lagrangeano aumentado que englobam o caso de ROCKAFELLAR (1974).

5.1.3.3 Métodos de Lagrangeano aumentado com penalidades coercivas²

Nos últimos anos muita pesquisa tem sido desenvolvida nesta classe de métodos de Lagrangeano aumentado, devido ao fato de serem robustos e resolverem problemas de grande porte. Duas grandes implementações foram desenvolvidas: LANCELOT (COON *et al*, 1992) e BOX-QUACAN (MARTINEZ, 2000), esta última desenvolvida por professores da Unicamp sob o comando do professor Martinez. O sucesso alcançado com os resultados das implementações, através de testes com problemas de médio e grande porte, assim como a sólida teoria de convergência já consolidada fez com que outras áreas passassem a utilizá-los, como é o caso da Engenharia Civil – problemas de contato com atrito e

² Uma função contínua, $f : R^n \rightarrow R$, diz-se coerciva se $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{\|x\|} = \infty$.

Engenharia Elétrica – fluxo de potência ótimo, e outras tantas áreas em que a formulação do problema recai num problema de programação não-linear com restrições (MARTINEZ, 2000).

Nesta seção será apresentada uma família de funções de penalidades, incluindo a penalidade de Rockafellar (5.17) e (5.18) – a menos da convexidade estrita, e posteriormente serão utilizadas no algoritmo de Lagrangeano aumentado aplicado ao problema com restrições de desigualdade (P).

Usaremos $p'(y, \mu)$ para denotar a derivada da função p em relação à primeira variável.

Definição 5.2 *Definimos a família P de funções de penalidades*

$$y \in (-\infty, b), \mu \in R_{++} \mapsto p(y, \mu) \in R$$

com domínio de p (em relação à variável y) igual a $(-\infty, b)$, $b > 0$ e podendo ser $+\infty$ e p satisfazendo as seguintes propriedades: para todo $\mu \in R_{++}$,

$$(P1) \quad p(0, \mu) = 0$$

$$(P2) \quad p(\cdot, \mu) \text{ é estritamente convexa e diferenciável em } (-\infty, b)$$

$$(P3) \quad p'(0, \mu) = \mu$$

$$(P4) \quad \lim_{y \rightarrow b} p'(y, \mu) = +\infty \text{ (coercividade pela direita)}$$

$$(P5) \quad \lim_{y \rightarrow -\infty} p'(y, \mu) = 0.$$

Na figura 5.1 a seguir estão plotadas algumas das possibilidades de penalidades da família P dadas na definição anterior. Neste caso $\mu > 0$ está sendo considerado fixo.

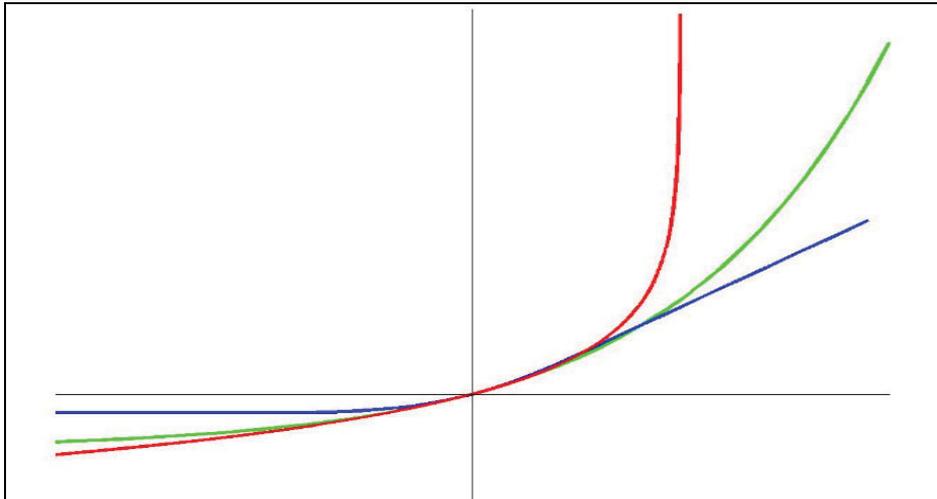


FIGURA 5.1 – FUNÇÕES DE PENALIDADES DA FAMÍLIA P .

Algumas características das penalidades da família P :

- Todas passam pela origem e possuem derivada igual a μ na origem.
- São estritamente convexas e diferenciáveis.
- Possuem derivada limitada quando y se aproxima de $-\infty$.
- São coercivas à direita.

Estas propriedades são necessárias para se construir bons algoritmos de Lagrangeano aumentado. Sem estas propriedades fica difícil construir a teoria de convergência dos algoritmos.

Uma boa maneira de se perceber o efeito da penalização é supor o problema (P) unidimensional e $y = g(x)$. Observe que quanto mais y se afasta da origem pelo lado direito (aumenta a inviabilidade) maior é o valor da penalidade p - característica da coercividade à direita. Por outro lado, quando $y = g(x) < 0$, ou seja, esta à esquerda da origem, o efeito da penalidade é praticamente nulo – efeito da limitação da derivada à esquerda. Em outras palavras, quando os pontos estão inviáveis se penaliza, por outro lado, quando estão viáveis não se penaliza.

Denotando-se $y = g(x)$ na penalidade de ROCKAFELLAR (1974) dada na relação (5.18), tem-se para $i = 1, 2, \dots, m$

$$P(y_i, \lambda_i, \eta) = \begin{cases} \eta y_i^2 + \mu_i y_i & \text{se } y_i \geq -\frac{\mu_i}{2\eta} \\ -\frac{\mu_i^2}{4\eta} & \text{c.c.} \end{cases} \quad (5.19)$$

Considerando-se μ e η fixos, tem-se que a menos da convexidade estrita exigida no item (P2) da definição 5.2, a penalidade de ROCKAFELLAR (1974) é da família P. Para o caso particular unidimensional com $\mu = 1$ e $\eta = 1$, tem-se

$$P(y, 1, 1) = \begin{cases} y^2 + y & \text{se } y \geq -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & \text{c.c.} \end{cases} \quad (5.20)$$

cujo gráfico esta plotado da figura 5.2 a seguir.

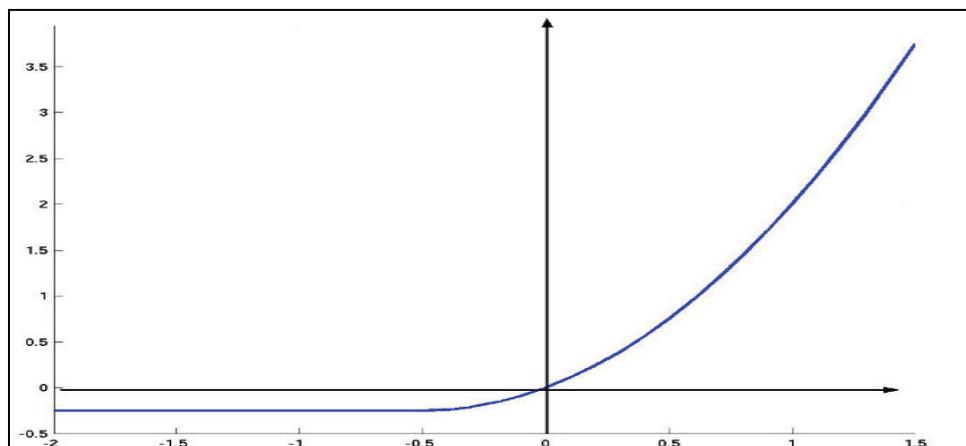


FIGURA 5.2 – PENALIDADE DE ROCKAFELLAR COM $\mu = \eta = 1$.

Pode-se observar que a penalidade de ROCKAFELLAR (1974) possui derivada até primeira ordem. No entanto, a segunda derivada não está definida em toda reta, o que acaba sendo um inconveniente, pois os subproblemas penalizados utilizando esta penalidade não podem ser resolvidos com métodos de programação não-linear irrestrita que

usam derivadas até segunda ordem, como é o caso do método de Newton e Região de Confiança. Será visto mais adiante outras funções de penalidades que são de classe C^2 (possuem derivadas contínuas pelo menos até segunda ordem).

5.1.3.4 Construindo penalidades da família P

As metodologias modernas para construir penalidades em geral utilizam uma função auxiliar de uma variável real, com as características a seguir.

Definição 5.3 Considere $\theta : R \rightarrow R$ uma função satisfazendo as seguintes propriedades:

- (a) $\text{int dom } \theta = (-\infty, b)$, $b > 0$, possivelmente $b = +\infty$
($\text{int dom } \theta$ é o interior do domínio de θ)
- (b) θ é estritamente convexa e diferenciável em $(-\infty, b)$
- (c) $\lim_{y \rightarrow b} \theta'(y) = +\infty$ (coercividade pela direita)
- (d) $\lim_{y \rightarrow -\infty} \theta'(y) = 0$
- (e) $\theta(0) = 0$ e $\theta'(0) = 1$.

Exemplos:

A função exponencial

$$y \in R \mapsto \theta(y) = \exp(y) - 1 \quad (5.21)$$

satisfaz as propriedades (a)-(e) da definição 5.3.

A função barreira logarítmica modificada

$$y \in (-\infty, 1) \mapsto \theta(y) = -\log(1 - y) \quad (5.22)$$

também satisfaz as propriedades (a)-(e) da definição 5.3.

Pode-se observar que o domínio da função exponencial (5.21) é toda reta e neste caso $b = +\infty$ na definição 5.3. Por outro lado, o domínio da função barreira logarítmica modificada é o intervalo $(-\infty, 1)$ e neste caso $b = 1$ na definição 5.3.

Agora, utilizando a função auxiliar θ apresentada na definição 5.3 juntamente com o parâmetro μ (no Lagrangeano aumentado é o vetor de multiplicadores de Lagrange) serão apresentadas duas metodologias para construção de penalidades p da família P dada na definição 5.2. Para simplificar a notação e a explanação será chamada de MET 1, a metodologia número 1, e MET 2, a metodologia número 2.

MET 1 – Considere $\theta : R \rightarrow R$ satisfazendo as propriedades (a)-(e) da definição 5.3. Então,

p dada por

$$(y, \mu) \in R \times R_{++} \mapsto p(y, \mu) = \mu \theta(y) \quad (5.23)$$

é uma penalidade da família P.

Esta metodologia é muito utilizada para construir métodos de Lagrangeano aumentado. TSENG & BERTSEKAS (1993) mostraram a convergência do método de Lagrangeano aumentado e este é um dos casos em que a função de penalidade é de classe C^2 , o que não acontece com a penalidade de ROCKAFELLAR (1974) apresentado em (5.18). Mais adiante será apresentado o algoritmo de Lagrangeano aumentado para o caso geral que engloba o que está sendo discutido.

Considere θ a função exponencial dada em (5.21) e p dada em (5.23) então

$$p(y, \mu) = \mu(\exp(y) - 1). \quad (5.24)$$

Nota-se que para cada valor de μ tem-se uma função p diferente. Na figura 5.3 a seguir será plotada a penalidade (5.24) para $\mu = 1$, $\mu = 2$ e $\mu = \frac{1}{2}$.

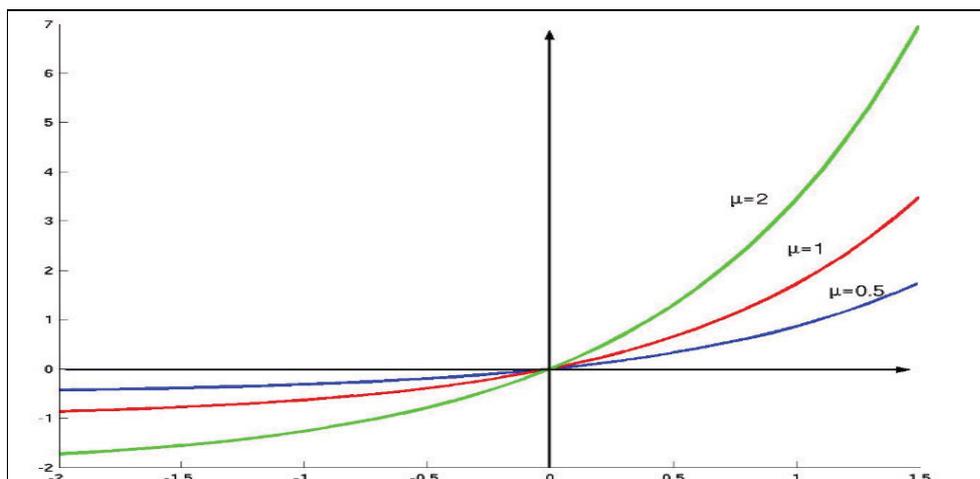


FIGURA 5.3 – PENALIDADE $\mu\theta(y)$ COM θ EXPONENCIAL E VALORES FIXOS DE μ .

MET 2 – Considere $\theta : R \rightarrow R$ satisfazendo as propriedades (a)-(e) da definição 5.3. Então,

p dada por

$$(y, \mu) \in R \times R_{++} \mapsto p(y, \mu) = \theta(\mu y) \quad (5.25)$$

é uma penalidade da família P.

Esta metodologia foi utilizada por MATIOLI e GONZAGA em (2000) para mostrar a convergência do método de Lagrangeano aumentado. Neste caso foi utilizada a função barreira logarítmica modificada dada em (5.22) e p dada em (5.25), ou seja,

$$p(y, \mu) = -\log(1 - \mu y), \text{ para } \mu y < 1. \quad (5.26)$$

A seguir segue o gráfico de p dada em (5.26) para $\mu = 1$, $\mu = 2$ e $\mu = \frac{2}{3}$.

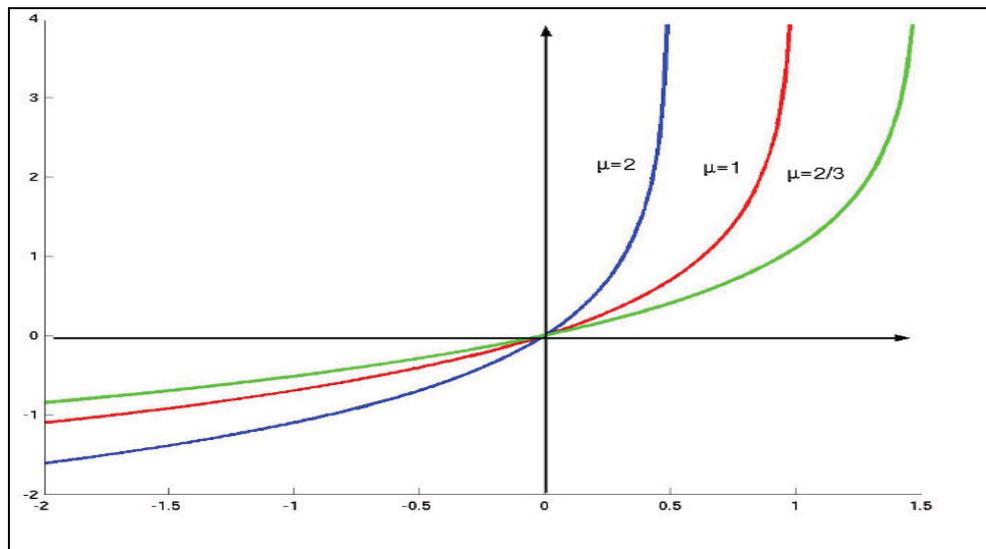


FIGURA 5.4 – PENALIDADE LOGARÍTMICA $\theta(\mu y)$ COM VALORES FIXOS DE μ .

A seguir, será apresentada uma função θ quadrática que não satisfaz todas as propriedades (a)-(e) da definição 5.3.

Considere $\theta : R \rightarrow R$ definida por

$$y \in R \mapsto \theta(y) = \frac{1}{2}y^2 + y. \quad (5.27)$$

Neste caso, $\lim_{y \rightarrow -\infty} \theta' = -\infty$ e a propriedade (d) da definição 5.3 não é satisfeita.

Conseqüentemente, as penalidades p dadas nas relações (5.23) e (5.25) com a função θ (5.27) não são da família P e, portanto, o método de Lagrangeano aumentado com esta penalidade não tem convergência garantida. No entanto, em MATIOLI (2000) foram mostradas algumas propriedades importantes sobre a penalidade (5.25) da metodologia 2 com θ quadrática dada na relação (5.27), que serão resumidas a seguir.

No caso em que a função objetivo e as restrições do problema (P) são lineares, este terá a forma

$$(P4) \quad \begin{array}{ll} \text{Minimizar} & c^T x \\ \text{s.a} & Ax \leq b \\ & x \in R^n \end{array}$$

onde $A \in R^{m \times n}$, $b \in R^m$ e $c \in R^n$, com $m > n$. Em MATIOLI (2000), foi mostrado que as direções duais geradas pelo método de Lagrangeano aumentado com penalidade dada na relação (5.25) e θ dada na relação (5.27) são equivalentes às geradas pelo algoritmo afim escala (sobre o algoritmo afim escala pode ser consultado GONZAGA (1992)). Na verdade, toda teoria foi feita via dual e utilizando o método de ponto proximal, que não serão dados detalhes aqui.

Do fato de as direções duais serem equivalentes às geradas pelo método afim escala pode-se tirar algumas conclusões: primeiramente, que os passos dados pelos pontos gerados pelo algoritmo de Lagrangeano aumentado com esta metodologia serão mais longos do que com a metodologia 1, pois em Matioli (2000) foi mostrado que, no dual, as curvas de nível geradas se assemelham aos elipsóides de Dikin. Os métodos afim escala, foram os que deram origem aos métodos de pontos interiores em programação linear e, nos últimos anos, generalizados para programação não-linear.

A segunda conclusão que se pode tirar é que não é possível mostrar convergência, para o caso geral, do método de Lagrangeano aumentado com esta metodologia, pois estes são equivalentes (no sentido acima descrito) aos métodos afim escala e sabe-se que o método afim escala só possui convergência para casos particulares de comprimento de passo.

O fato de a penalidade p dada em (5.25) com θ dada em (5.27) não ser da família P faz com que as variáveis duais (multiplicadores de Lagrange) geradas na método de Lagrangeano aumentado sejam negativas, e isso, não é permitido na classe de métodos de Lagrangeano aumentado. Este problema foi considerado em MATIOLI (2000) através de uma certa equivalência entre ponto proximal e região de confiança. No entanto, nenhuma implementação foi realizada com esta metodologia. A implementação foi realizada em JUSSIANI (2004) e foram realizados testes com 82 problemas da coleção CUTE (1995) para comparar a eficiência desta metodologia com outras existentes na literatura. Os resultados foram bastante promissores (ver capítulo 6 em JUSSIANI, 2004).

Na próxima seção será apresentado o método de Lagrangeano aumentado para penalidades da família P e aplicados ao problema com restrições de desigualdade, dado anteriormente como problema (P), ou seja

$$(P) \quad \text{Minimizar } f(x) \\ \text{s.a. } g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ x \in R^n$$

as funções f e g_i , para $i = 1, 2, \dots, m$ são definidas em R^n com valores em R (ver nota 1 na seção 5.1).

Antes de apresentar o método serão descritas as condições de Karush-Kuhn-Tucker – KKT para o problema, que são as condições necessárias de primeira ordem e garantem que se x^* é uma solução do problema (P), então x^* satisfaz as seguintes condições:

$$(C1) \quad \nabla_x l(x^*, \mu) = \nabla f(x^*) + \mu^T \nabla g(x^*) = 0$$

$$(C2) \quad \mu_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$(C3) \quad \mu_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$(C4) \quad g_i(x^*) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

em que $(x, \mu) \in R^n \times R_+^m \mapsto l(x, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \mu_i g_i(x)$ é a função Lagrangeana.

Na relação (C1) μ é o vetor de multiplicadores de Lagrange e $\nabla g(\cdot)$ é o gradiente da função $g(\cdot)$ (lembrando que $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))^T$ é um vetor com m componentes). Portanto $J_g(\cdot)$ é uma matriz (Jacobiana). Esta condição é conhecida como condição de estacionaridade. Já a condição (C2) é chamada de condição de complementaridade. As outras duas, (C3) e (C4) são a viabilidade dual e primal, respectivamente.

Desta forma, os pontos candidatos à solução do problema (P) devem satisfazer as condições (C1)-(C4). Deve-se observar que a recíproca não é verdadeira, ou seja, satisfazer (C1)-(C4) não significa que será solução de (P), pois estas condições são necessárias, mas

não suficientes. Este fato será um indicador de como construir métodos de Lagrangeano aumentado para o problema (P) com penalidade da família \mathbf{P} , como será descrito agora.

Definição 5.4 Associado ao problema (P) define-se a função Lagrangeano aumentado

$$(x, \mu, \eta) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+^m \times \mathbb{R}_{++} \mapsto L(x, \mu, \eta) = f(x) + \eta \sum_{i=1}^m p\left(\frac{g_i(x)}{\eta}, \mu_i\right) \quad (5.28)$$

em que p é uma penalidade da família \mathbf{P} dada na definição 5.2.

Considerando μ e η fixos na função Lagrangeano aumentado (5.28), derivando em relação à x e igualando a zero, tem-se

$$\nabla_x L(x, \mu, \eta) = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m p\left(\frac{g_i(x)}{\eta}, \mu_i\right) \nabla g_i(x) = 0. \quad (5.29)$$

Agora, denotando $\bar{\mu}_i = p\left(\frac{g_i(x)}{\eta}, \mu_i\right)$ e reescrevendo (5.29) tem-se

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \bar{\mu}_i \nabla g_i(x) = 0 \quad (5.30)$$

e esta é a condição (C1) de KKT dada anteriormente.

Outro fato importante é que, sendo p da família \mathbf{P} , esta é estritamente convexa e diferenciável (propriedade (P2) da definição 5.2) e, portanto, a derivada de p é não negativa. Desta forma, tem-se

$$\bar{\mu}_i = p\left(\frac{g_i(x)}{\eta}, \mu_i\right) \geq 0, \text{ para todo } i = 1, 2, \dots, m$$

e a condição (C3) de KKT também está satisfeita, ficando apenas as condições (C2) e (C4) de KKT a serem satisfeitas.

Logo, se p é uma penalidade da família \mathbf{P} , definida por 5.2 e L é a função Lagrangeano aumentado dada na relação (5.28), então o algoritmo de Lagrangeano aumentado aplicado ao problema (P) é dado por:

Algoritmo 5.4 – Lagrangeano aumentado aplicado ao problema (P)

Dados $\mu^0 > 0, \eta^0 > 0, K = 0, \alpha > 1$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,

encontre:

$$x^{K+1} \in \text{Arg min} \{L(x, \mu^K, \eta^K) : x \in R^n\} \quad (\text{SL})$$

faça: $\mu_i^{K+1} = p \left(\frac{g_i(x^{K+1})}{\eta^K}, \mu_i^K \right); i = 1, 2, \dots, m.$

$$\eta^{K+1} = \alpha \eta^K \quad (\text{por exemplo: } \alpha = 2)$$

$$K = K + 1$$

continue.

O subproblema (SL) no algoritmo 5.4 é chamado de subproblema interno e a resolução deste é a tarefa “mais pesada” do algoritmo. Os próximos passos do algoritmo são: a atualização dos multiplicadores e do parâmetro de penalidade.

Na verdade este algoritmo é conceitual, uma vez que o critério de parada está geral e não foi definido nenhum em particular. Poderia ser utilizado como critério de parada $\|\nabla_x L(x^K, \mu^K, \eta^K)\| \leq \varepsilon$, para algum ε pré-fixado anteriormente.

Outro fato importante é a atualização do parâmetro de penalidade η . Em geral, este parâmetro é atualizado forçando-se o algoritmo a dar passos mais longos e a satisfazer a viabilidade primal ($g(x) \leq 0$), assim como a complementaridade $\mu_i g_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, m$, que são as condições (C2) e (C4) de KKT apresentadas anteriormente.

Pode-se observar que em cada iteração do algoritmo 5.4 as condições (C1) e (C3) de KKT são satisfeitas, pois os multiplicadores são atualizados forçando-se estas condições, conforme apresentado anteriormente. Além disso, na prova de convergência, destes métodos de Lagrangeano aumentado modernos como do algoritmo 5.4, o parâmetro de penalidade pode ser considerado constante em todas as iterações, contornando desta forma

o problema de mau condicionamento dos métodos de penalização clássicos vistos nas seções 5.1.1 e 5.1.2.

CAPÍTULO 6

MÉTODOS DE LAGRANGEANO AUMENTADO APLICADOS AO PROBLEMA DE CONTATO

Este é o principal capítulo deste trabalho. Aqui será apresentado o método de Lagrangeano aumentado para o problema de contato, proposto por SIMO & LAURSEN (1990). Primeiro será considerado o problema de contato sem atrito, descrito no Capítulo 3 e depois o problema de contato com atrito, considerando o atrito de Coulomb. SIMO & LAURSEN (1990) usaram o método de Lagrangeano aumentado clássico, proposto por HESTENES (1969) E POWELL (1969) para problemas com restrições de igualdade e, também, o método de Lagrangeano aumentado proposto por ROCKAFELLAR (1974) para problemas com restrições de desigualdade. Estes métodos foram apresentados e discutidos no Capítulo 5.

A proposta do presente trabalho é a introdução de novos métodos de Lagrangeano aumentado, baseados em penalizações modernas desenvolvidas nos últimos anos e que foram apresentadas e discutidas, também, no Capítulo 5.

6.1 PROBLEMA DE CONTATO SEM ATRITO

Para fixar as idéias, será reescrito o problema de contato sem atrito apresentado anteriormente no Capítulo 3 e que será resolvido através do método de Lagrangeano aumentado. O problema de contato sem atrito é dado por (ver SIMO & LAURSEN [1990]).

$$G(\varphi, \delta\varphi) = \int_{\Omega} P \cdot \text{Grad}(\delta\varphi) d\Omega - \int_{\Omega} f \cdot \delta\varphi d\Omega - \int_{\Gamma_{\sigma}} \bar{t} \cdot \delta\varphi d\Gamma_{\sigma} \geq 0 \quad (6.1)$$

$\forall \delta\varphi \in D$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_{φ} e satisfazendo

$$\delta\varphi(X) \cdot n(\varphi(X)) \leq 0 \text{ em } \Gamma \text{ se } h(\varphi(X)) = 0. \quad (6.2)$$

Sendo que $\delta\varphi(X)$ é uma variação admissível na deformação e as demais variáveis e objetos da inequação estão definidos no Capítulo 3, onde o problema foi deduzido através das equações de equilíbrio e condições de contorno (relação 3.5).

Pode-se observar que a relação (6.1) é uma inequação variacional (ver KIKUCHI & ODEN [1988]). Resolver esta inequação juntamente com a restrição (6.2) se torna um problema difícil. Uma das maneiras de se fugir deste problema é a utilização dos multiplicadores de Lagrange que reduzem o problema a uma equação variacional sem o inconveniente da restrição (6.2) como será visto na seção a seguir.

6.1.1 Multiplicadores de Lagrange e Penalização Aplicados ao Problema de Contato sem Atrito

Será introduzida uma variável λ_N sobre Γ e suposto que as seguintes condições sejam satisfeitas, também, sobre Γ

$$\lambda_N \geq 0 \quad (6.3)$$

$$h(\varphi(X)) \leq 0 \quad (6.4)$$

$$\lambda_N h(\varphi(X)) = 0 \quad (6.5)$$

onde (6.3) representa a não negatividade do multiplicador de Lagrange, (6.4) representa a impenetrabilidade descrita com mais detalhe no Capítulo 3 e (6.5) representa a complementaridade.

Será considerada, ainda, a forma forte do problema de valor de contorno dada na relação (3.5) sujeita as restrições (6.3)-(6.5). Desta forma, tem-se as seguintes equações

variacionais que correspondem à formulação de multiplicadores de Lagrange (ver SIMO & LAURSEN [1990])

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \lambda_N \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.6)$$

$$\int_{\Gamma} [\delta\lambda_N] h(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.7)$$

as quais se verificam para todo admissível $\delta\varphi$ e $\delta\lambda_N$ com $\delta\lambda_N \geq 0$ sendo a variação de λ_N e $\delta\varphi$ a variação de φ .

Como citado anteriormente, (6.6) e (6.7) são equações variacionais não sujeitas à restrição (3.5) como era o caso da inequação variacional (6.1). No entanto, a dimensão do problema aumentou, uma vez que foram introduzidas as novas variáveis correspondentes aos multiplicadores de Lagrange. Esse inconveniente é resolvido via penalização juntamente com algum tipo de regularização, aqui, neste trabalho, será utilizada a *função gap*, definida a seguir à maneira de SIMO & LAURSEN (1990).

Para qualquer ponto x no espaço dominante, será definida a função g , chamada de *função gap*, como segue (ver Figura 6.1)

$$g(x) = \|x - \bar{x}\| = \min\{\|x - y\| : y \in D\} \quad (6.8)$$

em que D é a região admissível.

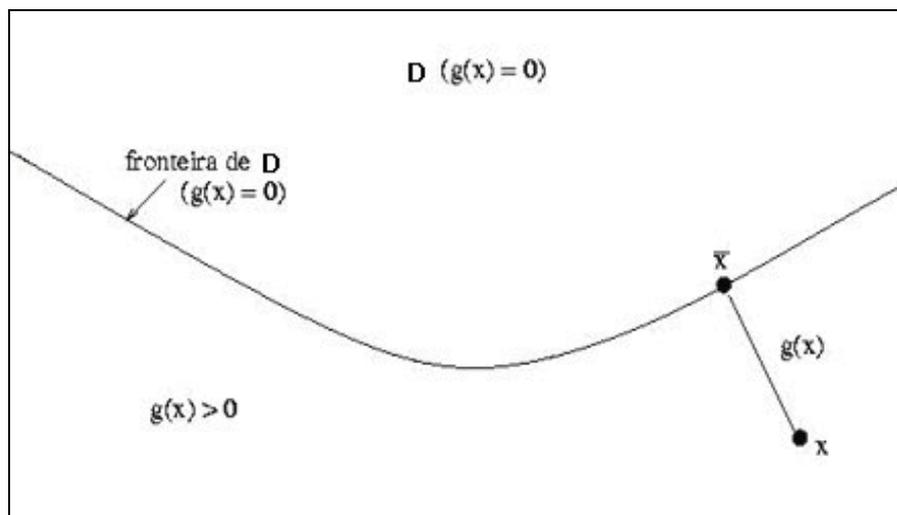


FIGURA 6.1 – DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO GAP NO ESPAÇO DOMINANTE.

Pode-se notar que (6.8) é uma regularização e \bar{x} é projeção do ponto mais próximo de x na região admissível. Nota-se, também, que se x é admissível então $x = \bar{x}$ e conseqüentemente $g(x) > 0$ apenas se x é inadmissível.

A definição da *função gap* demonstra porque foi admitido que D é um conjunto convexo. Como pode-se verificar, o caso em que x é inadmissível é de interesse apenas quando se considera a penalidade regularizada. Se fosse admitido que a região D não é convexa, a definição de \bar{x} poderia não ser única.

Como observado em SIMO & LAURSEN (1990) (ver nota 2.3, página 100), a função h poderia ser definida como a *função gap* g , porém, por algumas conveniências não o fizeram. No entanto, vale observar que g converte a desigualdade $h(x) \leq 0$ para uma igualdade $g(x) = 0$ (comparar Figura 6.1 com a definição de *função gauge* no Capítulo 3).

Com as definições acima, pode-se usar a penalidade regularizada e substituir as relações (6.3)-(6.5) pela seguinte

$$\lambda_n = \varepsilon_N g(\varphi(X)) \text{ em } \Gamma \quad (6.9)$$

em que ε_N é uma constante positiva e aqui representa o parâmetro de penalidade.

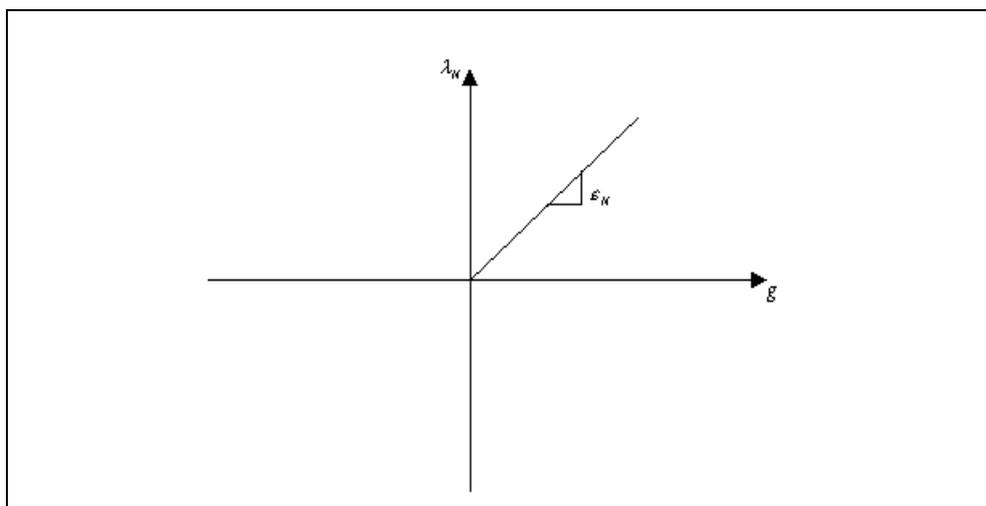


FIGURA 6.2 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DO PARÂMETRO DE PENALIDADE ε_N .

Observa-se na Figura 6.2 que se $\varepsilon_N \rightarrow \infty$ então $g \rightarrow 0$ e λ_N é limitado. Neste caso, percebe-se o efeito da penalização notando que quanto mais positivo é g (na linguagem do problema de contato, inadmissível) maior é ε_N , ou seja, a penalização. Como no final $g \rightarrow 0$ (para se tornar admissível) há a necessidade de fazer ε_N aumentar e conforme discutido no Capítulo 5, o problema se torna mal condicionado. O mau-condicionamento será remediado através do método de Lagrangeano aumentado ao invés da equação penalizada (6.9).

A equação variacional (6.6) para o método de penalidade é alcançada substituindo-se (6.9) em (6.6), ou seja

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \varepsilon_N g(\varphi(X)) \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.10)$$

que se verifica para toda variação $\delta\varphi \in D$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_{φ} .

A equação variacional (6.10), agora, está somente em função de φ e não está mais sujeita à restrição (6.2), o que a torna bastante atrativa e, por isso, muito utilizada juntamente com a implementação de elementos finitos.

Para resolver, ou minimizar, o problema de mau-condicionamento dos subproblemas gerados pelo método de penalização, utiliza-se, geralmente, o método de Lagrangeano aumentado, apresentado na próxima seção.

6.1.2 Método de Lagrangeano Aumentado Aplicado ao Problema de Contato sem Atrito

Será considerada a equação (6.9) alterada para

$$\bar{\lambda} = \lambda_N + \varepsilon_N g(\varphi(X)) \quad (6.11)$$

em que λ_N é o multiplicador de Lagrange. Agora, se λ_N é o multiplicador ótimo, no sentido que corresponde à solução do problema (6.6), então g será nula sobre Γ . A substituição de (6.11) em (6.10) conduz exatamente à equação variacional (6.6) no caso em que o multiplicador $\bar{\lambda}$ é ótimo. Infelizmente, não existe uma fórmula mágica para a determinação do multiplicador de Lagrange ótimo.

Assim, como não se tem o multiplicador de Lagrange ótimo, a idéia é fixar um multiplicador de Lagrange inicial e, através de um processo iterativo, estimá-lo em cada iteração deste processo. Esta estimativa é feita forçando-se, os multiplicadores de Lagrange, a satisfazer as condições necessárias de primeira ordem, como apresentado no Capítulo 5.

Reescrevendo a equação (6.6) sob esta nova interpretação tem-se

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} [\lambda_N + \varepsilon_N g(\varphi(X))] \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) \, d\Gamma = 0 \quad (6.12)$$

em que λ_N denota o multiplicador de Lagrange. Portanto, em um processo iterativo, em que na iteração K é conhecido o multiplicador de Lagrange estimado $\lambda_N^{(K)}$, uma sugestão para a avaliação deste multiplicador para a próxima iteração é a seguinte (ver relação (5.15) do Capítulo 5)

$$\lambda_N^{(K+1)} = \langle \lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N g \rangle \quad (6.13)$$

em que $\langle \cdot \rangle$ é conhecido como *Macauley bracket* e definido por

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} [x + |x|] = \begin{cases} x & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x \leq 0. \end{cases} \quad (6.14)$$

Agora, têm-se condições de apresentar o algoritmo de Lagrangeano aumentado (clássico) para o problema de contato sem atrito, elaborado por SIMO & LAURSEN (1990).

Algoritmo 6.1: Lagrangeano aumentado para o problema de contato sem atrito

Dados $\lambda_N^{(0)} > 0, \varepsilon_N^{(0)} > 0, K = 0$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,
resolva (usando alguma estratégia não-linear):

$$G(\varphi^{(K)}, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \langle \lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N^{(K)} g(\varphi^{(K)}(X)) \rangle \delta\varphi \cdot n(\varphi^{(K)}(X)) d\Gamma = 0 \quad (S)$$

atualize (multiplicador de Lagrange):

$$\lambda_N^{(K+1)} = \langle \lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N^{(K)} g(\varphi^{(K)}) \rangle \quad (\text{ver relação (6.14) para } \langle \cdot \rangle)$$

$$K = K + 1$$

$$\varepsilon_N^{(K)} = \varepsilon_N^{(0)}$$

continue.

Alguns comentários sobre o algoritmo:

Em SIMO & LAURSEN (1990), os autores inicializam $\lambda_N^{(0)} = \langle \lambda_N + \varepsilon_N g \rangle$ do último passo. Bem, como $\lambda_N^{(0)}$ é uma estimativa e o algoritmo ainda nem entrou no laço (*looping*), significa que não existe o último passo. Uma outra observação feita em SIMO & LAURSEN (1990) é que $\varepsilon_N^{(K)}$ está fixo para todo K , o que também foi considerado no algoritmo 6.1. Uma boa coisa a se fazer é verificar o quanto houve de ganho em relação à *função gap* g

($g(x) < 0$ - inadmissível), da iteração K para a iteração $K + 1$. Se o ganho foi pequeno, aplica-se uma penalização para forçar o algoritmo dar passos mais longos, caso contrário, mantém-se ε_N da prévia iteração (ver comentários apresentados após algoritmo 5.3 do Capítulo 5).

6.2 LAGRANGEANO AUMENTADO PARA O PROBLEMA DE CONTATO COM ATRITO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES

A discussão apresentada nesta seção é baseada na seção anterior e no trabalho de SIMO & LAURSEN (1990). Sendo assim, será dada a formulação do problema e, posteriormente, os métodos para resolvê-lo (ver seção 3 de SIMO & LAURSEN [1990]).

Considere Ω um subconjunto aberto de R^2 ou R^3 e x um ponto em Ω . Será denotado por u o campo de deslocamentos sobre Ω , suprimido a variável t da qual u é dependente. A normal ao corpo Ω em x é denotada por $n(x)$ e aponta para fora de Ω . O interior da região admissível é denotado por D e $\partial\Omega$ denota a fronteira de Ω , assim como ∂D denota a fronteira de D (ver Figura 3.1).

Será suposto que $x \in \Gamma$ tem uma distância inicial $g_0 \geq 0$ do ponto mais próximo de ∂D (é assumido que todos os pontos x estão inicialmente na região admissível). Assim, as condições de contato na teoria linear (SIMO & LAURSEN, 1990) são dadas por

$$g(u) = u \cdot n - g_0(x) \leq 0 \quad (6.15)$$

$$t_N(u) = -n \cdot \sigma(u)n \geq 0 \quad (6.16)$$

$$t_N(u)g(u) = 0, \quad (6.17)$$

para todo $x \in \Gamma$.

Da mesma forma que no Capítulo 3, as equações de equilíbrio e contorno são dadas por

$$Div \sigma + f = 0 \text{ em } \Omega \quad (6.18)$$

$$\sigma n = \bar{t} \text{ em } \Gamma_\sigma \quad (6.19)$$

$$u = \bar{u} \text{ em } \Gamma_u. \quad (6.20)$$

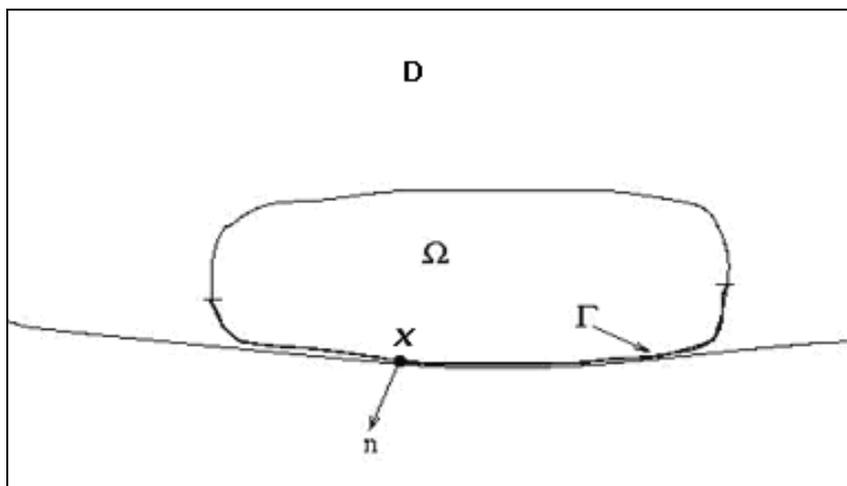


FIGURA 6.3 – NOTAÇÃO PARA O PROBLEMA DE CONTATO COM OBSTÁCULO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES.

A componente tangencial da tração é definida por

$$t_T(u) = -\sigma n - t_N n, \quad (6.21)$$

e a componente tangencial do deslizamento é definida por

$$u_T = u - (u \cdot n)n \text{ em } \Gamma. \quad (6.22)$$

Com as relações acima definidas, nesta seção, pode-se definir as condições de Karush-Kuhn-Tucker para o atrito de Coulomb

$$\Phi = \|t_T\| - \mu t_N \leq 0 \quad (6.23)$$

$$u_T = \xi \frac{\partial}{\partial t_T} \Phi \quad (6.24)$$

$$\xi \geq 0 \quad (6.25)$$

$$\xi \Phi = 0 \quad (6.26)$$

em que (6.23) representa o atrito de Coulomb com coeficiente de atrito $\mu > 0$. As equações (6.24) e (6.25) asseguram que o deslizamento ocorre na direção oposta àquela aplicada à tração tangencial. Por fim, a equação (6.26) implica que o deslizamento só pode ocorrer quando $\Phi = 0$, o que fornece em (6.23) $\|t_T\| = \mu t_N$. Agora, se $\|t_T\| < \mu t_N$ tem-se a aderência perfeita e a velocidade do deslizamento é zero, isto é, $u_T = 0$.

Na seqüência será dada a formulação fraca, como foi desenvolvida no Capítulo 3 e, também, em SIMO & LAURSEN (1990). Antes, deve-se lembrar que as variações admissíveis são restritas

$$\delta u \cdot n \leq 0 \text{ em } \Gamma \text{ se } g(u) = 0. \quad (6.27)$$

Segue que

$$G(u, \delta u) = \int_{\Omega} \sigma \cdot \text{grad}[\delta u] \, d\Omega - \int_{\Omega} f \cdot \delta u \, d\Omega - \int_{\Gamma_{\sigma}} t \cdot \delta u \, d\Gamma = \int_{\Gamma} [-t_N n \cdot \delta u - t_T \cdot \delta u_T] \, d\Gamma \quad (6.28)$$

tal que $\delta u = 0$ em Γ_u e (6.27) é satisfeita.

Uma vez mais se tem um problema não-linear restrito. Como realizado antes, na seção 6.1 e no Capítulo 5, usa-se penalização para transformar o problema (6.27)-(6.28) restrito, em um problema irrestrito, como será descrito a seguir.

6.2.1 Multiplicadores de Lagrange e Penalização Aplicados ao Problema de Contato com Atrito

Introduzindo-se multiplicadores de Lagrange λ_N e λ_T associados, respectivamente, as variações admissíveis δu e δu_T da relação (6.28), tem-se o seguinte problema

$$G(u, \delta u) = \int_{\Gamma} [-\lambda_N n \cdot \delta u - \lambda_T \cdot \delta u_T] \, d\Gamma \quad (6.29)$$

sujeito às restrições, para todo $x \in \Gamma$

$$g(u) \leq 0 \quad (6.30)$$

$$\lambda_N \geq 0 \quad (6.31)$$

$$\lambda_N g = 0 \quad (6.32)$$

$$\Phi = \|t_T\| - \mu t_N \leq 0 \quad (6.33)$$

$$u_T = \xi \frac{\partial}{\partial t_T} \Phi \quad (6.34)$$

$$\xi \geq 0 \quad (6.35)$$

$$\xi \Phi = 0. \quad (6.36)$$

Como realizado anteriormente, as condições de Karush-Kuhn-Tucker (6.30)-(6.32) são substituídas através da penalização

$$t_N = \varepsilon_N \langle g(u) \rangle \quad (6.37)$$

em que $\langle \cdot \rangle$ é denominado *Macauley bracket* apresentado na relação (6.14). Além disso, o deslizamento (6.34) também será penalizado e terá a forma

$$u_T - \xi \frac{\partial}{\partial t_T} \Phi = \frac{1}{\varepsilon_T} t_T \quad (6.38)$$

em que ε_T é o parâmetro de penalidade. Nota-se que (6.38) é uma espécie de relaxamento de (6.34), que é satisfeita apenas quando $\varepsilon_T \rightarrow \infty$.

Resumidamente o problema (6.29)-(6.36) tem a forma

$$G(u, \delta u) = \int_{\Gamma} [-t_N n \cdot \delta u - t_T \cdot \delta u_T] d\Gamma \quad (6.39)$$

sujeito às restrições

$$t_N = \varepsilon_N \langle g(u) \rangle \quad (6.40)$$

$$\Phi = \|t_T\| - \mu t_N \leq 0 \quad (6.41)$$

$$u_T - \xi \frac{\partial}{\partial t_T} \Phi = \frac{1}{\varepsilon_T} t_T \quad (6.42)$$

$$\xi \geq 0 \quad (6.43)$$

$$\xi\Phi = 0. \quad (6.44)$$

O problema, agora, é resolver (6.39) com t_N e t_T dados pelas equações (6.40)-(6.44).

Em SIMO & LAURSEN (1990) e LAURSEN (1992) foi utilizado o esquema de Euler para integrar as equações (6.40)-(6.44), provavelmente porque havia, apenas, a necessidade de uma precisão de primeira ordem, mas seria interessante verificar se a utilização de outros métodos forneceria uma solução mais rápida (o que fica como sugestão para trabalhos futuros). Não serão dados detalhes a respeito do esquema, pois o interesse, aqui, é no algoritmo final de Lagrangeano aumentado. O leitor interessado pode consultar as referências citadas acima. Apenas será reescrita a atualização de algumas variáveis que serão auxiliares no algoritmo de Lagrangeano aumentado, dadas em SIMO & LAURSEN (1990). Destaca-se que, em geral, resolve-se o problema (6.39)-(6.44) incrementalmente sobre o intervalo de tempo $[0, T] = \bigcup_{n=1}^N [t_n, t_{n+1}]$, e, em cada incremento de tempo, parte-se de (6.39) sendo satisfeita no tempo t_n e força-se a satisfação de (6.39) no incremento de tempo subsequente t_{n+1} sujeito às restrições (6.40)-(6.44) (também denominada, neste esquema, de leis de evolução). Sendo assim, tem-se o seguinte problema variacional, em que $\{u_n, t_{N_n}, t_{T_n}\}$ são dados em t_n ,

$$G(u_{n+1}, \delta u) = \int_{\Gamma} [-t_{N_{n+1}} n \cdot \delta u - t_{T_{n+1}} \cdot \delta u_T] d\Gamma \quad (6.45)$$

com $t_{N_{n+1}}$ em (6.45) dado por

$$t_{N_{n+1}} = \varepsilon_N \langle g(u_{n+1}) \rangle \quad (6.46)$$

e a tentativa de aderência (*stick*), que será denotada por *tent*, definida como

$$t_{T_{n+1}}^{tent} = t_{T_n} + \varepsilon_T (u_{T_{n+1}} - u_{T_n}) \quad (6.47)$$

$$\Phi_{n+1}^{tent} = \left\| t_{T_{n+1}}^{tent} \right\| - \mu t_{N_{n+1}} \quad (6.48)$$

e por fim

$$t_{T_{n+1}} = t_{n+1}^{tent} - \Delta\xi \frac{t_{T_{n+1}}^{tent}}{\|t_{T_{n+1}}^{tent}\|} \quad (6.49)$$

em que

$$\Delta\xi = \begin{cases} 0 & \text{se } \Phi_{n+1}^{tent} \leq 0 \\ \frac{\Phi_{n+1}^{tent}}{\mathcal{E}_T} & \text{se } \Phi_{n+1}^{tent} > 0. \end{cases} \quad (6.50)$$

A seguir, apresenta-se o problema que será aplicado o algoritmo de Lagrangeano aumentado como em SIMO & LAURSEN (1990). Na seqüência será explicado o funcionamento do mecanismo deste e a proposta de novos algoritmos de Lagrangeano aumentado.

$$G(u_{n+1}, \delta u) = \int_{\Gamma} [-t_{N_{n+1}} n \cdot \delta u - t_{T_{n+1}} \cdot \delta u_T] d\Gamma \quad (6.51)$$

$$t_N = \langle \lambda_N + \varepsilon_N g \rangle \quad (6.52)$$

$$\Phi = \|t_T\| - \mu t_N \leq 0 \quad (6.53)$$

$$\dot{u}_T - \xi \frac{\partial}{\partial t_T} \Phi = \frac{1}{\varepsilon_T} \left(\dot{t}_T - \dot{\lambda}_T \right) \quad (6.54)$$

$$\xi \geq 0 \quad (6.55)$$

$$\xi \Phi = 0. \quad (6.56)$$

Em que λ_N é o multiplicador associado às condições de Karush-Kuhn-Tucker já apresentado anteriormente e λ_T é o multiplicador associado à t_T . Portanto, tem-se o seguinte algoritmo de Lagrangeano aumentado, aplicado ao problema (6.51)-(6.56), juntamente com o esquema de integração de Euler (ver SIMO & LAURSEN [1990] e LAURSEN [1992]).

Algoritmo 6.2: Lagrangeano aumentado para o problema de contato com atrito e pequenas deformações

Dados $\lambda_N^{(0)} > 0$, $\Delta\lambda_T^{(0)} = 0$, $\varepsilon_N > 0$, $K = 0$.

Enquanto o critério de parada não for satisfeito,

encontre:

$$t_T(u_{n+1}^{(K)}) \text{ (esquema de Euler) e } u_{n+1}^{(K)} \text{ solução de}$$

$$G(u_{n+1}^{(K)}, \delta u) + \int_{\Gamma} \left[\lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N g(u_{n+1}^{(K)}) \right] \delta u \cdot n + t_T(u_{n+1}^{(K)}) \cdot \delta u_T \Big] d\Gamma = 0 \quad (6.2a)$$

atualize:

$$\lambda_N^{(K+1)} = \langle \lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N g(u_{n+1}^{(K)}) \rangle \quad (6.2b)$$

$$\Delta\lambda_T^{(K+1)} \quad (6.2c)$$

$$K = K + 1$$

continue.

O algoritmo 6.2 merece algumas explicações:

Inicializa-se o multiplicador de Lagrange λ_N^0 , arbitrariamente, $\Delta\lambda_T^0 = 0$ (utilizado na atualização de $\Delta\lambda_T^{(K+1)}$ em (6.2c)) e o contador de iterações $K = 0$.

Para a palavra critério, deve ser utilizado algum critério que detecte quando o problema foi resolvido (convergência do algoritmo). Em SIMO & LAURSEN (1990), o critério utilizado é:

$$g(u_{n+1}^{(K)}) \leq TOL1, \forall x \in \Gamma \text{ e}$$

$$\|u_{T_{n+1}} - u_{T_n}\| \leq TOL2, \forall x \in \Gamma \text{ e tal que}$$

$$\|t_T\| < \mu \langle \varepsilon_N g + \lambda_N \rangle,$$

e neste caso, $TOL1$ e $TOL2$ são valores constantes pré-fixados e μ é a constante de atrito também conhecida a priori.

O parâmetro $t_N(u_{n+1}^{(K)})$ utilizado no subproblema (6.2a) é encontrado pelo esquema de integração de Euler, que neste caso, é uma alteração feita nas equações (6.46)-(6.50) para

acomodar os multiplicadores de Lagrange λ_N e λ_T , associados, respectivamente, a t_N e t_T da formulação do problema (6.51)-(6.56) em que foi aplicado o algoritmo de Lagrangeano aumentado.

A solução do subproblema (6.2a) é obtida, no artigo de SIMO & LAURSEN (1990) utilizando o método de Newton-Raphson linearizado (linearização das equações), o que também pode ser obtido utilizando o método dos elementos finitos introduzido no Capítulo 4, assim como foi sugerido no algoritmo 6.1 para o problema de contato sem atrito.

O próximo passo é a atualização dos parâmetros: $\lambda_N^{(K+1)} = \langle \lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N g(u_{n+1}^{(K)}) \rangle$, multiplicador de Lagrange associado a t_N (ver equação (6.52)). Nota-se que para a iteração $K + 1$ do algoritmo 6.2, $\lambda_N^{(K+1)}$ utiliza $\lambda_N^{(K)}$ do passo K ; ε_N , parâmetro de penalidade, que é mantido constante no algoritmo e g aplicado no último valor encontrado como solução de (6.2a). Os demais parâmetros atualizados são $\Delta \lambda_T^{(K+1)}$ e o contador de iterações. A fórmula de atualização de $\Delta \lambda_T^{(K+1)}$ resulta também do esquema de Euler e das equações (6.46)-(6.50) e é dada por (para maiores detalhes ver SIMO & LAURSEN [1990] e LAURSEN[1992])

$$\Delta \lambda_T^{(K+1)} = \begin{cases} \Delta \lambda_T^{(K)} + \varepsilon_T \Delta u_T^{(K)} & \text{se } \left\| t_{T_n} + \Delta \lambda_T^{(K)} + \varepsilon_T \Delta u_T^{(K)} \right\| \leq \mu \lambda_N^{(K+1)} \\ \frac{t_{T_n} + \Delta \lambda_T^{(K)} + \varepsilon_T \Delta u_T^{(K)}}{\left\| t_{T_n} + \Delta \lambda_T^{(K)} + \varepsilon_T \Delta u_T^{(K)} \right\|} \mu \lambda_N^{(K+1)} - t_{T_n} & \text{c.c.} \end{cases}$$

O processo do algoritmo é continuado até que o critério seja satisfeito.

Até aqui os comentários feitos foram sobre os parâmetros e o entendimento dos passos do algoritmo. Na seqüência serão formuladas algumas propostas de algoritmos de Lagrangeano aumentado, sendo esta a parte original e mais importante, desta dissertação.

6.3 PROPOSTA DE NOVOS MÉTODOS DE LAGRANGEANO AUMENTADO PARA O PROBLEMA DE CONTATO E PEQUENAS DEFORMAÇÕES

A proposta será feita em duas subseções, sendo que a primeira tratará do problema de contato na ausência de atrito e, a segunda com a presença de atrito.

6.3.1 Uma Nova Proposta de Métodos de Lagrangeano Aumentado para o Problema de Contato sem Atrito

Serão recapitulados os passos seguidos na seção 6.1 que levaram ao algoritmo de Lagrangeano aumentado para o problema de contato sem atrito proposto na literatura.

Problema inicial (ver relações (6.1)-(6.2))

$$G(\varphi, \delta\varphi) = \int_{\Omega} P \cdot \text{Grad}(\delta\varphi) d\Omega - \int_{\Omega} f \cdot \delta\varphi d\Omega - \int_{\Gamma_{\sigma}} \bar{t} \cdot \delta\varphi d\Gamma_{\sigma} \geq 0 \quad (6.57)$$

$\forall \delta\varphi$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_{φ} e satisfazendo

$$\delta\varphi(X) \cdot n(\varphi(X)) \leq 0 \text{ em } \Gamma \text{ se } h(\varphi(X)) = 0. \quad (6.58)$$

Devido à dificuldade de resolvê-lo, este foi transformado em (acrescenta-se multiplicadores de Lagrange – relações (6.3)-(6.7))

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \lambda_N \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.59)$$

$$\int_{\Gamma} [\delta\lambda_N] h(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.60)$$

sujeito a

$$\lambda_N \geq 0 \quad (6.61)$$

$$h(\varphi(X)) \leq 0 \quad (6.62)$$

$$\lambda_N h(\varphi(X)) = 0. \quad (6.63)$$

Agora, a dificuldade é em relação ao número de variáveis que aumentou (multiplicadores de Lagrange) e as condições que estas devem satisfazer. Portanto, o problema é novamente transformado, utilizando-se penalização (Capítulo 5) e a *função gap* dada na relação (6.8), ou seja,

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \varepsilon_N g(\varphi(X)) \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) d\Gamma = 0 \quad (6.64)$$

que se verifica para toda variação $\delta\varphi$ tal que $\delta\varphi = 0$ em Γ_{φ} .

Agora, o problema ficou mais simples, no entanto, devido ao mau-condicionamento causado quando se faz $\varepsilon_N \rightarrow \infty$ (para obter convergência – ver Capítulo 5) é proposto, na literatura, o método de Lagrangeano aumentado clássico (HESTENES & POWELL, 1969) e o problema a ser resolvido fica

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} [\lambda_N + \varepsilon_N g(\varphi(X))] \delta\varphi \cdot n(\varphi(X)) d\Gamma = 0 . \quad (6.65)$$

Nota-se que o problema inicial (6.57) passou por várias transformações até chegar nesta forma final, ao qual foi aplicado o algoritmo 6.1.

Agora, será proposto um algoritmo de Lagrangeano aumentado com penalidades modernas discutidas no Capítulo 5.

A idéia é muito semelhante ao que já existe. Resolve-se um problema semelhante ao (6.65) só que com outras penalidades, ou seja,

$$G(\varphi, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \varepsilon_N p\left(\frac{g(\varphi(x))}{\varepsilon_N}, \lambda_N\right) \delta\varphi \cdot n(\varphi(x)) d\Gamma = 0 \quad (6.66)$$

em que p é uma das penalidades coercivas descritas na seção 5.3, do capítulo 5; ε_N é o parâmetro de penalidade e λ_N é o multiplicador de Lagrange.

A atualização dos multiplicadores de Lagrange é realizada como descrito no Capítulo 5. Assim, num processo iterativo, supondo conhecido $\lambda_N^{(K)}$ da iteração K , calcula-se $\lambda_N^{(K+1)}$ pela expressão

$$\lambda_N^{(K+1)} = p\left(\frac{g(\varphi^{(K)}(x))}{\varepsilon_N}, \lambda_N^{(K)}\right),$$

em que ε_N e $\varphi^{(K)}$ também são conhecidos. Além disso, $\lambda_N^{(K+1)} \geq 0$, pois p é uma penalidade coerciva, e então a relação (6.61) está satisfeita. Para as relações (6.62) e (6.63) utiliza-se a *função gap* g (definida pela relação (6.8)). Desta forma, se $\varphi^{(K)}(x)$ é admissível, $g(\varphi^{(K)}(x))$ será nula e $\lambda_N^{(K+1)} \geq 0$, e portanto, as relações (6.62) e (6.63) também estão satisfeitas. Por outro lado se $\varphi^{(K)}(x)$ não é admissível, $g(\varphi^{(K)}(x)) > 0$ e as relações (6.62) e (6.63) não estão satisfeitas. Portanto, como um critério de parada do algoritmo pode ser utilizado as relações (6.62) e (6.63). Além disso, pode-se diminuir o parâmetro de penalidade (neste caso ele nunca aumenta, pela própria construção das penalidades – nota-se que ε_N está no denominador de $p(\cdot, \lambda_N^{(K)})$) sempre que as duas relações estiverem longe de serem satisfeitas. Em outras palavras, aplica-se uma penalização quando $\varphi^{(K)}(\cdot)$ estiver longe de ser admissível. Resumidamente, o processo algorítmico fica:

Algoritmo 6.3 – Lagrangeano aumentado para o problema de contato sem atrito e penalidade coerciva

Dados $\lambda_N^{(0)} > 0$, $\varepsilon_N > 0$, $K = 0$, $Aux = 1$, $Eps > 0$.

Enquanto $Aux = 0$,

resolva (usando alguma estratégia não-linear):

$$G(\varphi^{(K)}, \delta\varphi) + \int_{\Gamma} \varepsilon_N p\left(\frac{g(\varphi^{(K)}(x))}{\varepsilon_N}, \lambda_N^{(K)}\right) \delta\varphi \cdot n(\varphi(x)) d\Gamma = 0$$

atualize (multiplicador):

$$\lambda_N^{(K+1)} = p\left(\frac{g(\varphi^{(K)}(x))}{\varepsilon_N}, \lambda_N^{(K)}\right)$$

cheque convergência.

Se $g(\varphi^{(K)}(x)) \leq \text{Eps}$,

Faça $Aux = 1$.

$$K = K + 1$$

continue.

Como no algoritmo proposto na literatura, o primeiro passo, deste algoritmo, consiste em encontrar uma solução para a equação variacional (6.64). A diferença essencial está na forma de escolher a penalização. Nesta proposta, qualquer penalidade da família P , incluindo a penalidade de Rockafellar (5.18), pode ser utilizada. Desta forma, tem-se uma combinação de vários métodos de Lagrangeano aumentado que podem ser utilizados. Todos com teoria de convergência já construída.

Pelas características, destas novas penalidades, coercividade, convexidade, diferenciabilidade (pelo menos de classe C^2 - a menos a de Rockafellar) – ver Capítulo 5 -, acredita-se que a convergência será mais rápida do que nos métodos de Lagrangeano aumentado propostos na literatura. Ao final da próxima seção será dada mais ênfase a essa discussão.

6.3.2 Uma Nova Proposta de Métodos de Lagrangeano Aumentado para o Problema de Contato com Atrito

Como foi realizado na seção 6.2, o problema a ser resolvido pelo método de Lagrangeano aumentado que será discutido nesta seção é dado pelas equações (6.51)-(6.56). Aqui, não serão reescritas estas relações, pelo fato que, os passos de inclusão de multiplicadores de Lagrange, penalização e por último, de Lagrangeano aumentado são idênticos aos realizados na seção 6.2.

Vale destacar que o problema com atrito apresenta dificuldades que o problema sem atrito não apresenta. Do ponto de vista matemático (não observando a parte física – significado real das variáveis), uma das dificuldades, a mais apresentada em relação ao

problema sem atrito, é a equação do movimento (6.54) que necessita ser satisfeita. Por causa dessa equação foram introduzidos novos multiplicadores de Lagrange e conseqüentemente mais um termo de penalização.

O novo algoritmo de Lagrangeano aumentado, que se está propondo, para resolver o problema (6.51)-(6.56), difere do algoritmo 6.2 somente na maneira de se escolher a penalidade. No proposto, aqui, existe uma gama de penalidades, pois pode ser qualquer penalidade da família P. Assim, no algoritmo 6.2 o que ficaria diferente é a equação variacional e a atualização dos multiplicadores referentes às condições de Karush-Kuhn-Tucker (6.30)-(6.32). Além disso, será utilizado como critério de parada o mesmo utilizado por SIMO & LAURSEN (1990). Portanto, tem-se o seguinte algoritmo:

Algoritmo 6.4 – Lagrangeano aumentado para o problema de contato com atrito e pequenas deformações com penalidades da família P

Dados $\lambda_N^{(0)} > 0$, $\Delta\lambda_T^{(0)} = 0$, $\varepsilon_N > 0$, $K = 0$, $Aux = 1$, $Eps1 > 0$ e $Eps2 > 0$.

Enquanto $Aux = 0$,

encontre $t_T(u_{n+1}^{(K)})$ e $u_{n+1}^{(K)}$ solução de

$$G(u_{n+1}^{(K)}, \delta u) + \int_{\Gamma} \varepsilon_N P\left(\frac{g(u_{n+1}^{(K)})}{\varepsilon_N}, \mu_N^{(K)}\right) \delta u \cdot n + t_T(u_{n+1}^{(K)}) \delta u_T \, d\Gamma = 0$$

cheque convergência.

Se $g(u_{n+1}^{(K)}) \leq Eps1$ (para todo $x \in \Gamma$) e

$$\|u_{T_{n+1}} - u_{T_n}\| \leq Eps2 \quad (\text{para todo } x \in \Gamma) \text{ tal que}$$

$$\|t_T\| < \mu \left(\lambda_N^{(K)} + \varepsilon_N g(u_{n+1}^{(K)}) \right)$$

faça $Aux = 1$.

Senão, atualize:

$$\mu_N^{(K+1)} = p \left(\frac{g(u_{n+1}^{(K)})}{\varepsilon_N}, \mu_N^{(K)} \right)$$

$$\Delta \lambda_T^{(K+1)} \quad (\text{como no algoritmo 6.2})$$

$$K = K + 1$$

fim do enquanto.

Observa-se que as novas penalidades estão presentes na equação variacional e neste algoritmo, assim como no desenvolvimento do Capítulo 5, denota-se os multiplicadores de Lagrange por μ_N ao invés de λ_N (referentes às condições de Kuhn-Tucker). As demais variáveis são as mesmas que as do algoritmo 6.2 e, portanto, já foram explicadas e comentadas naquele algoritmo (ou no algoritmo de SIMO & LAURSEN [1990]).

Para concluir este capítulo serão feitas algumas considerações. Primeiramente, será salientado que os novos algoritmos propostos (6.2 e 6.3) devem conduzir a resultados melhores do que os existentes na literatura. No entanto, não houve tempo hábil para implementações e então não foi possível comparar com os atuais (que seguem esta mesma linha). A intuição de que devem ser melhores está no fato de que estas penalidades modernas têm propriedades que as outras não têm, como: convexidade estrita, diferenciabilidade (pelo menos de classe C^2 - menos a de Rockafellar que é de classe C^1 e não é estritamente convexa), são coercivas pela direita, podendo-se comparar pelas figuras a seguir (nas figuras λ_N e μ_N estão fixos).

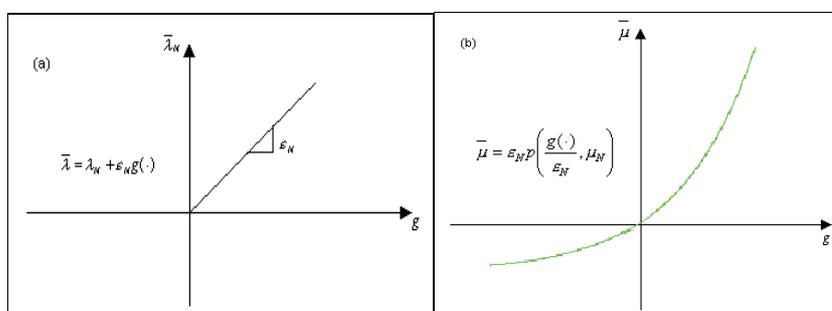


FIGURA 6.4 – COMPARAÇÃO ENTRE PENALIDADE CLÁSSICA E MODERNA.

Observa-se que a penalidade da Figura 6.4(b) tem uma qualidade que a da figura 6.4(a) não tem, ou seja, se $g > 0$ (não admissível) o gráfico da figura 6.4(b) cresce mais rapidamente que o da Figura 6.4(a), a menos que ε_N seja muito grande. Além disso, esse crescimento à direita da origem depende menos em $\bar{\mu}$ do que em $\bar{\lambda}$, pois a própria construção da penalidade tem esta característica.

Uma segunda consideração que deve ser feita é quanto ao parâmetro de penalidade ε_N que foi introduzido para os multiplicadores de Lagrange referentes às condições de Karush-Kuhn-Tucker. Este parâmetro não é atualizado em nenhum dos algoritmos. Nos métodos de penalidades se o parâmetro de penalidade não for atualizado, pode ocorrer falha no algoritmo, o que não acontece nos algoritmos de Lagrangeano aumentado, em que ε_N pode ser constante em todas as iterações. No entanto, tem aparecido na literatura trabalhos em que, se estes permanecerem constantes, a convergência pode ser muita mais lenta (ver por exemplo TSENG & BERTSEKAS [1993] E MATIOLI [2000]). Fica como sugestão para trabalhos futuros implementações e uma análise mais aprofundada referente à atualização do(s) parâmetro(s) de penalização.

Por fim, deve-se destacar que a penalidade quadrática descrita no Capítulo 5 e em Matioli (2000) e Jussiani (2004) que não é coerciva, mas que é uma alternativa às clássicas. No caso em que o problema (P) (ver Capítulo 5) é linear ou ainda se a função objetivo é quadrática e as restrições são lineares, então os subproblemas gerados pelo métodos de Lagrangeano aumentado são quadráticos e desta forma fáceis de resolver (comparados a outros que são altamente não-lineares).

CAPÍTULO 7

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, a formulação do problema de contato envolvendo ou não atrito, assim como, a aplicação de métodos de Lagrangeano aumentado na sua resolução, foram extensivamente discutidos.

O sistema de equações gerado por um típico problema de contato, particularmente tridimensional, é muito grande. O custo computacional para resolver tal sistema de equações é muito alto e, portanto, melhorar as técnicas iterativas utilizadas é algo extremamente atrativo. O efeito das condições de contato em tais técnicas iterativas é um importante tópico de investigação, sendo que, os métodos iterativos são altamente importantes na determinação do condicionamento das equações. Os métodos de Lagrangeano aumentado, em especial, são reconhecidos por gerarem problemas bem condicionados, o que os tornam mais atrativos que os outros na resolução de alguns problemas, como por exemplo, o problema de contato.

Técnicas de penalidades clássicas já são empregadas na resolução de problemas utilizando métodos de Lagrangeano aumentado, como por exemplo, a penalidade de Rockafellar (1974), mostrada neste trabalho. No entanto, nos últimos anos novas penalidades foram desenvolvidas com características extremamente relevantes: coercividade, convexidade e diferenciabilidade (pelo menos de classe C^2). Foram estas características que inspiraram a aplicação destas novas penalidades ao invés das penalidades clássicas como objeto de estudo deste trabalho.

Embora não houvesse tempo hábil para a implementação desta nova metodologia (implementação esta que se sugere para trabalhos futuros), acredita-se que esta metodologia deve conduzir a resultados melhores que os existentes na literatura, justamente devido às características citadas anteriormente.

Outro tópico sugerido para futuros trabalhos juntamente com a implementação da nova metodologia sugerida aqui é uma análise mais aprofundada com relação à atualização do(s) parâmetro(s) de penalização. Pois, embora não acarrete(m) problemas no algoritmo ao manter(em) constante(s), este(s) pode(m) levar a uma convergência mais rápida quando atualizado(s).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Eric. B. Becker, Graham F. Carey and T. J. Oden. *Finite Element: An Introduction*. Texas Institute for Computational Mechanics. The University of Texas at Austin, 1981.
2. D. P. Bertsekas. D. *Constrained Optimization and Lagrange Multipliers*. Academic Press, Mew York, 1992.
3. Eduardo Bittencourt. *Tratamento de Problemas Não-Lineares na Mecânica dos Sólidos*, Tese Pós-doutorado, Brown University, 2002.
4. Gene Golub and Charles Van Loan. *Matrix Computation*, 2 ed. Baltimore. The Johns Hopkins University Press, 1989.
5. A. R. Coon, N. L. Gould and Ph. L. Toint. *LANCELOT: a fortran package for large-scale nonlinear optimization (release A)*, Springer Verlag. Berlin and New York, 1992.
6. R. Fletcher. *Practical Methods of Optimization*, 2 ed, New York, John Wiley and Sons, 1986.
7. C. C. Gonzaga. Algoritmos de pontos interiores para programação linear. 17^o Colóquio Brasileiro de Matemática, Rio de Janeiro, Brasil, 1989.
8. C. C. Gonzaga. *Path following methods for linear programming*, SIAM Review, 34(2):167-227, 1992.
9. H. L. Guidorizzi. *Um Curso de Cálculo*, 3 ed, LTC – Livros Técnicos e Científicos S.A., Rio de Janeiro, 1997.
10. M. Hestenes. *Multiplier and Gradient Methods*. Journal Optmization Theory and Aplications, 4:303-320, 1969.

11. A. Iusem and M. Teboulle. *On the Convergence Rate of Entropic Proximal Optimization Methods*, Computational and Applied Mathematics of Operation Reserch, 20:657-677, 1995.
12. L. F. Jussiani. *Desempenho do Método de Lagrangeano Aumentado com Penalidade Quadrática*, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná, Brasil, 2004.
13. N. Kikuchi and J. T. Oden. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Elements Methods*, SIAM, Philadelphia, 1988.
14. Tod. A. Laursen. *Formulational and Treatment of Frictional Contact Problems using Finite Elements*, Tese de doutorado, Stanford University, USA, 1992.
15. Louis Leithold. *O Cálculo com Geometria Analítica 2*, 3 ed, Editora Harbra, São Paulo, 1994.
16. Jack Zhou, Li Ma, Alan Lau, Samuel Low and Roland deWit. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 2002.
17. J. M. Martinez, S. A. Santos. *Métodos Computacionais de Otimização*, 20º Colóquio Brasileiro de Matemática, Rio de Janeiro, IMPA, 1995.
18. J. M. Martinez. *BOX-QUACAN and the Implementation of Augmented Lagrangian Algoritmos for Minimization with Inequality Constraints*. Computational & Applied Mathematics, 19:31-56, 2000.
19. L. C. Matioli. *Uma Nova Metodologia para Construção de Funções de Penalização para Algoritmo de Lagrangeano Aumentado*, Tese doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 2000.
20. W. G. McCallum, D. Hughes-Hallett and A. M. Gleason et al. *Cálculo de várias variáveis*, Editora Edgar Blücher Ltda, São Paulo, 1997.
21. M. Minoux. *Mathematical Programming*. John Wiley & Sons Ltda, 1986.
22. J. Nocedal, S. J. Wright. *Numerical Optimization*, New York, Springer Verlag, 1999.

23. M. J. D. Powell. *A Method for Nonlinear Constraints in Minimization Problems in Optimization*. R. Fletcher, pages 283-298, 1969.
24. F. L. B. Ribeiro. *Introdução ao Método dos Elementos Finitos*. COPPE/UFRJ, Programa de Engenharia Civil, 2004.
25. R. T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton University Press, New Jersey, 1970.
26. R. T. Rockafellar. *Augmented Lagrange Multiplier Functions and Duality in Nonconvex Programming*, SIAM Journal of Control, 12, 268-285, 1974.
27. J. C. Simo and T. A. Laursen. *An Augmented Lagrangian Treatment of Contact Problems Involving Friction*. Computers & Structures, Stanford University, 97-116, 1990.
28. P. Tseng and D. Bertsekas. *On the Convergence of Exponential Multiplier Method for Convex Programming*. Mathematical Programming, 60:1-19, 1993.