

DISSERTAÇÃO

**Otimização Topológica Aplicada ao Projeto
de Microestruturas Osteocompatíveis**

MAISA DAMAZIO FRANCO

JOINVILLE, 2014

MAISA DAMAZIO FRANCO

**Otimização Topológica Aplicada ao Projeto de
Microestruturas Osteocompatíveis**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro de Ciências Tecnológicas, da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador(a): Prof. Dr. Eduardo Lenz Cardoso

JOINVILLE, SC

2014

F825o

Franco, Maisa Damazio

Otimização topológica aplicada ao projeto de microestruturas osteocompatíveis /
Maisa Damazio Franco. - 2015.

110 p. : il. ; 21 cm

Orientador: Eduardo Lenz Cardoso

Bibliografia: 103-110 p.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado Santa Catarina, Centro de
Ciências Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica,
Joinville, 2015.

1. Osteoartrite. 2. Arranjo microestrutural. 3. Otimização topológica. 4. Homogeneização.
I. Cardoso, Eduardo Lenz. II. Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.


CDD: 620.1 - 23. ed.

MAISA DAMAZIO FRANCO
OTIMIZAÇÃO TOPOLOGICA APLICADA AO PROJETO DE
MICROESTRUTURAS OSTEOCOMPATÍVEIS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Engenharia Mecânica como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica na área de concentração "Modelagem e Simulação Numérica".

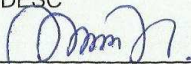
Banca Examinadora

Orientador:

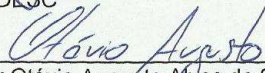


Prof. Dr. Eduardo Lenz Cardoso
CC7/UEDESC

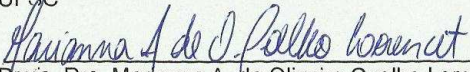
Membros



Prof. Dr. Pablo Andrés Muñoz Rojas
CC7/UEDESC



Prof. Dr. Otávio Augusto Alves da Silveira
UFSC



Prof.ª. Dra. Marianna A. de Oliveira Coelho Lorencet
CC7/UEDESC

Joinville, SC, 17 de dezembro de 2014.

Agradecimentos

Agradeço ao Professor Eduardo Lenz Cardoso pela excelente orientação, dedicação, paciência e principalmente por todo o conhecimento compartilhado.

Agradeço a todos os professores do programa de Pós graduação em Engenharia Mecânica pelas contribuições acadêmicas.

Agradeço aos meus pais por todo o apoio para que eu pudesse me dedicar aos estudos, e por todo o amor e carinho que não me deixam desanimar.

Agradeço ao meu namorado, Evandro Machado, por todos os bons momentos que passamos juntos, tanto estudando quanto nos divertindo, por todo o seu amor e apoio.

Agradeço aos colegas de mestrado pelos momentos de estudos.

Meus agradecimentos também à minha amiga Débora por toda ajuda e incentivo.

Agradeço à UDESC por todas as oportunidades de estudo e trabalho.

Agradeço à FAPESC, Chamada Pública 001/2012 pela bolsa de estudos.

O grupo de pesquisa "Desenvolvimento e Aplicação de Métodos Numéricos a Problemas do Contínuo" agradece à FAPESC, Chamada Pública 06/2013, Termo de Outorga 3387/2013. .

"Por vezes sentimos que aquilo que fazemos não é senão uma gota de água no mar. Mas o mar seria menor se lhe faltasse uma gota".

Madre Teresa de Calcutá.

Resumo

FRANCO, Maisa Damazio. **Otimização Topológica Aplicada ao Projeto de Microestruturas Osteocompatíveis**. 2014. 110. Dissertação (Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica) - Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2014.

Devido aos problemas como osteoartrite e fraturas, cada vez mais tem se recorrido às cirurgias de implante de prótese, como por exemplo, os implantes de quadril. Estas próteses devem ser produzidas com materiais biocompatíveis, como por exemplo, o titânio, e devem possuir propriedades mecânicas próximas à do meio ósseo, que apresenta características de materiais porosos. O objetivo deste trabalho é o projeto otimizado de microestruturas de titânio, de modo a minimizar a diferença entre o tensor de propriedades elásticas do osso e do material da prótese. Para isso, são utilizadas duas ferramentas bem estabelecidas na literatura: a otimização topológica de meios contínuos e o método de homogeneização por expansão assintótica. A eficácia da formulação é verificada por meio do projeto de diferentes microestruturas.

Palavras-chave: Osteoartrite. Arranjo Microestrutural. Otimização Topológica. Homogeneização.

Abstract

FRANCO, Maisa Damazio. **Topology optimization applied to osteo-compatible microstructures project**. 2014. 110. Dissertação (Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica) - Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2014.

Due to problems such as osteoarthritis and fractures, it is observed an increasingly amount of prosthesis implant surgery, as for example, hip prosthesis. These implants must be made with biocompatible materials such as titanium, and must have mechanical properties close to the bone, which has characteristics of porous materials. The objective of this work is the design of optimum titanium microstructures, in order to minimize the difference between the tensor of elastic properties of the bone and of the prosthesis material. For this purpose, two well established tools are used: the topology optimization and the continuous homogenization method, by means of asymptotic expansion. The efficacy of the formulation is verified by designing different microstructures.

Key-words: Osteoarthritis. Topology Optimization. Homogenization. Microstructure. Biocompatible.

Lista de ilustrações

Figura 1	Quadril normal e quadril com artrose	25
Figura 2	Radiografia do quadril	26
Figura 3	Microestruturas com coeficiente de Poisson de $1/3$	28
Figura 4	Microestruturas otimizadas	30
Figura 5	Maximização da condutividade térmica	31
Figura 6	Relação entre (E) e a porosidade do titânio	32
Figura 7	Estrutura do osso cortical.	36
Figura 8	Estrutura do osso trabecular.	37
Figura 9	Seção do osso mostrando osso trabecular e cortical.	37
Figura 10	Função com oscilações rápidas.	42
Figura 11	Uma oscilação na escala microscópica.	43
Figura 12	Problema Geral de Elasticidade.	44
Figura 13	Estrutura Celular.	44
Figura 14	Célula Base.	45
Figura 15	Otimização estrutural	60
Figura 16	Curvas do modelo SIMP	64
Figura 17	Célula unitária com reforço uniaxial.	84
Figura 18	Célula unitária com reforço a 45°	86
Figura 19	Maximização da componente C_{11}	88
Figura 20	Maximização da componente C_{22}	88
Figura 21	Maximização da componente C_{66}	89
Figura 22	Maximização da combinação linear $\Phi = \frac{3}{5}C_{11} + \frac{2}{5}C_{22}$	89
Figura 23	Topologias com $V_f = 13,75\%$	90
Figura 24	Topologia com vizinhança de segunda ordem	91
Figura 25	Topologia referente a obtenção do tensor 6.4.	92

Figura 26	Distribuições iniciais de titânio	93
Figura 27	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.7. . .	95
Figura 28	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.8. . .	96
Figura 29	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.9. . .	97
Figura 30	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.10. . .	97
Figura 31	Distribuição inicial de densidades.	98
Figura 32	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.11. . .	99
Figura 33	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.12. . .	100
Figura 34	Microestrutura da célula referente ao tensor 6.13. . .	101
Figura 35	Topologias periódicas das células 27, 28, 29, 30, 32 e 34	102

Lista de tabelas

Tabela 1	Módulo de elasticidade do osso trabecular	39
Tabela 2	Verificação cálculo de sensibilidades	82
Tabela 3	Dados da simulação.	84

Lista de abreviaturas e siglas

SIMP	Parametrização (<i>Simple Isotropic Material with Penalization</i>)
EPT	Estado plano de tensões
MMA	Método das assíntotas móveis
SLP	Programação linear sequencial
KKT	Condições de Karush-Kuhn-Tucker

Lista de símbolos

F	Função objetivo
C_{ijkl}	Componentes do tensor elástico efetivo
C_{ijkl}^H	Componentes do tensor elástico homogeneizado
C_{ijkl}^*	Componentes do tensor elástico desejado
$\ \cdot \ _{L2}$	Norma L2
E	Módulo elástico
E_x	Módulo de elasticidade na direção x
E_y	Módulo de elasticidade na direção y
G_{xy}	Módulo de cisalhamento
ν_{xy}	Coefficiente de Poisson
\mathcal{F}	Função qualquer
\mathbf{x}	Vetor posição de coordenadas macroscópicas
\mathbf{y}	Vetor posição de coordenadas microscópicas
\mathbf{N}	Matriz diagonal arbitrária de valores inteiros
\mathbf{Y}	Vetor dimensão da célula base
σ_{ij}	Componentes do tensor tensão
e_{kl}	Componentes do tensor deformação
δ	Parâmetro da relação entre as coordenadas macroscópicas e microscópicas

s	Contorno do conjunto v
v	Conjunto aberto pertencente a Y que representa o vazio
∂	Derivada parcial
Ψ	Parte sólida da célula
Ω	Domínio
\mathbf{u}	Deslocamento
\mathbf{v}	Deslocamento virtual
\mathbf{p}	Trações na fronteira
\mathbf{t}	Trações no contorno da peça
χ	Campo de deslocamento no interior da célula unitária.
Ψ	Campo de deslocamento no interior da célula unitária.
$\varepsilon(u)$	Deformação linearizada
U	Campo de deslocamentos
V	Volume
η_i	Notação simplificada para o termo χ_i^{11}
Λ_i	Notação simplificada para o termo χ_i^{22}
Θ_i	Notação simplificada para o termo χ_i^{12}
$g(\mathbf{x})$	Restrição de desigualdade
$h(\mathbf{x})$	Restrição de igualdade
L	Função lagrangiana

λ	Multiplicadores de Lagrange
β	Multiplicadores de Kuhn-Tucker
Ω^{mat}	Domínio que contém material
ρ	Vetor de pseudo densidades
p	Expoente da parametrização SIMP
\mathbf{K}_e	Rigidez efetiva do elemento
\mathbf{B}	Matriz de derivadas das funções de interpolação
ρ_{min}	Densidade mínima
w_j	Função peso
R_{max}	Raio máximo de vizinhança
V_f	Fração de volume
β_e	Fator de correção das densidades
\mathbf{H}_e	Matriz de localização do elemento
Φ	Combinação linear das componentes do tensor constitutivo
ηr	Fator estabilizador

Sumário

INTRODUÇÃO	25
1 PROPRIEDADES ÓSSEAS	35
1.1 Propriedades Mecânicas do Osso Trabecular	37
2 HOMOGENEIZAÇÃO	41
2.0.1 Expansão Assintótica	41
2.1 Homogeneização de um Problema de Elasticidade	43
2.1.1 Coeficientes Homogeneizados	47
3 OTIMIZAÇÃO	53
3.1 Ponto Regular	54
3.2 Multiplicadores de Lagrange	54
3.3 Condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)	55
4 OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA	59
4.1 Histórico	60
4.2 Parametrização Material	62
4.3 Problemas Relacionados à Otimização Topológica	65
4.4 Filtros	66
4.4.1 Filtro de Vizinhança Espacial	67
4.4.2 Procedimento Computacional	68
5 MICROESTRUTURAS OSTEOCOMPATÍVEIS	71
5.1 Critério de Ótimo	72
5.2 Análise de Sensibilidades	75
5.3 Sensibilidade da Função Objetivo	76
5.3.1 Derivada dos Coeficientes Homogeneizados	76
5.3.2 Sensibilidade da Restrição	80
5.3.3 Verificação da Sensibilidade	81

6	RESULTADOS	83
6.1	Verificação da Homogeneização	83
6.2	Extremização de Componentes do Tensor Elástico	86
6.3	Obtenção de um Tensor Específico	87
6.4	Obtenção de Microestruturas Osteocompatíveis	92
	CONCLUSÃO	103
6.5	Sugestões Para Trabalhos Futuros	104
	Referências	105

INTRODUÇÃO

A osteoartrite (artrose) é um processo degenerativo da cartilagem e é uma das patologias mais comuns na população adulta. Esta patologia resulta de um processo anormal entre a destruição cartilaginosa e a reparação da mesma, onde entende-se por cartilagem articular, um tipo especial de tecido que reveste a extremidade de dois ossos justapostos (unidos) e que possuem algum grau de movimentação relativo (como no caso de joelhos, tornozelos, dedos, quadril, etc. A figura 1 ilustra a articulação fêmur-quadril saudável (esquerda) e com osteoartrose (direita).

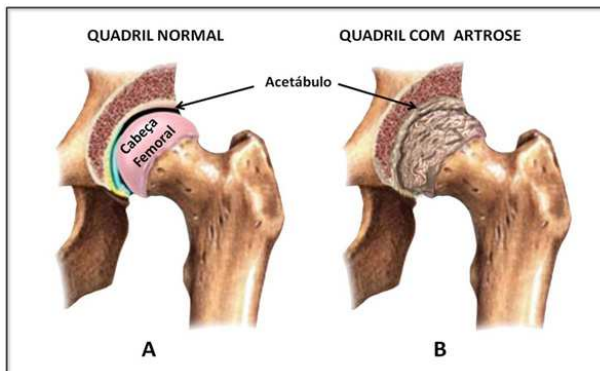


Figura 1: Quadril normal (esquerda) e quadril com artrose (direita).

Fonte: (GOMES, 2014).

Um dos sintomas mais comuns na osteoartrite é a dor, mas em casos mais graves pode ocorrer a perda de mobilidade. Então nestes casos, deve-se substituir a articulação por uma prótese, que irá funcionar como mecanismo da articulação. A prótese deve ser corretamente

fixada nos ossos que compõem o conjunto articulado, para evitar complicações.

Um exemplo de cirurgia para colocação de próteses em substituição da articulação natural é a artroplastia, que consiste na substituição da articulação que liga o fêmur com o quadril, ilustrada na figura 2. As primeiras artroplastias foram realizadas no ano de 1938 (LOURES, 2012). Desde então, o avanço em materiais e técnicas cirúrgicas tem sido constante.

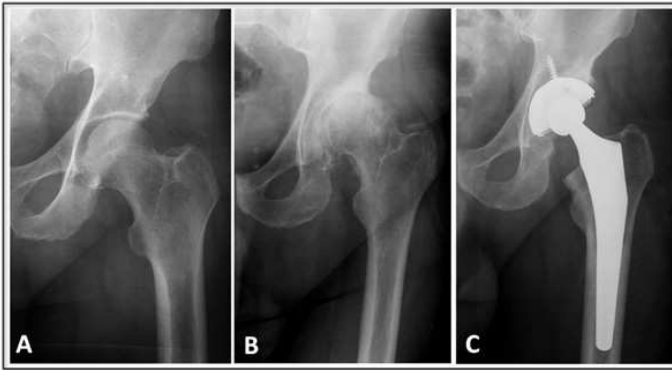


Figura 2: (A) Radiografia de um quadril normal. (B) Quadril com artrose. (C) Radiografia após a artroplastia.

Fonte: (GOMES, 2014).

Atualmente, as técnicas mais utilizadas são divididas em implantes cimentados e implantes não cimentados, onde os primeiros são fixados com um polímero acrílico conhecido como cimento ósseo. Já os implantes não cimentados são produzidos geralmente com titânio, ou ligas de titânio, que são biocompatíveis, ou seja não sofrem rejeição do corpo humano. Segundo Hatem (2014), nestes casos, a prótese fixa-se através do crescimento ósseo pelas porosidades do material. Como este crescimento ósseo demora algumas semanas para se completar, a fixação inicial é feita com parafusos, como mostra a Figura 2.

Para uma boa adaptação ao implante é necessário que se tenha cuidado com a rigidez da prótese, pois o ideal é que o osso e o implante se deformem similarmente. Quando o osso sofre esforço mecânico ocorre hipertrofia (acumulação em excesso de osso no entorno da prótese), e na ausência do esforço, ocorre atrofia (retirada de material ósseo no entorno da prótese) (DUARTE; ALBERTI, 2013), ou seja, quando existe uma diferença significativa no comportamento material da prótese e do osso, ocorre uma redistribuição na região de contato, o que nem sempre é desejável.

As ligas de titânio têm propriedades diferentes às do meio ósseo, pois o titânio é isotrópico e possui rigidez muito maior do que a do osso. Uma forma de obter uma prótese de titânio com propriedades mecânicas específicas é modificar a distribuição de titânio (material base) em um nível microscópico, com o objetivo de modificar o arranjo microestrutural. Embora este procedimento possa ser feito por tentativa e erro, verifica-se que não é viável do ponto de vista econômico e médico.

Assim, este trabalho propõe a análise do projeto da microestrutura de titânio utilizando duas ferramentas bem estabelecidas na literatura: a otimização topológica de meios contínuos e o método da homogeneização por expansão assintótica.

Otimização Topológica de Microestruturas

Segundo Mendonça (2005), um material composto é um conjunto de dois ou mais materiais diferentes, que são combinados em escala macroscópica e agem como uma unidade, com o objetivo de obter um conjunto de propriedades que os componentes individuais não apresentam.

Já um material poroso, é um material contendo espaços vazios ou preenchidos por fluidos, sendo uma classe particular de material composto. Na natureza, pode-se encontrar vários tipos de materiais porosos, como por exemplo madeira, ossos, cortiça, rochas e etc. O

meio poroso tem sido um alvo de pesquisa muito atual, pois o projeto de materiais porosos permite melhorar algumas propriedades como, por exemplo, a rigidez, a resistência mecânica e a resistência à corrosão, entre outras (CARDOSO; FONSECA, 2003). Bendsøe e Sigmund (1999) mostram a influência da densidade/porosidade de um material no módulo elástico efetivo (figura 3), onde fica claro que quanto menor a densidade, menor o módulo elástico efetivo.

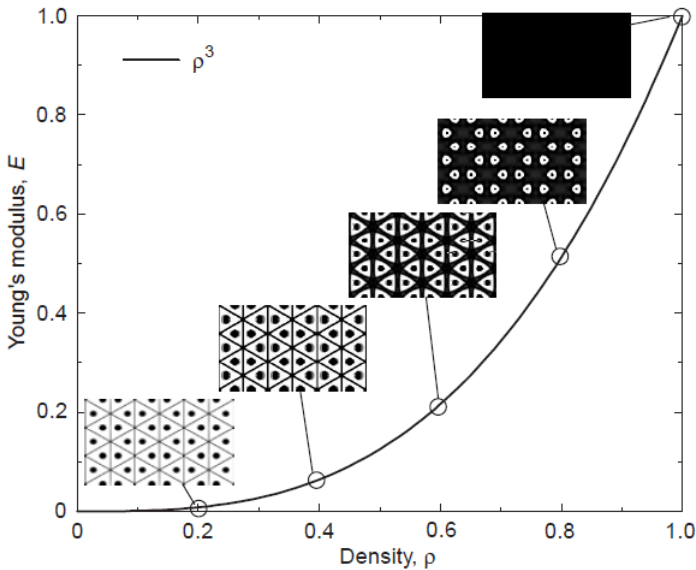


Figura 3: Microestruturas com coeficiente de Poisson de 1/3.

Fonte: (BENDSØE; SIGMUND, 1999).

O material poroso tem sido foco de vários avanços na área da medicina regenerativa, onde estão substituindo enxertos ósseos naturais (que possuem problemas como rejeição e falta de doador) por suportes porosos de titânio (FONTES, 2010). Estes suportes devem prover características mecânicas semelhantes ao meio ósseo, e porosidade suficiente para a migração do tecido ósseo (HOLLISTER; KIKUCHI; LIN,

2003). Muitos trabalhos apresentam sugestões para o desenvolvimento desses suportes, como por exemplo Yaszemski *et al* (1995) que demonstram que os suportes devem ter uma rigidez compatível com o tecido ósseo, Cleynenbreugel *et al* (2002) que estudam a alteração do material para que a rigidez axial da prótese coincida com a rigidez do osso trabecular e Hollister *et al* (2002), que utilizam a homogeneização para calcular a relação entre o diâmetro dos poros de um suporte e a sua rigidez efetiva.

Assim surge a seguinte questão: dado um material, e dadas as propriedades desejadas para uma estrutura, qual será a melhor distribuição deste material, para que as propriedades desejadas sejam alcançadas? Esta resposta pode ser obtida utilizando os métodos de otimização e de homogeneização, uma vez que a otimização topológica de meios contínuos, difundida por Bendsoe e Kikuchi (1988), é utilizada para definir a distribuição ótima de material, com o objetivo de satisfazer uma função associada as propriedades efetivas do meio poroso, e a homogeneização é utilizada para calcular estas propriedades efetivas.

Hollister *et al* (2003) utilizou estas duas ferramentas para encontrar um suporte ósseo com uma arquitetura que oferece propriedades elásticas próximas às do osso. Matematicamente, um meio para encontrar a distribuição de material que ofereça as propriedades desejadas é minimizar a diferença entre os coeficientes elásticos da estrutura otimizada e os coeficientes elásticos da estrutura desejada (problema inverso). A função objetivo utilizada por Hollister *et al* (2003) foi

$$F = \| C_{ijkl}^H - C_{ijkl}^* \|_{L_2}, \quad (1)$$

onde C^* são as componentes do tensor constitutivo elástico desejado e C^H são as componentes do tensor constitutivo elástico de propriedades efetivas do meio poroso. Assim suportes para alguns tipos de ossos foram encontrados, como mostra a figura 4.

O uso conjunto de otimização topológica e homogeneização para a solução de problemas inversos associados à determinação de

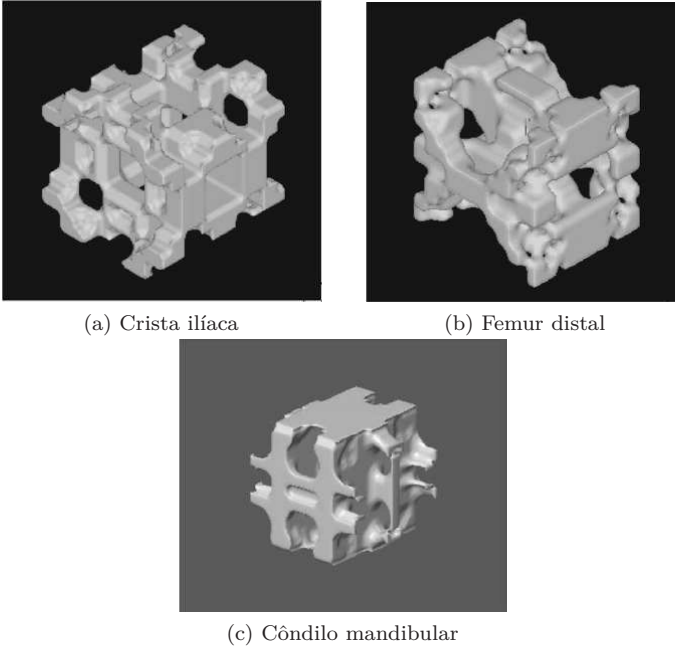


Figura 4: Microestruturas otimizadas para diferentes tipos de ossos

Fonte: (HOLLISTER; KIKUCHI; LIN, 2003).

microestruturas ótimas foi inicialmente proposto por Sigmund (1994). A partir de então, vários pesquisadores obtiveram resultados interessantes nesta área. Entre eles podemos citar o trabalho de Sigmund e Torquato (1997) onde são obtidas microestruturas de materiais com coeficientes térmicos negativos ou iguais a zero, Sigmund e Gibiansky (2000) onde propriedades extremas são obtidas para valores restritos de volume específico (quantidade de material base), e Yin e Yang (2001), onde são obtidas microestruturas associadas a propriedades prescritas. Guth (2012) utiliza estas técnicas para trabalhar com materiais constituídos de células treliçadas, obtendo a melhor distribuição das barras da célula unitária para que se possa maximizar propriedades como módulo de cisalhamento, módulo volumétrico, coeficiente de Poisson e condutividade térmica (figura 5).

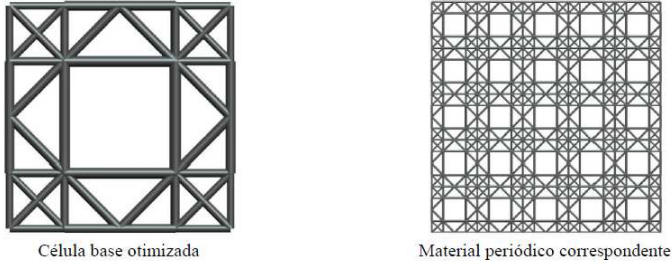


Figura 5: Maximização da condutividade térmica, utilizando apenas áreas como variáveis de projeto e aplicando restrição de isotropia no tensor térmico.

Fonte: (GUTH, 2012).

Nas aplicações da área biomédica, deve-se ter cuidado com o material de fabricação. Assim, cada vez mais surgem estudos sobre o desenvolvimento de novas ligas metálicas para aplicações biomédicas, onde procura-se fornecer materiais estruturais com excelente compatibilidade biológica química e mecânica. Um material muito utilizado para a fabricação de próteses e suportes ósseos é o titânio.

Segundo Niinomi (2008) e Abdel-Hady e Niinomi (2013), elementos como o Nióbio(Nb), o Tântalo(Ta) e o Zircônio(Zr) são adequados para utilização em ligas de titânio para uso biomédico, pois estas ligas possuem baixa rigidez (que é desejado no caso de implantes) além de serem não tóxicas e antialérgicas. Porém, mesmo as ligas com baixa rigidez, ainda possuem uma rigidez maior que o meio ósseo. Assim, um meio de diminuir a rigidez das ligas é inserindo porosidade não relacionada por um projeto microestrutural, como mostra a Figura 6. Deve-se salientar que embora interessante, esta abordagem não permite o projeto de materiais com propriedades anisotrópicas, como é o caso da maioria dos ossos.

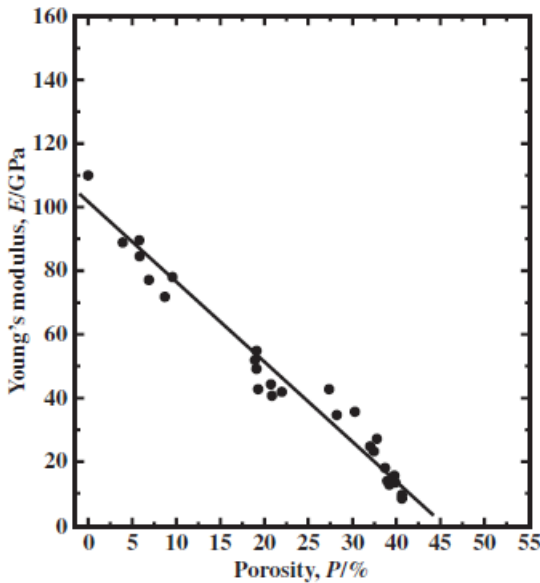


Figura 6: Relação entre o módulo elástico (E) e a porosidade do titânio.

Fonte: (NINOMI, 2008).

Organização do Trabalho

O capítulo 1 consiste em uma revisão sobre o meio ósseo e as suas propriedades. Neste capítulo, são apresentadas as diferenças entre os tipos de osso e os fatores que influenciam as propriedades.

O capítulo 2 é dedicado ao método de homogeneização por expansão assintótica, onde é mostrada a dedução dos coeficientes homogeneizados de um tensor constitutivo, baseado em uma pequena parte repetitiva do material, chamada de célula unitária.

O capítulo 3 aborda o conceito de otimização em geral, ou seja, o procedimento matemático que busca o valor extremo de um funcional.

O capítulo 4 apresenta rapidamente o conceito de otimização

estrutural, e depois se aprofunda no método de otimização topológica.

O capítulo 5 define a proposta do trabalho em questão, trazendo o problema a ser otimizado e alguns conceitos necessários para a solução do problema como, por exemplo, o critério de ótimo e a análise de sensibilidade, onde as derivadas das funções são deduzidas analiticamente, para poder ser implementadas no algoritmo de otimização.

O capítulo 6 apresenta os resultados de várias simulações numéricas. Foram realizadas simulações para a verificação do algoritmo de homogeneização, para a validação do algoritmo de otimização, e enfim foram feitas várias simulações para a solução do problema proposto.

Finalmente o capítulo 7 traz as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

1 PROPRIEDADES ÓSSEAS

O osso é um órgão resistente e rígido, que tem por função mecânica proteger os órgãos internos, dar suporte aos músculos, sustentação do corpo, entre outras. O osso também serve como reservatório de minerais essenciais ao corpo humano (ROCHA, 2012).

O comportamento ósseo é muito interessante, pois ele tem a capacidade de remodelação, ou seja, o osso pode mudar a sua microestrutura e as suas propriedades de acordo com a excitação mecânica. O osso renova-se continuamente ao longo da vida, e tem a capacidade de se auto-regenerar quando fraturado (TORMENA, 2009).

O osso é formado pelas seguintes componentes:

- Medula óssea: preenche a cavidade medular e os espaços trabeculares. Ela é responsável, também, pela produção de células sanguíneas;
- Perióstio: camada que envolve o osso;
- Endóstio: tecido conjuntivo que reveste internamente o osso;
- Cartilagem articular: reveste as articulações;
- Tecido ósseo: é formado por três células ósseas (osteoblastos, osteoclastos e osteócitos) e também pela matriz calcificada que é formada por fibras de colágeno e cristais de hidroxiapatita (que é um mineral formado basicamente por fosfato de cálcio). O tecido ósseo também é o responsável pelas propriedades mecânicas do osso.

Um osso também pode ser classificado de acordo com a sua porosidade:

- Osso cortical: é formado por lâminas ósseas muito próximas entre si, organizadas paralelamente, tornando este tipo de osso uma substância dura e compacta. Ele se localiza na parte externa do osso e sua porosidade varia entre 5% e 20%, como mostra a figura 7.

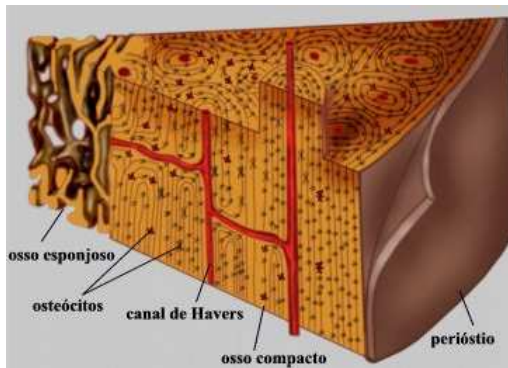


Figura 7: Estrutura do osso cortical.

Fonte: <http://yannaspinola.blogspot.com.br/>.

- Osso trabecular (osso esponjoso): é formado por lâminas ósseas (trabéculas) irregularmente dispostas e com espaços entre si. Geralmente se localiza na parte interna dos ossos e sua porosidade varia entre 30% e 90%, como mostra a Figura 8.

Assim o osso é formado pela camada externa de osso cortical e pela camada interna de osso trabecular (Figura 9).

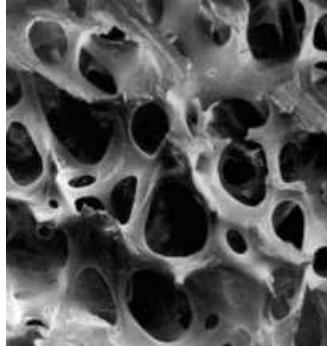


Figura 8: Estrutura do osso trabecular.

Fonte: (TORMENA, 2009).

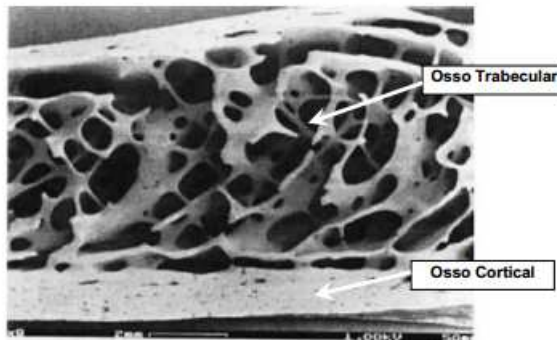


Figura 9: Seção do osso mostrando osso trabecular e cortical.

Fonte: (DOBLARÉ; GARCÍA; GÓMEZ, 2004).

1.1 Propriedades Mecânicas do Osso Trabecular

As propriedades materiais do osso trabecular são muito importantes para caracterizar uma série de patologias ósseas e também para analisar o remodelamento ósseo para a aplicações de implantes. O osso trabecular está mais sujeito a sofrer doenças do que o osso cortical,

portanto o estudo das suas propriedades é de grande utilidade no desenvolvimento de processos de cura (RHO; SPEARING; P.ZIOUPOS, 1998).

No passado acreditava-se que uma trabécula unitária, um ósteon e uma fina casca do osso cortical possuíam as mesmas propriedades mecânicas que grandes amostras de osso cortical, independente do tipo ou tamanho (WOLFF, 1892). Choi *et al* (1990) encontraram o módulo de elasticidade de micro amostras de osso cortical (5,4 GPa), com um valor consideravelmente menor do que o módulo de elasticidade encontrado por outros autores em grandes amostras de osso (17.1 GPa). Essa discrepância não é diferente em amostras de osso trabecular, pois existem variáveis que influenciam as propriedades do osso trabecular:

- A porosidade é o parâmetro que mais tem influência na nas propriedades mecânicas;
- A orientação das trabéculas;
- As propriedades da trabécula individual, embora esta variável tem uma menor influência em comparação com as outras duas.

Assim, com uma revisão bibliográfica sobre as propriedades de ossos, encontram-se valores na faixa de 1 a 20 GPa, como mostra a Tabela 1.

Pode-se perceber pela Tabela 1 que a variação das propriedades é muito grande. Vale lembrar também que o osso é um material orgânico vivo, e que existe muita variação de acordo com as pessoas e a idade. Assim, idealmente, a fabricação de suportes e próteses deve ser personalizadas para cada pessoa/tipo de osso.

Neste trabalho, os dados do meio ósseo utilizados nas simulações foram (REILLY; BURSTEIN, 1975), (VANVBUSKIRK; ASHMAN, 1981)

- Módulo de elasticidade na direção x (E_x): 11,5 GPa ,

Tabela 1: Módulos de elasticidade do osso trabecular encontrados na literatura.

Fonte	Módulo de elasticidade (GPa)
Wolff (1892)	17 – 20
Runkle e Pugh (1975)	$8,69 \pm 3,17$
Townsend <i>et al</i> (1975)	11,38
Williams e Lewis (1982)	1,30
Ashman e Rho (1988)	$12,7 \pm 2,0$
Ryan e Williams (1989)	$0,76 \pm 0,39$
Hodgskinson <i>et al</i> (1989)	15
Kuhn <i>et al</i> (1989)	3,81
Mente and Lewis (1989)	$7,8 \pm 5,4$
Choi <i>et al</i> (1990)	$5,35 \pm 1,36$
Rho <i>et al</i> (1993)	$10,4 \pm 3,5$
Rho <i>et al</i> (1997)	$19,6 \pm 3,5$

Fonte: (RHO; SPEARING; P.ZIOUPOS, 1998).

- Módulo de elasticidade na direção y (E_y): 11,5 GPa ,
- Módulo de cisalhamento (G_{xy}): 3,3 GPa ,
- Coeficiente de Poisson (ν_{xy}): 0,31

resultando no tensor constitutivo elastico 2D para Estado Plano de Tensão

$$\mathbf{C}^* = \begin{pmatrix} 12,723 & 3,944 & 0,000 \\ 3,944 & 12,723 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 3,3000 \end{pmatrix} GPa,$$

que corresponde a um material ortotrópico. Se o material fosse isotrópico, então o termo cisalhante C_{66}^* deveria assumir um valor igual a $4,389GPa$, ligeiramente maior do que o valor considerado ($3,300GPa$).

2 HOMOGENEIZAÇÃO

O método de homogeneização é utilizado para encontrar as propriedades efetivas de um material composto que apresenta um padrão periódico em sua distribuição de fases materiais. Este método foi desenvolvido por Sanches (1980) na década de 70 em paralelo com Benssousan *et al* (1978) e Cioranescu e Paulin (1979). A partir de então vários outros pesquisadores foram desenvolvendo e melhorando o método, como Léné e Leguillon (1982) que combinaram a técnica matemática com o método de elementos finitos.

O método de homogeneização, parte do pressuposto de que um material pode ser descrito por uma célula base (volume representativo), que é uma pequena parte repetitiva do material. Assim, as propriedades efetivas podem ser encontradas pela análise desta única célula. Uma maneira de utilizar a homogeneização é com o uso de expansões assintóticas para substituir as equações diferenciais com coeficientes de oscilação rápidos por equações diferenciais cujos coeficientes são constantes ou com variação lenta (HASSANI; HINTON, 1998).

No que segue, serão apresentados os conceitos e formulações utilizados para a implementação da homogeneização por expansão assintótica utilizada neste trabalho.

2.0.1 Expansão Assintótica

Uma função \mathcal{F} é dita com periodicidade regular se

$$\mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{N}\mathbf{Y}) = \mathcal{F}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ é o vetor posição, $\mathbf{N} = \begin{bmatrix} n_1 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 \\ 0 & 0 & n_3 \end{bmatrix}$ com n_1, n_2, n_3 valores inteiros arbitrários, e $\mathbf{Y} = \langle Y_1 \ Y_2 \ Y_3 \rangle^T$.

Um exemplo é a distribuição das propriedades de um material composto periódico, onde

$$C_{ijkl}(\mathbf{x} + \mathbf{N}\mathbf{Y}) = C_{ijkl}(\mathbf{x}), \quad (2.2)$$

tal que C_{ijkl} pode ser chamado de \mathbf{Y} -periódico, onde \mathbf{Y} contém o padrão de periodicidade.

Se uma função com periodicidade regular for utilizada para descrever um meio heterogêneo, pode-se considerar duas diferentes escalas: uma escala macroscópica, descrita por \mathbf{x} , e uma escala microscópica, descrita pela variável \mathbf{y} (figuras 10 e 11). Se assumirmos que existe uma proporcionalidade entre as dimensões macro e microscópicas, então é possível definir um parâmetro δ , tal que $\delta\mathbf{y} = \mathbf{x}$ ou $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\delta$ (HOLLISTER; KIKUCHI; LIN, 2003).

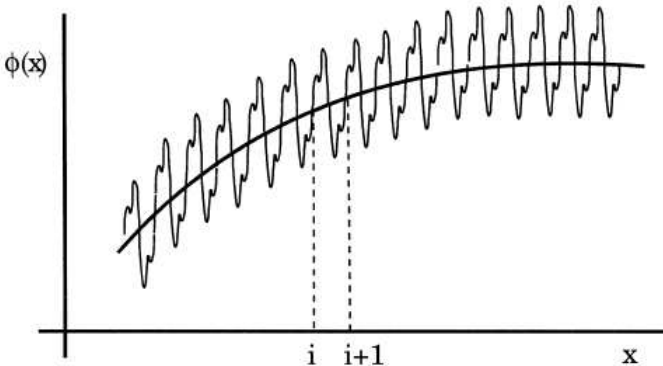


Figura 10: Função com oscilações rápidas.

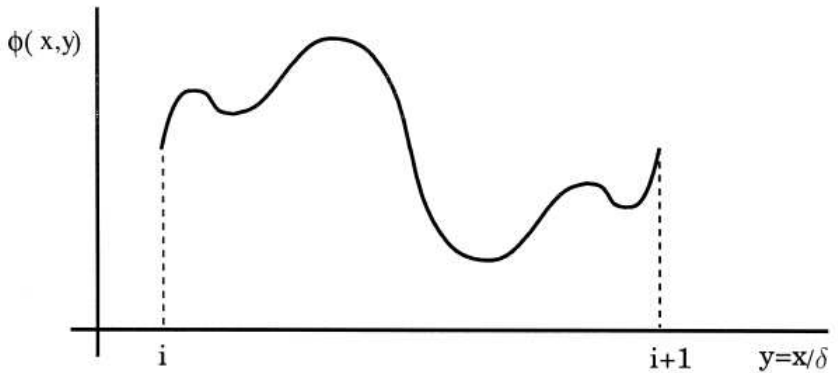


Figura 11: Uma oscilação na escala microscópica.

Fonte: (HASSANI; HINTON, 1998).

2.1 Homogeneização de um Problema de Elasticidade

Para demonstrar as equações necessárias para a homogeneização de um problema de elasticidade, será utilizado o procedimento apresentado por Guedes e Kikuchi (1990) e Hassani e Hinton (1998).

Considera-se um problema geral de elasticidade (representado na figura 12) com um material poroso e com microestrutura periódica, como pode ser visto na figura 13.

Seja \mathbf{Y} um paralelepípedo retangular aberto (veja figura 14) definido por $\mathbf{Y} =]0, Y_1[\times]0, Y_1[\times]0, Y_3[, \in \mathbb{R}^3$, e seja v um conjunto aberto pertencente a \mathbf{Y} com contorno definido por $s = \partial v$ (sendo suave o suficiente). Tem-se que \mathbf{Y} é a parte sólida da célula, ou seja $\mathbf{Y} = Y \setminus v$.

A parte sólida do problema é definida como

$$\Omega^\delta = \{x \in \Omega \mid (y = x/\delta) \in \mathbf{Y}\}, \quad (2.3)$$

e ainda define-se

$$S^\delta = \bigcup_{i=1}^{\text{todas as células}} s_i. \quad (2.4)$$

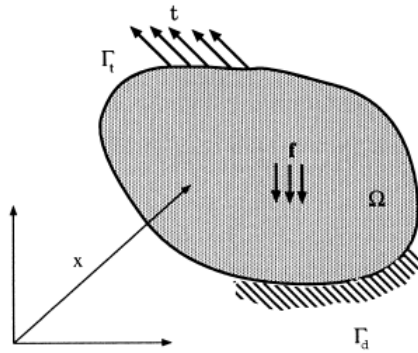


Figura 12: Problema Geral de Elasticidade.

Fonte: (HASSANI; HINTON, 1998).

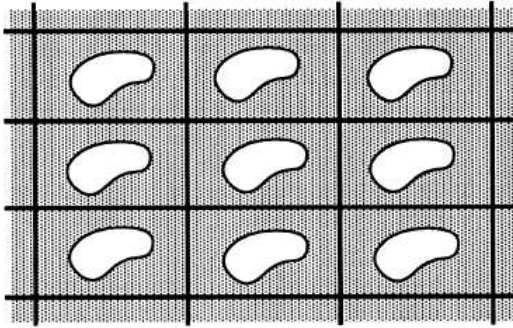


Figura 13: Estrutura Celular.

Fonte: (HASSANI; HINTON, 1998).

Considerando as relações tensão - deformação e deformação - deslocamento

$$\sigma_{ij}^{\delta} = C_{ijkl}^{\delta} e_{kl}^{\delta}, \quad (2.5)$$

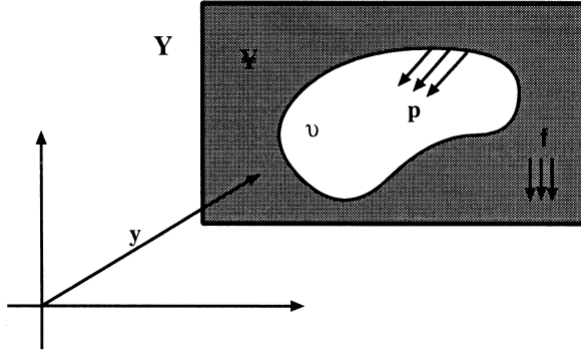


Figura 14: Célula Base.

Fonte: (HASSANI; HINTON, 1998).

$$e_{kl}^{\delta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right), \quad (2.6)$$

aplicando o princípio do trabalho virtual e considerando a simetria $C_{ijkl}^{\delta} = C_{jikl}^{\delta} = C_{ijlk}^{\delta}$ deve-se encontrar $\mathbf{u} \in \mathbf{U}$ tal que

$$\int_{\Omega^{\delta}} C_{ijkl}^{\delta} \frac{\partial u_k^{\delta}}{\partial x_l} \frac{\partial v_i}{x_j} d\Omega = \int_{\Omega^{\delta}} f_i^{\delta} v_i d\Omega + \int_{\Gamma} t_i v_i d\Gamma + \int_{S^{\delta}} p_i^{\delta} v_i dS \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^{\delta}, \quad (2.7)$$

onde C_{ijkl}^{δ} é o tensor constitutivo de propriedades elásticas, $\mathbf{u} \in \mathbf{U}$ é o deslocamento, $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ é o deslocamento virtual, \mathbf{U} é o espaço que contém os deslocamentos que satisfazem o problema, \mathbf{V} é o espaço das funções que assumem valor nulo em Γ_u , \mathbf{p} são as trações na fronteira interna da célula, \mathbf{t} são as trações no contorno da peça e $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ onde Γ_u é a parte do contorno com condições de contorno essenciais e Γ_t é a parte do contorno com condições de contorno naturais.

Utilizando expansão assintótica, assumindo que $\epsilon \rightarrow 0$ e fazendo várias manipulações matemáticas que podem ser encontradas em

Guedes e Kikuchi (1990), Hassani e Hinton (1998) e Cardoso e Fonseca (2003), chega-se na equação de equilíbrio no nível macroscópico

$$\int_{\Omega} \left[\frac{1}{|Y|} \int_{\mathfrak{Y}} C_{ijkl} \left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) dY \right] \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathfrak{Y}} f_i dY \right) v_i(x) d\Omega + \int_{\Gamma} t_i v_i(x) d\Gamma \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^\delta \quad (2.8)$$

e aos seguintes problemas de equilíbrio:

1) Seja χ^{kl} a solução de:

$$\int_{\mathfrak{Y}} C_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY = \int_{\mathfrak{Y}} C_{ijkl} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY, \quad (2.9)$$

2) Seja Ψ a solução de:

$$\int_{\mathfrak{Y}} C_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY = \int_S p_i v_i(y) dY, \quad (2.10)$$

onde χ e Ψ são campos de deslocamento da célula unitária, \mathbf{u}^0 é o campo de deslocamentos na macroescala, \mathbf{u}^1 é o campo de deslocamentos na microescala, com expressão

$$u_i^1 = -\chi_i^{kl}(x, y) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} - \Psi_i(x, y) + \tilde{u}_i^1(x), \quad (2.11)$$

e \tilde{u}_i^1 é uma constante arbitrária da integração em y .

Introduzindo 2.11 em 2.8 obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\frac{1}{|Y|} \int_{\mathfrak{Y}} \left(C_{ijkl} - C_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY \right] \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} \frac{\partial u_i(x)}{\partial x_j} d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathfrak{Y}} C_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} dY \right) \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathfrak{Y}} f_i dY \right) v_i d\Omega + \int_{\Gamma} t_i v_i(x) d\Gamma \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^\delta, \quad (2.12) \end{aligned}$$

e, convencionando,

$$C_{ijkl}^H(x) = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbf{Y}} \left(C_{ijkl} - C_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY \quad (2.13)$$

e

$$\tau_{ij}(x) = \int_{\mathbf{Y}} C_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} dY, \quad (2.14)$$

e

$$b_i(x) = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbf{Y}} f_i dY. \quad (2.15)$$

pode-se escrever a equação 2.12 como

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C_{ijkl}^H \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega &= \int_{\Omega} \tau_{ij}(x) \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} b_i(x) v_i(x) d\Omega + \int_{\Gamma} t_i(x) d\Gamma \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^\delta. \end{aligned} \quad (2.16)$$

A equação 2.16 representa o equilíbrio macroscópico, onde C_{ijkl}^H é o tensor das propriedades homogeneizadas, τ_{ij} são as tensões residuais dentro da célula devido as trações \mathbf{p} , e b_i são as forças de corpo médias.

Como os problemas microscópicos e macroscópicos não estão acoplados, a solução do problema de elasticidade pode ser descrita como:

- (1) Encontre χ e Ψ dentro célula base, solucionando as equações 2.9 e 2.10 considerando a periodicidade;
- (2) Encontre C_{ijkl}^H , τ_{ij} e b_i utilizando as equações 2.13, 2.14 e 2.15;
- (3) Solucione a equação 2.16 no nível macroscópico.

2.1.1 Coeficientes Homogeneizados

Para calcular as equações apresentadas anteriormente, precisa-se de algum método numérico. Neste trabalho será utilizado o método de elementos finitos.

Tem-se que, para um caso bidimensional, os índices do tensor constitutivo homogeneizado podem assumir valores de 1 e 2, ou seja:

$$\mathbf{C}^H = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1112}^H \\ C_{1122}^H & C_{2222}^H & C_{2212}^H \\ C_{1112}^H & C_{2212}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix}$$

porém para simplificar, será assumido que

$$11 \rightarrow 1$$

$$22 \rightarrow 2$$

$$12 \rightarrow 6$$

tal que

$$\mathbf{C}^H = \begin{bmatrix} C_{11}^H & C_{12}^H & C_{16}^H \\ C_{12}^H & C_{22}^H & C_{26}^H \\ C_{16}^H & C_{26}^H & C_{66}^H \end{bmatrix}$$

e, como o tensor é simétrico, apenas os coeficientes C_{11}^H , C_{12}^H , C_{16}^H , C_{22}^H , C_{26}^H e C_{66}^H precisam ser calculados.

Se não existirem forças de corpo, pode-se encontrar os coeficientes homogeneizados utilizando apenas as equações 2.9 e 2.13. Então considerando os somatórios dos índices i, j, p e q , agrupando de forma conveniente, e utilizando a notação simplificada, a equação 2.9 se torna:

$$\begin{aligned} & \int_Y \left[\left(C_{11} \frac{\partial \chi_1^{kl}}{\partial y_1} + C_{16} \frac{\partial \chi_1^{kl}}{\partial y_2} + C_{12} \frac{\partial \chi_2^{kl}}{\partial y_2} + C_{16} \frac{\partial \chi_2^{kl}}{\partial y_1} \right) \frac{\partial v_1(y)}{\partial y_1} + \right. \\ & \quad \left. \left(C_{21} \frac{\partial \chi_1^{kl}}{\partial y_1} + C_{26} \frac{\partial \chi_2^{kl}}{\partial y_1} + C_{22} \frac{\partial \chi_2^{kl}}{\partial y_2} + C_{26} \frac{\partial \chi_1^{kl}}{\partial y_2} \right) \frac{\partial v_2(y)}{\partial y_2} + \right. \\ & \quad \left. \left(C_{16} \frac{\chi_1^{kl}}{\partial y_1} + C_{26} \frac{\chi_2^{kl}}{\partial y_2} + C_{66} \frac{\chi_1^{kl}}{\partial y_2} + C_{66} \frac{\chi_2^{kl}}{\partial y_1} \right) \left(\frac{\partial v_2(y)}{\partial y_1} + \frac{\partial v_1(y)}{\partial y_2} \right) \right] dY = \\ & \int_Y \left[C_{1kl} \frac{\partial v_1(y)}{\partial y_1} + C_{2kl} \frac{\partial v_2(y)}{\partial y_2} + C_{6kl} \left(\frac{\partial v_1(y)}{\partial y_2} + \frac{\partial v_2(y)}{\partial y_1} \right) \right] dY \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^\delta. \end{aligned} \tag{2.17}$$

Agora variando os índices para a equação 2.13, obtêm-se os seguintes coeficientes:

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{11} - C_{11} \frac{\partial \chi_1^{11}}{\partial y_1} - C_{12} \frac{\partial \chi_2^{11}}{\partial y_2} - C_{16} \left(\frac{\partial \chi_1^{11}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{11}}{\partial y_1} \right) \right) dY,$$

$$C_{12}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{12} - C_{11} \frac{\partial \chi_1^{22}}{\partial y_1} - C_{12} \frac{\partial \chi_2^{22}}{\partial y_2} - C_{16} \left(\frac{\partial \chi_1^{22}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{22}}{\partial y_1} \right) \right) dY,$$

$$C_{22}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{22} - C_{21} \frac{\partial \chi_1^{22}}{\partial y_1} - C_{22} \frac{\partial \chi_2^{22}}{\partial y_2} - C_{26} \left(\frac{\partial \chi_1^{22}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{22}}{\partial y_1} \right) \right) dY,$$

$$C_{16}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{16} - C_{11} \frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_1} - C_{12} \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_2} - C_{16} \left(\frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_1} \right) \right) dY,$$

$$C_{26}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{26} - C_{21} \frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_1} - C_{22} \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_2} - C_{26} \left(\frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_1} \right) \right) dY,$$

$$C_{66}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{66} - C_{61} \frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_1} - C_{62} \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_2} - C_{66} \left(\frac{\partial \chi_1^{12}}{\partial y_2} + \frac{\partial \chi_2^{12}}{\partial y_1} \right) \right) dY.$$

Para simplificar ainda mais a notação define-se

$$\chi_i^{11} = \eta_i,$$

$$\chi_i^{22} = \Lambda_i,$$

$$\chi_i^{12} = \Theta_i$$

tal que a equação 2.17 com $k = l = 1$, para o primeiro caso de carregamento, pode ser reescrita como

$$\int_Y \left\{ \frac{\partial v_1}{\partial y_1} \quad \frac{\partial v_2}{\partial y_2} \quad \frac{\partial v_1}{\partial y_2} + \frac{\partial v_2}{\partial y_1} \right\} \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{26} \\ C_{16} & C_{26} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \eta_1}{\partial y_1} \\ \frac{\partial \eta_2}{\partial y_2} \\ \frac{\partial \eta_1}{\partial y_2} + \frac{\partial \eta_2}{\partial y_1} \end{Bmatrix} dY =$$

$$\int_Y \left\{ \frac{\partial v_1}{\partial y_1} \quad \frac{\partial v_2}{\partial y_2} \quad \frac{\partial v_1}{\partial y_2} + \frac{\partial v_2}{\partial y_1} \right\} \begin{Bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{16} \end{Bmatrix} dY \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}^\delta. \quad (2.18)$$

Se denotarmos ε como sendo o operador

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y_2} \\ \frac{\partial}{\partial y_2} & \frac{\partial}{\partial y_1} \end{bmatrix},$$

podemos escrever

$$\varepsilon(\eta) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \eta_1}{\partial y_1} \\ \frac{\partial \eta_2}{\partial y_2} \\ \frac{\partial \eta_1}{\partial y_2} + \frac{\partial \eta_2}{\partial y_1} \end{Bmatrix},$$

$$\varepsilon(\Lambda) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \Lambda_1}{\partial y_1} \\ \frac{\partial \Lambda_2}{\partial y_2} \\ \frac{\partial \Lambda_1}{\partial y_2} + \frac{\partial \Lambda_2}{\partial y_1} \end{Bmatrix}$$

e

$$\varepsilon(\Theta) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \Theta_1}{\partial y_1} \\ \frac{\partial \Theta_2}{\partial y_2} \\ \frac{\partial \Theta_1}{\partial y_2} + \frac{\partial \Theta_2}{\partial y_1} \end{Bmatrix}.$$

Logo as constantes homogeneizadas podem ser escritas como

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{11} - \mathbf{c}_1^T \varepsilon(\eta)) dY, \quad (2.19)$$

$$C_{12}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{12} - \mathbf{c}_1^T \varepsilon(\Lambda)) dY, \quad (2.20)$$

$$C_{22}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{12} - \mathbf{c}_2^T \varepsilon(\Lambda)) dY, \quad (2.21)$$

$$C_{26}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{26} - \mathbf{c}_2^T \varepsilon(\Theta)) dY, \quad (2.22)$$

$$C_{66}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{66} - \mathbf{c}_3^T \varepsilon(\Theta)) dY, \quad (2.23)$$

$$C_{16}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{16} - \mathbf{c}_1^T \varepsilon(\Theta)) dY, \quad (2.24)$$

onde

$$\mathbf{c}_1 = \begin{Bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{16} \end{Bmatrix},$$

$$\mathbf{c}_2 = \begin{Bmatrix} C_{12} \\ C_{22} \\ C_{26} \end{Bmatrix}$$

e

$$\mathbf{c}_3 = \begin{Bmatrix} C_{16} \\ C_{26} \\ C_{66} \end{Bmatrix}.$$

3 OTIMIZAÇÃO

Otimização é um procedimento matemático que busca o valor extremo de um funcional, ao mesmo tempo em que satisfaz um conjunto de restrições (ARORA, 2007). O procedimento de otimização se dá por meio da modificação de um conjunto de parâmetros associados ao projeto, conhecidos como variáveis de projeto. Uma vez formulado, um problema de otimização é descrito da seguinte forma,

$$\begin{array}{ll}
 \text{Min/Max} & f(\mathbf{x}) \\
 \mathbf{x} & \\
 \text{T.q.} & g_j(\mathbf{x}) \leq 0 \quad j = 1..m_g \\
 & h_j(\mathbf{x}) = 0 \quad j = 1..m_h \\
 & \underline{x}_i \leq x_i \leq \bar{x}_i \quad i = 1..nv
 \end{array} \quad (3.1)$$

onde:

\mathbf{x} :	vetor de variáveis de projeto
$f(\mathbf{x})$:	função objetivo que se deseja extremar,
$g_j(\mathbf{x})$:	funções de restrições de desigualdade,
$h_j(\mathbf{x})$:	funções de restrições de igualdade,
\bar{x}_i :	limite superior da i-ésima variável de projeto,
\underline{x}_i :	limite inferior da i-ésima variável de projeto,
m_g	número de restrições de desigualdade,
m_h	número de restrições de igualdade,
nv	número de variáveis de projeto.

Em um problema de otimização com restrições, existem algumas condições que devem ser satisfeitas para que se obtenha o mí-

nimo. Para discutir essas condições, serão abordadas algumas definições como ponto regular, multiplicadores de Lagrange e condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

3.1 Ponto Regular

Considere um problema restrito de minimização de $f(\mathbf{X})$ onde as restrições são dadas por $h_i(\mathbf{X}) = 0$ com $i = 1$ a m_h . Um ponto \mathbf{X}^* que satisfaça as restrições $h_i(\mathbf{X}^*) = 0$ é dito ser um ponto regular da região viável se $f(\mathbf{X}^*)$ é diferenciável e o conjunto dos vetores gradiente das restrições no ponto \mathbf{X}^* é linearmente independente (ARORA, 2007).

Quando restrições de desigualdade também são incluídas no problema, os vetores gradiente das restrições ativas devem ser linearmente independentes.

3.2 Multiplicadores de Lagrange

Os multiplicadores de Lagrange são valores escalares associados a cada restrição. Estes valores dependem das funções de restrição, se as funções mudam, os multiplicadores também mudam (ARORA, 2007).

O conceito dos multiplicadores de Lagrange é bem geral e pode ser encontrado em várias aplicações além da otimização. Os multiplicadores para as restrições, podem ser interpretados como a força requerida para impor a restrição.

Seja um problema com restrições de igualdade

$$\text{Minimize} \quad f(\mathbf{X}) \quad (3.2)$$

$$\text{Sujeito a} \quad h_i(\mathbf{X}) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.3)$$

A função Lagrangiana é definida introduzindo um multiplica-

dor de Lagrange λ_i para cada restrição $h_i(\mathbf{X})$

$$L(x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m) = f(\mathbf{X}) + \lambda_1 h_1(\mathbf{X}) + \dots + \lambda_m h_m(\mathbf{X}).$$

Assim, as condições necessárias para encontrar o extremo de L em pontos regulares são dadas por

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} = \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial h_i}{\partial x_j} = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (3.4)$$

e

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_i} = h_i(\mathbf{X}) = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.5)$$

Note que qualquer ponto regular que não satisfaça as condições 3.4 e 3.5, não podem ser um ponto de mínimo. Entretanto, se um ponto satisfaz as condições, ele não é necessariamente um ponto de mínimo, podendo ser também um ponto de máximo ou de inflexão.

Supondo que as soluções das condições 3.4 e 3.5 são

$$\mathbf{X}^* = \begin{Bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{Bmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\lambda}^* = \begin{Bmatrix} \lambda_1^* \\ \lambda_2^* \\ \vdots \\ \lambda_m^* \end{Bmatrix}, \quad (3.6)$$

então \mathbf{X}^* é um candidato a ponto de mínimo e o vetor $\boldsymbol{\lambda}^*$ oferece informações sobre a sensibilidade do ponto de ótimo em relação a satisfação das restrições (RAO, 2009)

3.3 Condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

A maioria dos problemas de otimização envolvem restrições de desigualdade. Nesses casos pode-se transformar a restrição de desigualdade em restrição de igualdade adicionando uma nova variável y_i

chamada de variável de folga, ou em inglês *slack variable*. (ARORA, 2007).

Quando a variável é igual a zero, temos que a restrição é ativa, e quando a variável é não nula, a restrição é de desigualdade estrita, sendo chamada de restrição inativa.

Como a variável de folga deve ser sempre positiva, utiliza-se y_i^2 . Assim a restrição do tipo

$$g_i(\mathbf{X}) \leq 0, \quad (3.7)$$

se torna

$$g_i(\mathbf{X}) + y_i^2 = 0. \quad (3.8)$$

As condições necessárias para um problema com restrições de igualdade e desigualdade foram primeiramente publicadas de forma simplificada por William Karush em 1939, mas elas se tornaram conhecidas quando apresentadas por Harold W. Kuhn e Albert W. Tucker em 1951. Hoje em dia elas são conhecidas como condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) (ARORA, 2007).

Então, seja um problema de minimização de $f(\mathbf{X})$, sujeito a restrições de igualdade $h_i(\mathbf{X}) = 0$ com $i = 1, \dots, m_h$ e restrições de desigualdade $g_j(\mathbf{X}) \leq 0$ com $j = 1, \dots, m_j$. A função Lagrangiana é dada por

$$L(\mathbf{X}, \lambda, \beta, y) = f(\mathbf{X}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(\mathbf{X}) + \sum_{j=1}^p \beta_j (g_j(\mathbf{X}) + y_j^2) \quad (3.9)$$

onde λ_i são os multiplicadores de Lagrange, β_j são os multiplicadores de Kuhn-Tucker e y_j são as variáveis de folga.

Assim, as condições necessárias para este problema se ele for

regular são

$$\frac{\partial L}{\partial x_l} = \frac{\partial f}{\partial x_l} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial h_i}{\partial x_l} + \sum_{j=1}^p \beta_j \frac{\partial g_j}{\partial x_l} = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_i} = h_i(\mathbf{X}) = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = g_j(\mathbf{X}) + y_j^2 = 0, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y_i} = 2\beta_j y_j = 0, \quad (3.13)$$

$$y_j^2 \geq 0, \quad (3.14)$$

$$\beta_j \geq 0. \quad (3.15)$$

As condições (KKT) servem para verificar a possibilidade de ótimo de um dado ponto e para determinar um ponto candidato a mínimo local.

Algumas informações importantes sobre as condições (KKT) merecem ser destacadas ([ARORA, 2007](#)):

- As condições (KKT) não são aplicáveis em pontos que não são regulares;
- Qualquer ponto regular que não satisfaz as condições (KKT) não pode ser um mínimo local;
- Um ponto que satisfaça as condições (KKT) pode ser restrito ou irrestrito. Ele é irrestrito se não tem restrições de igualdade e as restrições de desigualdade estão inativas. Neste caso ele pode ser um ponto de mínimo, de máximo ou de inflexão.

4 OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA

Quando o funcional e as restrições estão associados a um problema de engenharia que envolva o cálculo de estruturas mecânicas, diz-se que a otimização é do tipo estrutural, e de acordo com o conjunto de variáveis de projeto, pode-se classificar a otimização estrutural como sendo paramétrica, de forma ou topológica, como mostra a figura 15 (MENEGHELLI, 2013):

- Otimização Paramétrica: as variáveis de projeto são parâmetros geométricos da estrutura, como por exemplo, o diâmetro de um eixo, o comprimento de uma viga, o diâmetro de um furo, espessuras e dimensões de uma seção transversal. Ou seja, no caso de otimização paramétrica, a forma e a distribuição de material no projeto não são alteradas, apenas os valores de algumas dimensões.

- Otimização de Forma: as variáveis de projeto são associadas aos contornos da estrutura. Os contornos são gerados com interpolações baseadas nas variáveis de projeto, como por exemplo, interpolação por splines.

- Otimização Topológica: as variáveis de projeto são associadas à distribuição de material em um domínio fixo. Esta abordagem permite mais tipos de aplicações, pois é mais genérica do que as outras. Além de permitir a criação de contornos, possibilita também a inclusão de vazios na estrutura.

Assim, a Otimização Topológica consiste em distribuir material em uma região do espaço previamente definida, com o objetivo de obter o extremo um funcional e de satisfazer as condições de contorno do problema de equilíbrio e as restrições associadas ao problema de

otimização.

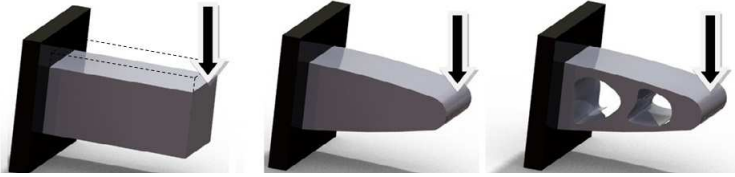


Figura 15: Otimização Paramétrica (esquerda), Otimização de Forma (centro) e Otimização Topológica (direita).

Fonte:(MENEHELLE, 2013).

4.1 Histórico

Diversas referências citam que o primeiro trabalho em Otimização Topológica foi apresentado por Michell (1904) no início do século XX. Após o trabalho de Michell (1904), a otimização topológica se manteve desconhecida por décadas, até que foi retomado por alguns pesquisadores como Cox (1956), Owen (1975) e principalmente por Rozvany e Adidam (1972). Embora estes trabalhos sejam de Otimização Topológica, a abordagem utilizada era baseada em uma malha de treliças, conhecida como universo de barras.

Cheng e Olhoff (1981), apresentaram um estudo na área de otimização topológica de meios contínuos, sobre maximização da rigidez de placas delgadas considerando a espessura como variável de projeto. A partir de então, chegou-se à conclusão de que quanto mais fina a discretização do domínio, maior era o número de reforços obtidos, e isto indica que malha tem influência na solução do problema discretizado. Para reprimir este problema, Cheng e Olhoff (1982) propuseram a utilização de uma parametrização alternativa, que ao invés de considerar diretamente as espessuras como variáveis de projeto, utilizaram os parâmetros geométricos de reforços com geometria pré-estabelecida. Esta abordagem foi generalizada para problemas de elasticidade por

Kohn e Strang (1986a, 1986b) e posteriormente utilizada por Bendsøe e Kikuchi (1988), onde a parametrização não era aplicada diretamente sobre a quantidade de material, mas sim sobre propriedades geométricas de uma microestrutura periódica. E então as propriedades efetivas do meio eram obtidas por meio do método de Homogeneização, (HASSANI; HINTON, 1998; SILVA et al., 1999).

Porém, outra complicação surgia com a solução do problema de distribuição de material em um domínio contínuo, a solução era uma material poroso de difícil interpretação e fabricação. Então Bendsøe (1989) desenvolveu uma parametrização de material SIMP (*Simple Isotropic Material with Penalization*). Bendsøe e Sigmund (1999) apresentam uma boa revisão e sobre a parametrização SIMP.

Em outros tipos de estudos sobre otimização topológica, destacam-se os trabalhos de Ambrósio e Buttazzo (1993), que propuseram uma restrição do perímetro como forma de restringir o espaço de solução e garantir a existência de um ponto de ótimo. Harber, Jog e Bendsøe (1996) implementaram esta abordagem para parametrizações contínuas. Beckers (1997) apresenta uma implementação baseada em variáveis discretas, com bons resultados mas de difícil generalização. Trabalhos relevantes também têm sido desenvolvidos por pesquisadores atuais, pois novidades nesta área surgem frequentemente.

Uma vez estabelecida a base matemática para a correta parametrização de material no domínio, outras contribuições relevantes surgem com os trabalhos de Sigmund (1994, 1997), que propõem filtros para suavizar a distribuição espacial das pseudo densidades, eliminando assim o fenômeno da instabilidade de tabuleiro ou *checkerboard*. Uma revisão sobre os métodos de filtragem é apresentada por Sigmund em (2007).

Com o desenvolvimento de computadores mais potentes, cada vez mais têm crescido as áreas de aplicações de otimização topológica. Atualmente, ela é muito utilizada para a solução de problemas de engenharia mecânica, civil, aeroespacial, biomedicina entre outras.

4.2 Parametrização Material

A Otimização Topológica de meios contínuos é formulada por meio da distribuição de um ou mais materiais em um domínio fixo, de modo a maximizar ou minimizar um funcional sujeito a restrições (BENDSØE; SIGMUND, 2003).

Tendo o domínio (Ω) definido, o objetivo é encontrar o domínio que efetivamente contém material (Ω^{mat}). Em se tratando da distribuição de um material isotrópico, o desejável seria utilizar a parametrização

$$\mathbf{C}(X) = \varphi(X)\mathbf{C}^0, \quad (4.1)$$

$$\text{com } \varphi(X) = \begin{cases} 1 & X \in \Omega^{mat} \\ 0 & X \in \Omega/\Omega^{mat} \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\int_{\Omega} \varphi(X)d\Omega = Vol(\Omega^{mat}) \leq V,$$

onde \mathbf{C}^0 é o tensor constitutivo que representa as propriedades de um material base isotrópico, \mathbf{C} é o tensor constitutivo efetivo e V é o volume limite de material. Porém, esta abordagem é de natureza discreta, ou seja, não permite valores intermediários, somente presença ou ausência de material. Assim, esta parametrização faz com que o problema de otimização seja dependente da discretização, além de dificultar a solução por métodos baseados em gradientes.

Bendsøe e Kikuchi (1988), propuseram uma solução para essa dependência. Eles formularam uma parametrização que descreve a variação espacial de um material anisotrópico periódico, onde as propriedades em cada ponto do domínio são descritas por parâmetros geométricos de uma célula unitária, e as propriedades efetivas do material são obtidas utilizando-se o Método da Homogeneização (HASSANI; HINTON, 1998). Porém, a distribuição de material com esta parametrização é de difícil Fabricação.

Para evitar o uso de uma relaxação que utilize material anisotrópico, pode-se utilizar a relaxação do tipo SIMP (*Simple Isotropic Material with Penalization*), que tem como objetivo relaxar a parametrização discreta proposta na equação 4.2, ao mesmo tempo em que permite a utilização de materiais isotrópicos. A parametrização SIMP tem a forma

$$\mathbf{C} = \rho^p \mathbf{C}^0 \quad (4.3)$$

com

$$\int_{\Omega} \rho d\Omega \leq V, \quad 0 \leq \rho \leq 1$$

onde ρ é a pseudo densidade em cada ponto de Ω , \mathbf{E}^0 é o tensor constitutivo que representa as propriedades de um material base isotrópico, \mathbf{E} é o tensor constitutivo efetivo e V é o volume disponível de material. Não é de interesse do problema, encontrar densidades intermediárias, então o expoente $p > 1$ tem como objetivo penalizar o aparecimento de pseudo densidades intermediárias.

A relação entre o módulo de elasticidade e a pseudo densidade com a variação de p , pode ser observada na Figura 16, onde mostra-se que para $p = 1$ obtém-se uma relação linear entre a rigidez efetiva do meio e a pseudo densidade e para $p \rightarrow \infty$ a densidade volta a ser discreta, como na parametrização da equação 4.2. No entanto, no processo de otimização podemos obter regiões com pseudo densidades intermediárias, conhecidas como escalas de cinza ou *gray-scales*, que podem ser amenizadas utilizando-se um valor adequado de p .

Neste trabalho, o domínio é discretizado por elementos finitos. Assim, assume-se que cada elemento é constituído de um material cuja

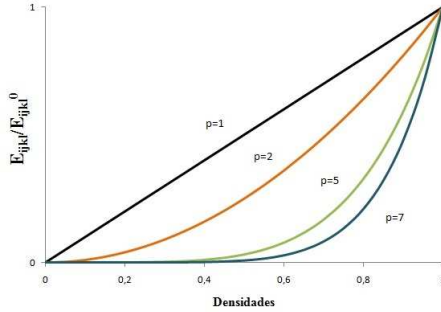


Figura 16: Curvas do modelo SIMP

Fonte: (MENEGHELLI, 2013).

propriedade é $\mathbf{E} = \rho_e^p \mathbf{E}^0$, e a matriz rigidez local deste elemento será

$$\mathbf{K}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} d\Omega_e = \rho_e^p \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{E}^0 \mathbf{B} d\Omega_e = \rho_e^p \mathbf{K}_e^0, \quad (4.4)$$

onde \mathbf{K}_e representa a rigidez efetiva do elemento, \mathbf{B} é a matriz de derivadas das funções de interpolação e \mathbf{K}_e^0 é matriz de rigidez sem levar em consideração a pseudo densidade. A rigidez global da malha de elementos finitos, \mathbf{K} , é obtida por um operador de sobreposição local-global, na forma

$$\mathbf{K} = \bigoplus_{e=1}^{nelems} \mathbf{K}_e \quad (4.5)$$

onde $nelems$ é o número de elementos finitos na malha.

De modo a evitar problemas numéricos associados a uma matriz de rigidez global singular, utiliza-se um valor de pseudo densidade mínimo maior do que zero, tal que $0 < \rho_{min} \leq \rho_e \leq 1$.

4.3 Problemas Relacionados à Otimização Topológica

O método de Otimização Topológica pode apresentar algumas dificuldades durante o processo, entre elas:

- Mínimos locais: Em se tratando de problemas de otimização, eles podem ser não convexos, ou seja, ter vários mínimos locais. E quando a otimização envolve problemas de engenharia, isto é muito comum, ou seja, o problema pode encontrar vários resultados diferentes. Assim não se pode garantir que o ponto de mínimo fornecido pela solução seja o melhor ponto, isto é, o de menor valor da função objetivo.
- A dependência da malha: Mesmo que a parametrização SIMP permita a formulação do problema, ela não evita a dependência do resultado com o refino da malha. Isto se deve ao fato de estarmos distribuindo um material isotrópico, somente materiais anisotrópicos permitem atingir o ótimo. Com isto, à medida que se refina a malha, o número de reforços é aumentado, tendendo para uma microestrutura anisotrópica (MENEHELLE, 2013).
- A instabilidade do tabuleiro: Às vezes, a distribuição de material no domínio produz regiões onde a pseudo densidade dos elementos vizinhos varia de forma periódica. A região então fica similar a um tabuleiro de xadrez, alternando entre espaços vazios e espaços sólidos que não correspondem à distribuição ótima de material. Este fenômeno é conhecido como *checkerboard*. Os resultados do trabalho de Díaz e Sigmund (1995) mostram que esse fenômeno surge devido a um modelamento inadequado do MEF e, nas regiões onde isso acontece, a rigidez aparenta artificialmente ter um valor elevado quando comparado com outra região da estrutura que possua o mesmo volume mas com uma distribuição homogênea.

4.4 Filtros

Com o objetivo de suavizar a distribuição de material, aplicam-se operadores matemáticos sobre uma função não regular. Estes operadores são chamados de filtros e evitam instabilidades numéricas, como o *checkerboards*, assim como permitem um controle sobre a topologia obtida (CARDOSO; FONSECA, 1999).

Basicamente, os filtros podem ser classificados em 3 categorias, de acordo com (SIGMUND, 2007):

1. Filtros de vizinhança espacial: Nestes filtros uma grandeza associada a um elemento finito é obtida por meio de uma média ponderada das grandezas dos elementos vizinhos (MENEGHELLI, 2013). A vizinhança é obtida por meio da definição de um raio em torno do elemento. Geralmente esses filtros são aplicados sobre as sensibilidades ou pseudo densidades dos elementos, embora outras grandezas também possam ser filtradas (CARDOSO; FONSECA, 1999).
2. Métodos restritivos: Controle de perímetro proposto por Ambrosio e Buttazzo (1993) e Haber *et al* (1996) e métodos de controle de gradiente local e global (PETERSON; SIGMUND, 1998).
3. Outros métodos como *Wavelet Parametrization* (KIM; YOON, 2000) e o Método de *Level Set* (ALLAIRE; JOUVE; TOADER, 2004).

Os filtros citados de vizinhança espacial são os mais utilizados devido a facilidade de implementação e eficiência. Os métodos restritivos são mais difíceis de aplicar devido à dependência da geometria e das condições do problema. Existem ainda métodos híbridos que combinam as categorias 1 e 2 como discutido em (CARDOSO, 2000).

Embora as primeiras implementações de Otimização Topológica utilizassem como variáveis de projeto as pseudo densidades de cada

elemento, tem-se observado um aumento no uso de variáveis nodais, que são posteriormente aplicadas aos centróides dos elementos. Porém os métodos discutidos aqui podem ser implementados das duas formas.

4.4.1 Filtro de Vizinhança Espacial

Filtros de Vizinhança Espacial modificam as pseudo densidades dos elementos (e conseqüentemente a sua rigidez), através da aplicação de um operador que depende dos valores de pseudo densidades presentes em uma vizinhança em torno do elemento. Uma discussão importante é a conservação do volume contido na vizinhança antes e depois da atuação do filtro (SIGMUND, 2007).

O filtro espacial de densidades introduzido por Bruns e Tortorelli (2001) calcula a pseudo densidade de um elemento e por meio de uma média ponderada, na forma:

$$\rho_e = \frac{\sum_{j=1}^{nev} w_j v_j \rho_j}{\sum_{j=1}^{nev} w_j v_j} \quad (4.6)$$

sendo j um elemento vizinho, v_j seu volume, w_j uma função peso que tem como objetivo ponderar a influência dos vizinhos em função de sua distância e nev é o número de vizinhos ao elemento. A abordagem mais utilizada é a linear, com a forma

$$w_j = \frac{R_{max} - R_{ej}}{R_{max}}, \quad (4.7)$$

onde R_{max} é o raio de filtragem previamente estipulado para abranger uma determinada vizinhança, R_{ej} é a distância entre o elemento central e um determinado vizinho j . Desta forma, verifica-se que o raio de abrangência R_{max} é o parâmetro de controle do filtro e a função w_j será zero se o vizinho estiver além da abrangência do raio. A suavização da distribuição das variáveis no domínio será proporcional à magnitude do raio.

4.4.2 Procedimento Computacional

A implementação computacional de um problema de Otimização Topológica consiste na realização sequencial de diversas etapas (MENEGBELLI, 2013).

Primeiramente define-se o domínio de projeto, sua discretização e a imposição das condições de contorno do problema de equilíbrio, na forma:

- Escolher adequadamente o domínio de referência que permita a definição de carregamento e condições de contorno;
- Definir as regiões do espaço de projeto que devam obrigatoriamente conter ou não material;
- Construir uma malha de elementos finitos para o domínio já estabelecido. O refino da malha de ser tal que consiga representar adequadamente a estrutura, tanto do ponto de vista de equilíbrio quanto de definição da topologia que se deseja.

Em seguida então realiza-se efetivamente a otimização através dos seguintes passos:

- Fazer uma estimativa inicial das variáveis de projeto;
- Calcular as sensibilidades (gradientes);
- Utilizar um algoritmo de otimização como critério de ótimo, MMA (Método das Assíntotas Móveis) ou SLP (Programação Linear Sequencial);
- Atualizar as variáveis de projeto e repetir o procedimento até que seja atingido o ponto de ótimo.

A última etapa é a fase de pós-processamento.

- Os resultados obtidos na segunda etapa devem ser interpretados, analisados e representados como uma topologia definida.

5 MICROESTRUTURAS OSTEO-COMPATÍVEIS

Este trabalho tem como objetivo determinar a distribuição de material em uma célula unitária que permita obter um tensor constitutivo de propriedades efetivas com valores pré-determinados. Especificamente, pretende-se encontrar um arranjo microestrutural de titânio que ofereça propriedades elásticas próximas ao meio ósseo.

Esta investigação se baseia no modelo de Hollister (2003) apresentado no capítulo , que pode ser descrito na forma padrão de otimização como

$$\begin{aligned}
 \text{Min} \quad & F_\rho = \| C_{ij}^H(\boldsymbol{\rho}) - C_{ij}^* \|_{L2} \\
 \text{tal que} \quad & g(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{e=1}^{nelems} \rho_e V_e - V_f \leq 0 \\
 & \rho_{min} \leq \rho_e \leq 1
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde $\boldsymbol{\rho}$ são as (pseudo) densidades utilizadas para descrever a distribuição de material, V_e é o volume do elemento e e V_f é a fração de volume do material base utilizado para a obtenção da topologia.

O tensor \mathbf{C}^* representa o tensor que se deseja obter (osso) e o tensor $\mathbf{C}^H(\boldsymbol{\rho})$ é o tensor homogeneizado correspondente à topologia descrita por $\boldsymbol{\rho}$. $\| \cdot \|_{L2}$ é o operador norma $L2$, ou seja, a função objetivo é dada pela raiz quadrada da diferenças ao quadrado das componentes do tensor homogeneizado e do tensor alvo.

Para resolver este problema de otimização é necessário um algoritmo que atualize as densidades, obtenha as propriedades homogeneizadas, calcule a sensibilidade das funções em relação às densidades

e calcule a função objetivo.

Assim, o processo de otimização pode ser descrito por

- (1) Distribuição inicial de densidades;
- (2) Encontrar o tensor homogeneizado da microestrutura obtida;
- (3) Calcular a função objetivo, a função de restrição e as sensibilidades;
- (4) Aplicar o filtro no gradiente da função objetivo;
- (5) Baseado nestas informações, obter uma nova distribuição de material;
- (6) Verificar se o problema satisfaz o critério de parada. Se sim, pare o programa, se não, ir para o próximo passo;
- (7) Definir um novo vetor de densidades, de acordo com o critério de ótimo, e ir para o passo (2).

5.1 Critério de Ótimo

Para encontrar uma solução de um problema de otimização, existem algumas técnicas que podem ser usadas. As mais comuns em otimização topológica são:

- Critério de ótimo: utiliza as condições KKT para deduzir um algoritmo específico para um tipo de problema, que permite encontrar a solução do problema de otimização.
- Métodos evolucionários: usam técnicas heurísticas para encontrar a solução do problema de otimização.
- Programação matemática: utiliza métodos como a programação linear sequencial e o método das assíntotas móveis para encontrar a solução do problema de otimização.

Devido ao fato das funções utilizadas na formulação deste trabalho serem contínuas e diferenciáveis e de termos apenas uma restrição que depende linearmente das variáveis de projeto, utilizou-se o critério de ótimo para solucionar o problema de otimização. Segundo Allwood e Chung (1984) o desenvolvimento do critério de ótimo pode ser dividido em dois processos. O primeiro é encontrar o critério que solucione o problema, e o segundo é satisfazer esse critério.

Existem vários métodos de critério de ótimo e pesquisadores estão encontrando critérios mais apropriados para cada tipo de problema, como por exemplo no trabalho de Ananiev (2005), onde pode-se encontrar uma boa revisão e comparação entre o método dos gradientes projetados e o critério de ótimo tradicional.

Neste trabalho será utilizada uma adaptação do critério de ótimo desenvolvido por Bendsøe e Kikuchi, (1988), devido a sua simplicidade e eficiência. O desenvolvimento do critério de ótimo parte da função Lagrangiana do problema de minimização com restrições definido na Eq. 5.1

$$L(\boldsymbol{\rho}, \lambda) = F(\boldsymbol{\rho}) + \lambda g(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.2)$$

onde F é a função objetivo e g é a restrição.

Derivando a expressão 5.2 em relação a uma variável de projeto, tem-se que

$$\frac{\partial L}{\partial \rho_e} = \frac{\partial F}{\partial \rho_e} + \lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e} = 0, \quad (5.3)$$

se $\boldsymbol{\rho}$ for o ponto de ótimo. Então

$$\frac{\partial F}{\partial \rho_e} = -\lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e} \quad (5.4)$$

ou

$$\frac{-\frac{\partial F}{\partial \rho_e}}{\lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e}} = 1. \quad (5.5)$$

Caso o ponto não seja o extremo (ótimo), então a Eq. 5.5 resulta em

$$\beta_e = \frac{-\frac{\partial F}{\partial \rho_e}}{\lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e}}, \quad (5.6)$$

onde β_e pode ser utilizado como um fator de correção das densidades, sendo 1, 0 no ponto de ótimo.

O critério de ótimo utilizado neste trabalho é baseado no critério proposto por Bendsøe (1989) para o problema de minimização de flexibilidade. No entanto, como as derivadas da flexibilidade são sempre negativas, modificou-se o algoritmo original para que sejam considerados apenas os gradientes negativos na Eq. 5.6, resultando em

$$\beta_e = \frac{\max(0, -\frac{\partial F}{\partial \rho_e})}{\lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e}}. \quad (5.7)$$

A atualização da densidade pelo critério de ótimo é dada pela densidade atual multiplicada pelo fator de correção, na forma

$$\rho_e^{novo} = \begin{cases} \rho_{min} & \text{se } \beta^{\eta r} \rho_e \leq \rho_{min} \\ \beta^{\eta r} \rho_e & \text{se } \rho_{min} \leq \beta^{\eta r} \rho_e \leq \rho_{max} \\ \rho_{max} & \text{se } \beta^{\eta r} \rho_e \geq \rho_{max} \end{cases} \quad (5.8)$$

onde ηr é um fator estabilizador, e ρ_{min} e ρ_{max} são, respectivamente, os valores mínimos e máximos que a densidade pode assumir.

Como o critério de ótimo descrito na equação 5.8 depende apenas de λ , que é o multiplicador de Khun-Tucker associado à restrição de volume, este pode ser solucionado de forma simples, por meio do método da bisseção. Desta forma, a implementação do critério de ótimo utilizado neste trabalho pode ser resumida como

1 Define os parâmetros iniciais: $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 = \kappa$

2 Calcula $\lambda_m = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}$

3 Para cada elemento e da malha de elementos finitos

3.1 Calcula o fator β_e

3.2 Faz uma estimativa para a densidade: $\rho_e^\# = \rho_e \beta_e^{\eta r}$

3.3 Encontra os limites inferior e superior:

$$\text{lmi} = \max(\rho_{min}, \rho_e(1 - \delta))$$

$$\text{lms} = \min(\rho_{max}, \rho_e(1 + \delta))$$

3.4 Encontra a nova densidade: $\rho_e^{novo} = \max(\text{lmi}, \min(\text{lms}, \rho_e^\#))$

4 Calcula a nova estimativa de volume: $V^{novo} = \rho^{novo} \cdot \frac{\partial g}{\partial \rho}$

5 Testa pelas assíntotas da bissecção: Se $V^{novo} > V_f V_{total}$ então

$$\lambda_1 = \lambda_m$$

$$\text{se não } \lambda_2 = \lambda_m$$

6 Se $\lambda_2 - \lambda_1 > \text{tol}$, volte para o passo 2.

Se $\lambda_2 - \lambda_1 < \text{tol}$, fim do algoritmo.

onde κ é um valor muito menor do que a magnitude das funções envolvidas e δ é um valor de limite móvel.

5.2 Análise de Sensibilidades

Um dos cálculos necessários para a realização do processo de otimização, é o cálculo do gradiente da função objetivo e das restrições em relação a variável de projeto. Este cálculo é importante para fazer a análise de sensibilidade do problema, pois o gradiente de uma função indica o quão sensível é esta função quando se faz modificações nas variáveis de projeto.

Nesta seção serão descritos os cálculos das sensibilidades, feitos analiticamente. As equações obtidas foram implementadas no algoritmo de otimização.

5.3 Sensibilidade da Função Objetivo

Como visto anteriormente, temos que a função objetivo é dada por

$$F = \| \mathbf{C}^H(\boldsymbol{\rho}) - \mathbf{C}^* \|_{L2}, \quad (5.9)$$

e, considerando o problema bidimensional abordado neste trabalho,

$$F = \sqrt{(C_{ij}^H(\boldsymbol{\rho}) - C_{ij})^2} \quad i, j = 1, 2, 6. \quad (5.10)$$

Utilizando à regra da cadeia para derivar a função objetivo em relação a densidade, obtemos

$$\frac{\partial F}{\partial \rho_e} = \frac{1}{2 \left(\sqrt{(C_{ij}^H - C_{ij})^2} \right)} \left(2(C_{ij}^H - C_{ij}) \frac{\partial C_{ij}^H}{\partial \rho_e} \right), \quad (5.11)$$

ou

$$\frac{\partial F}{\partial \rho_e} = \frac{1}{F} \left((C_{ij}^H - C_{ij}) \frac{\partial C_{ij}^H}{\partial \rho_e} \right). \quad (5.12)$$

Pode-se observar que para a conclusão do cálculo de sensibilidade da função objetivo, é necessário encontrar a derivada dos coeficientes homogeneizados em relação à densidade dos elementos $\frac{\partial C_{ij}^H}{\partial \rho_e}$.

5.3.1 Derivada dos Coeficientes Homogeneizados

Nesta seção será deduzido o cálculo da derivada do coeficiente homogeneizado C_{11}^H . As derivadas dos outros coeficientes são análogas.

Como visto anteriormente na equação (2.19) o coeficiente homogeneizado C_{11}^H é representado por

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y (C_{11} - \mathbf{c}_1^T \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\eta})) dY. \quad (5.13)$$

Transformando a integral em somatório obtemos

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [C_{11} - \mathbf{c}_1^T \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\eta})] w_j J_j, \quad (5.14)$$

onde j são os pontos de Gauss do elemento, npg é o número de pontos de Gauss, $nelems$ é o número de elementos finitos na malha utilizada para descrever a célula unitária, w_j são os pesos da quadratura e J_j é o determinante da matriz jacobiana.

Em seguida, pode-se escrever $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\eta}) = \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta}$, onde \mathbf{B}_{ej} é a matriz de derivadas das funções de interpolação do elemento (e) no ponto de Gauss (j) e \mathbf{H}_e é uma matriz de localização do elemento, tal que $\mathbf{u}_e = \mathbf{H}_e \mathbf{U}$, onde \mathbf{U} é o vetor global de deslocamentos da malha e \mathbf{u}_e é o vetor de deslocamentos do elemento e .

Considerando a parametrização SIMP, tem-se que $\mathbf{C} = \rho_e^p \mathbf{C}^0$, onde \mathbf{C}^0 é o tensor de propriedades do material base (titânio) e p é o expoente da parametrização SIMP.

Assim, a equação 5.14 pode ser reescrita como

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\rho_e^p C_{11}^0 - \rho_e^p \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta}] w_j J_j. \quad (5.15)$$

De modo a evitar o cálculo da derivada do vetor de estados $\boldsymbol{\eta}$, será utilizado o método adjunto. Assim, utilizando-se o primeiro caso de carregamento, definido por $\mathbf{f}_1 = \mathbf{K} \boldsymbol{\eta}$, pode-se definir $\mathbf{K} \boldsymbol{\eta} - \mathbf{f}_1 = \mathbf{0}$, tal que

$$C_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\rho_e^p C_{11}^0 - \rho_e^p \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta}] w_j J_j + \lambda_1^T (\mathbf{K} \boldsymbol{\eta} - \mathbf{f}_1). \quad (5.16)$$

Agora derivando a equação 5.16 em relação a ρ_m , obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{11}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} \left[p\rho_e^{p-1} C_{11}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta} - \rho_e^p \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \rho_m} \right] w_j J_j \\ &+ \lambda_1^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\eta} + \lambda_1^T \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \rho_m} \mathbf{K} - \lambda_1^T \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial \rho_m}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Porém, o primeiro caso de carregamento pode ser definido por

$$\mathbf{f}_1 = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\mathbf{B}_{ej} \rho_e^p \mathbf{c}_1] w_j J_j,$$

assim

$$\frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial \rho_m} = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\mathbf{B}_{mj} p \rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1] w_j J_j. \quad (5.18)$$

Então, substituindo a equação (5.18) na equação (5.17) e colocando $\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \rho_m}$ em evidência, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{11}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1} C_{11}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta} - \lambda_1^T \mathbf{B}_{mj} p \rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1] w_j J_j \\ &+ \lambda_1^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\eta} + \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \rho_m} \left\{ \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [-\rho_e^p \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e] w_j J_j + \lambda_1^T \mathbf{K} \right\}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Se o termo entre chaves, que multiplica $\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \rho_m}$ for nulo, então evitamos o cálculo desta derivada. Isto é obtido se definirmos o problema adjunto

$$\lambda_1^T \mathbf{K} = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\rho_e^p \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e] w_j J_j, \quad (5.20)$$

que corresponde a um problema de equilíbrio auxiliar.

Com isso a equação 5.19 é reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{11}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1} C_{11}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\lambda}_1^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1] w_j J_j \\ &+ \boldsymbol{\lambda}_1^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\eta}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Assim, da mesma forma encontra-se as derivadas dos outros coeficientes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{22}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1} C_{22}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_2^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\lambda}_2^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_2] w_j J_j \\ &+ \boldsymbol{\lambda}_2^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\Lambda}, \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{66}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1} C_{66}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_3^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\Theta} - \boldsymbol{\lambda}_3^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_3] w_j J_j \\ &+ \boldsymbol{\lambda}_3^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\Theta}, \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{12}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1} C_{12}^0 - p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\lambda}_1^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1} \mathbf{c}_1] w_j J_j \\ &+ \boldsymbol{\lambda}_1^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \boldsymbol{\Lambda}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{16}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1}C_{16}^0 - p\rho_e^{p-1}\mathbf{c}_1^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \Theta - \lambda_1^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1}\mathbf{c}_1] w_j J_j \\ &\quad + \lambda_1^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \Theta, \end{aligned} \quad (5.25)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{26}^H}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [p\rho_e^{p-1}C_{26}^0 - p\rho_e^{p-1}\mathbf{c}_2^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e \Theta - \lambda_2^T \mathbf{B}_{mj} p\rho_e^{p-1}\mathbf{c}_2] w_j J_j \\ &\quad + \lambda_2^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_m} \Theta, \end{aligned} \quad (5.26)$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ são referentes ao primeiro, segundo e terceiro caso de carregamento respectivamente, ou seja

$$\lambda_2^T \mathbf{K} = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\rho_e^p \mathbf{c}_2^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e] w_j J_j, \quad (5.27)$$

e

$$\lambda_3^T \mathbf{K} = \frac{1}{|Y|} \sum_{e=1}^{nelem} \sum_{j=1}^{npg} [\rho_e^p \mathbf{c}_3^T \mathbf{B}_{ej} \mathbf{H}_e] w_j J_j. \quad (5.28)$$

5.3.2 Sensibilidade da Restrição

Neste problema, existe apenas uma restrição de volume,

$$g(\boldsymbol{\rho}) = \boldsymbol{\rho}^T \mathbf{V} - V_f, \quad (5.29)$$

onde \mathbf{V} é o vetor de volumes dos elementos, $\boldsymbol{\rho}$ é o vetor de variáveis de projeto e V_f é a fração de volume.

Assim a sensibilidade da restrição em relação a uma variável de projeto m é dada por

$$\frac{\partial g}{\partial \rho_m} = V_m. \quad (5.30)$$

5.3.3 Verificação da Sensibilidade

As derivadas obtidas foram verificadas utilizando o método de diferenças finitas centrais. Para obtermos as expressões de diferenças finitas, utilizamos a expansão em Série de Taylor da função, truncada no termo de primeira ordem, para frente

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h, \quad (5.31)$$

e para trás

$$f(x - h) = f(x) - f'(x)h. \quad (5.32)$$

A partir da equação 5.31, pode-se escrever a derivada como sendo

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h}, \quad (5.33)$$

conhecida como diferenças progressivas.

Da mesma maneira, a partir da equação 5.32

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x - h)}{h}, \quad (5.34)$$

que é conhecida como diferenças regressivas.

Também é possível encontrar a diferença entre as equações 5.31 e 5.32,

$$f(x + h) - f(x - h) = 2f'(x)h, \quad (5.35)$$

tal que

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad (5.36)$$

conhecido como diferenças centrais.

Para a verificação das derivadas dos coeficientes homogeneizados obtidas na seção 5.3.1, calculou-se a derivada por diferenças finitas

Tabela 2: Verificação do procedimento analítico para cálculo de sensibilidades.

$C_{ij} \setminus h$	1×10^{-1}	1×10^{-2}	1×10^{-3}	1×10^{-4}	1×10^{-5}	1×10^{-6}
C_{11}	0,980	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999
C_{12}	0,951	0,999	0,999	0,999	1,000	1,000
C_{22}	0,959	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999
C_{16}	0,983	0,999	0,999	0,999	1,000	1,000
C_{26}	0,957	0,999	0,999	0,999	0,999	1,000
C_{66}	0,991	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999

Fonte: Produção do próprio autor.

centrais e então os valores foram comparados com a derivada obtida analiticamente. Os resultados obtidos para a análise de sensibilidade de um elemento da malha são ilustrados na tabela 2, para diferentes valores da perturbação h . Na tabela, são mostrados a relação entre o valor obtido por diferenças finitas e o valor calculado pelas Eqs. 5.21 a 5.26, onde 1,000 corresponde ao cálculo do valor exato.

Uma característica interessante das sensibilidades obtidas nas Eqs. 5.21 a 5.26 é que as mesmas são nulas quando a distribuição de densidades é homogênea. Desta forma, deve-se sempre utilizar um campo não homogêneo como distribuição inicial de densidades para a validação das derivadas e para a solução do problema de otimização.

6 RESULTADOS

Este capítulo é separado em quatro partes, de modo a cobrir as diversas possibilidades de uso da formulação implementada neste trabalho. A primeira parte trata da verificação do procedimento de homogeneização (análise) discutido e implementado neste trabalho. Após, são abordados resultados referentes à formulação mais comum quando se acopla otimização topológica com homogeneização: extremização de uma combinação linear de componentes do tensor constitutivo. Este tópico é abordado neste capítulo, pois é uma forma interessante de verificarmos o critério de ótimo implementado e os gradientes das restrições. Por fim, é apresentada a validação da formulação proposta neste trabalho e sua aplicação para o projeto de microestruturas osteocompatíveis. O elemento finito bilinear isoparamétrico de 4 nós é utilizado em todos os exemplos considerados neste capítulo.

6.1 Verificação da Homogeneização

Para a verificação do processo de homogeneização, foram feitas simulações de células unitárias que tenham resultados conhecidos por meio da regra de misturas de dois materiais (MENDONÇA, 2005). O caso mais simples é o de um reforço uniaxial no sentido horizontal. Para isto, foi gerada a distribuição de material ilustrada na figura 17, utilizando os dados da tabela 3 na simulação.

Neste caso, utilizando a teoria de misturas, espera-se obter um módulo de elasticidade longitudinal efetivo igual a

$$E^H = V_f E^0 + (1 - V_f) E_{vazio}^0,$$

Tabela 3: Dados da simulação.

Malha	80×80
Módulo de elasticidade (E)	10Pa
Coefficiente de Poisson (ν)	0,0
ρ_{min}	10^{-6}
p	3
Fração de volume (V_f)	13,75%

Fonte: Próprio autor.

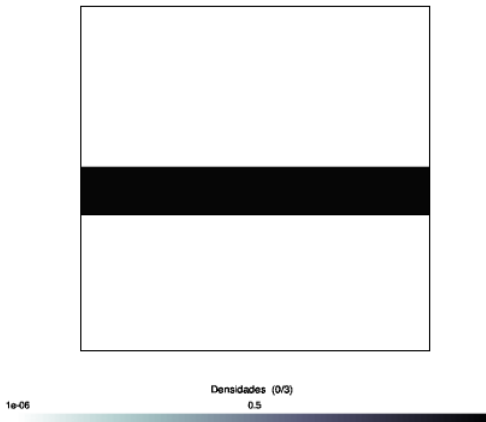


Figura 17: Célula unitária com reforço uniaxial.

Fonte: Próprio autor.

onde $E_{vazio}^0 = \rho_{min}^p E^0$. Considerando os valores da tabela 3,

$$E^H = (0,1375)10 + (1 - 0,1375)(1 \times 10^{-6})^3 10 = 1,375 Pa.$$

Assim, como $C_{11}^H = \frac{E^H}{1-\nu^2} = E^H$, verifica-se que o tensor efetivo obtido por homogeneização deve ser igual a

$$\mathbf{C}^H = \begin{pmatrix} 1,375 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 \end{pmatrix} Pa,$$

que é exatamente o resultado obtido com o procedimento implementado neste trabalho.

É interessante notar que valores do tensor constitutivo homogeneizado deste exemplo variam de acordo com a rotação do sistema de referência. Neste caso, podemos obter os valores do tensor rotacionado por meio da aplicação de um operador de rotação \mathbf{R} que, na forma compacta, é descrito por

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} c^4 & s^4 & 2c^2s^2 & 4c^2s^2 & -4c^3s & -4cs^3 \\ s^4 & c^4 & 2c^2s^2 & 4c^2s^2 & 4cs^3 & 4sc^3 \\ c^2s^2 & c^2s^2 & c^4 + s^4 & -4c^2s^2 & 2(c^3s - cs^3) & 2(cs^3 - c^3s) \\ c^2s^2 & s^2c^2 & -2c^2s^2 & (c^2 - s^2)^2 & 2(c^3s - cs^3) & 2(cs^3 - c^3s) \\ c^3s & -s^3c & s^3c - c^3s & 2(cs^3 - c^3s) & c^4 - 3c^2s^2 & 3c^2s^2 - s^4 \\ cs^3 & -sc^3 & c^3s - s^3c & 2(c^3s - s^3c) & 3c^2s^2 - s^4 & c^4 - 3c^2s^2 \end{bmatrix},$$

onde $c = \cos(\theta)$, $s = \sin(\theta)$ e θ é o ângulo de rotação em torno do eixo Z (MENDONÇA, 2005). A rotação é aplicada na forma compacta do tensor que se deseja rotacional, $\mathbf{Q} = [C_{11} \ C_{22} \ C_{12} \ C_{33} \ C_{13} \ C_{23}]^T$, na forma $\mathbf{Q}' = \mathbf{R}\mathbf{Q}$. Se o tensor for rotacionado em 45° , obtemos

$$\mathbf{C}^H = \begin{bmatrix} a & a & a \\ a & a & a \\ a & a & a \end{bmatrix}$$

onde $a = 1,375 \cos(45) = 0,3437$ Pa.

Assim, utilizando a distribuição de material ilustrada na figura 18 (que leva em consideração o fato da fração de volume do arranjo diagonal ser $0,1375\sqrt{2}$), para os mesmos dados do exemplo anterior,

obteve-se o tensor homogeneizado

$$\mathbf{C}^H = \begin{bmatrix} 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \\ 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \\ 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \end{bmatrix}$$

o que ilustra a eficácia do procedimento de homogeneização, para o cálculo de todas as componentes do tensor.

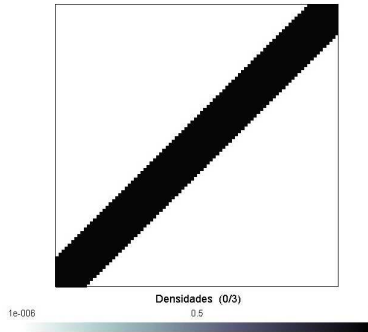


Figura 18: Célula unitária com reforço a 45°.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

6.2 Extremização de Componentes do Tensor Elástico

Quando se trata de acoplar a Otimização Topológica com a homogeneização, observa-se que a abordagem mais comum é a extremização de uma combinação linear de componentes do tensor constitutivo. Nesta abordagem, o problema de otimização é escrito na forma padrão

$$\max \Phi = \sum_{i=1}^6 \alpha_i C_i \quad (6.1)$$

$$\text{tal que } \sum \rho v \leq V_f$$

$$\rho_{min} \leq \rho \leq 1$$

onde α_i são os coeficientes prescritos da combinação linear (por exemplo, se o objetivo for maximizar somente o C_{11} , teremos $\alpha_1 = 1$, com os demais nulos). A derivada da função objetivo é dada por

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \rho_m} = \sum_{i=1}^6 \alpha_i \frac{\partial C_i}{\partial \rho_m},$$

ou seja, é uma combinação linear das derivadas obtidas na parte teórica deste trabalho. Deve-se salientar que podem existir ligeiras modificações da formulação proposta, como por exemplo, a maximização do coeficiente de Poisson, mas que pode ser vista como uma expressão dependente das componentes do tensor constitutivo.

A validação desta formulação foi realizada com a comparação direta dos resultados apresentados por Weihong *et al* (2007), que utiliza exatamente a abordagem ilustrada acima. Os dados utilizados aqui foram os mesmos do referido artigo, com $E_x = 1000\text{Pa}$, $\nu = 0,3$ e $V_f = 50\%$. A comparação dos resultados pode ser observada nas Figuras 19, 20, 21 e 22. Da comparação direta das topologias obtidas com neste trabalho com as da referência, pode-se ver que topologias distintas (número de reforços uniaxiais nas células representadas nas figuras 19 e 20) levam qualitativamente a um mesmo resultado. Isto mostra que o problema possui múltiplas células unitárias que levam ao mesmo resultado, fato este que será explorado em mais detalhes na próxima seção.

6.3 Obtenção de um Tensor Específico

A formulação de otimização proposta neste trabalho visa obter uma distribuição de material que leve a um tensor específico \mathbf{C}^* , para

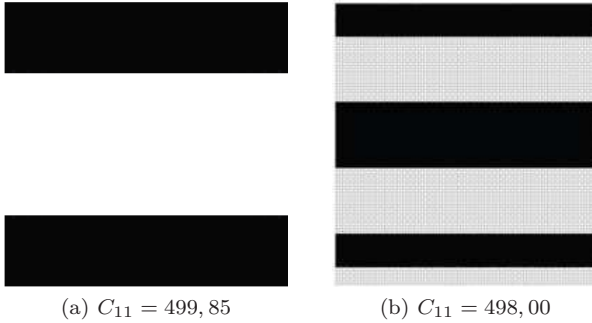


Figura 19: Maximização da componente C_{11} : (a) Resultado obtido neste trabalho. (b) Resultado obtido por Weihong *et al* (2007).

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

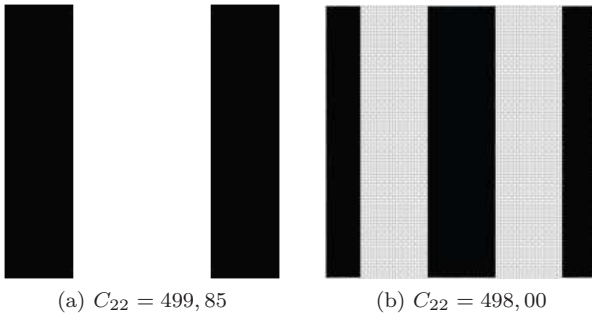


Figura 20: Maximização da componente C_{22} : (a) Resultado obtido neste trabalho. (b) Resultado obtido por Weihong *et al* (2007).

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

uma dada fração de volume, ou seja,

$$\begin{aligned}
 \text{Min} \quad & F_\rho = \| C_{ij}^H(\boldsymbol{\rho}) - C_{ij}^* \|_{L2} \\
 \text{tal que} \quad & g(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{e=1}^{nelems} \rho_e V_e - V_f \leq 0. \\
 & \rho_{min} \leq \rho_e \leq 1
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

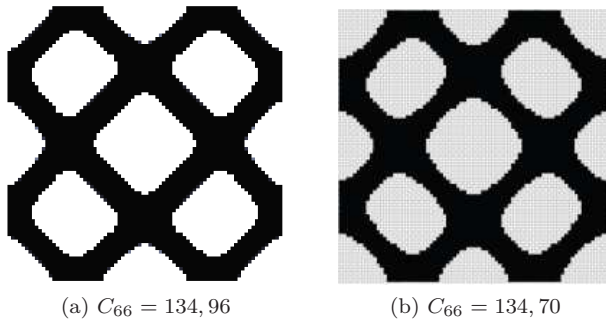


Figura 21: Maximização da componente C_{66} : (a) Resultado obtido neste trabalho. (b) Resultado obtido por Weihong *et al* (2007).

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

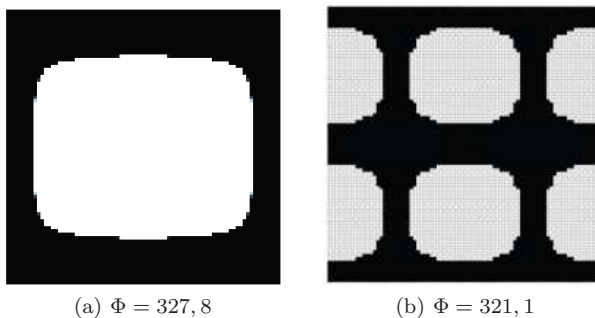


Figura 22: Maximização da combinação linear $\Phi = \frac{3}{5}C_{11} + \frac{2}{5}C_{22}$: (a) Resultado obtido neste trabalho. (b) Resultado obtido por Weihong *et al* (2007).

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

Uma das aplicações desta formulação é justamente o projeto de microestruturas osteocompatíveis.

Este problema é matematicamente mais complexo do que o anterior, pois pode ser que não exista a possibilidade de obtermos o tensor desejado. Isto dependerá da fração de volume, do tensor alvo,

das propriedades do material base, do raio do filtro utilizado e, também, da distribuição inicial de material.

O primeiro teste realizado para a validação da formulação proposta é a obtenção, via otimização, de uma topologia que tenha o tensor efetivo

$$\mathbf{C}^* = \begin{pmatrix} 1,375 & 0,00 & 0,00 \\ 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ 0,00 & 0,00 & 0,00 \end{pmatrix} Pa \quad (6.3)$$

para uma fração de volume de 13,75%, ou seja, a mesma situação apresentada no primeiro exemplo de verificação deste capítulo. A distribuição inicial de material foi totalmente aleatória, como mostrado na figura 26a. Se o mesmo problema for solucionado duas vezes, com duas distribuições iniciais aleatórias diferentes, são obtidas duas topologias distintas, mas que possuem o mesmo tensor de propriedades efetivas, figura 23.

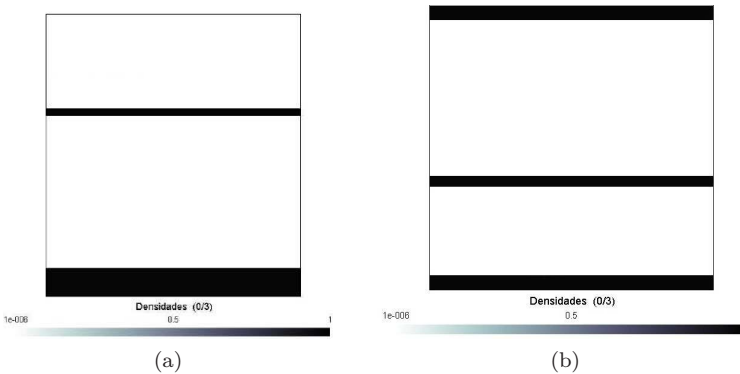


Figura 23: Topologias referentes ao tensor alvo 6.3, para um fração de volume de 13,75% e filtro com vizinhos de primeira ordem. Cada topologia foi obtida com uma distribuição aleatória diferente de material.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

As topologias da figura 23 possuem exatamente o tensor espe-

cificado, mostrando que existe mais de uma solução para o problema. Uma maneira de evitar a convergência para diferentes soluções é a utilização de um filtro com maior raio, pois isto faz com que detalhes geométricos menores do que o raio do filtro sejam evitados. De fato, considerando que as topologias da figura 23 foram obtidas considerando uma vizinhança de primeira ordem (todos os elementos que compartilham um nó com o vizinho central), pode-se entender a presença dos reforços de menor espessura. Se o mesmo problema for solucionado considerando uma vizinhança de segunda ordem (vizinhos de primeira ordem e todos os elementos que compartilham um nó com os vizinhos de primeira ordem), obtemos a topologia da figura 24, mostrando a importância do filtro na definição do espaço de busca da otimização topológica.

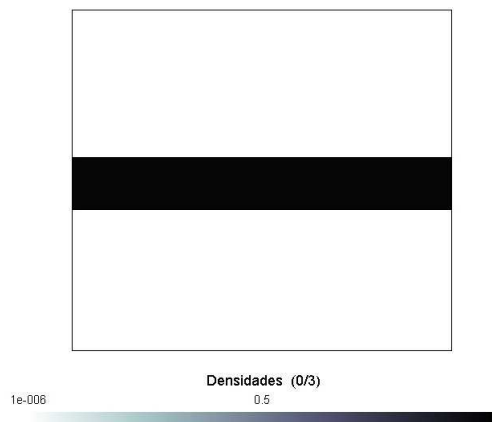


Figura 24: Topologia referente ao tensor alvo 6.3, para um fração de volume de 13,75% e filtro com vizinhança de segunda ordem.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

O segundo caso de verificação considerado é a obtenção do

tensor

$$\mathbf{C}^* = \begin{pmatrix} 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \\ 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \\ 0,3437 & 0,3437 & 0,3437 \end{pmatrix} Pa \quad (6.4)$$

referente ao segundo caso estudado na seção de validação do procedimento de homogeneização, ou seja, a topologia uniaxial rotacionada a 45° . A distribuição inicial de densidades foi aleatória e uma vizinhança de segunda ordem foi utilizada. A topologia obtida é a ilustrada na figura 25

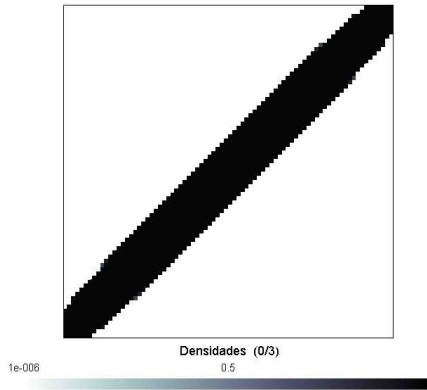


Figura 25: Topologia referente a obtenção do tensor 6.4.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

6.4 Obtenção de Microestruturas Osteocompatíveis

O objetivo final deste trabalho é determinar o arranjo microestrutural de uma célula de titânio que possua propriedades efetivas o mais próximas possíveis do meio ósseo (osteocompatibilidade).

Como visto anteriormente, as simulações feitas para verificar o algoritmo de homogeneização e de otimização obtiveram resultados bastante satisfatórios. Porém o problema proposto é mais difícil de ser satisfeito, pois pode não ser possível obter as propriedades que estão

sendo impostas, além da já comentada dificuldade associada à não convexidade.

Como o problema é não convexo, serão feitas várias simulações com diferentes distribuições iniciais de material e frações de volume. As distribuições iniciais utilizadas foram a puramente aleatória (Figura 26a), a distribuição radial aleatória (Figura 26b), a distribuição em X (Figura 26c) e distribuições sobrepostas (Figura 26d). O programa implementado neste trabalho permite a geração de diversas distribuições iniciais, seja para análise ou para otimização, como por exemplo, a radial aleatória, elipse, retângulo, reforços em X e em Y, reforços diagonais, bem como a sua sobreposição.

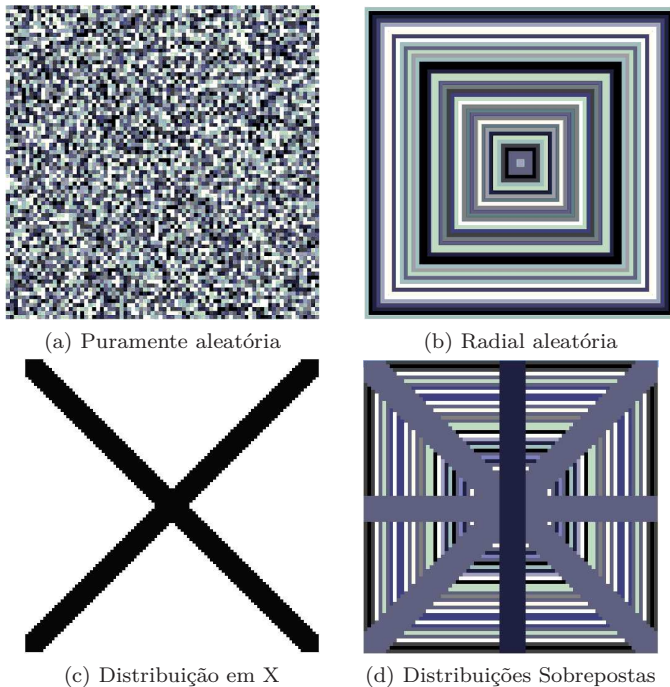


Figura 26: Distribuições iniciais de titânio

Para realizar as simulações, foram utilizadas as seguintes propriedades ósseas: $E = 11,5$ GPa, $\nu = 0,31$ e $G = 3,3$ GPa. Assim, se considerarmos o tensor para o estado plano de tensões

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \frac{E}{1-\nu^2} & \frac{E\nu}{1-\nu^2} & 0 \\ \frac{E\nu}{1-\nu^2} & \frac{E}{1-\nu^2} & 0 \\ 0 & 0 & G \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

obtemos o tensor alvo

$$\mathbf{C}^* = \begin{bmatrix} 12,722 & 3,944 & 0 \\ 3,944 & 12,722 & 0 \\ 0 & 0 & 3,3 \end{bmatrix} \text{ GPa} \quad (6.6)$$

que não é puramente isotrópico, uma vez que $G \neq \frac{C_{11}-C_{12}}{2}$.

Os dados utilizados para o material base (liga de titânio biocompatível) foram $E = 113,8$ GPa e $\nu = 0,342$. No que segue, serão apresentados alguns resultados obtidos com a formulação proposta, para os dados do problema de projeto de materiais osteocompatíveis. Em todos os exemplos considerados aqui, a mesma malha de 100×100 elementos finitos bilineares isoparamétricos de quatro nós é utilizada.

O primeiro problema considerado foi o projeto da distribuição de titânio com uma restrição de fração de volume de $V_f = 30\%$, distribuição inicial em X e vizinhança de primeira ordem. A topologia da célula unitária obtida é ilustrada na figura 27 e o tensor de propriedades efetivas é

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 12,786 & 3,975 & 0,023 \\ 3,975 & 12,680 & 0,022 \\ 0,023 & 0,022 & 3,331 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.7)$$

O resultado obtido é satisfatório, pois os valores do tensor obtido são praticamente iguais ao do tensor alvo, Eq. 6.6.

Posteriormente o mesmo problema de $V_f = 30\%$ foi solucionado utilizando uma distribuição inicial em X sobreposta a uma distribuição

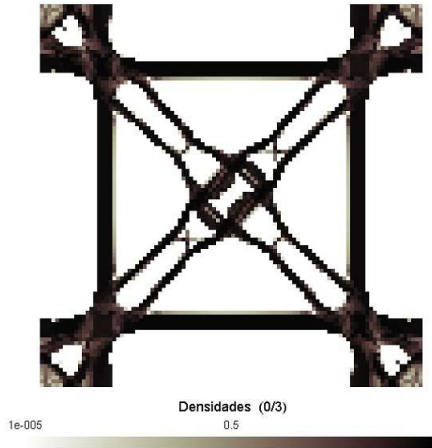


Figura 27: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.7.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

radial aleatória. O tensor obtido neste caso é

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 12,713 & 4,076 & -0,004 \\ 4,076 & 12,528 & -0,002 \\ -0,004 & -0,002 & 3,023 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.8)$$

Pode-se perceber que o resultado foi igualmente satisfatório, porém devido a não convexidade do problema, a topologia obtida neste caso (figura 28) difere da topologia encontrada anteriormente (figura 27).

De modo a verificar a influência do raio de vizinhança nos resultados obtidos até então, foram considerados os mesmos casos discutidos anteriormente, mas com uma vizinhança de segunda ordem aplicada ao filtro. Assim, considerando os mesmos dados da primeira simulação, foi

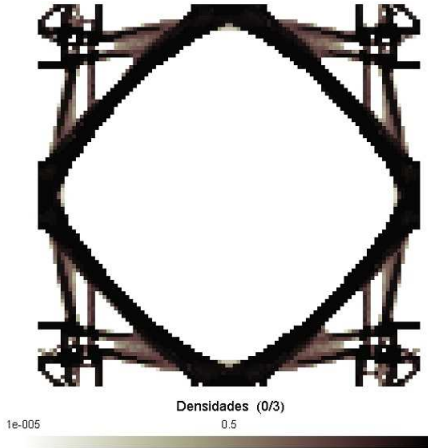


Figura 28: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.8.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

obtida a topologia da figura 29, cujo tensor de propriedades efetivas é

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 12,648 & 4,150 & 0 \\ 4,150 & 12,541 & 0 \\ 0 & 0 & 2,787 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.9)$$

Novamente, pode-se verificar que o procedimento de otimização permite o correto projeto da microestrutura, embora, neste caso, o termo C_{66} apresente um valor significativamente menor do que o do tensor alvo.

Da mesma forma, utilizando-se os mesmos dados do segundo caso, porém com uma vizinhança de segunda ordem, obtém-se a topologia da figura 30, cujo tensor de propriedades efetivas é

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 12,367 & 3,854 & 0 \\ 3,854 & 12,636 & 0 \\ 0 & 0 & 3,210 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.10)$$

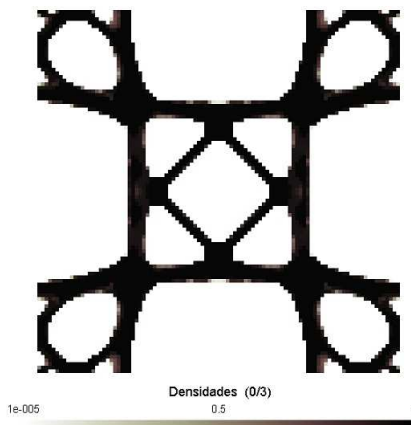


Figura 29: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.9.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

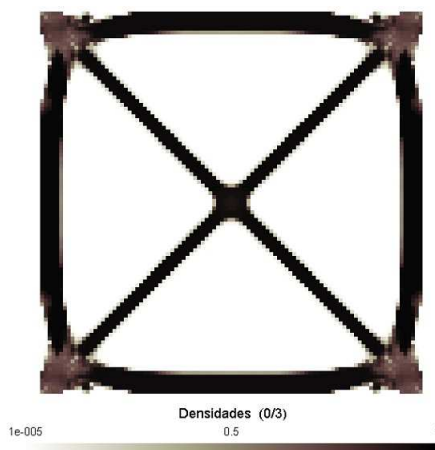


Figura 30: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.10.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

Com estes resultados, pode-se verificar que para uma fração de volume de 30%, é possível obter uma topologia que satisfaça o problema

de otimização, embora os resultados dependam do raio de filtragem e da distribuição inicial de densidades.

De modo a investigar a influência da fração de volume no resultado do problema de otimização, foi considerado um novo problema, com vizinhança de primeira ordem e com a distribuição inicial de densidades ilustrada na figura 31, que foi selecionada de modo a satisfazer as componentes cisalhantes (paralelogramo) e as componentes normais (distribuição radial). A restrição de fração de volume considerada é de 20%.

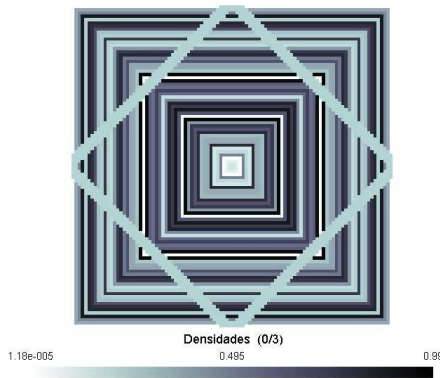


Figura 31: Distribuição inicial de densidades.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

A topologia obtida para este caso é ilustrada na figura 32, com o tensor de propriedades efetivas

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 9,072 & 3,812 & 0 \\ 3,812 & 9,072 & 0 \\ 0 & 0 & 3,296 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.11)$$

O resultado mostra que, para esta fração de volume, o algoritmo tem dificuldade em satisfazer ao mesmo tempo os termos de rigidez normal e de rigidez cisalhante. Foi observado, ao estudar este

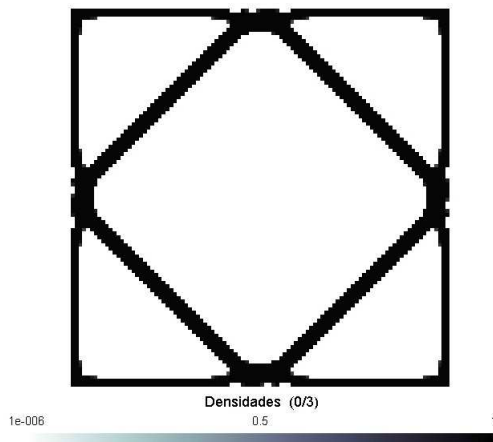


Figura 32: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.11.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

caso, que um filtro com vizinhança de segunda ordem leva a um resultado pior, pois evita a formação dos reforços mais finos que o algoritmo utiliza para gerar a topologia. Isto mostra que, além de todas as dificuldades, existe a possibilidade de não obtermos o tensor desejado por uma provável deficiência no espaço de solução, que pode ser aumentado pela redução do filtro e/ou pelo refino da malha.

Se o mesmo problema for considerado, porém com uma fração de volume de 15%, obtém-se a topologia da figura 33, referente ao tensor de propriedades efetivas

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 4,489 & 4,568 & 0 \\ 4,568 & 4,771 & 0 \\ 0 & 0 & 3,324 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.12)$$

Como pode ser verificado pelo tensor obtido, a distribuição inicial considerada já leva a topologia a um estado de máxima rigidez cisalhante, o que faz com que esta componente do tensor seja satisfeita, enquanto as componentes de rigidez normais apresentam valor abaixo

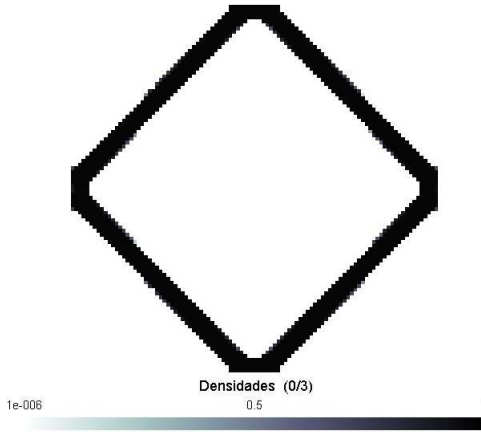


Figura 33: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.12.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

do especificado. Isto ocorre pois a fração de volume é baixa, levando o otimizador a uma relação de compromisso que é influenciada pela distribuição inicial.

Por fim, para este mesmo problema, mas com uma fração de volume de 40%, obtém-se a topologia da figura 34, referente ao tensor de propriedades efetivas

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 12,681 & 3,964 & 0 \\ 3,964 & 12,681 & 0 \\ 0 & 0 & 3,293 \end{bmatrix} \text{ GPa.} \quad (6.13)$$

A topologia mostra claramente que a restrição de volume é satisfeita, porém, como existe excesso de material (já que uma fração de 30% é suficiente), ocorre um arranjo microestrutural geometricamente mais sinuoso. De fato, da maneira como o algoritmo está implementado, observa-se que a restrição de volume é sempre satisfeita pela igualdade.

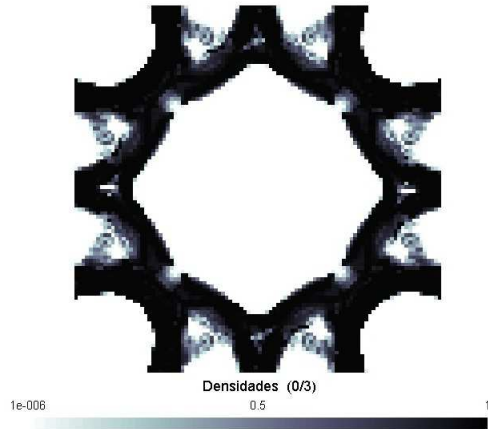
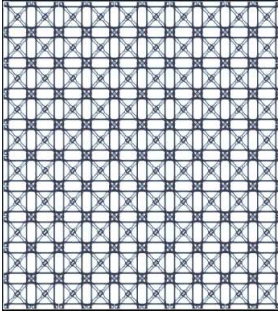


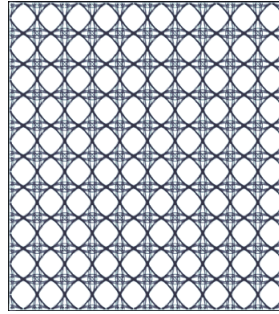
Figura 34: Microestrutura da célula referente ao tensor 6.13.

Fonte: Produção do próprio autor, 2014.

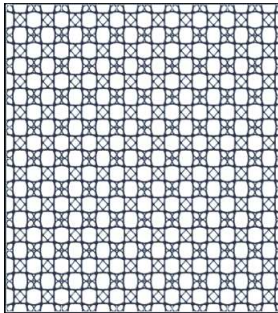
Para fins de visualização das estruturas formadas pelas células encontradas, a figura 35 mostra as topologias formadas pela repetição periódica (10×10) das células otimizadas.



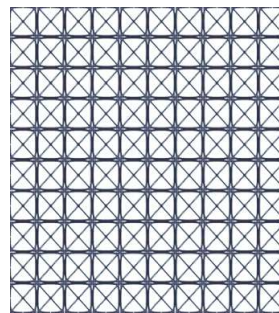
(a) Topologia periódica referente à célula 27



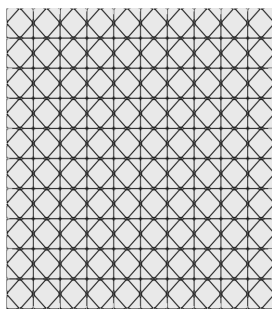
(b) Topologia periódica referente à célula 28



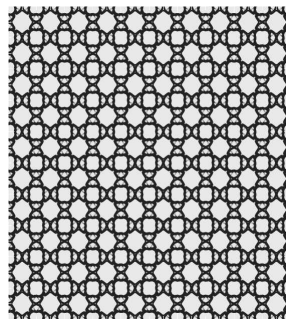
(c) Topologia periódica referente à célula 29



(d) Topologia periódica referente à célula 30



(e) Topologia periódica referente à célula 32



(f) Topologia periódica referente à célula 34

Figura 35: Topologias periódicas das células 27, 28, 29, 30, 32 e 34

CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho é determinar a distribuição de material em uma célula unitária que permita obter um tensor de propriedades efetivas com valores pré determinados. Para encontrar o arranjo microestrutural criou-se um algoritmo de otimização topológica em conjunto com homogeneização.

Com base nos dados obtidos no capítulo 6 pode-se concluir que:

- O algoritmo de homogeneização implementado neste trabalho é eficaz, pois nos casos de verificação obteve os valores esperados pela regra de misturas;
- Na aplicação mais comum de otimização topológica em conjunto com a homogeneização, maximização de uma combinação linear de componente do tensor efetivo, obteve-se resultados extremamente satisfatórios em comparação com os resultados da literatura (WEIHONG *et al.*, 2007). Pode-se perceber que a distribuição inicial de material tem influência neste caso, porém as topologias obtidas neste trabalho também são semelhantes às obtidas por Weihong *et al* (2007) se considerá-las periódicas.
- É importante salientar que o tensor alvo é ortotrópico. Assim, o objetivo é encontrar um tensor com as componentes C_{16} e C_{26} o mais próximas de zero possível. Pode-se perceber que em todos os casos, essas componentes obtiveram valores muito baixos, e ainda para alguns casos essas componentes chegaram na ordem 10^{-12} , sendo assumidas como nulas.
- O tensor constitutivo elástico do titânio (material base) possui uma ordem de grandeza muito maior que o tensor do osso. Porém

em todas as simulações conseguiu se reduzir a grandeza à mesma ordem, o que já é satisfatório. Na prática, devido a grande variação nas propriedades de materiais biológicos, o importante é que as componentes tenham a mesma ordem de grandeza, e não valores exatamente iguais;

- Foi possível observar que para algumas frações de volume não foi possível obter o tensor desejado. Para frações de volume muito baixas, não existe material suficiente para se obter o tensor alvo, enquanto que para frações de volume muito altas, o algoritmo distribui o material de forma a não exceder os valores estipulados;
- Ao observar as topologias obtidas nas células unitárias, fica claro a influência da distribuição inicial de material sobre o problema, pois a formulação é não convexa. Assim para simulações utilizando os mesmos dados, porém com distribuições iniciais distintas, obteve-se topologias diferentes. Isto pode ocorrer também se utilizarmos o mesmo tipo de distribuição inicial, pois apesar de ter uma forma semelhante, seus valores são aleatórios.

6.5 Sugestões Para Trabalhos Futuros

Devido ao sucesso da formulação implementada neste trabalho, sugere-se a implementação do procedimento para o caso tridimensional. Neste caso, devido à maior tendência de elementos finitos simples apresentarem resultados insatisfatórios para malhas pouco refinadas (como no caso do elemento trilinear isoparamétrico de 8 nós), sugere-se o estudo e a implementação de elementos finitos não compatíveis. Por fim, neste trabalho foi utilizado um método extremamente simples de otimização, sendo que outros métodos de otimização podem ser considerados em uma possível continuação deste trabalho.

Referências

- ABDEL-HADY, G. M.; NIINOMI, M. Biocompatibility of ti-alloys for long-term implantation. *J Mech Behav Biomed Mate.*, 2013. v. 20, p. 407–415, 2013. Citado na página 31.
- ALLAIRE, G.; JOUVE, F.; TOADER, A. M. Identification and control of dynamical system using neural networks. *J. Comput. Phys.*, 2004. v. 194, n. 1, p. 363–393, 2004. Citado na página 66.
- ALLWOOD, R. J.; CHUNG, Y. S. Minimum-weight design of trusses by an optimality criteria method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering.*, 1984. v. 20, p. 697–713, 1984. Citado na página 73.
- AMBROSIO, L.; BUTTAZZO, G. An optimal design problem with perimeter penalization, calculus and variations and partial differential equations. *Calc. of Var.*, 1993. p. 55–69, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 66.
- ANANIEV, S. On equivalence between optimality criteria and projected gradient methods with application to topology optimization problem. *Multibody System Dynamics.*, 2005. v. 13, p. 25–38, 2005. Citado na página 73.
- ARORA, J. S. *Optimization of Structural and Mechanical Systems*. [S.l.]: 2 ed. Iowa, World Scientific, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 53, 54, 56 e 57.
- ASHMAN, R. B.; RHO, J. Y. Elastic modulus of trabecular bone material. *Biomech.*, 1988. v. 21, p. 177–181, 1988. Citado na página 39.
- BECKERS, M. Optimisation topologique de structures tridimensionnelles en variable discretas. *Technical Report Of-44*, 1997. 1997. LTAS, University of Liege. Citado na página 61.
- BENDSØE, M. P. Optimal shape design as a material distribution problem. *Structural Optimization*, 1989. v. 1, p. 192–202, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 74.

- BENDSØE, M. P.; KIKUCHI, N. Generating optimal topologies in structural design using homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics*, 1988. v. 71, n. 2, p. 197–224, 1988. Citado 4 vezes nas páginas 29, 61, 62 e 73.
- BENDSØE, M. P.; SIGMUND, O. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archives of Applied Mechanics*, 1999. v. 69(9-10), p. 635–654, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 61.
- BENDSØE, M. P.; SIGMUND, O. *Topology Optimization: Theory, Methods and Applications*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2003. Citado na página 62.
- BENSSOUSAN, A.; LIONS, J.; PAPANICOLAOU, G. *Asymptotic analysis for periodic structures*. [S.l.]: Amsterdam, North Holland, 1978. Citado na página 41.
- BRUNS, T. E.; TORTORELLI, D. A. Topology optimization of nonlinear elastic structures and compliant mechanisms. *Comput. Methods. Appl. Mech. Eng.*, 2001. v. 190, p. 3443–3459, 2001. Citado na página 67.
- CARDOSO, E. L. *Controle de Complexidade na Otimização Topológica de Estruturas Contínuas*. Dissertação (Mestrado) — Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2000. Citado na página 66.
- CARDOSO, E. L.; FONSECA, J. S. Intermediate density reduction and complexity control in the topology optimization. In: *In: 20TH IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING (CILAMCE99)*. [S.l.: s.n.], 1999. Citado na página 66.
- CARDOSO, E. L.; FONSECA, J. S. O. *Mecânica dos sólidos 3*. [S.l.], 2003. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 46.
- CHENG, T.; OLHOFF, N. An investigation concerning optimal design of solid elastic plates. *International Journal of Solid Structures*, 1981. v. 17, p. 305–323, 1981. Citado na página 60.
- CHENG, T.; OLHOFF, N. Regularized formulation for optimal design of axisymmetric plates. *International Journal of Solid Structures*, 1982. v. 18, p. 153–169, 1982. Citado na página 60.

- CHOI, K. et al. The elastic moduli of human subchondral trabecular, and cortical bone tissue and the size-dependency of cortical bone modulus. *Biomech.*, 1990. v. 23, p. 03–13, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- CIORANESCU, D.; PAULIN, J. Homogenization in opens sets with holes. *J Math Aanal Appl.*, 1979. v. 71, p. 590–607, 1979. Citado na página 41.
- CLEYNENBREUGEL, T. V.; OOSTERWYCK, H. V.; SLOTEN, J. V. Trabecular bone scaffolding using a biomimetic approach. *Journal of Materials Science-Materials in Medicine.*, 2002. v. 13, p. 1245–1249, 2002. Citado na página 29.
- COX, H. L. *The Design of Structures of Least Weught*. [S.l.]: Pergamon, London, 1956. Citado na página 60.
- DÍAZ, A. R.; SIGMUND, O. Checkerboard patterns in layout optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 1995. v. 10, p. 40–45, 1995. Citado na página 65.
- DOBLARÉ, M.; GARCÍA, J. M.; GÓMEZ, M. J. Modelling bone tissue fracture and healing: a review. *Engineering Fracture Mechanics.*, 2004. v. 71, p. 1809–1840, 2004. Citado na página 37.
- DUARTE, G. M. H.; ALBERTI, L. R. *Artroplastia total cimentada do quadril*. [S.l.], 2013. Citado na página 27.
- FONTES, R. A. M. *Fabrico e Caracterização de Scaffolds à Base de Fosfatos de Cálcio*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa, 2010. Citado na página 28.
- GIBIANSKY, L. V.; SIGMUND, O. Multiphase composites with extremal bulk modulus. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.*, 2000. v. 48, p. 416–498, 2000. Citado na página 30.
- GOMES, L. S. M. *Artroplastia de Quadril: O que você precisa saber antes da cirurgia*. 2014. Disponível em: <http://www.sbquadril.org.br/info-pacientes.php?ver=3>. Acesso em 04 de outubro de 2014. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- GUEDES, J.; KIKUCHI, N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer methods in applied mechanics and engineering.*, 1990. v. 83, p. 143–198, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 46.

- GUTH, D. C. *Otimização de materiais constituídos de células treliçadas com restrições de isotropia para aplicações termomecânicas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Mestrado em Ciências e Engenharia de Materiais, Joinville, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- HABER, R. B.; JOG, C. S.; BENDSØE, M. P. New approach to variable-topology shape design using a constraint on perimeter. *Structural and Multidisciplinary Optimization*⁹, 1996. v. 11, p. 1–12, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 66.
- HASSANI, B.; HINTON, E. *Homogenization and Structural Topology Optimization: Theory, Practice and Software*. [S.l.]: New York: Springer-Verlag, 1998. Citado 6 vezes nas páginas 42, 43, 44, 45, 61 e 62.
- HASSANI, B.; HINTON, E. A review of homogenization and topology optimization i - homogenization theory for media with periodic structure. *Computer and Structures*., 1998. v. 69, p. 107–117, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 41, 43 e 46.
- HATEM, M. *Artroplastia do quadril - Tipos de próteses*. 2014. Disponível em: <http://www.quadrilcirurgia.com.br/tipos-de-procureteteses.html>. Acesso em 04 de outubro de 2014. Citado na página 26.
- HODGSKINSON, R.; CURREY, J. D.; EVANS, G. P. Hardness, an indicator of the mechanical competence of cancellous bone. *Orthop Res.*, 1989. v. 7, p. 754–754, 1989. Citado na página 39.
- HOLLISTER, S.; MADDOX, R.; TABOAS, J. Optimal design and fabrication of scaffolds to mimic tissue properties and satisfy biological constraints. *Biomaterials*., 2002. v. 23, p. 4095–4103, 2002. Citado na página 29.
- HOLLISTER, S. J.; KIKUCHI, N.; LIN, C. Y. A novel method for biomaterial scaffold internal architecture design to match bone elastic properties with desired porosity. *Journal of Biomechanics*., 2003. v. 37, p. 623–636, 2003. Citado 4 vezes nas páginas 29, 30, 42 e 71.
- KIM, Y. Y.; YOON, G. H. Multi-resolution multi-scale topology optimization - a new paradigm. *Int. J. Solids Struct*, 2000. v. 37, p. 5529–5559, 2000. Citado na página 66.

- KOHN, R. V.; STRANG, G. optimal design and relaxation of variational problems - i. *Comm on Pure an Appl. Math*, 1986. v. 39, p. 113–137, 1986. Citado na página 61.
- KOHN, R. V.; STRANG, G. optimal design and relaxation of variational problems - ii. *Comm on Pure an Appl. Math*, 1986. v. 39, p. 139–182, 1986. Citado na página 61.
- KUHN, J. L. et al. Comparison of the trabecular and cortical tissue moduli from human iliac crests. *Orthop Res.*, 1989. v. 7, p. 876–884, 1989. Citado na página 39.
- LéNé, F.; LEGUILLON, D. Homogenized constitutive law for a partially cohesive composite material. *Int. J. Solid Structures.*, 1982. v. 18, p. 443–458, 1982. Citado na página 41.
- LOURES, E. *Artrose do quadril*. [S.l.], 2012. Citado na página 26.
- MENDONÇA, P. T. R. *Materiais compostos e Estruturas-Sanduíches*. [S.l.]: Manole, Barueri,SP, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 27, 83 e 85.
- MENEGHELLI, L. R. *Projeto de Mecanismos Flexíveis com Restrição de Tensões Utilizando o Método da Otimização Topológica*. Dissertação (Mestrado) — Programa de pós graduação em Engenharia Mecânica, UDESC., Joinville, 2013. Citado 6 vezes nas páginas 59, 60, 64, 65, 66 e 68.
- MENTE, P. L.; LEWIS, J. L. Experimental method for the measurement of the elastic modulus of trabecular bone tissue. *Orthop Res.*, 1989. v. 7, p. 456–461, 1989. Citado na página 39.
- MICHELL, A. G. M. The limits of economy of material in frame structures. *Philosophical Magazine*, 1904. v. 6, n. 8, p. 589–597, 1904. Citado na página 60.
- NIINOMI, M. Biologically and mechanically biocompatible titanium alloys. *Materials Transactions.*, 2008. v. 49, p. 2170–2178, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- OWEN, J. B. B. *The Analysis and Design of Light Structures*. [S.l.]: Edward Arnold, London, 1975. Citado na página 60.
- PETERSON, J.; SIGMUND, O. Slope constrained topology optimization. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 1998. v. 41, p. 1171–1194, 1998. Citado na página 66.

- RAO, S. *Engineering Optimization - Theory and Practice*. [S.l.]: Jhon-Wiley and Sons, 2009. Citado na página 55.
- REILLY, D.; BURSTEIN, A. H. The elastic and ultimate properties of compact bone tissue. *J. Biomechanics.*, 1975. v. 08, p. 393–405, 1975. Citado na página 38.
- RHO, J. Y.; ASHMAN, R. B.; TURNER, C. H. Young's modulus of trabecular and cortical bone material: ultrasonic and microtensile measurements. *Biomech.*, 1993. v. 26, p. 111–119, 1993. Citado na página 39.
- RHO, J. Y. et al. Young's modulus and hardness of trabecular and cortical bone in various directions determined by nanoindentation. *Transactions of the 43th Annual Meeting of the Orthopaedic Research Society.*, 1997. v. 891, 1997. Citado na página 39.
- RHO, J. Y.; SPEARING, L. K.; P.ZIOUPOS. Mechanical properties and the hierarchical structure of bone. *Medical Engineering and Physics.*, 1998. v. 20, p. 92–102, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- ROCHA, G. L. *Estudo das propriedades de simetria de ossos trabeculares*. Dissertação (Mestrado) — Programa de pós graduação interunidas bioengenharia - Escola de engenharia de São Carlos/ Faculdade de medicina de Ribeirão preto/ Instituto de química de São Carlos da Universidade de São Paulo., São Carlos, 2012. Citado na página 35.
- ROZVANY, G. I. N.; ADIDAM, S. Rectangular grillage of least weight. *J. Eng. Mch. ASCE*, 1972. v. 98, p. 1337–1352, 1972. Citado na página 60.
- RUNKLE, J. C.; PUGH, J. The micro-mechanics of cancellous bone. *Bull Hosp Jt Dis.*, 1975. v. 36, p. 02–10, 1975. Citado na página 39.
- RYAN, C. B.; WILLIAMS, J. L. Tensile testing of rodlike trabeculae excised from bovine femoral bone. *Biomech.*, 1989. v. 22, p. 351–355, 1989. Citado na página 39.
- SANCHEZ-PALENCIA, E. *Non-homogenous media end vibration theory*. [S.l.]: Lect Notes Phys, 1980. Citado na página 41.
- SIGMUND, O. *Design of Material Structures Using Topology Optimization*. Tese (PhD) — Department of Solid Mechanics,

- Technical University of Denmark, Denmark, 1994. Citado na página 61.
- SIGMUND, O. Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem. *International Journal of Solids and Structures.*, 1994. v. 31, p. 2313–2329, 1994. Citado na página 30.
- SIGMUND, O. On the design of compliant mechanisms using topology optimization. *Mechanics of Structures and Machines*, 1997. v. 25, p. 495–526, 1997. Citado na página 61.
- SIGMUND, O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2007. v. 33, p. 401–424, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 61, 66 e 67.
- SIGMUND, O.; TORQUATO, S. Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.*, 1997. v. 45, p. 1037–1067, 1997. Citado na página 30.
- SILVA, E. C. N. et al. Optimization methods applied to material and flextensional actuator design using the homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1999. v. 172, p. 241–271, 1999. Citado na página 61.
- TORMENA, F. V. *Um modelo de remodelamento ósseo utilizando potenciais termodinâmicos generalizados*. Tese (Tese de doutorado) — Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 37.
- TOWNSEND, P. R.; ROSE, R. M.; RADIN, E. L. Buckling studies of single human trabeculae. *Bull Hosp Jt Dis.*, 1975. v. 8, p. 199–201, 1975. Citado na página 39.
- VANVBUSKIRK, W. C.; ASHMAN, R. B. The elastic moduli of bone, in mechanical properties of bone. *Joint ASME-ASCE Applied Mechanics, Fluids Engineering and Bioengineering Conference.*, 1981. Boulder, 1981. Citado na página 38.
- WEIHONG, Z. et al. Topology optimal design of material microstructures using strain energy-based method. *Chinese Journal of Aeronautics.*, 2007. v. 20, p. 320 – 326, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 87, 88, 89 e 103.

WILLIAMS, J. L.; LEWIS, J. L. Properties and an anisotropic model of cancellous bone from the proximal tibial epiphysis. *Biomech.*, 1982. v. 104, p. 50–56, 1982. Citado na página 39.

WOLFF, J. *ODas Gesetz der Transformation der Knochen*. [S.l.]: Berlin: Hirschwald, 1892. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.

YASZEMSKI, M. et al. Evolution of bone transplantation: molecular, cellular, and tissue strategies to engineer human bone. *Biomaterials.*, 1995. v. 17, p. 175–185, 1995. Citado na página 29.

YIN, L. Z.; YANG, W. Optimality criteria method for topology optimization under multiple constraints. *Computers and Structures.*, 2001. v. 97, p. 1839–1850, 2001. Citado na página 30.