

OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA USANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS ATÔMICOS (AFEM)Lucca Heinze Faro¹, Renato Pavanello²

1. Estudante da Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas (FEM-UNICAMP)
2. Professor da FEM-UNICAMP - Departamento de Mecânica Computacional/Orientador

Resumo

Neste trabalho é desenvolvida uma solução para a otimização topológica de estruturas em nível atômico. Para isso, o Método dos Elementos Finitos Atômicos (AFEM) é utilizado para gerar uma simulação da estrutura analisada, com potencial de Lennard-Jones servindo de modelo para a interação atômica.

A partir dessa simulação, uma otimização topológica baseada no método Bi-Directional Evolutionary Structural Optimization (BESO) é usada para minimizar a energia de deformação da estrutura, dada uma solicitação externa, resultando em estruturas com topologias otimizadas.

Os resultados obtidos são ilustrados e comparados com exemplos clássicos da literatura de otimização topológica e demonstram a possibilidade de aplicação desses métodos ao nível da modelagem atômica molecular. Com o extraordinário avanço atual das técnicas de nanofabricação, a aplicação destas técnicas de projeto será necessária para o desenvolvimento de novas nanoestruturas.

Palavras-chave: BESO; Método dos Elementos Finitos; Modelagem Atômica.

Apoio financeiro: CNPq

Trabalho selecionado para a JNIC: UNICAMP

Introdução

Otimização topológica é um método computacional usado para otimizar estruturas e materiais de engenharia. Na formulação clássica do método BESO, isso é feito distribuindo de forma ótima uma quantidade de material prédefinida em um domínio de projeto. Para tanto, modelos matemáticos de simulação do comportamento mecânico das estruturas são usados para mapear a densidade de energia de deformação local em toda a estrutura. A partir da avaliação dessa distribuição, material pode ser removido ou adicionado de acordo com a análise de sensibilidade realizada. A solução converge iterativamente para uma forma otimizada.

Os métodos mais comuns utilizados na etapa de mapeamento da função objetivo são baseados na Mecânica do Contínuo. Estes, porém, têm se tornado insuficientes na modelagem de problemas envolvendo análise multiescala, nos quais a escala atômica precisa ser considerada. Nestes casos, o comportamento a nível microscópico do material pode influenciar na resposta macroscópica da estrutura, sendo necessária a utilização de uma simulação que represente efeitos atômicos. Nesse cenário, o AFEM surge como alternativa para a simulação. Esse método se baseia no uso de potenciais interatômicos para modelar as estruturas e ligações atômicas. Neste trabalho foi utilizado o potencial de Lennard-Jones, por sua simplicidade de cálculo.

A vantagem do AFEM é o custo computacional baixo comparado a outros métodos de dinâmica molecular. De acordo com (Liu et al., 2005), simulações baseadas em gradiente conjugado, por exemplo, são ordem- N^2 , de forma que o custo computacional cresce com o quadrado do número de átomos na malha. Já o AFEM tem ordem- N , representando um ganho considerável para aplicações com grande número de átomos.

Dessa forma, este trabalho desenvolve uma simulação atômica baseada no AFEM que, em seguida, é usada junto a um programa de otimização topológica, baseado no método BESO, para realizar a otimização de nanoestruturas na escala atômica. A partir disso, o programa foi aplicado a exemplos clássicos da literatura, para avaliar a viabilidade da metodologia proposta. Os resultados obtidos com a aplicação combinada do AFEM com o BESO foram consistentes com respeito às demais publicações da área.

Metodologia

A primeira etapa do trabalho foi desenvolver uma simulação atômica da estrutura. Para isso, o AFEM foi implementado usando o equacionamento disponível em (Liu et al., 2004) e de acordo com a estrutura tradicional de Elementos Finitos, baseada na matriz de rigidez e nos vetores de deslocamento e de carga. A equação utilizada foi:

$$K \cdot u = P \quad (1)$$

com K e P dados por

$$K = \frac{\partial^2 U_{tot}(x)}{\partial x \partial x} \quad (2)$$

$$P = F - \frac{\partial U_{tot}(x)}{\partial x} \quad (3)$$

onde U_{tot} representa a energia total do sistema (dada pelo potencial adotado), x é o vetor de posições atômicas, e F é o conjunto de forças externas. Nas equações, U_{tot} é avaliado para $x = x_0$, onde x_0 é uma estimativa da posição de equilíbrio.

Dessa forma, a partir da equação do potencial, neste caso o de Lennard-Jones, são calculadas as derivadas necessárias para os termos das equações (1) a (3). Como o sistema é não linear na posição de equilíbrio, essas equações são resolvidas iterativamente até a sua convergência, usando o processo de Newton-Raphson.

A etapa seguinte foi a otimização topológica. Para isso, a partir da posição de equilíbrio da malha obtido pelo AFEM, foi implementado o cálculo da energia de deformação do sistema, através da equação

$$\Delta U = U_{eq} - U_0 \quad (4)$$

onde U_{eq} é a energia potencial no estado deformando e U_0 é a energia potencial no estado indeformado.

Como a energia de deformação é calculada para elementos descontínuos, ela deve ser suavizada para evitar concentrações em pontos com restrições ou aplicações de força. Isso é feito ponderando-se a energia de cada elemento com a energia dos elementos no seu entorno, através do filtro numérico definido por:

$$\alpha_i = \frac{\sum_{j=1}^M \omega(r_{ij}) \Delta U_j}{\sum_{j=1}^M \omega(r_{ij})} \quad (5)$$

onde M corresponde ao número de conexões de cada átomo, $\omega(r_{ij})$ é um fator de ponderação proporcional à distância entre átomos vizinhos e ΔU_j corresponde à energia de deformação de cada elemento. α_i é chamado de sensibilidade do elemento. Esse número permite também estender a definição da energia de deformação para elementos que estejam inativos na malha, e cuja energia calculada pela Eq. (4) seja zero, de forma que eles entrem também da redistribuição de material. Um valor limite de sensibilidade é, então, calculado. Com isso, átomos ativos cuja sensibilidade seja inferior ao limite são retirados da malha, enquanto os inativos com valor superior são adicionados. Este processo é repetido iterativamente, conforme definido no método BESO.

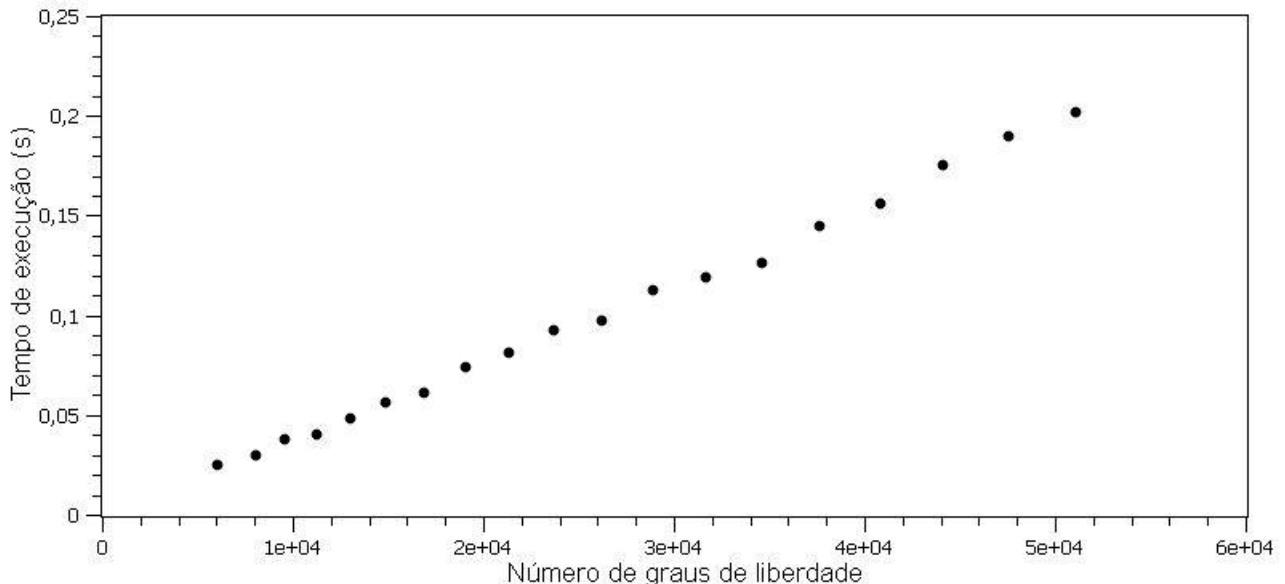
O código foi otimizado, de forma a garantir uma maior eficiência e um tempo de execução reduzido. Foram utilizados os recursos de matriz esparsa e paralelização para permitir a aplicação do código com um número de átomos representativo.

Resultados e Discussão

Primeiramente, fez-se uma validação da simulação atômica, comparando os resultados obtidos com os fornecidos por uma implementação padrão do método de Dinâmica Molecular. Os valores obtidos em deslocamento coincidiram para os 9 algoritmos significativos considerados, mostrando a validade da implementação efetuada.

Foi avaliada, também, a relação entre o tempo de execução da simulação e a quantidade de graus de liberdade no sistema, representada na Figura 1. Como cada átomo apresenta dois graus de liberdade, esse gráfico indica que, para o intervalo analisado, o tempo de execução tem um relação linear com o número de átomos na malha, indicando que o método AFEM tem ordem- N conforme mencionado na literatura.

Figura 1: Tempo de execução da simulação em função do número de átomos na malha



Por fim, a otimização foi validada utilizando exemplos clássicos da literatura. Para isso, esses exemplos foram implementados e os resultados das otimizações foram comparados aos disponíveis em (Huang; Xie, 2010).

O primeiro caso testado foi a estrutura de duas barras, ilustrado na Figura 2. Nesse exemplo, o lado esquerdo do domínio de projeto é engastado nas extremidades superior e inferior, enquanto o lado direito recebe uma solicitação na metade da sua altura. O segundo caso foi a estrutura de Michell, ilustrado na Figura 3. Neste exemplo, a parte inferior do domínio de projeto é apoiada em suas extremidades, enquanto seu meio recebe a solicitação.

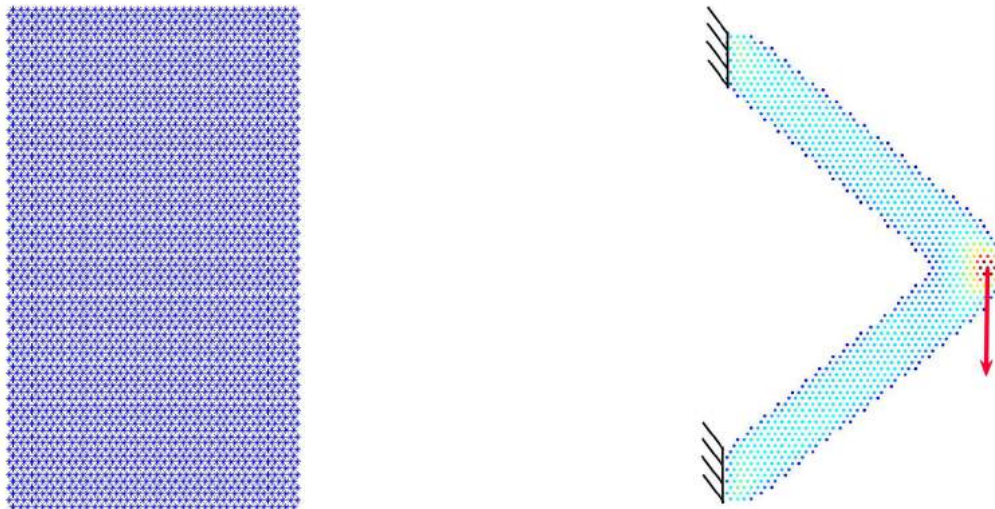


Figura 2: Otimização para a estrutura de duas barras com taxa de remoção de 2%, volume final de 40% e força externa de 0,5 eV. À esquerda, o domínio do projeto; à direita a estrutura otimizada.

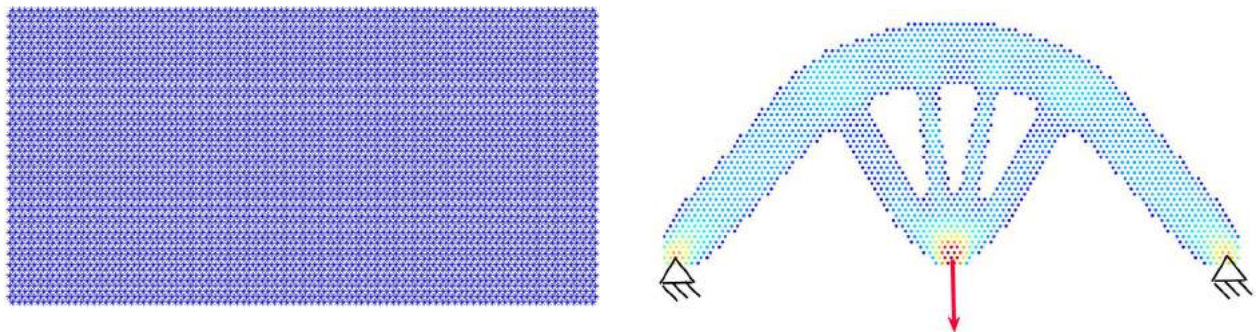


Figura 3: Otimização para a estrutura de Michell com taxa de remoção de 0,8%, volume final de 40% e força externa de 0,1 eV. À esquerda, o domínio do projeto; à direita a estrutura otimizada.

Para os dois casos, os resultados obtidos coincidiram com os disponíveis na literatura de otimização topológica. Isso indica que, para os casos analisados, a combinação do AFEM com o BESO gerou uma solução adequada para a otimização topológica de estruturas em nível atômico.

Conclusões

Um método de Otimização Topológica baseado na combinação dos métodos AFEM e BESO aplicado à modelos atômicos foi proposto, implementado e testado neste trabalho.

O potencial para o uso do AFEM na otimização de estruturas em escalas microscópicas foi evidenciado neste trabalho. A partir da validação dos resultados fornecidos pela implementação do AFEM e da otimização topológica, foi possível atestar a aplicabilidade dessa combinação em caso de malhas bidimensionais usando o potencial de Lennard-Jones.

Além disso, foi possível também confirmar que o método de simulação tem ordem-N, o que gera um grande potencial para a representação de estruturas cada vez maiores, englobando estruturas atômicas 3D e potenciais mais representativos, representando uma alternativa para o projeto conceitual inicial de nano estruturas.

Referências bibliográficas

LIU, B.; JIANG, H.; HUANG, Y.; QU, S.; YU, M. F.; HWANG, K. C. Atomic-scale finite element method in multiscale computation with applications to carbon nanotubes. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, v. 72, n. 3, 2005.

LIU, B.; HUANG, Y.; JIANG, H.; QU, S.; HWANG, K. C. The atomic-scale finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 193, n. 17–20, p. 1849–1864, 7 maio 2004.

HUANG, X.; XIE, Y. *Evolutionary topology optimization of continuum structures: methods and applications*. [s.l.] Wiley, 2010.

DAMASCENO, D. A. *Nonlinear Atomic-scale Finite Element Method for the Modelling of Nanomaterials and Nanostructures*. 2017. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo.