



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS  
DE CAMADAS GRANULARES INCLINADAS  
COM ATRITO: UMA ANÁLISE NUMÉRICA  
DOS DADOS POR MÉTODOS DE  
OTIMIZAÇÃO**

**LUIZ ALBERTO DA SILVA VIEIRA**

Orientador: Dr. Rodrigo Tomás Nogueira Cardoso  
Cefet-MG

Coorientador: Dr. Allbens Atman Picardi Faria  
Cefet-MG

BELO HORIZONTE  
AGOSTO DE 2018

**LUIZ ALBERTO DA SILVA VIEIRA**

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE  
CAMADAS GRANULARES INCLINADAS COM ATRITO:  
UMA ANÁLISE NUMÉRICA DOS DADOS POR MÉTODOS DE  
OTIMIZAÇÃO**

Projeto de Mestrado apresentado ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Sistemas Inteligentes

Orientador: Dr. Rodrigo Tomás Nogueira Cardoso  
Cefet-MG

Coorientador: Dr. Allbens Atman Picardi Faria  
Cefet-MG

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL  
BELO HORIZONTE  
AGOSTO DE 2018

V657e Vieira, Luiz Alberto da Silva  
Estudo das propriedades mecânicas de camadas granulares inclinadas com atrito: uma análise numérica dos dados por métodos de otimização / Luiz Alberto da Silva Vieira. – 2018.  
68 f.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Rodrigo Tomás Nogueira Cardoso.

Coorientador: Allbens Atman Picardi Faria.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Materiais granulados – Teses. 2. Cisalhamento – Teses.  
3. Simulação por computador – Teses. 4. Otimização matemática – Teses.  
I. Cardoso, Rodrigo Tomás Nogueira. III. Faria, Allbens Atman Picardi.  
III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

CDD 003.3

Esta folha deverá ser substituída pela cópia digitalizada da folha de aprovação fornecida pelo Programa de Pós-graduação.

Dedico esse trabalho à todas as pessoas que mantêm e apoiam o Programa do Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional, em especial aos seus professores que desenvolvem um trabalho brilhante para o desenvolvimento da pesquisa em nosso país.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao CEFET-MG pela oportunidade de realizar esse trabalho. À secretaria do Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática e Computacional pela paciência e presteza para atender os alunos, solucionando os mais diversos problemas. Ao meus orientadores Allbens Atman e Rodrigo Cardoso pela disponibilidade e paciência. À minha família por entender e apoiar nas diversas horas de ausência, em especial neste caso, minha esposa Fernanda, que me incentivou para que esse trabalho fosse realizado.

*A persistência é o menor caminho do êxito.*  
(Charles Chaplin)

# Resumo

O estudo de materiais granulares é um assunto muito rico e com intensa atividade nos últimos anos. Diversos trabalhos consideram o estudo das forças envolvidas no processo de cisalhamento de materiais granulares, a transição de um substrato estático granular para um substrato deslizante. Esse fenômeno se faz presente, por exemplo, nos processos de desmoronamento de materiais, no estudo das propriedades de materiais granulares, no monitoramento de encostas, na construção civil, na logística de abastecimento. Neste trabalho, visamos utilizar ferramentas de otimização matemática em busca da melhor compreensão das propriedades do substrato no momento de transição de um estado estático para um deslizante. Para tanto, desenvolvemos um modelo de Otimização Matemática para encontrar o melhor conjunto de parâmetros que descrevem o comportamento das propriedades mecânicas medidas pela simulação, aproximando-a de resultados analíticos válidos para materiais sólidos. A simulação considera um empilhamento em camadas estáticas de grãos com atrito submetidos a gravidade, a uma força constante aplicada sobre a camada superior deste empilhamento. De posse dos resultados das simulações, avaliamos o caráter multimodal do problema de otimização e utilizamos um algoritmo genético com busca local para avaliar a aproximação por mínimos quadrados. Esta é a principal contribuição do trabalho, uma vez que as principais referências da área se utilizam de uma simplificação do problema de otimização para encontrar um mínimo que satisfizesse as condições do problema em diferentes instâncias, constatado que esse mínimo pode variar de maneira abrupta com a variação dos parâmetros do problema.

**Palavras-chave:** Materiais granulares. Cisalhamento. Simulação. Otimização.

# Abstract

The study of granular materials is a very rich subject with intense activity in recent years. Several studies consider the study of the forces involved in the shear process of granular materials, the transition from a granular static substrate to a sliding substrate. This phenomenon is present, for example, in the processes of collapse of materials, in the study of the properties of granular materials, in the monitoring of slopes, in the civil construction, in the supply logistics. In this work, we aim to use mathematical optimization tools in order to better understand the properties of the substrate at the moment of transition from a static state to a slider. For that, we developed a Mathematical Optimization model to find the best set of parameters that describe the behavior of the mechanical properties measured by the simulation, approaching valid analytical results for solid materials. The simulation considers a stacking in static layers of grains subjected to gravity at a constant force applied on the upper layer of this stack. Based on the results of the simulations, we evaluated the multimodal character of the optimization problem and used a genetic algorithm with local search to evaluate the least squares approximation. This is the main contribution of the work, since the main references of the area use a simplification of the optimization problem to find a minimum that satisfies the conditions of the problem in different instances, noting that this minimum can vary abruptly with the variation of the problem parameters.

**Keywords:** DEM. Shear. Simulation. Optimization.

# Lista de Figuras

Figura 1 – Exemplo de um substrato 2D inclinado . . . . .	5
Figura 2 – verlet atualização variáveis . . . . .	11
Figura 3 – Exemplo de contato entre duas esferas . . . . .	11
Figura 4 – Exemplo de gráfico de perfil de resposta normal . . . . .	13
Figura 5 – Diagrama de Fases Equações Analíticas . . . . .	14
Figura 6 – Ilustração da operação de cruzamento . . . . .	19
Figura 7 – Exemplo de uma operação de cruzamento, partindo de uma população $P_k$ para uma população $P_{k+1}$ . . . . .	20
Figura 8 – Metodologia . . . . .	23
Figura 9 – Ilustração de uma preparação . . . . .	24
Figura 10 – Exemplo de posição do sensor . . . . .	27
Figura 11 – Exemplo de Perfil de Resposta . . . . .	27
Figura 12 – Exemplo de Perfil de Resposta . . . . .	27
Figura 13 – Exemplo de Perfil de Resposta . . . . .	29
Figura 14 – Exemplo de Perfil de Resposta . . . . .	29
Figura 15 – Exemplo de Perfil de Resposta . . . . .	30
Figura 16 – Diagrama do modelo de dados relacional . . . . .	38
Figura 17 – Diagrama Modelo de Dados Relacional . . . . .	39
Figura 18 – Views desenvolvidas para relatórios . . . . .	40
Figura 19 – Tela de Visualização de Dados . . . . .	41
Figura 20 – Heat Map de R e T . . . . .	43
Figura 21 – Heat Map de R e $v_{21}$ . . . . .	43
Figura 22 – Heat Map de T e $v_{21}$ . . . . .	43
Figura 23 – Heat Map de $\tau$ e R . . . . .	44
Figura 24 – Heat Map de $\tau$ e T . . . . .	44
Figura 25 – Heat Map de $\tau$ e $v_{21}$ . . . . .	44
Figura 26 – Perfis da função objetivo . . . . .	45
Figura 27 – Exemplo compartilhado de ajuste AGRP x Busca local . . . . .	46
Figura 28 – Exemplo compartilhado de ajuste AGRP x Busca local . . . . .	47
Figura 29 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,09$ . Ângulo 0 . . . . .	49
Figura 30 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,03$ . Ângulo 0 . . . . .	49
Figura 31 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=0,31$ . Ângulo 0 . . . . .	50
Figura 32 – Gráfico de resultado do cálculo da média da função resposta. Ângulo 0 . . . . .	50
Figura 33 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,37$ . Ângulo 5 . . . . .	51
Figura 34 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=0,05$ . Ângulo 5 . . . . .	51
Figura 35 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,27$ . Ângulo 5 . . . . .	52

Figura 36 – Gráfico de resultado do cálculo da média da função resposta. Ângulo 5 .	52
Figura 37 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,48$ . Ângulo 15 . . . . .	53
Figura 38 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,26$ . Ângulo 15 . . . . .	53
Figura 39 – Gráfico de resultado do cálculo da função resposta, $F_0$ em $x=-0,06$ . Ângulo 15 . . . . .	54
Figura 40 – Gráfico de resultado do cálculo da média da função resposta. Ângulo 15	54
Figura 41 – Exemplo de resultado do ajuste pela otimização da função $\Delta$ . . . . .	55
Figura 42 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 2 graus e angulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	56
Figura 43 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 0 graus e angulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	56
Figura 44 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 8 graus e angulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	57
Figura 45 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 12 graus e ângulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	57
Figura 46 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 14 graus e ângulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	58
Figura 47 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 16 graus e ângulo de $F_0$ de 45 graus. . . . .	58
Figura 48 – Gráfico resultado do ajuste da função $\Delta$ para inclinação de 16 graus e ângulo de $F_0$ de 30 graus. . . . .	60
Figura 49 – Gráfico da relação entre o ângulo de inclinação e $\frac{G}{E_1}$ . . . . .	60
Figura 50 – Gráfico de relação entre variáveis da otimização e a inclinação . . . . .	61

# Lista de Tabelas

Tabela 1 – Parâmetros do modelo de Dinâmica Molecular . . . . .	31
Tabela 2 – Valores das variáveis de Otimização . . . . .	33
Tabela 3 – Comparação NLOPT x AGRP . . . . .	34
Tabela 4 – Parâmetros do AGRP . . . . .	34
Tabela 5 – Estatísticas da Dinâmica Molecular . . . . .	42
Tabela 6 – Resultados do ajuste realizado com AGRP e Busca Local . . . . .	46
Tabela 7 – Tabela de resultados da otimização de $\Delta$ , ângulo de inclinação de 5 graus	55
Tabela 8 – Tabela de resultados do ajuste da dinâmica molecular . . . . .	59

# Lista de Abreviaturas e Siglas

DEM	<i>Discrete Element Method</i>
AGRP	Algoritmo Genético Real Polarizado
GM	Granular Materials
DM	Dinâmica Molecular

# Sumário

<b>1 – Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Organização do trabalho	4
<b>2 – Fundamentação Teórica</b>	<b>5</b>
2.1 Caracterização do Problema	6
2.1.1 Dinâmica Molecular	6
2.1.2 Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias	8
2.1.3 Solução numérica para Dinâmica Molecular	9
2.1.3.1 Equações Analíticas	13
2.2 Otimização	15
2.2.1 Otimização Não Linear	16
2.2.1.1 Otimização Local	16
2.2.1.2 Método Elipsoidal	17
2.2.1.3 Algoritmos Genéticos	17
<b>3 – Metodologia</b>	<b>22</b>
3.1 Delineamento da pesquisa	22
3.1.1 Simulação de Dinâmica Molecular	22
3.1.1.1 Preparação dos grãos	23
3.1.1.2 Simulação da Deposição dos Grãos - Instância Pai	24
3.1.1.2.1 Busca de Vizinhos	24
3.1.1.2.2 Método Preditor	25
3.1.1.2.3 Detecção de Contatos	25
3.1.1.2.4 Cálculo de Forças	26
3.1.1.2.5 Método Corretor	26
3.1.1.2.6 Verificação de Equilíbrio	26
3.1.1.3 Cálculo do <i>Tension</i> - Instância Pai	26
3.1.1.4 Simulação da Deposição dos Grãos - Instância Filho	28
3.1.1.5 Cálculo da Função Resposta - Instância Filho	28
3.1.1.6 Cálculo do Perfil de Resposta Médio de $F_0$	28
3.1.1.7 Parâmetros da Dinâmica Molecular	30
3.1.2 Ajuste às equações analíticas	31
3.1.3 Algoritmos de Otimização	33
3.1.3.1 Algoritmo Genético Real Polarizado	33
3.1.3.2 Busca Local	35
3.1.3.2.1 Implementação do Método Elipsoidal	35

3.1.3.2.2	Implementação do Paralelismo . . . . .	36
3.2	Coleta e tratamento de dados . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Análise de Resultados . . . . .</b>	<b>42</b>
4.0.1	Análise da Função Objetivo e da Otimização . . . . .	42
4.0.2	Análise da Dinâmica Molecular . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Conclusão . . . . .</b>	<b>62</b>
5.1	Trabalhos Futuros . . . . .	63
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>64</b>
	<b>Apêndices . . . . .</b>	<b>67</b>
	<b>APÊNDICE A – Códigos Dinâmica Molecular . . . . .</b>	<b>68</b>
A.1	Códigos . . . . .	68

# Capítulo 1

## Introdução

Neste trabalho, visamos estender a análise numérica realizada em [Atman et al. \(2014\)](#) utilizando ferramentas de otimização matemática em busca da melhor compreensão das propriedades elásticas do substrato no momento de transição de um estado estático para um deslizante, ou seja, da transição de um comportamento sólido para fluído. Para tanto, desenvolveremos um modelo de Otimização Matemática para encontrar o melhor conjunto de parâmetros que descrevem o comportamento das propriedades mecânicas medidas pela simulação, aproximando-a de resultados analíticos válidos para materiais sólidos. A simulação considera um empilhamento em camadas estáticas de grãos com atrito, submetidos a gravidade, e a uma força aplicada sobre a camada superior deste empilhamento. De posse dos resultados das simulações, avaliamos o caráter multimodal do problema de otimização e utilizamos um algoritmo genético com busca local para avaliar uma aproximação por mínimos quadrados.

O estudo de materiais granulares é um assunto muito rico e com intensa atividade nos últimos anos. Diversos trabalhos relacionados ao estudo das forças envolvidas no processo de cisalhamento de materiais granulares estão disponíveis na literatura, ou seja, a transição de um substrato estático granular para um substrato deslizante, ([MANDL; JONG; MALTHA, 1977](#)), ([STARON; VILOTTE; RADJAI, 2002](#)) e ([MARONE; KILGORE, 1993](#)) são exemplos. Esses estudos são importantes para a compreensão desse fenômeno que se faz presente, por exemplo, nos processos de desmoronamento de materiais.

Para a indústria, o estudo das propriedades de materiais granulares se mostra importante de maneira direta ao lidar principalmente com o transporte e armazenagem de granulados, presentes na indústria alimentícia, siderúrgica e mineração, farmacêutica, entre outras ([MAGALHÃES, 2008](#)).

Para a sociedade civil, o entendimento das propriedades destes materiais e sua transição pode ajudar a desenvolver melhores ferramentas para o monitoramento de encostas, cons-

trução civil, produção de alimentos, logística de abastecimento, eventualmente promovendo condições de prevenção de acidentes, aumento da qualidade e diminuição de custos.

Uma situação interessante relacionada ao estudo de materiais granulares ocorre ao observarmos um efeito de separação de granulados conhecido como *Brazil Nut Effect* (BNE). Em [Shinbrot \(2004\)](#) e [Missel \(2005\)](#) esse efeito de separação é estudado. Basicamente o BNE é caracterizado pela movimentação dos grãos maiores para a superfície quando o arranjo de grãos é submetido a vibração.

Baseando-se no trabalho ([Atman et al., 2014](#)) e nos diversos trabalhos científicos dos últimos anos a respeito do processo de cisalhamento em materiais granulares (([D. Serero et al., 2001](#)), ([SOMFAI et al., 2007](#)), ([Atman et al., 2005b](#))), visamos estender a análise numérica realizada utilizando ferramentas de otimização matemática em busca da melhor compreensão das propriedades do substrato no momento de transição de um estado estático para um deslizante. Em [Atman et al. \(2014\)](#) é realizado um estudo de um arranjo de grãos depositos em camadas utilizando diferentes preparações, a saber *Rain Like* (RL), Grão por grão (GG) e avalanche (AV) e submetidos a diferentes ângulos de inclinação e a uma força  $F_0$  aplicada próximo à superfície. A simulação realizada considera discos de raios variados sob ação da gravidade e o algoritmo de dinâmica molecular apresentado neste trabalho. Os resultados numéricos encontrados são então submetidos a uma operação de aproximação das equações teóricas definidas em [Otto et al. \(2003\)](#).

Nenhum algoritmo de otimização é considerado, entretanto, e uma simplificação do problema de otimização foi realizada para encontrar um mínimo que satisfizesse as condições em diferentes instâncias e constatado que esse mínimo pode variar de maneira abrupta com a variação dos parâmetros, portanto justificando a existência deste trabalho. Como resultado é verificado que o módulo de cisalhamento ( $G$ ) decresce em conjunto com o módulo de Young ( $E_1$ ), eixo rígido, em relação ao módulo de Young  $E_2$ , eixo flexível.

A resposta numérica do sistema em relação a  $F_0$  é realizada com base nos trabalhos desenvolvidos em [D. Serero et al. \(2001\)](#), [Atman et al. \(2005a\)](#) e [Atman, Claudin e Combe \(2009\)](#) e as equações teóricas utilizadas para a aproximação foram retiradas de [Otto et al. \(2003\)](#), onde um estudo analítico das propriedades elásticas de materiais granulares é realizado e as equações teóricas são derivadas.

Partindo dos resultados encontrados na simulação DEM, desenvolvemos um modelo de otimização Matemática para encontrar o melhor conjunto de parâmetros que descrevem o comportamento das propriedades mecânicas medidas pela simulação, aproximando-a das equações teóricas.

A simulação considera um empilhamento em camadas estáticas de grãos com atrito, subme-

tidos a gravidade, e a uma força  $F_0$  aplicada sobre a camada superior deste empilhamento, assim como em [Atman et al. \(2014\)](#). Entretanto a simulação já se inicia com a inclinação do arranjo de grãos atribuída, ou seja, não é incrementada gradativamente. Várias instâncias da simulação são executadas considerando diferentes inclinações tanto para o arranjo de grãos quanto para a força  $F_0$ .

O algoritmo de otimização considerado para o ajuste é um Algoritmo Genético Real Polarizado (AGRP) ([RAMOS et al., 2003](#)), com busca local. A busca local consiste em um algoritmo do elipsoide. Algoritmos Genéticos são largamente estudados e utilizados como em [Santos, Almeida e Cardoso \(2017\)](#) onde o mesmo é utilizado para otimização de custos de combustível em uma fornalha de reaquecimento do lingote de aço ou em [Sarubbi, Martins e Silva \(2016\)](#) onde o mesmo é utilizado para minimizar a alocação de *Roadside units* utilizados em uma rede de veículos.

Sua utilização possui a vantagem de não necessitar de conhecimento prévio da função objetivo e ser facilmente adaptável a diversas naturezas de problemas ([TAKAHASHI, 2007](#)). Para realização da simulação e otimização, e geração ágil dos resultados, um *framework* de DEM é desenvolvido, já vinculado a um processo de otimização. Todos os dados gerados são registrados em um banco de dados relacional padronizado e uma aplicação *desktop* foi desenvolvida para geração dos gráficos da função resposta e da otimização.

Como trabalhos relacionados podemos citar, além do próprio trabalho realizado em [Atman et al. \(2014\)](#) onde é feito um estudo das propriedades de materiais granulares sob a ótica de diferentes preparações e nos demais [Atman et al. \(2005a\)](#) onde um estudo sobre a função resposta é realizada para pilhas de areia, em [Atman et al. \(2005b\)](#) onde uma avaliação da sensibilidade da função resposta em relação a preparação é desenvolvido ou em [Atman, Claudin e Combe \(2009\)](#) onde um estudo detalhado sobre a aplicação da força  $F_0$  é realizado.

Temos também o trabalho apresentado em [Do Alejandro M. Aragón \(2018\)](#) onde um *framework* para calibração de modelos de simulação de materiais granulares é definido e desenvolvido utilizando-se otimização para melhor calibrar os parâmetros da simulação de acordo com resultados conhecidos, a abordagem visa encontrar os parâmetros que melhor aproximam a simulação da realidade. (Como curiosidade um vídeo sobre o trabalho pode ser visualizado em <https://www.youtube.com/watch?v=SooUD9riKAQ>. O vídeo apresentado foi eleito como melhor vídeo de divulgação no Congresso “*Powders and Grains, 2017, Montpellier, França*”).

Outros trabalhos relacionados, mas sem associação direta, são os apresentados por [Magaalhães \(2008\)](#) onde uma apresentação geral da dinâmica molecular é realizada e um estudo do comportamento de pilhas de granulares durante avalanches é apresentado, e [Luding](#)

(1994) onde modelos da simulação de materiais granulares são apresentados.

Muito embora este trabalho apresente uma abordagem consistente com o desenvolvimento de um software de simulação de Dinâmica Molecular, a opção pelo desenvolvimento ao invés de simples utilização de códigos existentes também foi objeto do trabalho. Podemos citar como diretamente relacionado, o projeto de software *MercuryDPM*<sup>1</sup> cujos fundadores são Anthony Thornton and Thomas Weinhart. O software é utilizado para simulações em DEM tanto 2D quanto 3D e avaliação dos resultados.

## 1.1 Organização do trabalho

Esse trabalho está organizado da seguinte maneira:

- No capítulo 2 são apresentados os conceitos utilizados para concepção do trabalho.
- No capítulo 3 uma descrição detalhada da metodologia de pesquisa utilizada.
- A apresentação dos resultados encontrados e interpretações é realizada no capítulo 4.
- No capítulo 5 é realizada a finalização da dissertação com apresentação das conclusões.

---

<sup>1</sup>[www.mercurydpm.org](http://www.mercurydpm.org)

## Capítulo 2

### Fundamentação Teórica

A realização deste estudo se baseia essencialmente nos trabalhos em dinâmica molecular e na utilização de algoritmos de otimização para auxiliar na análise dos resultados obtidos nas simulações realizados por computador. A dinâmica molecular é a disciplina que se encarrega de estudar o comportamento de grãos de diversos materiais e dimensões sob diversas condições. Pode ser utilizada na simulação da interação entre átomos e até entre grãos de dimensões macroscópicas.

Para o trabalho em questão estamos interessados no comportamento do substrato simulado, contendo 3600 grãos dispostos conforme a figura abaixo.

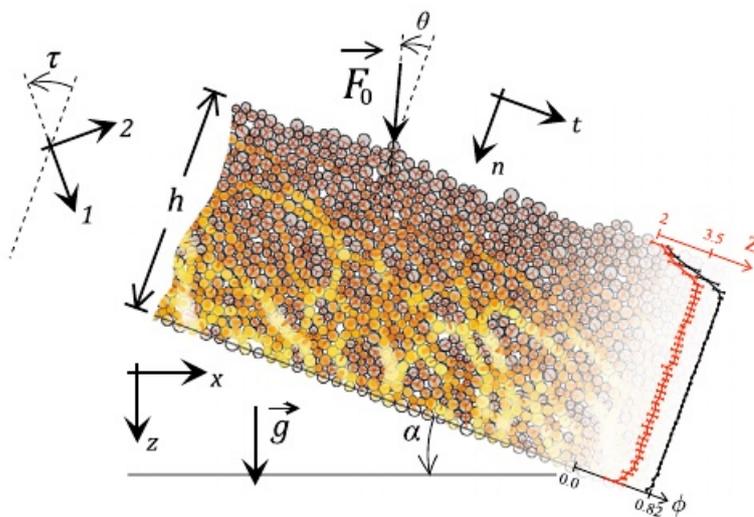


Figura 1 – Exemplo de um substrato 2D inclinado

Fonte: (Atman et al., 2014)

Descrição:

- $x$  = eixo horizontal;

- $z$  = eixo vertical;
- $g$  = gravidade;
- $\alpha$  = inclinação do sistema em relação a horizontal;
- $h$  = altura média;
- $t$  = eixo tangencial;
- $n$  = eixo normal;
- $F_0$  = força aplicada;
- $\theta$  = ângulo da força com respeito à normal;
- Eixos  $(1,2)$  = eixos referentes à análise ortotrópica onde  $E_1$  corresponde ao eixo rígido e  $E_2$  ao flexível.
- $\tau$  = ângulo entre eixos ortotrópicos e eixos  $(n,t)$ .

Esse tipo de arranjo de grãos permite a avaliação de diversos resultados numéricos calculados diretamente das forças presentes no arranjo conforme demonstrado em [Atman et al. \(2014\)](#). Para esse trabalho estamos interessados especificamente no estado de stress do sistema.

## 2.1 Caracterização do Problema

### 2.1.1 Dinâmica Molecular

Segundo [Thornton \(2015\)](#), sistemas de grãos correspondem a conjuntos de grãos individuais ou aglomerados e estão espalhados na natureza e indústria. Quando examinados em macroescala eles podem se comportar como sólidos, líquidos ou gases. Antigamente a pesquisa experimental se limitava a aferições realizadas em macroescala e as tentativas de apresentar uma explicação racional do fenômeno macroscópico observado se baseavam na intuição.

Visando um melhor entendimento do comportamento de sistemas de grãos, técnicas de modelagem vêm ganhando força e também tem sido utilizadas. Tradicionalmente, a modelagem contínua tem tratado os sistemas de grãos como pseudo-sólidos, onde um sistema é considerado como um único corpo sólido. Entretanto, com o aumento contínuo do poder computacional é possível tratar os sistemas de grãos como descontínuos, reconhecendo que areia, pó e grãos são compostos de elementos discretos que interagem uns com os outros em micro-escala ([THORNTON, 2015](#)).

Segundo [Thornton \(2015\)](#) não se sabe ao certo quando a simulação computacional foi primeiramente utilizada para o estudo da Dinâmica Molecular, entretanto, pode-se argumentar que sua primeira ocorrência foi publicada no artigo de [Metropolis et al. \(1953\)](#). Ao longo dos anos, diversos outros trabalhos foram realizados, tais como ([BUCHHOLTZ; POSCHEL,](#)

1993), (BUCHHOLTZ; POSCHEL, 1996),(RAPAPORT, 2001) e (DURAN; REISINGER; GENNES, 2012), levando ao desenvolvimento da área.

Thornton (2015) delimita três técnicas principais de estudo da Dinâmica Molecular.

- “Dinâmica Granular” ou em inglês “*Granular Dynamics*” (GD) é adequada para grãos maiores e fluxos rápidos de material. Em simulações GD os grãos considerados são rígidos e as colisões são instantâneas. A energia é dissipada nas colisões devido ao atrito e os coeficientes de restituição. Essas simulações são conhecidas como “*Event Driven*” pois o passo de tempo utilizado para avançar a simulação é definido como o menor tempo para a próxima colisão. Devido a isso, está técnica GD é restrita a sistemas relativamente dispersos.
- A “Dinâmica de Contatos” ou em inglês *Contact Dynamics* (CD) é uma outra técnica para a Dinâmica Molecular de grãos rígidos e foi desenvolvida por J.J. Moreau (MOREAU, 1983), matemático francês.
- “*Discrete Element Method*” (DEM) é uma técnica de Dinâmica Molecular que se utiliza de grãos “macios”, ou seja, apresentam a ideia de amortecimento ao contato e foi originada pelo trabalho de (CUNDALL, 1971). A técnica DEM é caracterizada pelo tempo limitado de ocorrência das colisões. Durante a colisão as forças de contato são aproximadas como cálculo de dois grãos interagindo da compressão a restituição.

A técnica DEM é a utilizada nesse trabalho para a definição do simulador numérico desenvolvido.

Segundo (THORNTON, 2015, pag. 13) as equações de cinética de grãos podem ser definidas, como variação das velocidades linear ( $v$ ) e angular ( $w$ ):

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{\sum F_{ci}}{m_i} + g \quad (1)$$

$$\frac{dw_i}{dt} = \frac{\sum F_{ti}R}{I} \quad (2)$$

em que  $F_c$  são as forças de contato atuando nos grãos e  $F_t R_i$  são os momentos devido às forças tangenciais. O parâmetro  $g$  é a gravidade,  $v$  e  $w$  são as velocidades linear e angular respectivamente e  $I$  é o momento de inércia definido por  $\frac{1}{2}mR^2$ . O índice  $i$  representa o grão  $i$  no arranjo e  $R_i$  é o raio do grão  $i$ .

A simulação da Dinâmica Molecular, consiste em resolver numericamente as equações 1 e 2 considerando todos os grãos do sistema.

## 2.1.2 Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

A solução de equações diferenciais de forma analítica é restrita a apenas algumas formas especiais de problemas, conforme (CAMPOS, 2007). A solução numérica não possui essa limitação e portanto praticamente toda equação diferencial ordinária pode ser resolvida numericamente.

O Método de Euler, é inspiração para vários algoritmos numéricos para resolução de equações diferenciais e pode ser resumido em uma expansão da solução da equação  $y(x)$ , em série de Taylor, em torno do valor inicial  $x_0$ .

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2}y''(x_0) + \frac{h^3}{6}y'''(x_0) + \dots \quad (3)$$

Ao truncar a série após a primeira derivada e assumindo  $x_{i+1} = x_i + h$ ,  $y_i = y(x_i)$ , onde  $i = \{1, 2, 3, \dots, N\}$ , e  $y'(x) = f(x, y)$  temos:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) \quad (4)$$

Métodos como o Método de Euler realizam a estimativa de  $y_i$  para cada iteração e possuem a característica de encontrar valores melhores, quanto menor for  $h$ . Desse modo, a busca por aumento da precisão necessariamente leva à necessidade de um número maior de passos e em consequência, maior necessidade de tempo e poder computacional.

Opções para aumentar a precisão sem onerar tanto o tempo de processamento existem e uma formulação bastante utilizada por sua eficiência são os métodos de Runge-Kutta. Estes são resultado dos trabalhos de Carl David Runge e M. Wilhelm Kutta (CAMPOS, 2007). Runge desenvolveu o primeiro método em 1895 e Kutta elaborou a formulação geral em 1901. Conforme Campos (2007), os métodos de Runge-Kutta são algoritmos numéricos de passo simples e explícitos que apresentam a forma geral:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h\varphi(x_i, y_i; h), \\ \text{onde, } \varphi(x, y; h) &= \sum_{i=1}^s b_i k_i, \text{ com} \\ k_1 &= f(x, y) \\ k_2 &= f(x + c_2h, y + a_{21}hk_1) \\ k_3 &= f(x + c_3h, y + h(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)) \\ &\dots \\ k_s &= f(x + c_s h, y + h(a_{s1}k_1 + a_{s2}k_2 + \dots + a_{s,s-1}k_{s-1})) \end{aligned} \quad (5)$$

Sendo  $a, b$  e  $c$  constantes definidas para cada método particular.

Os métodos de Runge-Kutta são classificados de acordo com sua ordem, que corresponde a derivada de maior grau presente na expressão e por sua vez corresponde ao índice  $s$  utilizado na Equação 5.

Para, especificamente, métodos de segunda ordem, a expansão em Taylor é feita até a segunda derivada e são avaliadas  $\varphi(x_i, y_i; h)$  para  $s = 2$ . O resultado é um sistema não-linear de 3 equações e 4 variáveis, sendo que uma variedade de métodos podem ser encontrados com base nas infinitas soluções do sistema.

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_2 c_2 = \frac{1}{2} \\ b_2 a_{21} = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (6)$$

Uma solução é  $b_1 = 0, b_2 = 1, c_2 = \frac{1}{2}$  e  $a_{21} = \frac{1}{2}$ , o método é conhecido como método de Euler modificado (CAMPOS, 2007).

Ainda tratando de métodos de solução de equações de equações diferenciais, temos os métodos Previsor-Corretor que se formam uma família de algoritmos para solução numérica desses problemas. Esses algoritmos se utilizam de duas fórmulas chamadas previsor e corretor. O previsor é uma fórmula utilizada para cálculo de  $y_{n+1}$ , o corretor se utiliza de outra fórmula que se usa o valor de  $y_{n+1}$ , calculado pelo previsor, para um cálculo mais preciso de  $y_{n+1}$ .

### 2.1.3 Solução numérica para Dinâmica Molecular

Em sua dissertação de mestrado (MAGALHÃES, 2008) discorre sobre todo o processo de integração numérica utilizado em suas simulações de dinâmica molecular. Ele ressalta o caráter não linear das equações envolvidas na integração e destaca o quão sensíveis às condições iniciais as mesmas são. Desse modo, para minimizar a propagação de erros deste tipo de algoritmo é incluído um passo de correção das velocidades com base no erro estimado entre as acelerações previstas pelo passo de tempo e a aceleração calculada pelo processo de cálculo de forças.

De maneira geral o algoritmo de Dinâmica Molecular utilizado executa as seguintes etapas para a simulação (MAGALHÃES, 2008):

- Calcula as posições dos grãos no instante de tempo. (Previsor)

- Calcula as forças que atuam nos grãos considerando que os mesmos se encontram nas posições calculadas.
- Corrige as variáveis do sistema de simulação considerando as acelerações obtidas nas equações de movimento e no cálculo das forças. (Corretor)
- Realiza o cálculo de quaisquer outras variáveis de interesse.

O algoritmo de Verlet é dos mais citados para integração das equações de movimento de Newton. No tocante a dinâmica molecular, é um dos algoritmos mais frequentemente encontrados.

O algoritmo original abre mão do cálculo explícito da velocidade e é consequência da seguinte relação:

$$a_n = \frac{\Delta r_n}{\Delta t^2} = \frac{\frac{r_{n+1} - r_n}{\Delta t} - \frac{r_n - r_{n-1}}{\Delta t}}{\Delta t} \quad (7)$$

Onde  $a_n$  é a aceleração,  $r_n$  a posição do grão no instante  $t=n$ . A quantidade  $\Delta t$  é o passo de tempo da simulação. A Equação 7 resulta na relação de recorrência:

$$r_{n+1} = 2r_n - r_{n-1} + a_n(\Delta t)^2 \quad (8)$$

Visando a melhorar o tratamento das velocidades e eliminar a necessidade de memória no passo  $n-1$ , foi desenvolvido o algoritmo *Velocity Verlet*, apresentado pela primeira vez em [Swope et al. \(1982\)](#) e apresenta a seguinte definição para a integração:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= r_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2, \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{a_n + a_{n+1}}{2} \Delta t \end{aligned} \quad (9)$$

A definição da Equação 9 é estendida para o movimento rotacional na Equação 10, onde  $\theta$  é a posição angular,  $\omega$  é a velocidade angular e  $\alpha$  a aceleração angular.

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega_n \Delta t + \frac{1}{2} \alpha_n (\Delta t)^2, \\ \omega_{n+1} &= \omega_n + \frac{\alpha_n + \alpha_{n+1}}{2} \Delta t \end{aligned} \quad (10)$$

O algoritmo numérico de dinâmica molecular utilizado neste trabalho baseia-se na integração numérica das equações de movimento do sistema pelo algoritmo *Velocity Verlet*. Conforme apresentado nas Equações 9 e 10.

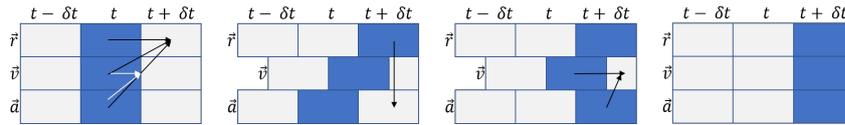


Figura 2 – Diagrama de como o algoritmo *Velocity Verlet* realiza a atualização das variáveis de acordo com o tempo. Setas indicam o que é necessário para cálculo. Retângulos coloridos indicam o que está salvo na memória

Uma vez que a posição dos grãos é conhecida, passa-se ao processo de identificação dos grãos em contato e cálculo das forças envolvidas.

Os grãos em contato são aquelas cuja distância entre seus pontos centrais é menor que a soma de seus respectivos raios. [Thornton \(2015\)](#) dá a seguinte definição: se A e B são duas esferas e R é o raio.  $\alpha \equiv R_A + R_B - D$  onde D é a distância entre os centros das esferas.

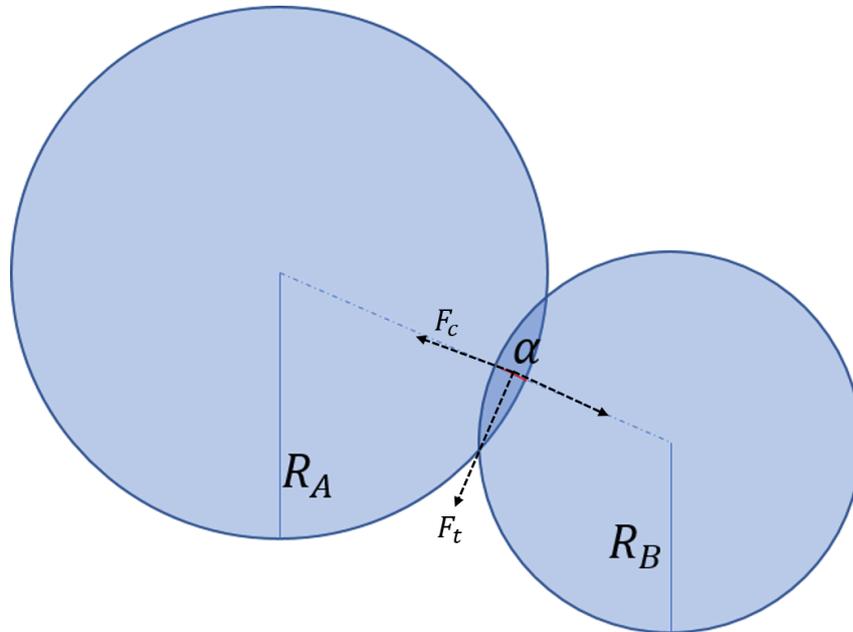


Figura 3 – Exemplo de contato entre duas esferas

Se  $\alpha > 0$ , as esferas A e B estão em contato e o cálculo das forças é realizado. Caso não exista contato, o grão se encontra em queda livre e somente a gravidade é aplicada. Esse procedimento é repetido para todos os grãos a cada passo de tempo  $\Delta t$  da simulação.

O cálculo das forças resultantes do contato é realizado conforme apresentado em [Magalhães \(2008\)](#), onde são desconsiderados efeitos eletrostáticos, magnéticos, deformações permanentes e umidade. De maneira geral, a simplificação realizada representa um sistema de granulados circulares imersos em um gás e sob ação da gravidade.

Em resumo, 3 forças são consideradas no contato entre os grãos:

### Força Elástica

$$f_{el} = -k_n \alpha n_{ij}, \quad (11)$$

onde  $k_n$  é uma constante que representa a resistência do material,  $n_{ij}$  é o vetor unitário que aponta do centro do grão  $i$  para o centro do grão  $j$  e  $\alpha$  é a deformação dos grãos.

### Força de Amortecimento

$$f_{av} = -\gamma(v_{ij} \cdot n_{ij})n_{ij} \quad (12)$$

Onde  $\gamma$  é o coeficiente de amortecimento crítico,  $v_{ij}$  é a velocidade relativa entre os grãos  $i$  e  $j$ , e  $n_{ij}$  é o vetor unitário que aponta do centro do grão  $i$  para o centro do grão  $j$ .

### Força de Atrito

$$f_{ac} = \begin{cases} f_r \\ \text{sign}(f_r \cdot t_{ij}) f_{max} t_{ij}, \text{ se } |f_r| > f_{max} \end{cases} \quad (13)$$
$$f_r = -k_t \delta t (v_{ij} \cdot t_{ij} - r_i \omega_i - r_j \omega_j) t_{ij}$$
$$f_{max} = \mu |f_n|$$

Onde  $f_{ac}$  é a força de atrito,  $f_r$  é a força de atrito estático,  $-k_t$  é a constante relacionada a rugosidade,  $v_{ij}$  é a velocidade relativa entre os grãos  $i$  e  $j$ ,  $t_{ij}$  é o vetor tangente, na direção perpendicular ao  $n_{ij}$ ,  $r_i$  é o raio do grão  $i$ ,  $\omega_i$  é a velocidade angular do grão  $i$ ,  $f_{max}$  é a força de atrito máxima,  $\mu$  é o coeficiente de atrito e  $f_n$  é a força normal do contato entre os grãos.

Uma demonstração de como o cálculo das forças envolvidas é realizado pode ser encontrado em [Thornton \(2015\)](#).

O Algoritmo utilizado em [Atman et al. \(2014\)](#) que implementa toda a simulação da Dinâmica Molecular e também implementado nesta dissertação é o *Velocity Verlet*.

Conforme ([THORNTON, 2015](#)) sistemas de grãos podem se comportar como sólidos ou líquidos, normalmente ficando preso em um estado metaestável ([MAGALHÃES, 2008](#)), não configurando um sistema em estado de menor energia.

Para permitir a medição das características físicas do sistema de grãos, é utilizado em [Atman et al. \(2014\)](#) o cálculo da função resposta, que é apresentada por [Goldenberg et al. \(2006\)](#), e define a função resposta  $\sigma_{\alpha\beta}$  utilizada para medição do tensor de stress do sistema como:

$$\sigma_{\alpha\beta}(r) = \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \int_0^1 ds \phi[r - r_i + sr_{ij}] \quad (14)$$

Onde  $i, j$  correspondem aos grãos em contato,  $\alpha$  e  $\beta$  são coordenadas cartesianas, dando a direção da função resposta,  $r_{ij} \equiv r_i - r_j$ ,  $r_i$  é a posição do centro de massa do grão  $i$ ,  $f_{ij}$  é a força exercida pelo grão  $j$  no grão  $i$ .

De [Goldenberg et al. \(2006\)](#), a função  $\phi(r)$  deve ser normalizada e semi-definida positiva. Para essa dissertação  $\phi(r)$  é dada por:

$$\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi w}} e^{-\left(\frac{|r|}{w}\right)^2} \quad (15)$$

Onde  $w$  é definido como  $6\bar{d}$  e  $\bar{d}$  é o diâmetro médio dos grãos da simulação.

O cálculo numérico da função resposta do sistema empregado na simulação é exatamente o determinado pela Equação 14. A Figura 4 representa um perfil de função resposta.

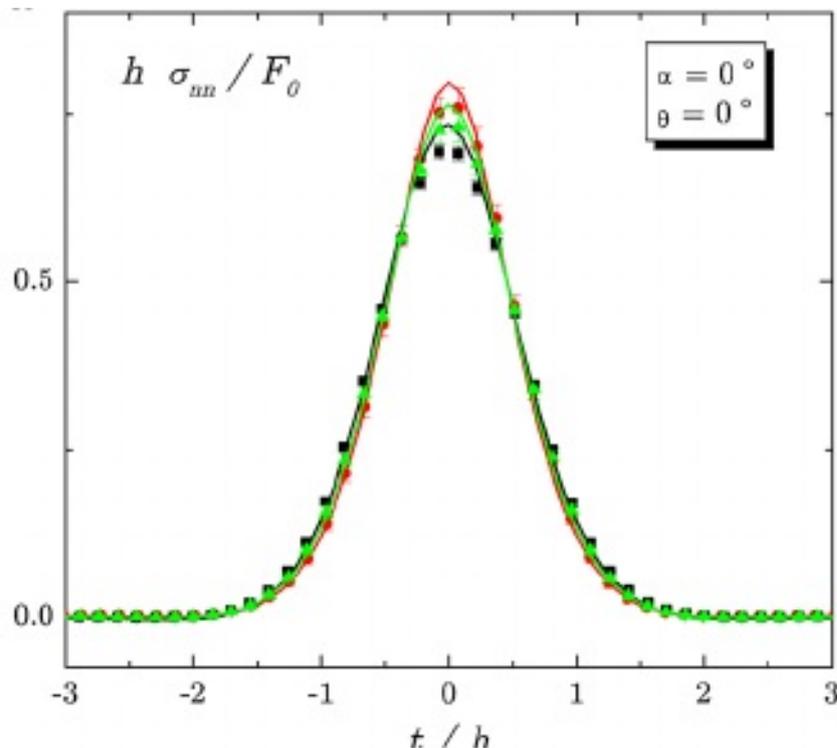


Figura 4 – Exemplo de gráfico de perfil de resposta normal

Fonte: [\(Atman et al., 2014\)](#)

Os resultados encontrados com o cálculo da função resposta serão então ajustados via processo de otimização às equações analíticas que relacionam os parâmetros elásticos do arranjo de grãos.

### 2.1.3.1 Equações Analíticas

Visando à comparação dos resultados numéricos encontrados na simulações com as equações teóricas, utilizamos os resultados encontrados em [Otto et al. \(2003\)](#). O artigo

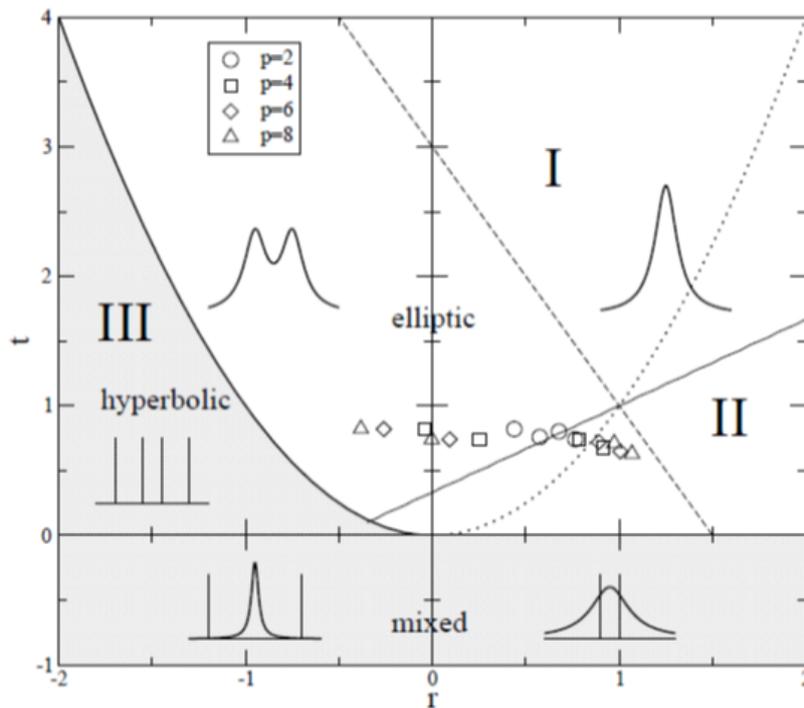


Figura 5 – Diagrama de Fases Equações Analíticas (Otto et al., 2003)

apresenta uma abordagem para compreensão da função resposta em camadas de grãos anisotrópicos, estas funções são utilizadas em Atman et al. (2014).

As equações analíticas serão então comparadas aos resultados numéricos encontrados. Para maiores informações sobre as equações analíticas utilizadas vide Otto et al. (2003) e Atman et al. (2014).

A Figura 5 apresenta o diagrama de fases dos resultados encontrados com as equações analíticas. No eixo  $X$  é representada a variável de otimização  $R$  e no eixo  $Y$  a variável  $T$ . As áreas  $I$ ,  $II$  e  $III$  apresentam o comportamento esperado da função. Por exemplo, na área  $I$ , espera-se encontrar gráficos com aspecto de sino, apresentando um pico somente (comportamento elíptico). Já na área  $III$  é esperado que o gráfico apresente dois picos (comportamento hiperbólico). Todos os exemplos apresentados nessa dissertação apresentam aspecto de um pico somente.

## 2.2 Otimização

Usando a filosofia de otimização é possível abordar um problema de decisão complexo, envolvendo a seleção de valores de variáveis inter-relacionadas, focando em um único objetivo projetado para quantificar o desempenho e mediar a qualidade da decisão.[...] (LUENBERGER, 1973)

Segundo (BOYD; VANDENBERGHE, 2004) um problema de otimização matemática ou simplesmente problema de otimização tem a forma:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } f_0(x) \\ &\text{sujeito a } f_i(x) \leq b_i, i = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{16}$$

Onde o vetor  $x \in R^n$  é a variável de otimização e a função  $f_0 : R^n \rightarrow R$  é a função objetivo. As funções  $f_i : R^n \rightarrow R, i = 1, \dots, m$  são as restrições de desigualdade e as constantes  $b_1, \dots, b_m$  são os limites das restrições. Um vetor  $x^*$  é chamado ótimo ou solução do problema de otimização se ele tem o menor valor de função objetivo entre todos os vetores que satisfazem as restrições.

Quando o problema apresentado em (16) respeita a seguinte definição:

$$f_i(\alpha x + \beta y) = \alpha f_i(x) + \beta f_i(y) \tag{17}$$

Esse problema é dito linear. Ao passo que se a definição seguinte é respeitada

$$f_i(\alpha x + \beta y) \leq \alpha f_i(x) + \beta f_i(y) \tag{18}$$

O problema definido em (16) é considerado convexo.

O problema de otimização tratado neste trabalho busca o ajuste dos parâmetros elásticos resultantes da simulação de dinâmica molecular à equações analíticas e se relaciona, portanto à classe de problemas de **Mínimos Quadrados**, técnica muito utilizada para “*Data fitting*”.

Segundo (BOYD; VANDENBERGHE, 2004) os problemas de mínimos quadrados são a base para análises de regressão, controle ótimo e muitos métodos de estimativa de parâmetros e *data fitting*.

Problemas de otimização da forma de mínimos quadrados são definidos como:

$$\text{minimizar } f_0(x) = \|Ax - b\|^2 = \sum_{i=1}^k (a_i^T x_i - b_i)^2 \tag{19}$$

O problema de mínimos quadrados (19) possui solução analítica e pode ser reduzido à solução de um conjunto de equações lineares.

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b$$

## 2.2.1 Otimização Não Linear

Segundo (BOYD; VANDENBERGHE, 2004) o termo Otimização Não Linear é usado para descrever problemas tais que a função objetivo ou suas restrições são não lineares e que não podem ser identificados como convexos. Não existe método efetivo conhecido para solução de problemas não lineares gerais.

### 2.2.1.1 Otimização Local

Conforme (BOYD; VANDENBERGHE, 2004) métodos de otimização local desistem da busca do ponto ótimo que minimiza a função objetivo sobre todos os pontos viáveis e foca somente na busca de um ponto ótimo local. Isso significa que ele minimiza a função objetivo dentre os pontos viáveis próximos ao mínimo local, mas não existem garantias de ter encontrado o ponto que minimiza a função para todos os pontos viáveis.

Uma definição para mínimos locais é dada em Luenberger (1973) :

Um ponto  $x^* \in \Omega$  é dito como ponto de mínimo relativo ou ponto de mínimo local de  $f$  sobre  $\Omega$  se existe um  $\epsilon > 0$  tal que  $f(x) \geq f(x^*) \forall x \in \Omega | \|x - x^*\| < \epsilon$ . Se  $f(x) > f(x^*) \forall x \in \Omega | \|x - x^*\| < \epsilon$  e  $x \neq x^*$  então  $x^*$  é dito ser um ponto de mínimo relativo estrito.

(LUENBERGER, 1973) dá uma definição para mínimos globais:

Um ponto  $x^* \in \Omega$  é dito ponto de mínimo global de  $f$  sobre  $\Omega$  se para todo  $x \in \Omega$   $f(x) \geq f(x^*)$ . Se  $f(x) > f(x^*) \forall x \in \Omega$  e  $x \neq x^*$  então  $x^*$  é dito ser um ponto de mínimo global estrito.

Métodos de otimização local podem ser rápidos, tratar problemas grandes e serem aplicáveis em geral. Métodos de otimização local possuem algumas desvantagens, além do fato de não garantirem o ótimo global. Estes métodos necessitam que seja informado um ponto de partida dentro da região viável, e a escolha deste ponto inicial é crítica para a solução encontrada, pois caso a função objetivo possua vários mínimos locais, partir de pontos diferentes pode levar a mínimos diferentes. Pouca informação é dada sobre quão longe o ponto encontrado está da solução global e esses métodos costumam ser sensíveis aos parâmetros de configuração que podem necessitar ajustes para uma determinada família de problemas.

### 2.2.1.2 Método Elipsoidal

Dentro da Otimização, uma classe de algoritmos muito estudada e utilizada é a de Exclusão de Semi-espacos. Conforme a definição dada por [Takahashi \(2007\)](#): Os métodos de exclusão de semi-espacos são aqueles que empregam a propriedade de subgradientes de funcionais para definir um plano que divide o espaco em dois semi-espacos, sendo que o funcional necessariamente decresce em um destes semi-espacos.

O algoritmo Elipsoidal é um exemplo de método de exclusão de semi-espacos. Neste método, busca-se encontrar uma sequencia de elipsoides que contenham sempre o ponto de ótimo procurado e que sempre diminuam em “volume”. O conceito de volume é utilizado como medida de tamanho do elipsoide, em  $R^2$  diz respeito a área, em  $R^3$  ao volume. Este conceito é extrapolado para  $R^n$ .

O Algoritmo Elipsoidal básico é descrito ([TAKAHASHI, 2007](#)) pelas seguintes fórmulas recursivas que geram uma sequência de pontos  $x_k$ .

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \beta_1 \frac{Q_k g_k}{(g_k^T Q_k g_k)^{\frac{1}{2}}} \\ Q_{k+1} &= \beta_2 (Q_k - \frac{\beta_3 (Q_k g_k)(Q_k g_k)^T}{(g_k^T Q_k g_k)}) \\ \beta_1 &= \frac{1}{n+1} \\ \beta_2 &= \frac{n^2}{n^2 - 1} \\ \beta_3 &= \frac{2}{n+1}\end{aligned}\tag{20}$$

O vetor  $g_k$  é o subgradiente da restrição mais violada, ou no caso do vetor  $x_k$  estar na reunião factível, um subgradiente da função objetivo. A matriz  $Q_k$  representa o elipsoide e ao inicio do algoritmo é equivalente a matriz identidade.  $\beta_1, \beta_2$  e  $\beta_3$  são constantes e  $n$  é a dimensão do problema.

### 2.2.1.3 Algoritmos Genéticos

[Goldberg \(\)](#) define Algoritmos Genéticos como algoritmos de busca que se baseiam nas mecânicas de seleção natural e genética. Estes definem indivíduos como “strings” codificados e realizam uma busca aleatória e estruturada para encontrar o indivíduo mais apto. A cada iteração uma nova geração de indivíduos é gerada, carregando consigo informações dos melhores indivíduos da geração anterior. No contexto de otimização, o individuo mais apto é o que apresenta melhor valor de função objetivo. Um Algoritmo Genético em geral apresenta as seguintes propriedades que os separam de métodos de busca convencionais:

- Parâmetros de otimização codificados.
- Busca executada sobre uma população e não somente um indivíduo.
- Busca via amostragem ou “*blind search*”.
- Busca utilizando operadores estocásticos.

Além disso, estes mimetizam a seleção natural e genética através de operações de seleção, cruzamento e mutação. Um Algoritmo Genético pode ser construído a partir dessas três regras somente, ou pode conter outros tipos de regras, tais como: nicho, busca local, entre outras. Pertencentes a classe de algoritmos populacionais, esse algoritmo possui como característica especial a busca abrangente de informações sobre a função objetivo por todo o espaço viável sendo que nenhuma avaliação de gradiente é realizada. Como implementação bastante utilizada de um algoritmo genético, temos o de codificação binária que representa os parâmetros ou indivíduos da população como *strings* de 0 ou 1 e implementa as operações de seleção, cruzamento e mutação como operações sobre esses *strings*. Para o trabalho em questão é de interesse o Algoritmo Genético de Codificação Real e operador de cruzamento polarizado. Esse algoritmo adota uma codificação real dos parâmetros de otimização e é definido em [Ramos et al. \(2003\)](#) possuindo as seguintes características que o diferenciam do algoritmo genético de codificação binária:

- Os parâmetros da otimização são codificados em  $R^n$
- Realiza a operação de “Cruzamento Polarizado”. O resultado desse cruzamento são dois novos indivíduos onde um deles tem maior probabilidade de se encontrar mais próximo de seu ancestral de melhor valor de função objetivo.

O Algoritmo Genético Real Polarizado é assim descrito:

- Cada parâmetro de projeto é descrito por uma variável real, sendo o conjunto de parâmetros armazenado em um vetor no espaço  $R^n$ . Cada indivíduo corresponde a um vetor deste espaço.
- Existe uma faixa admissível para cada um dos parâmetros (ou seja, para cada coordenada do vetor de parâmetros), dentro da qual estarão localizados os respectivos componentes de todos os indivíduos.
- O algoritmo se inicia com a geração aleatória de um número  $N$ , (usualmente grande) de vetores (indivíduos) dentro das faixas admissíveis.
- São realizadas em sequência as operações de: cruzamento, mutação, avaliação, cálculo da função de ajuste (“*fitness function*”), seleção e elitização, sendo gerada nova população com mesmo número de indivíduos. A operação de cruzamento pode ser utilizada com um fator de polarização com extrapolação.
- O algoritmo termina seja atingindo determinada condição de término, seja excedendo o número máximo permitido de iterações.

A operação de cruzamento visa copiar o cruzamento genético que ocorre na natureza, escolhendo um par de indivíduos para perpetuarem sua “informação genética”. O método implementado para este trabalho, consiste em dividir a população em duas metades e, para cada par formado, verifica-se se vai ou não ocorrer cruzamento, com probabilidade de ocorrência  $pC$ , sendo esta parâmetro do método. Caso venha a ocorrer cruzamento são gerados dois novos indivíduos segundo a lei:

$$\begin{aligned} x_g &= \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2 \\ - 0,1 &< \alpha < 1,1 \end{aligned} \quad (21)$$

Onde  $x_g$  o novo indivíduo gerado e  $x_1$  e  $x_2$  seus ancestrais.  $\alpha$  é um número aleatório gerado para cada novo indivíduo e determinante para a polarização e extrapolação. Os novos indivíduos gerados estão necessariamente sobre o segmento de reta determinada por  $x_1$  e  $x_2$  e seus extremos ultrapassam os ancestrais em 10%.

A condição  $f_0(x_2) < f_0(x_1)$  deve ser respeitada e  $f_0(x)$  é a função objetivo a ser minimizada. A variável aleatória  $\alpha$  é gerada de acordo com a determinação se a operação de cruzamento será ou não polarizada. Caso seja,

$$\alpha = 1,4\beta_1\beta_2 - 0,2 \quad (22)$$

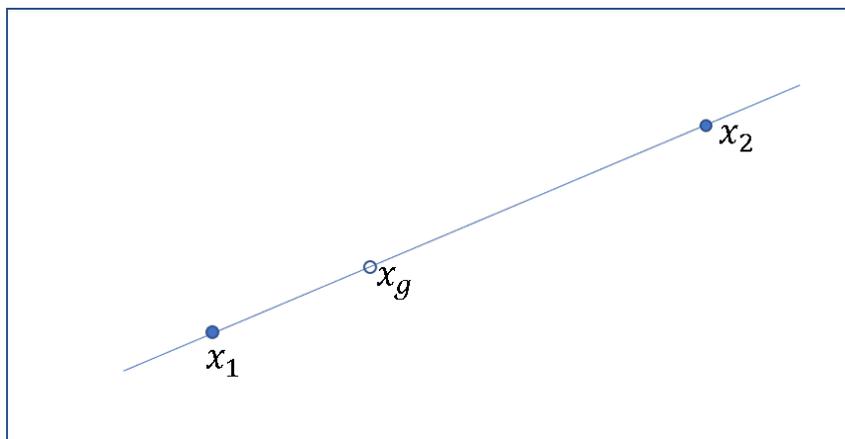


Figura 6 – A figura apresenta uma ilustração da operação de cruzamento utilizada pelo AGRP. O ponto  $x_g$  pode ser gerado em qualquer ponto do segmento de reta.

$\beta_1$  e  $\beta_2$  são variáveis aleatórias uniformes em  $[0, 1]$ . O segundo indivíduo é sempre escolhido sem polarização e nesse caso  $\alpha$  assume um valor aleatório de distribuição uniforme em  $[0, 1]$ . A Figura 6 ilustra a operação de cruzamento sobre um segmento de reta. Como a operação de cruzamento pode extrapolar a região viável, é necessário realizar uma operação que corrija indivíduos assim gerados. Para essa correção é utilizada uma operação de reflexão

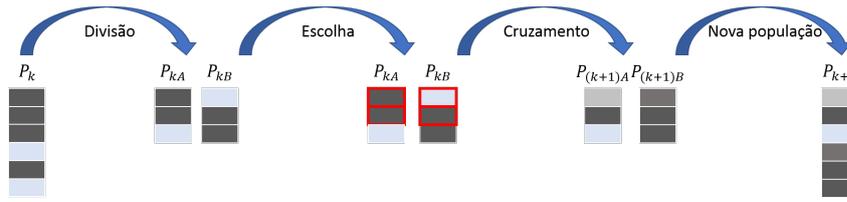


Figura 7 – Exemplo de uma operação de cruzamento, partindo de uma população  $P_k$  para uma população  $P_{k+1}$

O operador de mutação insere o fator de imprevisibilidade na geração de uma nova população. Assim como na natureza, um indivíduo é selecionado de maneira aleatória para sofrer uma mutação qualquer. O método baseia-se em determinar para cada indivíduo da população se este sofrerá ou não mutação, com probabilidade igual a  $pM$ . Caso o indivíduo seja selecionado para sofrer mutação, é gerado um vetor  $\delta$  cujas componentes são definidas por:

$$\delta_i = 0,05\beta_i(X_S - X_I)_i \quad (23)$$

Onde  $\beta_i$  é um número aleatório no intervalo  $(0,1)$ .  $x_S$  é o vetor de restrições superiores e  $x_I$  o vetor de restrições inferiores.

A mutação é então aplicada ao indivíduo  $(x_m)$ .

$$x_m = x + \delta \quad (24)$$

Durante a etapa de avaliação a função objetivo é avaliada para todos os indivíduos da população.

A função objetivo é então injetada na função de ajuste, para realização da operação de seleção, e é descrita em [Takahashi \(2007\)](#) como:

Seja  $J$  o vetor das avaliações da função objetivo para os  $N$  indivíduos da população. A

equação da função de ajuste (FT) é dada por:

$$\begin{aligned}
 \bar{J} &= \text{média}(J) \\
 J_M &= \text{max}(J) \\
 J_m &= \text{min}(J) \\
 v &= \frac{(\gamma J_m - J_M)}{\gamma - 1} \\
 J_m \geq v &\implies \begin{cases} \alpha = \frac{\bar{J}(\gamma - 1)}{J_M - 1} \\ \beta = \frac{\bar{J}(J_M - \gamma \bar{J})}{J_M - \bar{J}} \end{cases} \\
 J_m < v &\implies \begin{cases} \alpha = \frac{\bar{J}}{J_M - J_m} \\ \beta = -\frac{(\bar{J} J_m)}{J_M - J_m} \end{cases} \\
 FT &= \alpha J + \beta
 \end{aligned} \tag{25}$$

É realizada uma seleção de N indivíduos dentre os N indivíduos existentes, sendo que cada indivíduo pode ser selecionado mais de uma vez. A probabilidade de um indivíduo ser selecionado a cada vez é igual ao valor da fração de sua função de ajuste em relação à soma das funções de ajuste de todos os indivíduos. Esse tipo de seleção é conhecido como “Roleta”.

Seja  $FT_i$  o valor da função de ajuste do indivíduo i, então a probabilidade do indivíduo ser selecionado  $pS_i$  é dada por:

$$pS_i = \frac{FT_i}{\sum FT_i} \tag{26}$$

Caso o melhor indivíduo não tenha sido selecionado para a nova população, ele é nela introduzido, com a exclusão de um elemento qualquer, escolhido aleatoriamente. Essa operação é chamada de *Elitismo*.

# Capítulo 3

## Metodologia

Neste capítulo discutiremos a metodologia adotada e apresentaremos o que foi desenvolvido ou utilizado como ferramental para o desenvolvimento da pesquisa. Será apresentado o *framework* de dinâmica molecular gerado para este trabalho e a metodologia utilizada para coleta dos dados. Os métodos de otimização desenvolvidos serão apresentados, bem como a justificativa de sua utilização para análise dos resultados.

### 3.1 Delineamento da pesquisa

A pesquisa foi dividida em duas vertentes, a primeira trata da simulação de Dinâmica Molecular e a segunda do uso da Otimização como ferramenta de ajuste de curvas a ser utilizada na análise dos dados da simulação.

A Figura 8 apresenta uma visão geral do processo utilizada para geração dos dados e realização do ajuste via otimização.

#### 3.1.1 Simulação de Dinâmica Molecular

Todo o projeto de simulação da Dinâmica Molecular tem como objetivo a geração dos dados numéricos da função resposta de uma força  $F_0$  sobre um substrato de grãos. A execução do processo como um todo exige grande esforço computacional, e conseqüentemente tempo. Neste trabalho, para geração dos resultados necessários com a precisão necessária para a simulação, a execução de um processo de simulação pode demandar dias.

De modo a permitir o aproveitamento de implementação existente, o desenvolvimento do programa de simulação foi realizado em C++. Buscando agilidade na análise dos resultados, optamos por manter os dados gerados em um banco de dados relacional, evitando assim o tratamento via arquivos texto.

O programa de simulação consiste de algumas etapas que serão apresentadas em seguida.

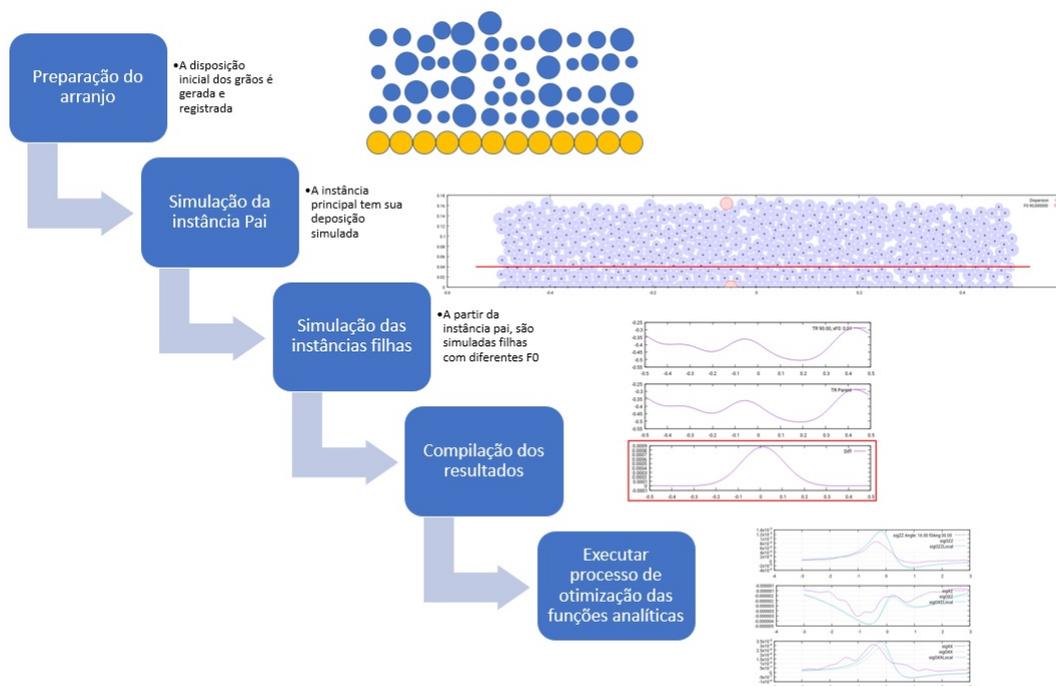


Figura 8 – Metodologia

Para fins de nomenclatura, neste trabalho, cada simulação de dinâmica molecular será chamada de “instância”. As instâncias geradas podem ser associadas, em um relacionamento de *Pai x Filha*. Uma instância *Pai* é caracterizada por partir do momento em que os grãos ainda se encontram sem contato algum e além disso a força  $F_0 = 0$ . Uma instância *filha* é gerada a partir de uma instância *Pai* em equilíbrio e a força  $F_0 \neq 0$ . A simulação da dinâmica molecular para as instância considera condições periódicas de contorno, ou seja, para todos os efeitos os sistema só é limitado na base. Uma instância de simulação é encerrada caso a mesma atinja o equilíbrio ou o limite de iterações configurado seja alcançado.

### 3.1.1.1 Preparação dos grãos

Existe uma infinidade de maneiras de preparação dos grãos para a simulação e cada uma delas pode influenciar nos resultados obtidos ao final da mesma. Em [Atman et al. \(2005b\)](#) é realizado um estudo sobre a influência da preparação na configuração final da simulação. Para este trabalho o processo de preparação escolhido é do tipo *Rain-Like*. Nesta preparação os grãos são gerados com raios variando, aleatoriamente, entre um raio mínimo ( $R_{min}$ ) e um raio máximo ( $R_{max}$ ). Cada grão é posicionado de modo a não ter contato algum, sendo portanto um grão livre. A distribuição dos grãos é tal que a largura do substrato possui aproximadamente  $2\sqrt{N}$  grãos e a altura aproximadamente  $0,5\sqrt{N}$  grãos. A base do substrato é formada por grãos de mesmo raio  $R_{max}$ , fixos e em contato de modo

a não permitir a passagem de qualquer dos grãos livres. A escala da disposição dos grãos é ajustada de modo que todos os grãos estejam posicionados em um intervalo de tamanho 1, e definido como  $[-0,5, 0,5]$ . A Figura 9 ilustra a situação final da preparação dos grãos da simulação.

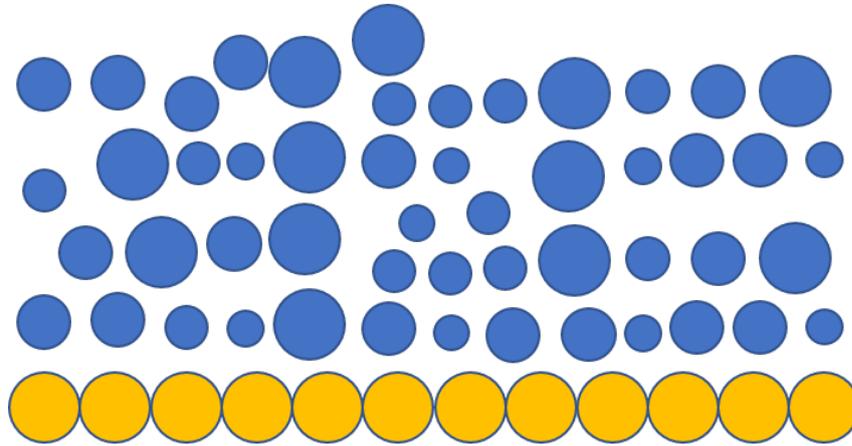


Figura 9 – A ilustração acima apresenta a ideia do processo de preparação dos grãos. Grãos em amarelo são fixos e os demais são livres.

Ao iniciar a simulação, a gravidade será responsável por iniciar o movimento dos grãos e o efeito chuva que dá o nome a essa preparação é iniciado.

O resultado da preparação é salvo no banco de dados, para uso do processo de deposição.

### 3.1.1.2 Simulação da Deposição dos Grãos - Instância Pai

A simulação da deposição da instância pai é feita a partir do resultado da preparação realizada anteriormente. A ação da gravidade é iniciada e os grãos partem do repouso em um processo de queda livre.

As etapas da simulação para cada passo de tempo são:

#### 3.1.1.2.1 Busca de Vizinhos

A busca de vizinhos representa uma adaptação no algoritmo de dinâmica molecular para evitar que a operação de detecção de contatos tenha que ser realizada para todos os grãos do arranjo em todos os passos da simulação, para tanto esta consiste na criação de uma lista ( $l_v^i$ ) indexada para cada grão (i corresponde a um grão), contendo os vizinhos mais próximos. O algoritmo realiza uma avaliação de todos os grãos e cada grão cuja distância seja menor que um fator, tomado arbitrariamente como  $2, 2R_{max}$ , do grão investigado será considerado um vizinho deste. A sub-rotina tem complexidade  $O(n^2)$  e é executada em uma frequência configurável para a simulação.

Se executada de forma muito frequente, o efeito sobre o custo computacional é grande, podendo eliminar os benefícios de seu uso, por outro lado, se executada menos que o necessário, imprecisões podem ocorrer na simulação. Neste trabalho, a busca de vizinhos foi configurada para ser executada a cada 1000 iterações, número considerado ideal em [Atman et al. \(2014\)](#), para que nenhuma iteração entre os grãos seja perdida.

Como resultado deste método, construímos a lista  $l_v^i = \{viz_1, viz_2, \dots, viz_n\}$  contendo todos os vizinhos do grão  $i$ .

### 3.1.1.2.2 Método Preditor

Essa sub-rotina é responsável por prever as posições dos grãos no próximo passo de tempo. São calculadas as seguintes variáveis do modelo para cada grão ( $i$ ):

- $x_i^p$ : Posição prevista.
- $v_i^p$ : Velocidade prevista.
- $a_i^p$ : Aceleração prevista.
- $\theta_i^p$ : Posição Angular prevista.
- $\omega_i^p$ : Velocidade Angular prevista.
- $\alpha_i^p$ : Aceleração Angular prevista.

$$\begin{aligned}
 x_i^p &= x_i + \delta t v_i + \frac{a_i \delta t^2}{2} \\
 v_i^p &= v_i + \delta t a_i \\
 a_i^p &= a_i \\
 \theta_i^p &= \theta_i + \delta t \omega_i + \frac{\alpha_i \delta t^2}{2} \\
 \omega_i^p &= \omega_i + \delta t \alpha_i \\
 \alpha_i^p &= \alpha_i
 \end{aligned} \tag{27}$$

Em que o sobrescrito  $p$  indica a previsão, a variável sem o sobrescrito corresponde ao valor atual e  $\delta t$  corresponde ao passo de tempo da simulação.

### 3.1.1.2.3 Detecção de Contatos

Essa sub-rotina é responsável por identificar os pares de grãos em contato e se utiliza da lista de vizinhos  $l_v^i$  de um grão e das posições calculadas pelo Método Preditor.

Se um contato é identificado conforme ilustrado na Figura 3, este é adicionado na lista de contatos  $l_c^i$  do passo de tempo.

Supondo que  $g_1$  e  $g_2$  são grãos da dinâmica molecular e  $r_1$  e  $r_2$  seus respectivos raios, e que  $g_2 \in l_v^1$ , os grãos  $g_1$  e  $g_2$  vão ser avaliados para existência de um contato entre eles.

Para tanto, a distância entre seus centros ( $d$ ) deve ser tal que  $d < r_1 + r_2$ . Caso estejam em contato, o índice 2 será adicionado à lista  $l_c^1$ .

#### 3.1.1.2.4 Cálculo de Forças

Essa sub-rotina é responsável por calcular as forças em ação sobre um grão. Todo grão na simulação possui pelo menos a força da gravidade em ação, situação em que o grão não possui contatos. Para cada um dos contatos existentes no passo de tempo (listas  $l_c^i$ ), é realizado um cálculo das forças elástica, amortecimento e atrito, conforme apresentado na seção 2.1.3.

#### 3.1.1.2.5 Método Corretor

A sub-rotina do método corretor é responsável por corrigir as variáveis do modelo para cada grão, com base no erro de aferição da aceleração de cada grão. Isso é possível por se conhecer as forças envolvidas com cada um dos grãos da simulação.

As variáveis atualizadas são:

- Velocidade
- Aceleração
- Velocidade Angular
- Aceleração Angular

#### 3.1.1.2.6 Verificação de Equilíbrio

A instância de simulação é considerada em equilíbrio se as seguintes condições são satisfeitas:

- Não existem grãos deslizantes.
- A energia cinética do sistema é menor que um erro  $\epsilon_1$ .
- A resultante de forças do sistema é menor que um erro  $\epsilon_2$

#### 3.1.1.3 Cálculo do *Tension* - Instância Pai

Ao final da simulação de cada instância é realizado o cálculo da função resposta, assim como apresentado na Equação 14. É importante ressaltar que o perfil de resposta varia com altura do “sensor”. Este sensor pode ser descrito como referência de altura no arranjo de grãos para o cálculo da função resposta. A altura do sensor é definida como a quantidade de diâmetros médios a partir da base do arranjo de grãos ( $h = 0$ ).

Seja,  $d_i$  o diâmetro do grão livre  $i$  e  $N$  o número de grãos livres.

$$\langle d \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N d_i}{N} \quad (28)$$

A posição do sensor,  $P_s$ , é um número inteiro, tal que a altura do sensor,  $h_s = P_s \langle d \rangle$ . É importante observar também que o perfil da função resposta corresponde ao intervalo de deposição dos grãos  $[-0,5, 0,5]$ . A Figura 10 exemplifica a deposição de 400 grãos com o sensor realçado em vermelho. A diferença entre os perfis gerados em diferentes alturas de sensor podem ser observadas nas figuras 11 e 12.

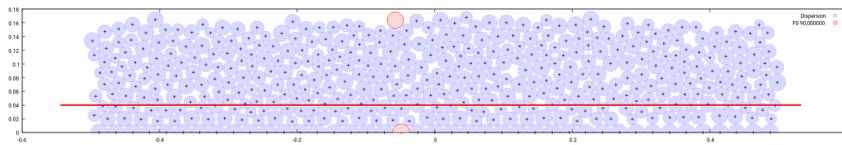


Figura 10 – O sensor para cálculo da função resposta é ilustrado como uma linha vermelha ao longo de todo arranjo de grãos. O arranjo apresentado possui 400 grãos.  $F_0$  é aplicada no grão em vermelho no topo

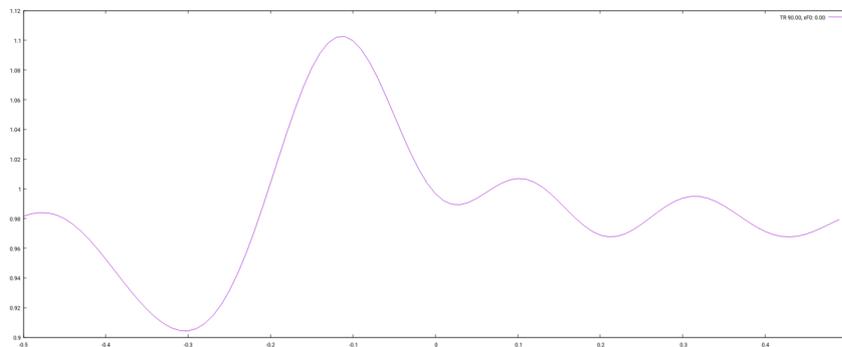


Figura 11 – Exemplo de perfil de resposta com  $P_s = 0$  para o arranjo de 400 grãos.

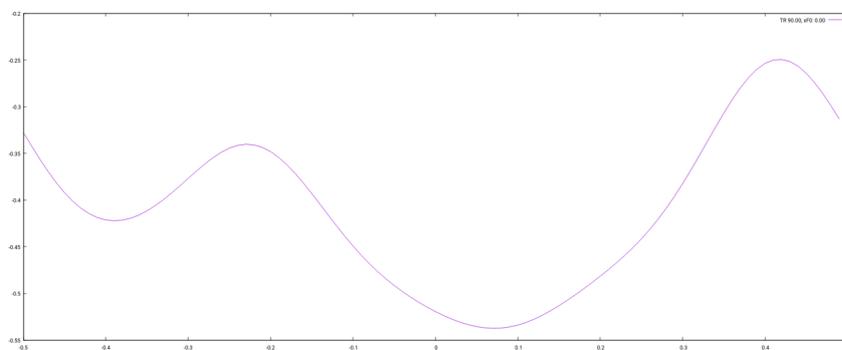


Figura 12 – Exemplo de perfil de resposta com  $P_s = 4$  para o arranjo de 400 grãos.

#### 3.1.1.4 Simulação da Deposição dos Grãos - Instância Filho

A simulação de uma instância dita *filha* de outra instância parte do momento em que a instância de referência, dita *pai* alcança o equilíbrio. A instância *filha* é gerada como uma cópia e inicia sua simulação, a única diferença é que uma força  $F_0$  é então aplicada sobre um grão próximo a superfície. Seja  $m_i$  a massa do grão livre  $i$ ,  $N$  o número de grãos livres,  $g$  a aceleração da gravidade e  $\rho$  um número real positivo.

$$F_0 = \rho g \frac{\sum_{i=1}^N m_i}{N} \quad (29)$$

A simulação da aplicação de  $F_0$  é realizada de maneira crescente durante 10000 iterações, até que alcance o valor correspondente da Equação 29. Isso é feito para evitar alterações substanciais no arranjo de grãos, tais como, alteração do número total de contatos ou grãos deslizantes.

O grão onde  $F_0$  é aplicada é selecionado de maneira aleatória para cada instância *filha* simulada, sendo sorteado da lista grãos próximos à superfície.

Os passos da simulação da instância *filha* são os mesmos da instância *Pai*. Quando o equilíbrio é alcançado, um par de instâncias relacionados *Pai x Filho* é efetivamente criado.

#### 3.1.1.5 Cálculo da Função Resposta - Instância Filho

O cálculo da função resposta da instância filha é então realizado e um novo perfil de resposta é criado. Não há diferença no processo de cálculo de função resposta entre as instâncias, entretanto, para cada par de instâncias "Pai x Filho", ao se calcular a diferença entre os perfis de resposta de cada um, é gerado um perfil de resposta para a força aplicada  $F_0$ . A Figura 13 apresenta o resultado da diferença, onde o perfil de sino esperado para a função resposta pode ser visualizado.

#### 3.1.1.6 Cálculo do Perfil de Resposta Médio de $F_0$

Para efeito de nomenclatura definimos uma sessão de simulação como a realização de  $n$  instâncias ( $I$ ) de simulação tais que  $I_0$  corresponde a instância pai e os demais  $I_i$  correspondem a instâncias filhas,  $i$  é um número do conjunto  $[1..n]$ . Cada uma das instâncias  $I_i$  possui um cálculo de função resposta para cada  $P_s$  (posição do sensor) configurado. Esse resultado é único para a posição, ou grão, onde  $F_0$  foi aplicada.

Isso pode ser observado ao avaliar as figuras 13 e 14. A primeira tem  $F_0$  aplicada próxima ao ponto  $x = -0,01$  e a segunda em  $x = -0,26$ .

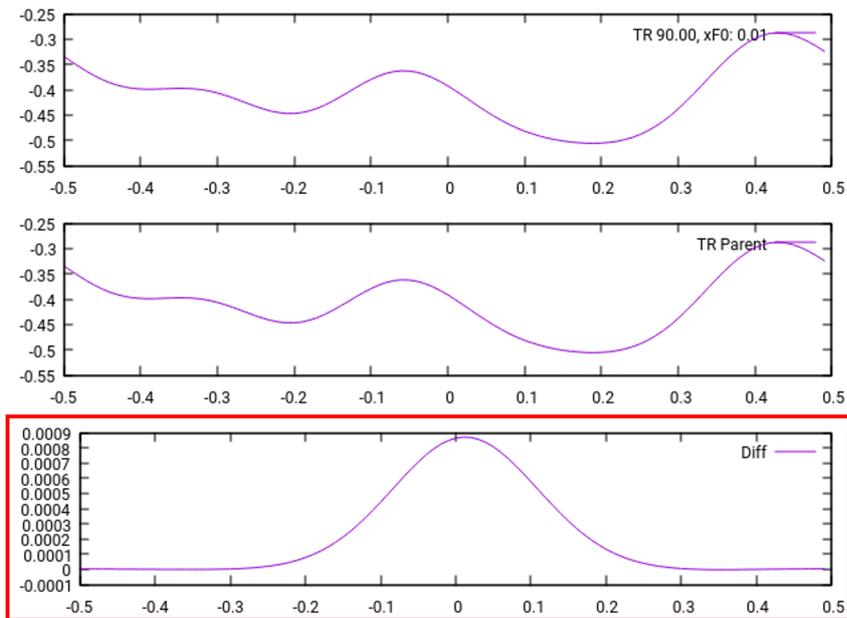


Figura 13 – Exemplo de perfil de resposta com  $P_s = 4$  para o arranjo de 400 grãos e apresentação do perfil de  $F_0$ . A curva “Diff” corresponde à diferença “Filho - Pai”

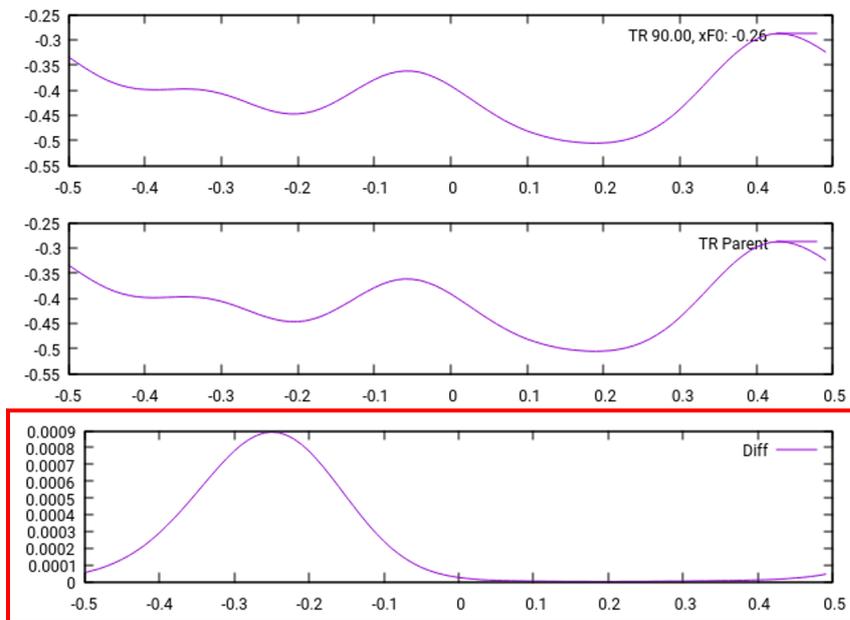


Figura 14 – Exemplo de perfil de resposta com  $P_s = 4$  para o arranjo de 400 grãos e apresentação do perfil de  $F_0$  realçado em vermelho

Para cálculo do perfil resposta médio, é necessário que todas as instâncias filhas  $I$  estejam representadas na mesma escala e posição relativa, para tanto definimos  $I_i^0$  como o perfil resposta de  $I_i$  reposicionado de modo que o ponto  $x$  onde  $F_0$  é aplicada equivale a origem ( $x = 0$ ).

O perfil resposta médio de  $F_0$ ,  $\bar{I}$ , é então definido como a média dos perfis  $I_i^0$ . A Figura 15

representa  $\bar{I}$  para uma instância Pai.

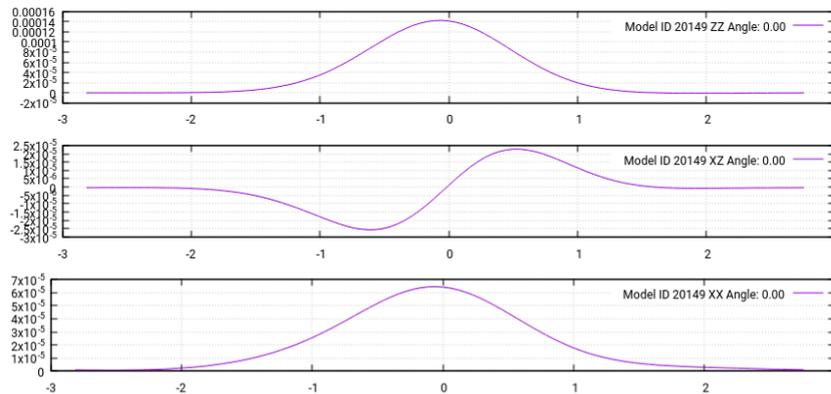


Figura 15 – Exemplo de perfil de resposta médio  $\bar{I}$  com  $P_s = 4$  para o arranjo de 400 grãos. De cima para baixo, primeiro gráfico reflete perfil de resposta em relação a ZZ, segundo gráfico em relação a XZ, terceiro gráfico em relação a XX

### 3.1.1.7 Parâmetros da Dinâmica Molecular

Cada instância de dinâmica molecular possui um conjunto de parâmetros que podem ser alterados para geração de resultados diferentes, aproximando diferentes comportamentos de materiais diferentes.

Para todas as instâncias executadas para essa dissertação é possível configurar as seguintes opções:

- N - Número de grãos.
- $\alpha$  - Ângulo de inclinação em relação a horizontal.
- $\theta$  - Ângulo de aplicação da força  $F_0$
- Kn - Coeficiente de elasticidade em relação a normal do contato entre grãos. Característico do material.
- Ks - Coeficiente de elasticidade em relação a tangente do contato entre grãos.
- $\mu$  - Coeficiente de atrito.
- $R_{min}$  - Raio mínimo dos grãos.
- $R_{max}$  - Raio máximo dos grãos.
- $\rho$  - Fator multiplicador de  $F_0$ .

Os parâmetros utilizados nas nossas simulações podem ser visualizados na Tabela 1.

O coeficiente de amortecimento é calculado de modo a ser correspondente a 90% do amortecimento crítico, conforme simulações de [Atman et al. \(2014\)](#). O amortecimento crítico

Parâmetro	Valor
N	3600
$\alpha$	[0..20]
$\theta$	45, 60, 90
Kn	1000
Ks	750
$\mu$	0,5
$R_{min}$	0,3
$R_{max}$	0,5
$\rho$	[0..1]

Tabela 1 – A tabela apresenta os valores utilizados para os parâmetros da Dinâmica Molecular

$\gamma$  pode ser definido como:

$$\gamma = \sqrt{2 \min \{M\}} \quad (30)$$

Onde M é o conjunto de massas dos grãos livres.

### 3.1.2 Ajuste às equações analíticas

Como resultados dos trabalhos de (Otto et al., 2003), o conjunto de equações analíticas para a função resposta em um arranjo de granulados foi desenvolvido. O conhecimento dessas equações permite sua utilização em abordagens de ajuste numérico, visando encontrar os parâmetros que descrevem os dados encontrados.

As funções analíticas são definidas como  $\sigma_{\alpha\beta}(x, \Omega)$ , onde  $\alpha$  e  $\beta$  são índices correspondentes aos eixos coordenados X e Z. Sendo assim, temos 4 componentes para a função:

- $\sigma_{XX}(x, \Omega)$
- $\sigma_{XZ}(x, \Omega)$
- $\sigma_{ZX}(x, \Omega)$
- $\sigma_{ZZ}(x, \Omega)$

$x$  é um número real no intervalo [-0,5, 0,5].  $\Omega$  é um vetor em  $R^4$  e corresponde ao conjunto de parâmetros físicos do arranjo de grãos, tal que  $\Omega = (\tau, R, T, \nu_{21})$ .

Onde:

$$\begin{aligned} T &= \frac{E_2}{E_1} = \frac{\nu_{21}}{\nu_{12}} \\ R &= \frac{1}{2} \cdot E_2 \cdot \left( \frac{1}{G} - \frac{\nu_{12}}{E_1} - \frac{\nu_{21}}{E_2} \right) \end{aligned} \quad (31)$$

As variáveis utilizadas para definir R e T são as propriedades elásticas do material.

- $E_1$  corresponde ao módulo de Young na direção do eixo ortotrópico 1 (Direção em que o material apresenta maior resistência a deformação).
- $E_2$  corresponde ao módulo de Young na direção do eixo ortotrópico 2 (Direção em que o material apresenta menor resistência a deformação).
- $v_{12}$  e  $v_{21}$  são coeficientes de Poisson relacionados a deformação longitudinal dos grãos.
- G corresponde ao coeficiente de cisalhamento do material.

A variável  $\tau$  corresponde ao ângulo entre o eixo ortotrópico 1 e a direção normal do substrato. Vide Figura 1.

Com base na definição das variáveis R e T e um pouco de álgebra chegamos na Equação 32 em que temos do lado esquerdo a relação de variáveis desconhecidas do modelo e do lado direito variáveis que buscamos ao realizarmos a operação de ajuste.

$$\frac{G}{E_1} = \frac{T}{2(R + v_{21})} \quad (32)$$

As funções  $\sigma$  tratam de integrais com solução numérica somente. Os métodos responsáveis por sua integração foram utilizados em [Atman et al. \(2014\)](#) e também são aproveitados neste trabalho.

Podemos definir  $\bar{I}_{\alpha\beta}$  como o perfil resposta numérico médio em relação aos eixos  $\alpha$  e  $\beta$ ,  $\alpha \in [X, Z]$  e  $\beta \in [X, Z]$ . Resultando, assim como a função  $\sigma$  em:

- $\bar{I}_{XX}(x)$
- $\bar{I}_{XZ}(x)$
- $\bar{I}_{ZX}(x)$
- $\bar{I}_{ZZ}(x)$

Os perfis resposta gerados tanto para as equações analíticas, quanto numéricas podem ser descritos, devido a discretização, como  $(x_k, \sigma_{\alpha\beta}(x_k, \Omega))$  e  $(x_k, \bar{I}_{\alpha\beta}(x_k))$  respectivamente e podemos seguir para a definição da função objetivo.

$$\Delta = \min_{\Omega} \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_{[\alpha\beta], \theta} \sum_{k=1}^{N_p} \left( \frac{\bar{I}_{\alpha\beta}(x_k) - \sigma_{\alpha\beta}(x_k, \Omega)}{\delta \bar{I}_{\alpha\beta}(x_k)} \right)^2} \quad (33)$$

Sujeito a  $\Omega \in V$

Onde  $\delta \bar{I}_{\alpha\beta}$  corresponde ao desvio padrão da média realizada entre os perfis de resposta,  $\theta$

corresponde ao ângulo de aplicação de  $F_0$  em relação a normal,  $N_p$  corresponde ao número de pontos do ajuste e  $V$  ao conjunto de pontos viáveis dos parâmetros elásticos e tem seus valores definidos na Tabela 2.

### 3.1.3 Algoritmos de Otimização

Nessa seção discutiremos o que foi desenvolvido em relação aos algoritmos de otimização considerados necessários para a pesquisa deste trabalho e busca do ponto ótimo para a função objetivo definida na Equação 33 percorrendo o espaço de valores viáveis de  $\Omega$ .

Com base nos resultados apresentados em Atman et al. (2014) definimos que uma abordagem segura para o problema seria considerá-lo como pertencente a classe problemas não-lineares e multimodais. Para avaliação da melhor estratégia foi feito um estudo de como a função objetivo se comporta combinando-se as variáveis de modo a produzir um mapa de calor (*Heat Map*) de todas as combinações de duas variáveis considerando as demais constantes. Isso foi feito para avaliar a função em relação a multimodalidade.

A estratégia para geração dos gráficos de calor leva em consideração os limites inferiores e superiores de cada uma das variáveis de  $\Omega$ , estas são combinadas aos pares e para cada par são gerados vários pontos no espaço viável onde a função objetivo é avaliada. As demais variáveis assumem seus valores constantes conforme apresentado na Tabela 2.

Variável	Limite Inferior	Limite Superior	Valor Constante
$\tau$	0	$\pi$	$\frac{\pi}{2}$
R	0,5	2	1,25
T	0,5	1	0,75
$v_{21}$	0,15	0,25	0,2

Tabela 2 – A tabela apresenta os valores de limites superior, inferior e constantes utilizados tanto na otimização quanto no processo de avaliação da função objetivo

Como resultado da análise da função objetivo, consideramos a combinação de dois algoritmos de otimização, um Algoritmo Genético, utilizado para encontrar um ponto candidato a ótimo global e em seguida, partindo deste ponto, executar uma busca local com o algoritmo elipsoidal, visando encontrar melhora do resultado.

#### 3.1.3.1 Algoritmo Genético Real Polarizado

A implementação do Algoritmo Genético Real Polarizado (AGRP) seguiu a definição dada em Ramos et al. (2003). O desenvolvimento foi realizado em linguagem C++ em ambiente Linux e utilizando a biblioteca livre para álgebra linear Eigen<sup>1</sup>. O programa insere a possibilidade

<sup>1</sup><https://eigen.tuxfamily.org/dox/>

de processamento paralelo na avaliação da função objetivo, no processamento da mutação e do cruzamento, e foi implementado de forma genérica, permitindo seu uso para outras funções que não função a  $\Delta$ .

Para auxiliar o ajuste dos parâmetros da AGRP, foi utilizada uma biblioteca de otimização Não-Linear chamada NLOpt<sup>2</sup> e testes comparativos de execução com a função  $\Delta$  foram realizados.

Método	Duração (min)	$\tau$	$R$	$T$	$v_{12}$	Resultado
NLOPT	300	2,77	0,88	0,5	0,19	653,85
AGRP	60	2,87	1,84	0,63	0,18	613,43
AGRP	75	2,89	1,51	0,55	0,22	613,19

Tabela 3 – A tabela apresenta os valores resultantes da comparação entre a biblioteca NLOPT e o AGRP desenvolvido.

A Tabela 3 apresenta a execução do NLOPT e do AGRP para a mesma instância de problema de otimização, apresentando um melhor comportamento do AGRP tanto no tempo de otimização quanto do melhor valor de função objetivo encontrado. Para os casos apresentados o AGRP foi até cinco vezes mais rápido e encontrou melhor resultado.

Parâmetro	Valor
Probabilidade de Mutação	5%
Tamanho da Mutação	2%
Probabilidade de Cruzamento	70%
Fator de extrapolação	0,2
Fator de dispersão	1,5
Probabilidade de polarização	20%
Tamanho da população	> 400

Tabela 4 – A tabela apresenta os valores utilizados para os parâmetros de configuração do AGRP

Uma configuração utilizada nesse trabalho corresponde aos parâmetros apresentados na Tabela 4.

As seguintes condições de parada foram consideradas para a implementação do AGRP:

- Número máximo de gerações
- Número de gerações sem encontrar melhora
- Estabilização do valor de função objetivo para a população (A diferença entre o maior valor encontrado e o menor valor encontrado ser menor que um erro).

<sup>2</sup><https://nlopt.readthedocs.io>

- Estabilização da população da geração. A maior diferença entre os pontos da população ser menor que um erro.

### 3.1.3.2 Busca Local

A motivação do uso do AGRP é buscar o ponto de ótimo de maneira global, tentando escapar das armadilhas de ótimos locais. Ao término da execução do AGRP, utilizamos um algoritmo de otimização não-linear clássico que possa iniciar sua busca a partir do ponto de ótimo encontrado, visando assim encontrar melhoras do valor encontrado pelo AGRP. Neste trabalho foi desenvolvido o algoritmo do Elipsoide.

#### 3.1.3.2.1 Implementação do Método Elipsoidal

A implementação do método elipsoidal foi realizada em C++ de maneira mais genérica possível, e se utilizando de programação paralela nos cálculos do gradiente. A decisão de implementação que teve que ser tomada foi somente a definição do tamanho inicial do Elipsoide, um tamanho inicial muito grande poderia levar para longe do ponto de ótimo e um tamanho inicial muito pequeno não permitiria que o método evoluísse. Dessa forma, a seguinte estratégia foi adotada:

Seja  $R_{inicial}$  o raio inicial do elipsoide e  $X_o$  o conjunto de pontos candidatos a ótimo que o AGRP encontrou durante sua execução. Tomamos arbitrariamente o subconjunto dos últimos 5 pontos encontrados ( $X_o^5$ ) e calculamos a maior distância entre eles, ou seja, se  $X_i \in X_o^5$  e  $X_j \in X_o^5$ , definimos  $d_{ij} = ||X_i - X_j||$ , e  $d_{ij}^M$  como o maior valor de  $d_{ij}$  encontrado, então  $R_{inicial} = 10d_{ij}^M$ .

Ao trocar o gradiente calculado pelo gradiente da restrição mais violada, forçamos o método a permanecer na região viável e nenhum outro mecanismo de garantia da viabilidade dos pontos encontrados é necessária.

As seguintes condições de parada foram consideradas para a implementação do método do Elipsoide:

- Número máximo de iterações.
- Número de iterações sem encontrar melhora.
- Tamanho ou “volume” do elipsoide.
- Estabilização dos últimos pontos encontrados. A maior diferença entre os pontos encontrados ser menor que um erro.
- Norma do gradiente calculado ser menor que um erro.

### 3.1.3.2.2 Implementação do Paralelismo

A implementação do processamento paralelo neste trabalho foi possível através da utilização da biblioteca para C++ *Open MP*<sup>3</sup>. A biblioteca permite incorporar processamento paralelo através de anotações em pontos das classes ou métodos dos programas, de maneira geral seu uso é simples e direto bastando o cuidado de controlar acesso concorrente às estruturas de dados do programa, no caso, vetores padrão do C++. O trecho de código abaixo apresenta o uso do paralelismo para cálculo do gradiente da função objetivo.

```
#if defined(_OPENMP) && USE_OMP==1
#pragma omp parallel for schedule(static)
#endif
for (size_t it = 0; it < s;++ it)
{
  GAVector deltaV(X);
  deltaV.setZero();
  deltaV[it] += delta;
  deltaV = X+deltaV;
  double_t f_deltaV = F(deltaV);
  double_t f = F(X);
#pragma omp critical
  (*ret)[it] = (f_deltaV - f)/delta;
}
```

Já para implementação do AGRP foi utilizado paralelismo na função objetivo e nos métodos de mutação e cruzamento, seguindo a mesma abordagem de paralelizar os laços de iteração sobre a população.

## 3.2 Coleta e tratamento de dados

Os dados gerados na pesquisa são resultados das execuções das simulações do modelo de dinâmica molecular e a consolidação de seus perfis de resposta. Posteriormente são gerados os dados da Otimização que considera a função objetivo definida em 33.

Para coleta dos dados de simulação foi utilizada uma instalação Linux com a distribuição OpenSuse onde os códigos foram compilados para 64bits utilizando g++. Foram executadas um total de 1824 simulações, com todos os dados salvos em uma base de dados relacional, PostgreSQL, gerando dados que ocupam 51GB de espaço em disco.

Desse modo todos os relatórios são gerados a partir de consultas SQL e ferramentas de Office.

---

<sup>3</sup><https://www.openmp.org/>

A base de dados é estruturada em tabelas relacionadas ao modelo de dinâmica molecular, tabelas relacionadas ao processo de otimização e views de consolidação dos perfis de resposta.

A Figura 16 apresenta o conjunto de tabelas específicas da dinâmica molecular. Sua principal entidade é a tabela *DMInstance* onde são registradas todas as instâncias de simulação com seus dados de configuração. A cada N iterações da simulação os resultados parciais são registrados, o que permite recuperação em caso de interrupção do processo de simulação.

A Figura 17 apresenta o conjunto de tabelas específicas do processo de otimização. Sua principal entidade é a tabela *Optimization\_exec* e registra dados como início e fim da otimização e parâmetros de configuração.

A Figura 18 apresenta o diagrama de visões de banco de dados utilizadas para consolidação dos resultados numéricos, facilitando e tornando automático o processo de geração dos perfis de resposta.

Figura 16 – Diagrama do modelo de dados relacional específico para a Dinâmica Molecular



Figura 17 – Diagrama do Modelo de Dados Relacional exclusivo para a parte de Otimização

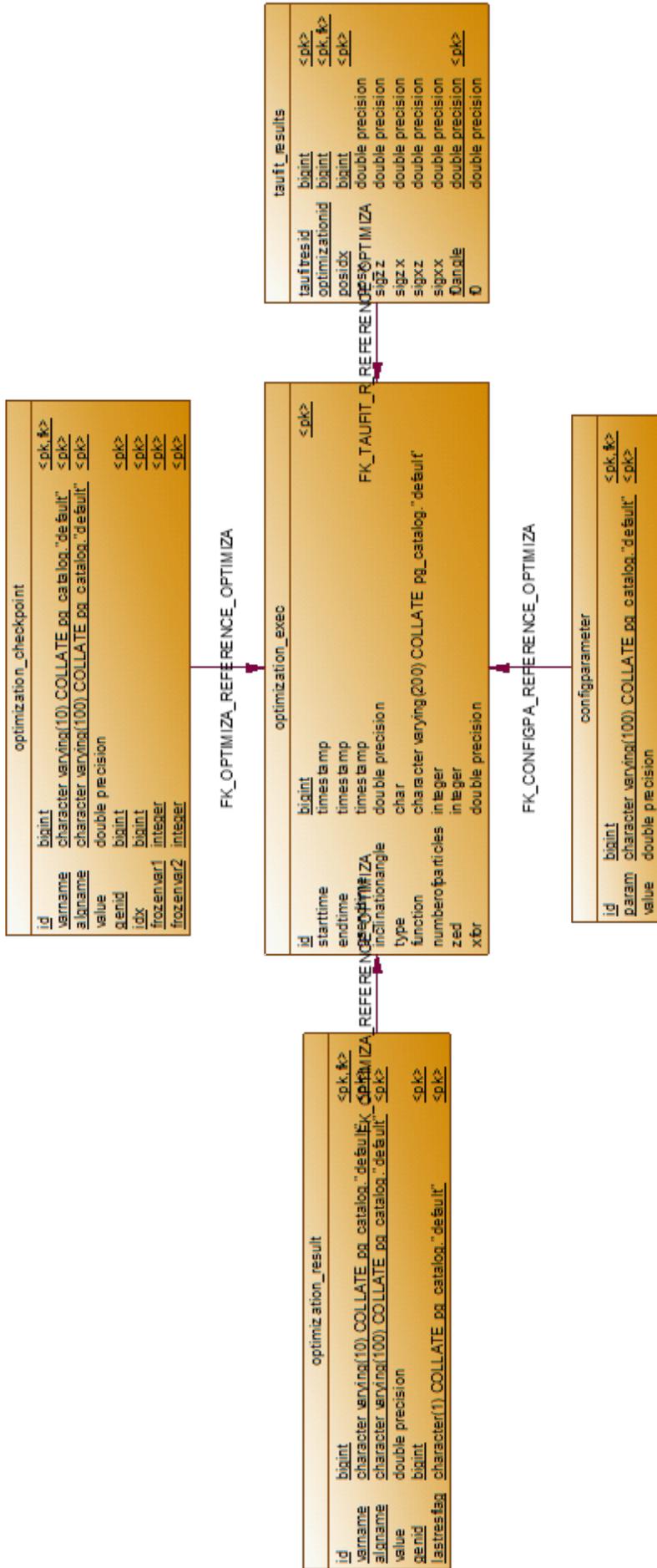
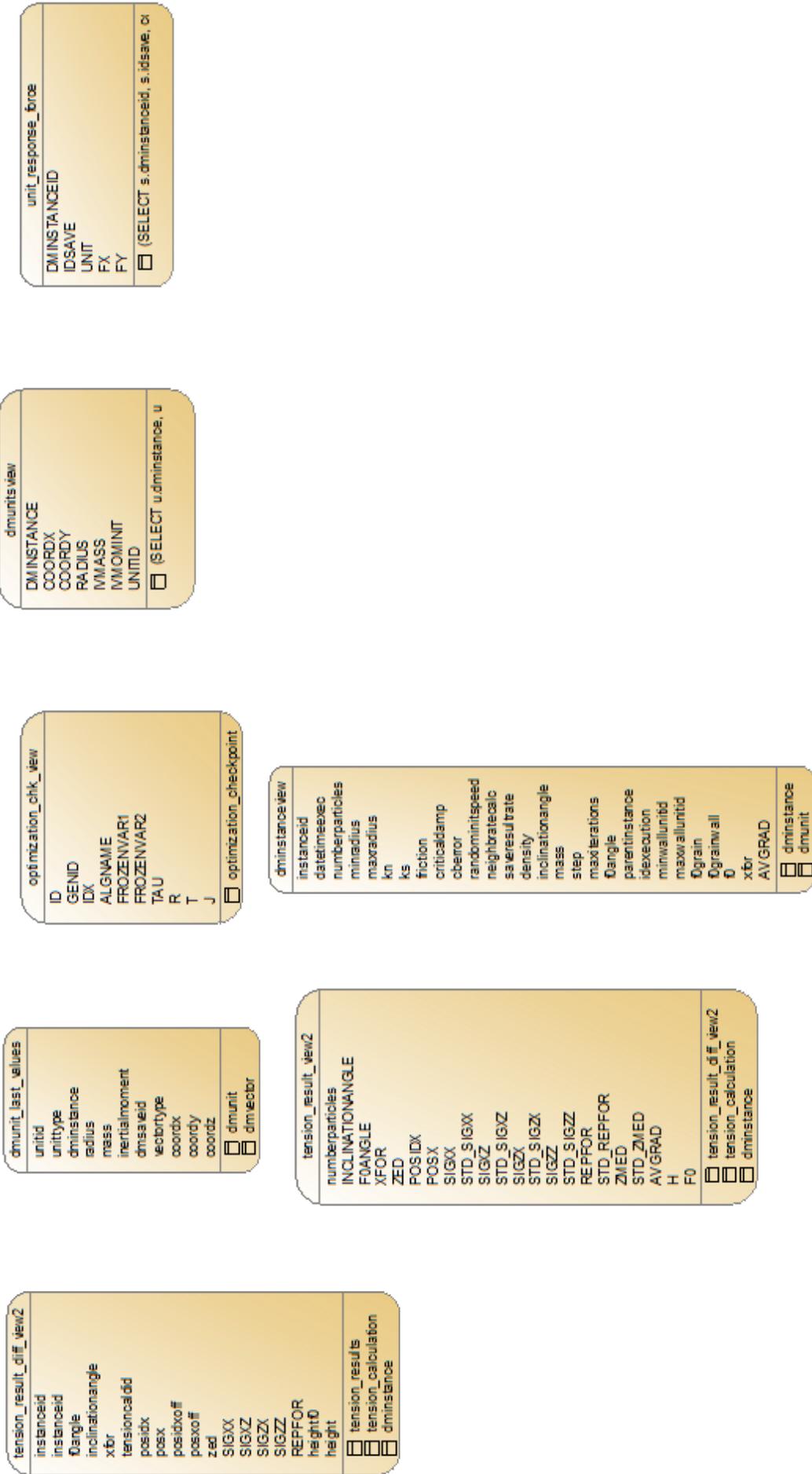


Figura 18 – Views de banco de dados relacionais desenvolvidas para geração de relatórios e consultas especializadas da dinâmica molecular



Para facilitar a visualização dos dados gerados, tanto pelas simulações quanto pelas execuções do programa de Otimização, foi desenvolvido um programa em C++ para permitir realizar a plotagem destes resultados. A Figura 19 apresenta a *interface* do programa.

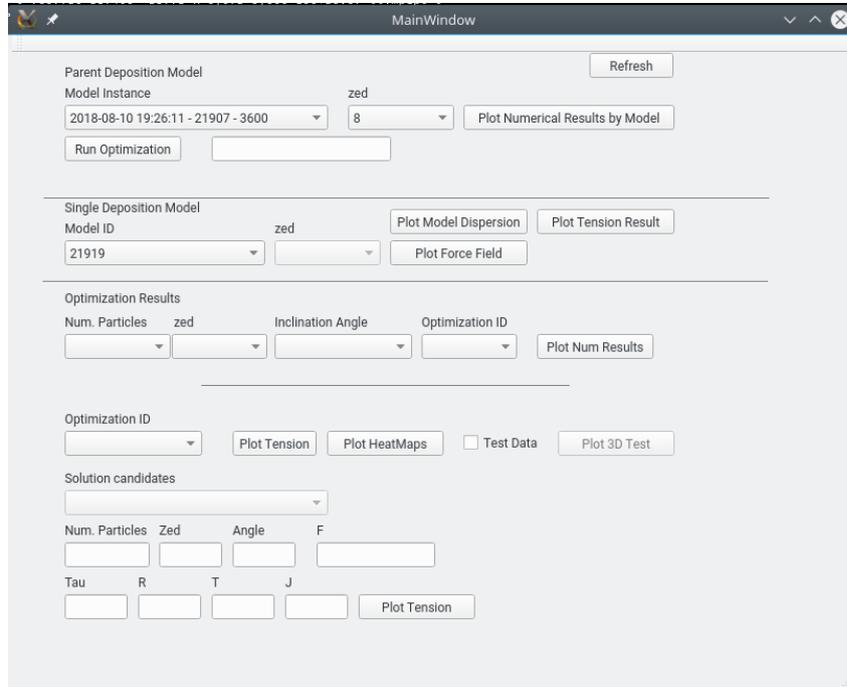


Figura 19 – Utilizada para visualização dos dados das simulações e otimizações executadas.

O programa permite visualizar dados de perfil de resposta de instâncias individuais, da média dos perfis de resposta de um conjunto de instâncias Pai x Filha, o diagrama de distribuição dos grãos e o grão onde a força  $F_0$  foi aplicada, entre outras opções.

A orientação de como ter acesso aos códigos fontes dos programas utilizados pode ser encontrada no apêndice A.

# Capítulo 4

## Análise de Resultados

Neste capítulo, apresentaremos os resultados encontrados com base na metodologia de pesquisa considerada. Primeiramente apresentaremos a classificação da função objetivo com base na produção dos mapas de calor. Seguiremos para apresentação dos resultados e perfis de tensão recuperados com as diversas execuções da simulação de dinâmica molecular. Posteriormente apresentaremos os resultados encontrados com auxílio do algoritmo de otimização e da Equação 32.

### 4.0.1 Análise da Função Objetivo e da Otimização

De acordo com resultados prévios em [Atman et al. \(2014\)](#), a função  $\Delta$  que deve ser minimizada pode apresentar vários mínimos locais. Essa característica da função foi confirmada nesse trabalho e a utilização do algoritmo genético se mostrou mais adequada para tentar encontrar o ótimo global.

Se observarmos as figuras 20, 21 e 22 veremos que a função apresenta comportamento de função convexa quando  $\tau$  é variável fixada. Por outro lado nas figuras 23, 24 e 25, a função  $\Delta$  apresenta características de multimodalidade e não-linearidade. Isso nos dá pistas que, caso  $\tau$  seja conhecido, o problema pode ter sua complexidade reduzida e eventualmente ser resolvido por um algoritmo mais eficiente para funções não-lineares de maneira inequívoca.

Número de Instâncias Total	1824
Número de instâncias Pai	70
Número médio de contatos	6426,12

Tabela 5 – Tabela que apresenta algumas estatísticas de Dinâmica Molecular utilizadas para essa dissertação

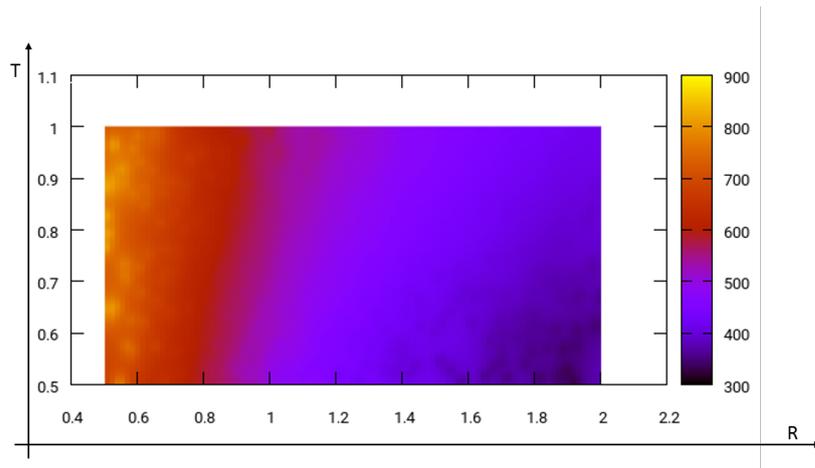


Figura 20 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis R e T considerando  $\tau$  e  $v_{21}$  com seus valores constantes.

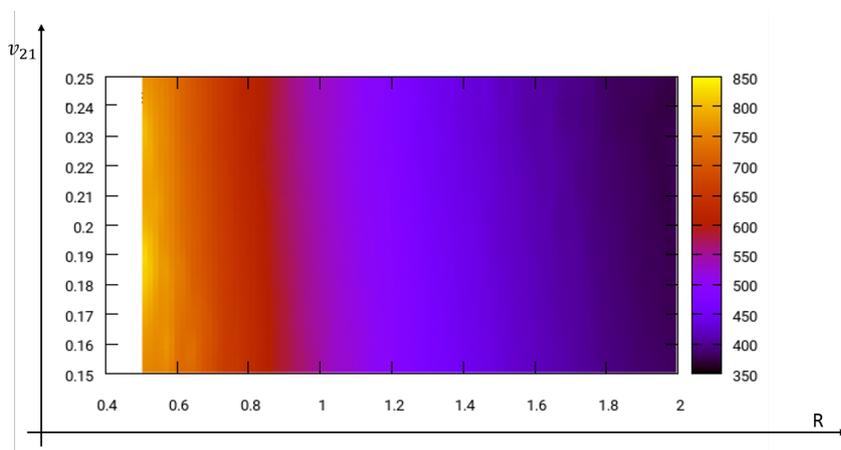


Figura 21 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis R e  $v_{21}$  considerando  $\tau$  e T com seus valores constantes.

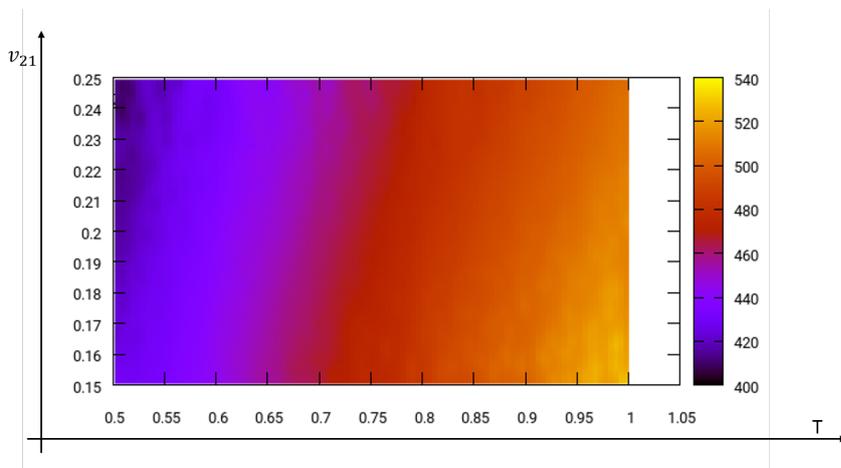


Figura 22 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis T e  $v_{21}$  considerando R e  $\tau$  com seus valores constantes.

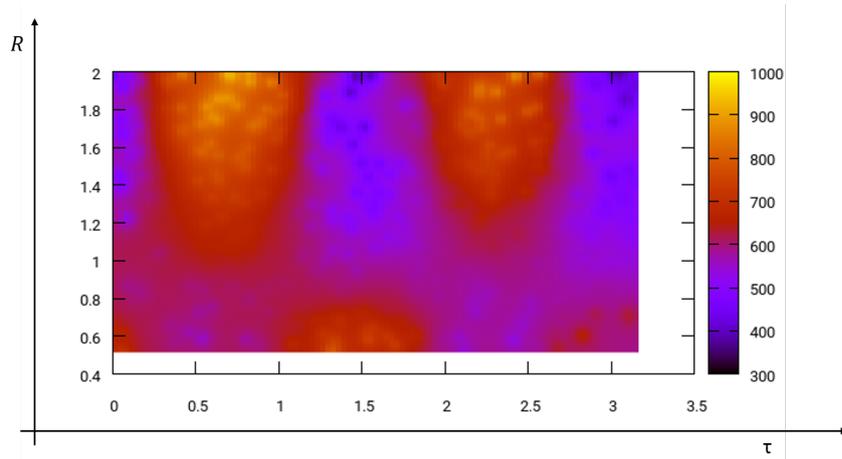


Figura 23 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis  $\tau$  e R considerando  $v_{21}$  e T com seus valores constantes.

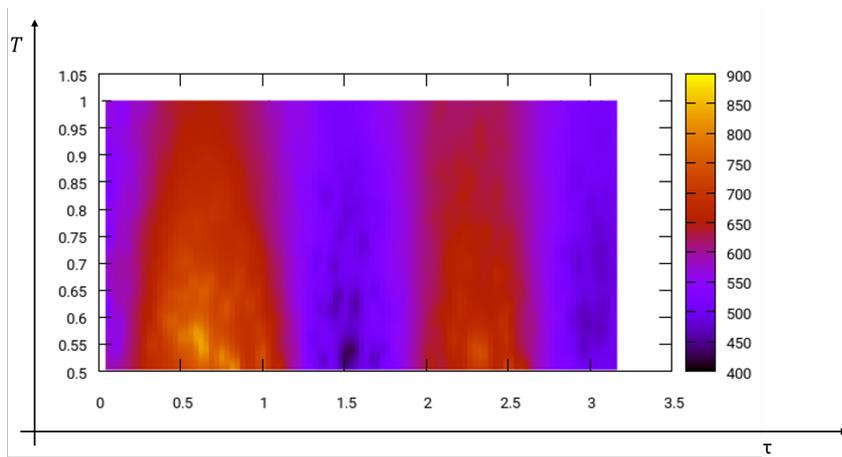


Figura 24 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis  $\tau$  e T considerando  $v_{21}$  e R com seus valores constantes.

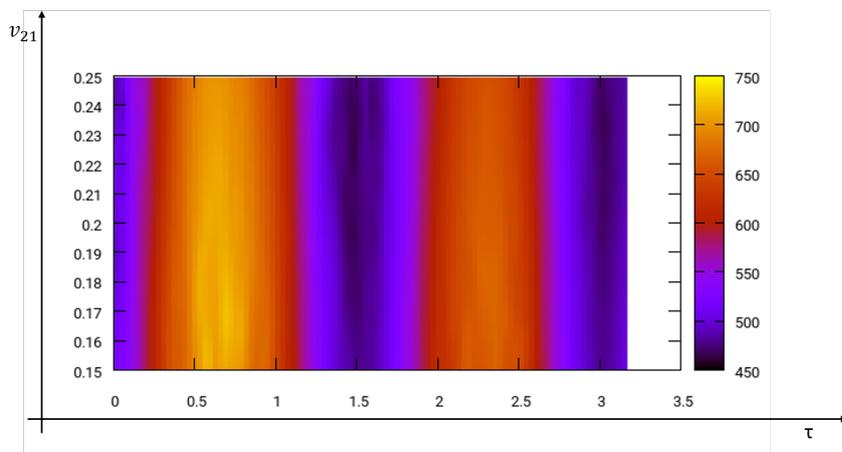


Figura 25 – Resultado do gráfico de calor de  $\Delta$  para as variáveis  $\tau$  e  $v_{21}$  considerando T e R com seus valores constantes.

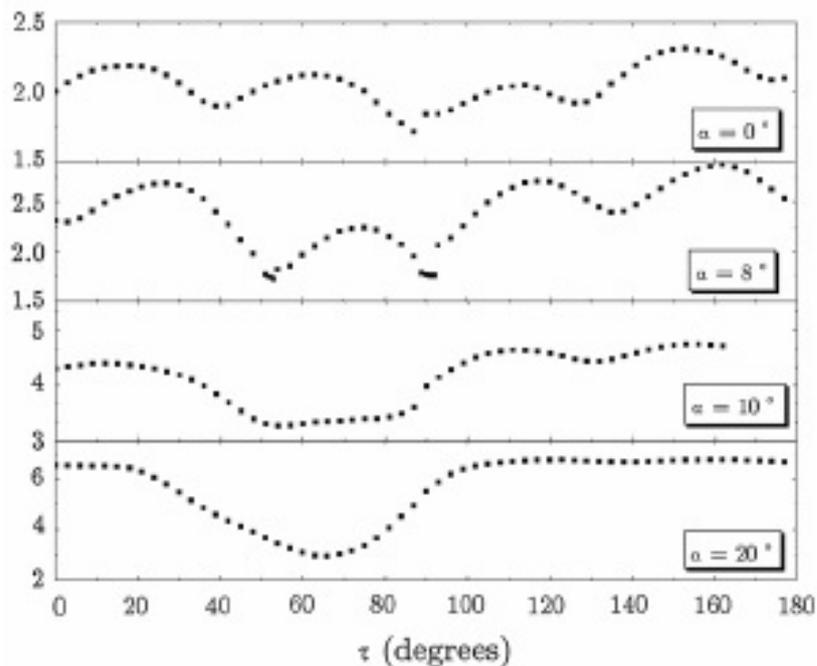


Figura 26 – Perfis da função objetivo

Fonte: (Atman et al., 2014)

A Figura 26 apresenta alguns dos perfis encontrados em Atman et al. (2014) somente variando  $\tau$  para alguns valores fixos de  $\alpha$ .

Várias execuções do modelo otimização foram executadas, considerando uma variação de ângulos de inclinação e tamanho da população. Os resultados podem ser visualizados na Tabela 6. De maneira geral, o AGRP leva um tempo considerável para encerrar sua execução, chegando a executar por várias horas para populações maiores. Não foi encontrada relação entre encontrar bons ajuste e grandes populações. Todos os resultados apresentados na Tabela 6 consideram a combinação do AGRP com a busca local, sendo que, somente duas das execuções obtiveram sucesso em melhorar o resultado encontrado pelo AGRP. Acreditamos que se deve ao fato do AGRP já se encontrar em um ponto ótimo que condiz com as condições de parada do método do Elipsoide.

As figuras 27 e 28 apresentam um comparativo do ajuste realizado utilizando o AGRP com busca local. Nessa situação a busca local produziu um ajuste melhor.

Inc.	$t_1$	$t_2$	AGRP						Busca Local					
			$T$	$R$	$v_{21}$	$\tau$	$\Delta$	$\frac{G}{E_1}$	$T$	$R$	$v_{21}$	$\tau$	$\Delta$	$\frac{G}{E_1}$
0	01:14:48	00:10:22	0,510	1,992	0,223	87,39	<b>135,72</b>	0,565	-	-	-	-	-	-
1	00:58:58	00:15:34	0,908	1,838	0,180	86,23	<b>538,94</b>	0,916	-	-	-	-	-	-
2	03:55:53	00:00:01	0,879	1,911	0,153	73,23	<b>70,03</b>	0,907	-	-	-	-	-	-
5	01:11:33	00:37:26	0,792	1,963	0,204	176,50	20,79	0,858	0,500	1,144	0,250	180,16	<b>16,423</b>	0,349
5	02:11:34	00:00:01	0,500	1,145	0,250	180,12	<b>16,42</b>	0,349	-	-	-	-	-	-
6	05:00:01	00:00:01	0,501	1,999	0,249	90,37	<b>152,98</b>	0,563	-	-	-	-	-	-
8	05:00:01	00:00:00	0,501	1,985	0,249	92,48	<b>49,21</b>	0,560	-	-	-	-	-	-
10	03:24:08	00:00:00	0,751	1,450	0,203	94,15	<b>27,22</b>	0,621	-	-	-	-	-	-
12	05:00:02	00:00:00	0,501	1,735	0,248	3,61	<b>19,89</b>	0,497	-	-	-	-	-	-
14	05:00:01	00:00:01	0,503	1,946	0,232	91,03	<b>36,22</b>	0,547	-	-	-	-	-	-
15	00:00:48	00:03:32	0,613	1,822	0,187	169,11	238,01	0,616	0,614	1,822	0,208	0,01	<b>122,260</b>	0,623
15	05:00:01	00:00:00	0,508	1,966	0,242	2,61	<b>22,00</b>	0,561	-	-	-	-	-	-
16	05:00:02	00:00:00	0,502	1,938	0,239	93,45	<b>48,64</b>	0,546	-	-	-	-	-	-
16,5	05:00:03	00:00:01	0,516	1,936	0,220	88,67	<b>219,24</b>	0,556	-	-	-	-	-	-
16,8	06:19:39	00:00:00	0,539	1,633	0,202	57,99	<b>808,06</b>	0,495	-	-	-	-	-	-
17	05:00:01	00:00:00	0,520	1,996	0,234	174,64	<b>621,09</b>	0,579	-	-	-	-	-	-

Tabela 6 – Resultados de convergência do AGRP com Busca Local para a função  $\Delta$ , Inc corresponde a inclinação do arranjo de grãos, Pop. corresponde ao número de indivíduos,  $t_1$  e  $t_2$  são os tempos, em horas, decorridos para execução do AGRP e da busca local respectivamente,  $T, R, v_{21}, \tau$  são variáveis da otimização. A relação  $\frac{G}{E_1}$  é apresentada tanto para AGRP quanto para busca local.

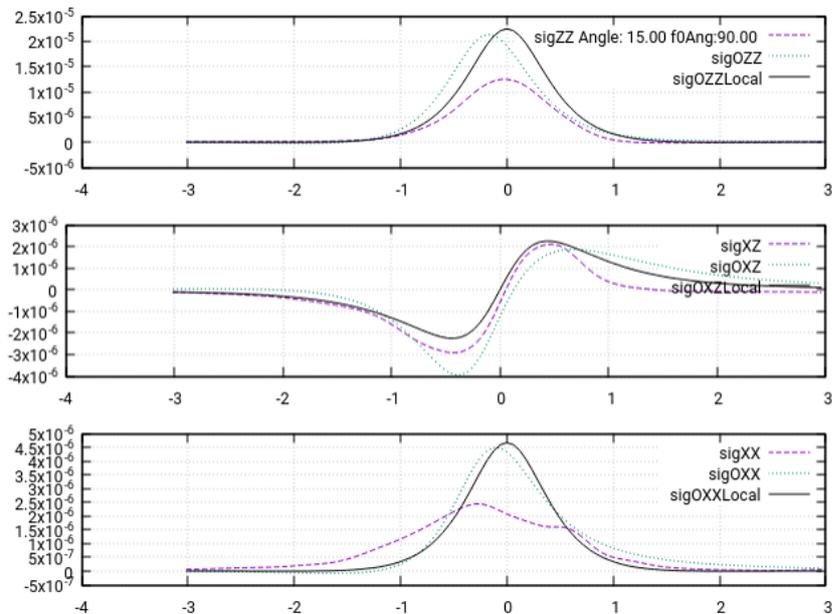


Figura 27 – A figura apresenta o resultado do ajuste utilizando o AGRP e a busca local. A linha contínua corresponde a busca local, a linha pontilhada corresponde ao AGRP. A linha tracejada representa o resultado numérico.

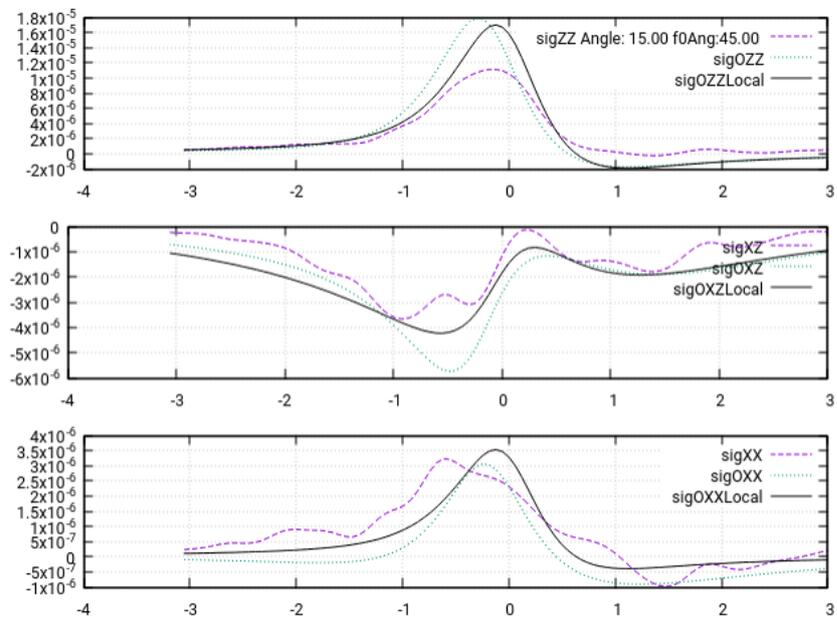


Figura 28 – A figura apresenta o resultado do ajuste utilizando o AGRP e a busca local. A linha continua corresponde a busca local, a linha pontilhada corresponde ao AGRP. A linha tracejada representa o resultado numérico.

## 4.0.2 Análise da Dinâmica Molecular

Iniciaremos a análise, partindo da função  $\Delta$  definida em 33. As restrições do problema de otimização são definidas conforme 2. A ideia inicial é acompanhar principalmente a evolução do coeficiente de cisalhamento  $G$  do material, o qual se imagina tender a 0 no momento de transição do sistema, ou seja, verificar se, quando a inclinação do arranjo tende ao ângulo crítico,  $G$  se aproxima de 0.

Em uma primeira abordagem verificaremos o comportamento dos resultados numéricos em relação a resposta do sistema de grãos à aplicação da força  $F_0$ . Para permitir comparação todos os gráficos apresentados consideram o sensor a altura de 4<d> e inclinação do arranjo variando entre 0 e 15 graus.

As figuras 29, 30 e 31 representam resultados de perfil de resposta. Cada figura apresenta três gráficos, onde o primeiro de cima para baixo corresponde ao perfil de resposta da instância Pai, o segundo gráfico corresponde ao perfil de resposta da instância filha e por último é apresentado o gráfico correspondente a diferença (Perfil filho - Perfil Pai). A força  $F_0$  foi aplicada em  $x = -0,09$  na Figura 29 e pode ser observado que um pico correspondente a ação de  $F_0$  está aproximadamente sobre essa posição, de maneira semelhante o mesmo comportamento pode ser observado nas demais figuras. Aproximadamente 30 instâncias filhas foram executadas para geração da média de perfis e o resultado dessa média pode ser observado na Figura 32. Nessa figura, apresentamos, de cima para baixo,  $\bar{I}_{ZZ}(x)$ ,  $\bar{I}_{XZ}(x)$ ,  $\bar{I}_{XX}(x)$ .

O mesmo procedimento foi adotado para configurações em inclinações diferentes, aqui ilustradas nas figuras 33, 34, 35 e 36 em que consideramos a inclinação de 5 graus, e nas figuras 37, 38, 39 e 40 onde a inclinação é de 15 graus. Todos os ensaios consideraram o ângulo da força  $F_0$  como 90 graus.

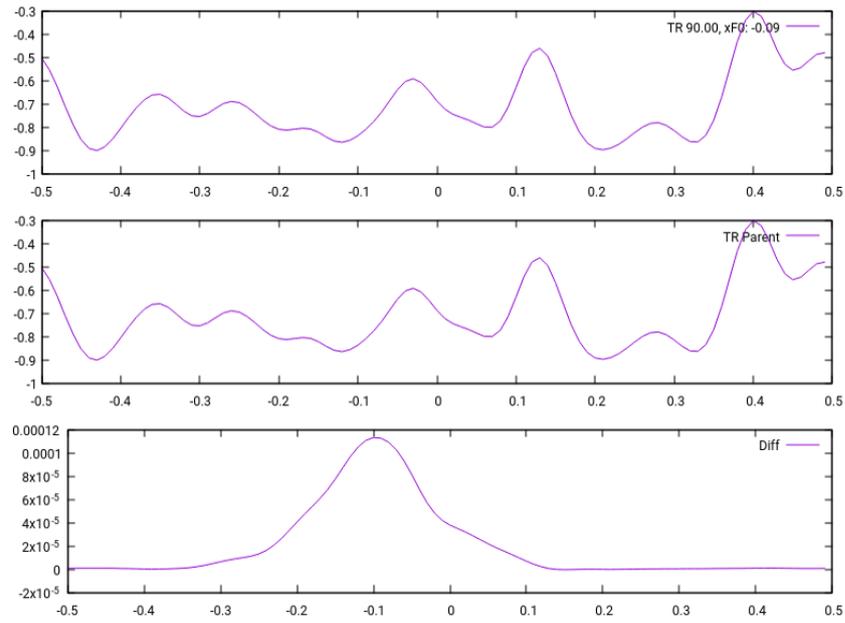


Figura 29 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 0, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x=-0,09$ .

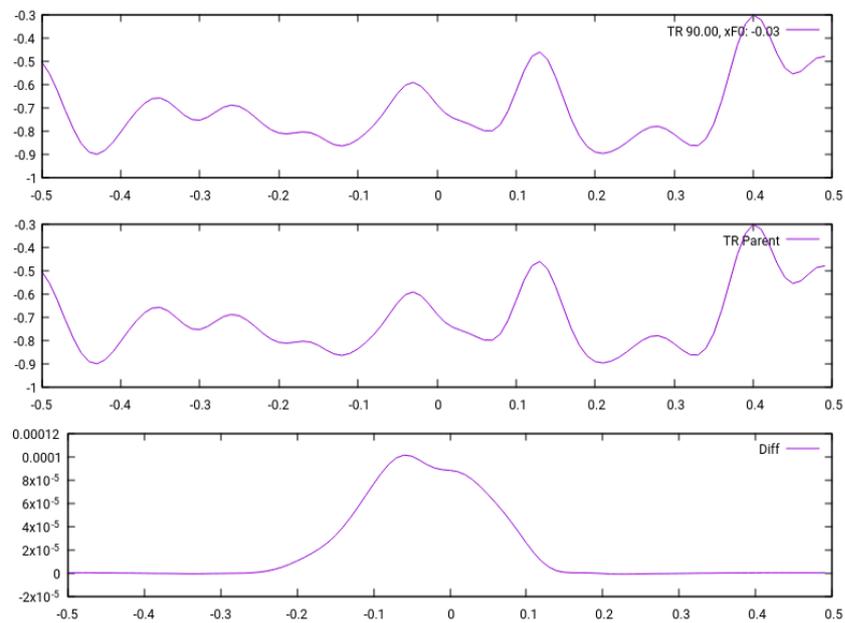


Figura 30 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 0, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x=-0,03$ .

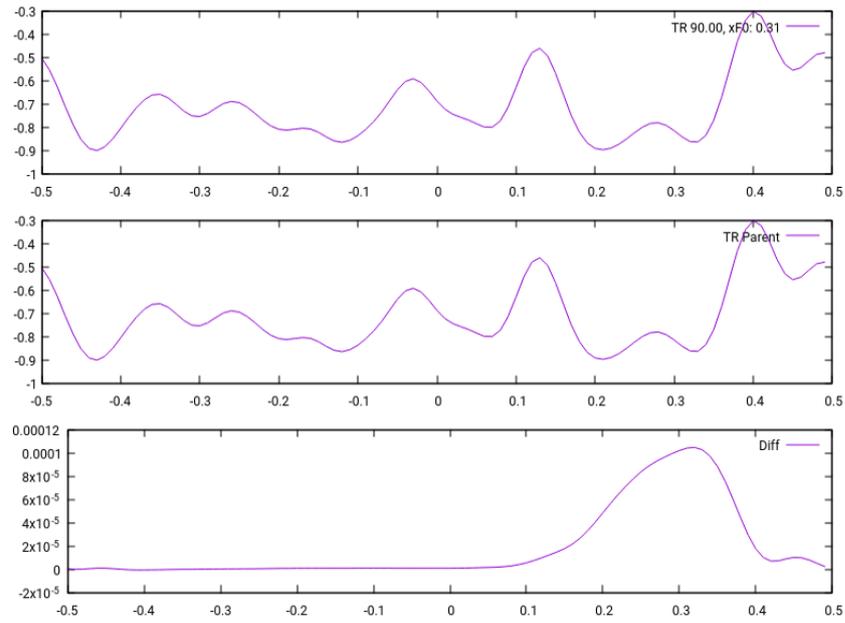


Figura 31 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 0, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x=0,31$ .

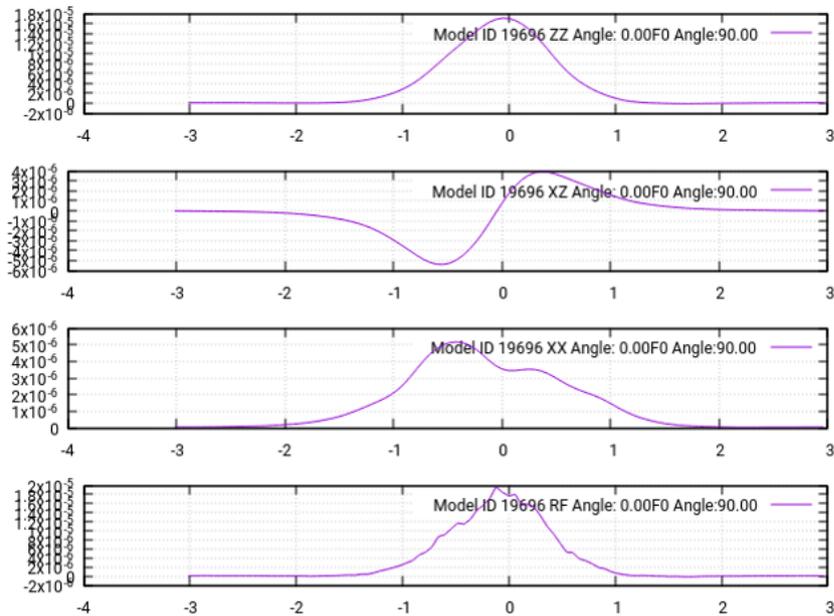


Figura 32 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 0, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$ .

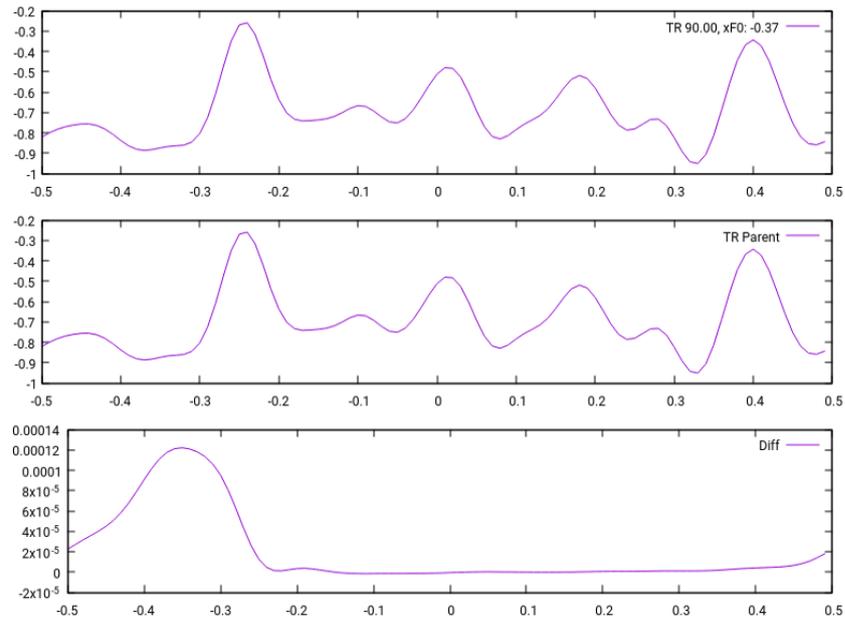


Figura 33 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 5, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x = -0,37$ .

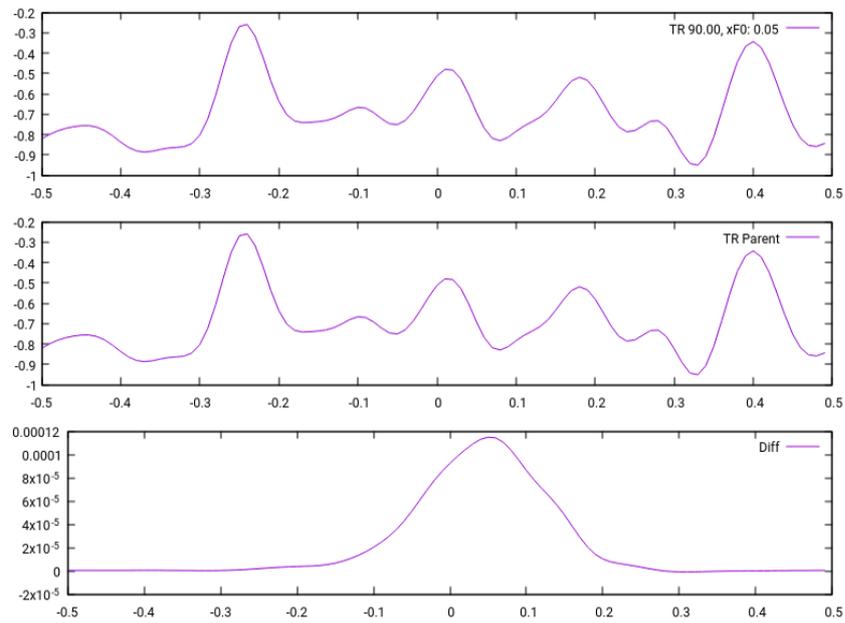


Figura 34 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 5, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x = 0,05$ .

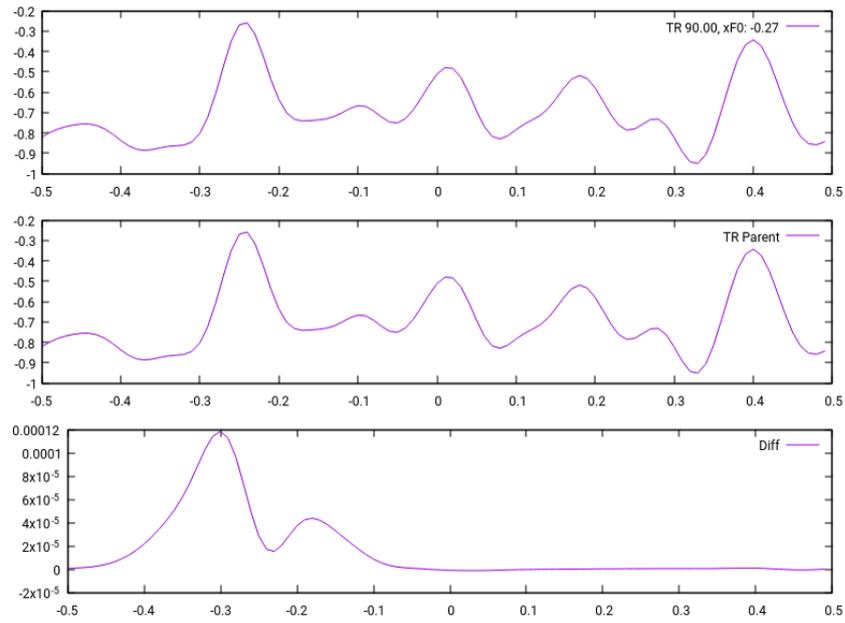


Figura 35 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 5, posição do sensor  $4\langle d \rangle$  e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x = -0,27$ .

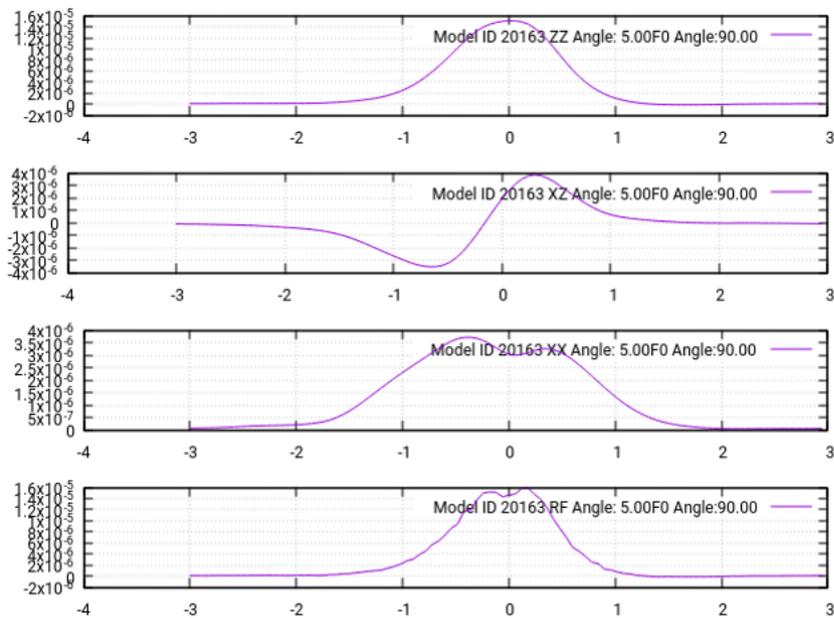


Figura 36 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 5, posição do sensor  $4\langle d \rangle$  e  $F_0 = \langle m \rangle g$ .

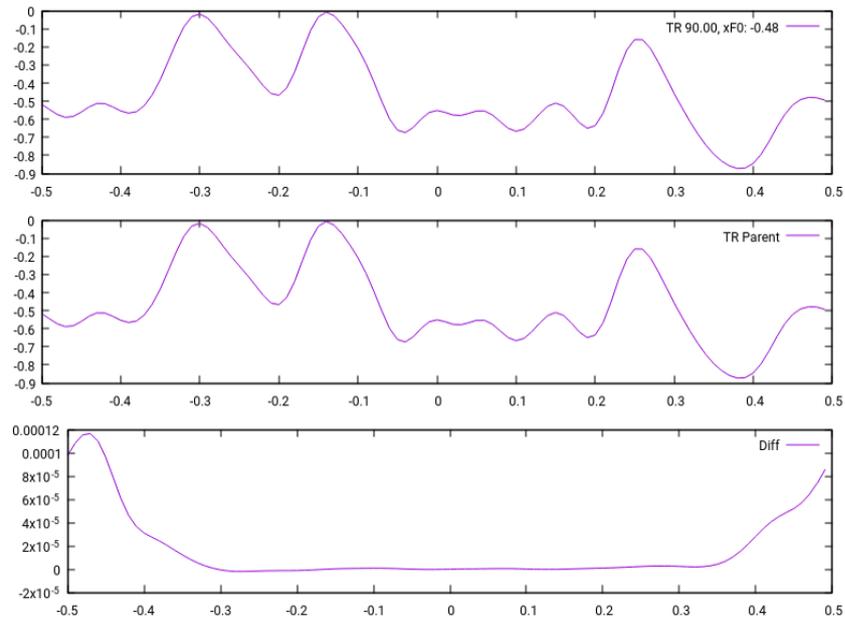


Figura 37 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 15, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em em  $x=-0,48$ .

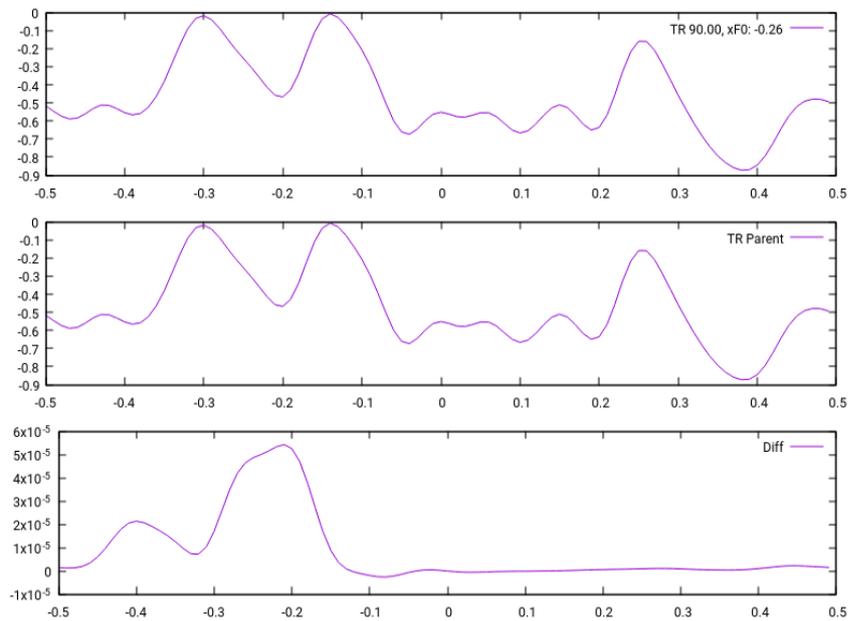


Figura 38 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 15, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em em  $x=-0,26$

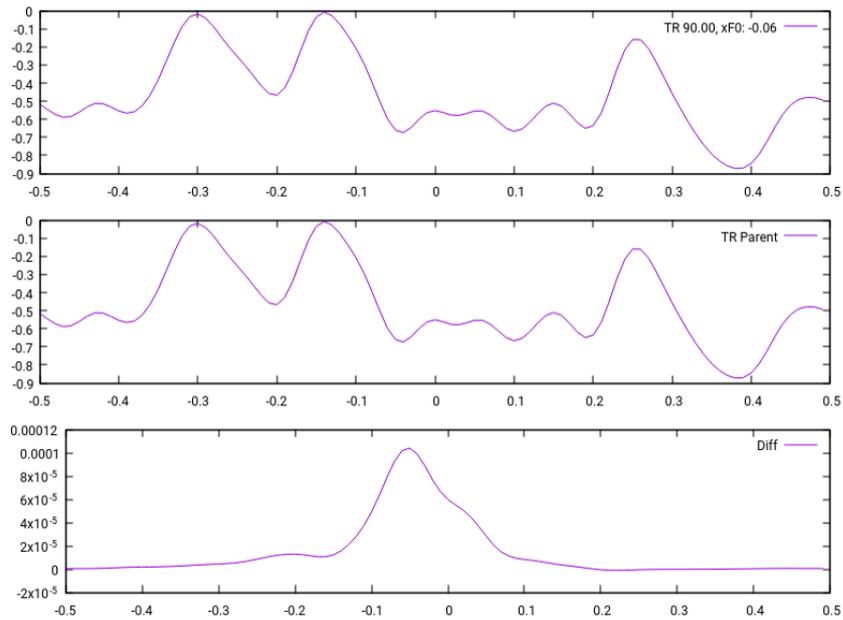


Figura 39 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 15, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$  aplicada em  $x=-0,06$ .

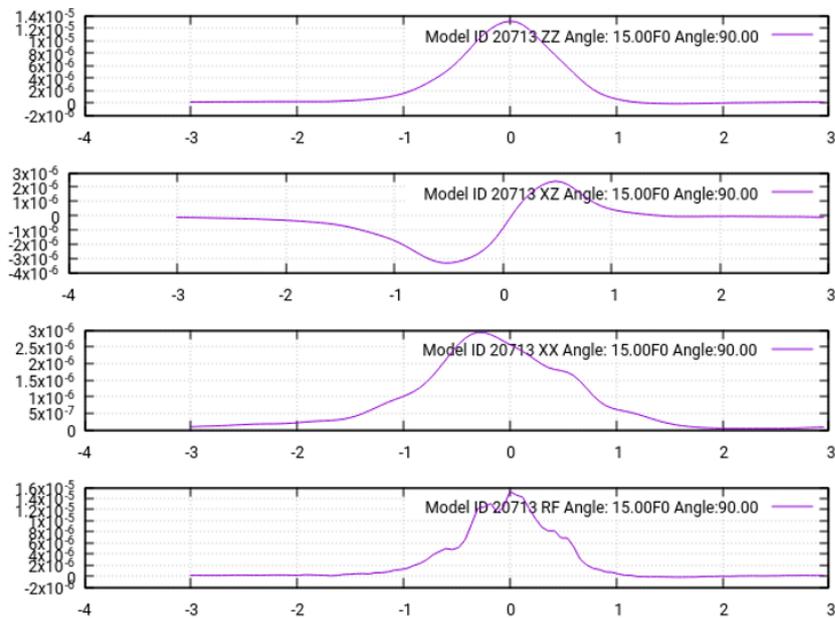


Figura 40 – Gráfico de resultado do cálculo numérico da função resposta para 3600 grãos, ângulo de inclinação 15, posição do sensor 4<d> e  $F_0 = \langle m \rangle g$ .

A análise da função  $\Delta$  foi então realizada sendo executado o processo de otimização por ângulo de inclinação,  $F_0$  (fixo) e posição do sensor (fixo e  $4 < d >$ ). Um exemplo de resultados para inclinação de 5 graus pode ser visualizado na Figura 41 e na Tabela 7.

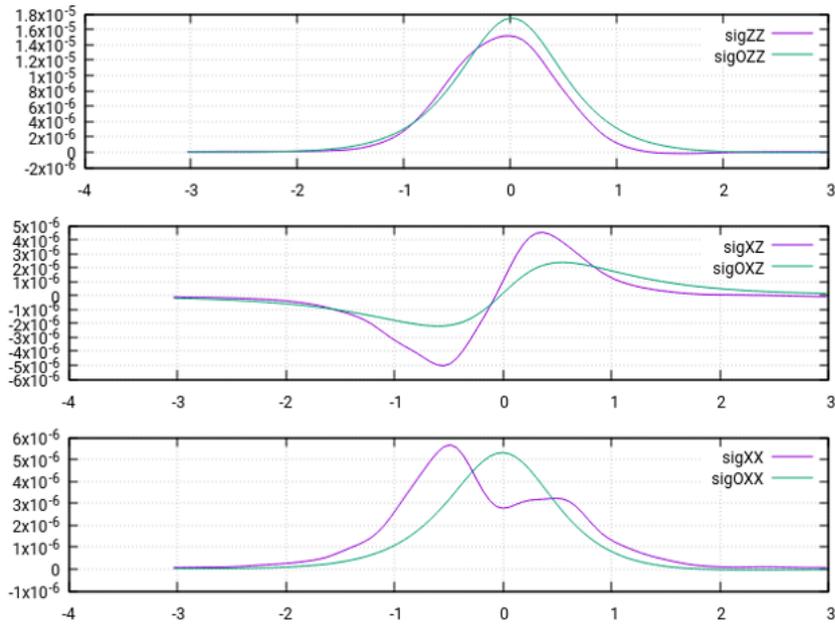


Figura 41 – Resultado da otimização realizada sobre a função  $\Delta$ .  $\tau = 91,54$  graus,  $R = 1,694$ ,  $T = 0,628$  e  $v_{21} = 0,190$ . A relação  $\frac{G}{E_1}$  é  $0,166$ .

População	Duração (horas)	T	R	$v_{21}$	$\tau$ em graus	$\frac{G}{E_1}$
400	04:53	0,549	1,546	0,198	112,56	1,034
400	06:14	0,628	1,694	0,190	91,54	1,034
400	05:26	0,701	1,544	0,202	94,90	0,855

Tabela 7 – A tabela apresenta resultado de 3 rodadas de otimização considerando ângulo de inclinação de 5 graus.

Foi observado que para o modelo de dinâmica molecular configurado conforme 1 que o ângulo crítico ( $a_c$ ) é algo próximo a inclinação de 17 graus. Empiricamente, raramente instâncias com inclinação superior a 17 graus alcançaram o equilíbrio. Dessa forma, focamos a execução da otimização da função  $\Delta$  em resultados de instâncias com ângulo de inclinação menores que 17 graus. A Tabela 6 apresenta os dados dos processos de otimização executados.

Todos as figuras apresentadas como resultados do ajuste possuem três gráficos, de cima para baixo, correspondem a  $\sigma_{ZZ}$ ,  $\sigma_{XZ}$  e  $\sigma_{XX}$ . A linha pontilhada representa os dados numéricos e linha contínua o resultado da otimização, independente se produzido pelo AGRP ou pela busca local.

A Figura 42 apresenta o resultado do ajuste para um arranjo de 3600 grãos e inclinação de 2 graus. O Ângulo de  $F_0$  é de 45 graus. O ajuste não foi perfeito para XX, mas aceitável para XZ e muito bom para ZZ.

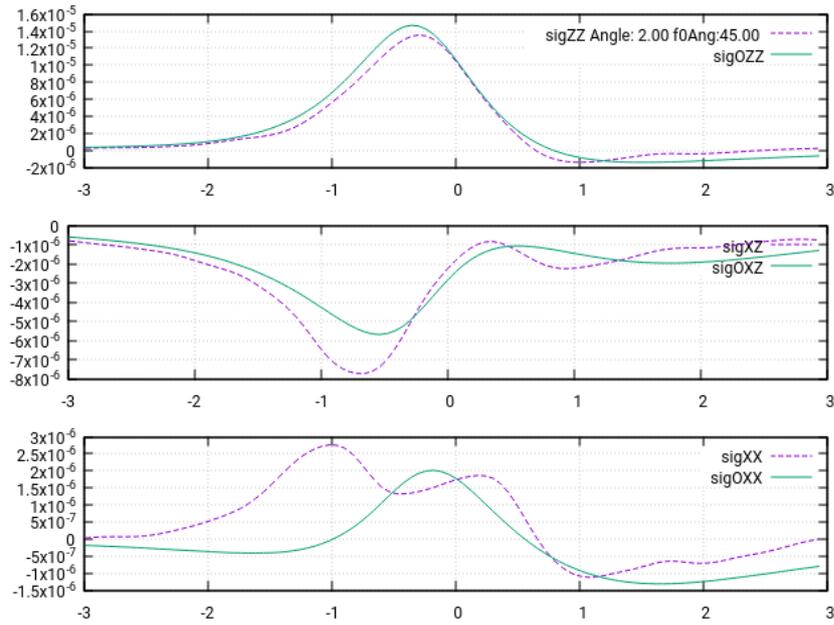


Figura 42 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 2 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

A Figura 43 apresenta o resultado do ajuste para um arranjo de 3600 grãos e inclinação de 0 graus. O ângulo de  $F_0$  é de 45 graus. O ajuste não foi perfeito para XX, mas muito bom para XZ e ZZ.

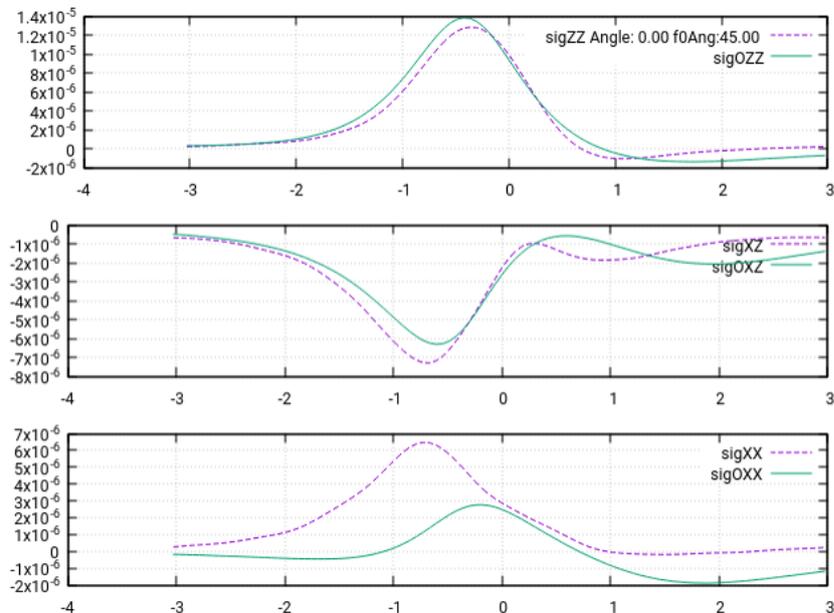


Figura 43 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 0 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

A medida que a inclinação aumenta os ajustes tendem a piorar, exemplo disso são as figuras 44, 45, 46, 47 e 48 .

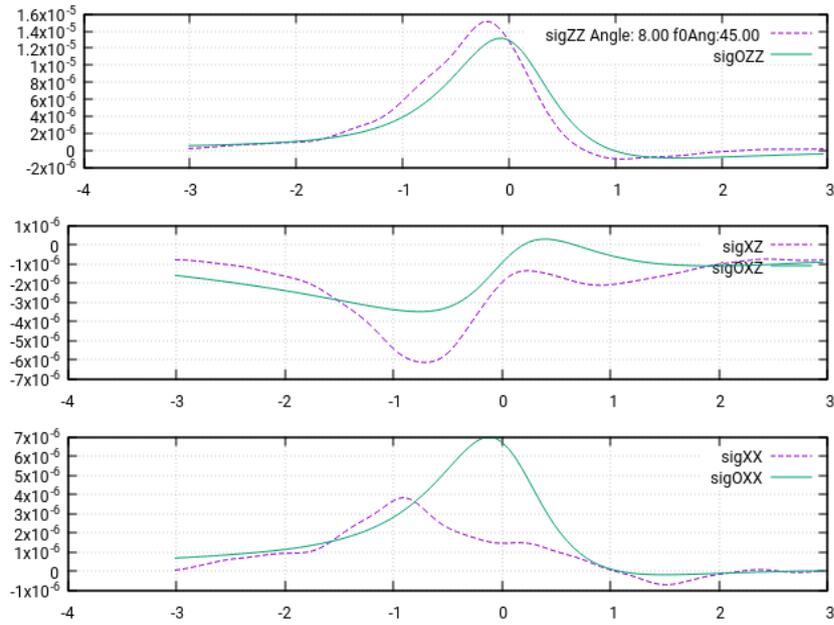


Figura 44 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 8 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

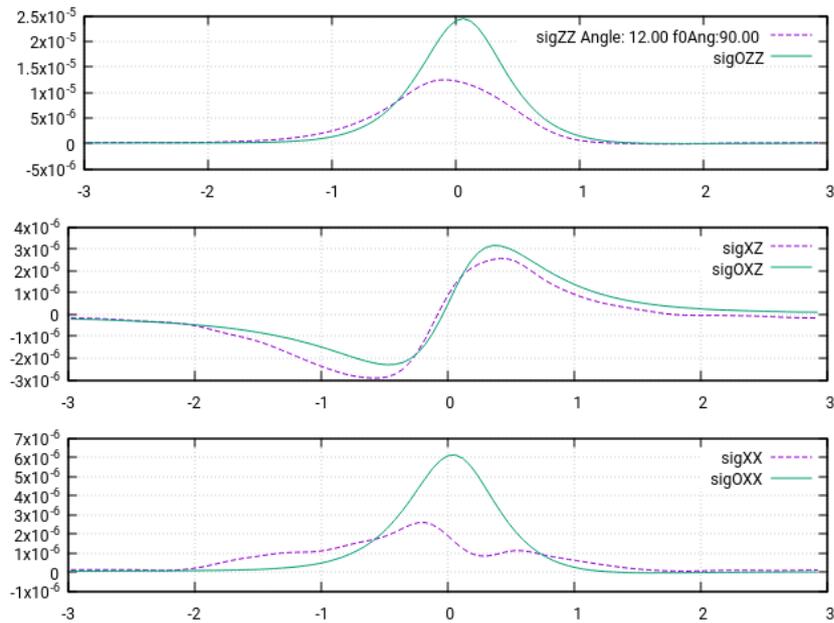


Figura 45 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 12 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

Parte desse comportamento pode ser resultado de um número insuficiente de instâncias na simulação, pois nota-se grande variabilidade no gráfico dos resultados numéricos. Curvas cujo o número de simulações foi maior apresentam gráficos numéricos com menor variação. Nessas condições não foi possível verificar se a relação  $\frac{G}{E_1}$  tende a 0 quando a ângulo de inclinação se aproxima do ângulo crítico. A Figura 49 representa a relação encontrada. Os dados correspondentes se encontram na Tabela 4.0.2.

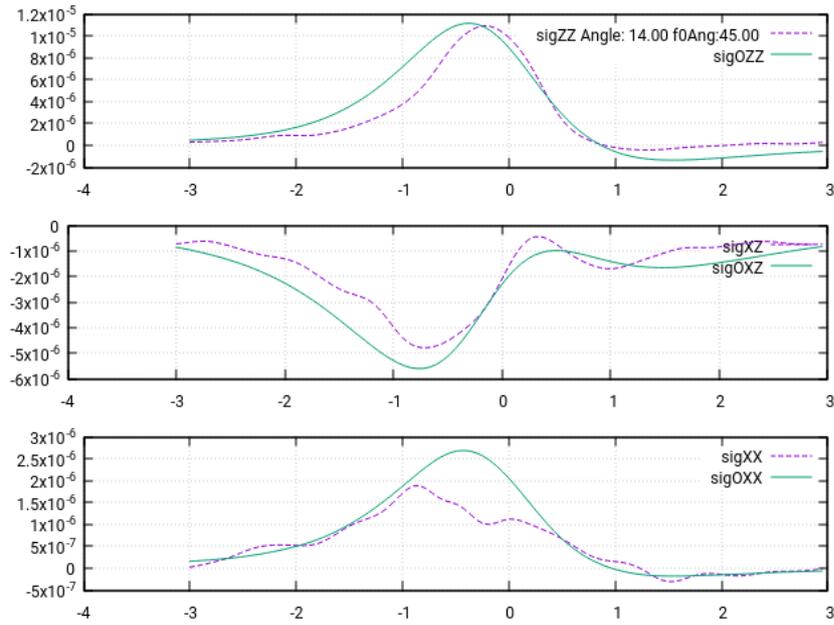


Figura 46 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 14 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

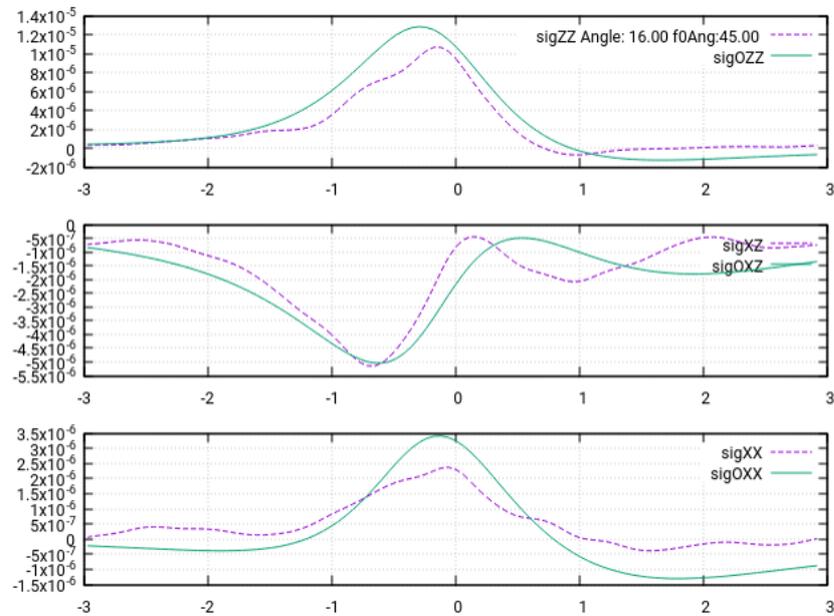


Figura 47 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 16 graus e ângulo de  $F_0$  de 45 graus.

Já na Figura 50 é possível observar a relação das variáveis de otimização frente a inclinação do substrato. No geral os dados coletados foram suficiente para avaliar a metodologia, onde o processo de otimização é utilizado para realizar um ajuste de parâmetros elásticos frente a um conjunto de resultados numéricos recuperados do processo de simulação por dinâmica

ID	Inclinação	T	R	$v_{21}$	$\tau$	$\frac{G}{E_1}$
888	0	0,761	0,787	0,150	2,118	0,406
887	0	2,955	0,648	0,150	0,696	1,853
886	0	0,848	1,523	0,150	2,203	0,253
885	0	0,580	1,851	0,250	1,461	0,138
829	0	0,693	1,895	0,170	1,165	0,168
841	2	0,879	1,911	0,153	1,278	0,213
824	5	0,753	1,729	0,186	1,232	0,197
806	6	0,501	1,999	0,249	1,577	0,111
851	8	0,501	1,985	0,249	1,614	0,112
822	8	0,532	1,677	0,153	1,706	0,145
826	10	0,751	1,450	0,203	1,643	0,227
852	12	0,501	1,735	0,248	0,063	0,126
825	14	0,748	0,771	0,196	2,029	0,387
821	14	0,503	1,946	0,232	1,589	0,115
897	15	0,614	1,822	0,208	0,000	0,151
896	15	0,578	1,832	0,173	0,098	0,144
895	15	0,723	2,001	0,237	1,521	0,162
893	15	0,784	1,830	0,250	1,585	0,189
892	15	0,746	1,990	0,237	1,602	0,168
891	15	0,622	1,370	0,250	0,674	0,192
870	15	0,865	1,347	0,250	1,540	0,271
869	15	0,766	1,433	0,193	1,458	0,236
868	15	0,711	1,724	0,220	1,602	0,183
867	15	0,500	0,842	0,150	0,709	0,252
866	15	0,996	1,604	0,250	1,624	0,269
865	15	0,946	0,662	0,254	0,816	0,516
863	15	0,502	1,646	0,255	1,653	0,132
860	15	1,181	1,958	0,379	3,078	0,253
857	15	0,761	1,233	-0,110	1,473	0,339
805	15	0,500	1,997	0,240	1,448	0,112
804	15	0,536	1,922	0,199	1,136	0,126
890	16	0,822	1,300	0,250	0,639	0,265
884	16	0,894	1,101	0,150	0,297	0,357
883	16	0,500	0,899	0,150	0,975	0,239
882	16	0,664	1,782	0,150	1,025	0,172
881	16	1,001	1,889	0,150	1,105	0,245
880	16	0,526	1,903	0,150	2,877	0,128
879	16	1,001	1,394	0,150	1,348	0,324
878	16	0,741	1,333	0,150	2,984	0,250
877	16	0,937	1,796	0,250	0,716	0,229
876	16	0,950	2,001	0,150	2,303	0,221
875	16	0,718	1,451	0,250	1,512	0,211
874	16	0,907	1,402	0,250	1,294	0,274
854	16	0,647	1,171	0,220	2,406	0,233
853	16	0,662	1,450	0,226	1,319	0,198
820	16	0,502	1,938	0,239	1,631	0,115
818	16	0,532	1,969	0,241	3,151	0,120
817	16	0,636	1,915	0,181	3,103	0,152
816	16	0,633	1,438	0,221	1,096	0,191
808	16	0,526	1,979	0,243	1,598	0,118
840	16,5	0,768	1,804	0,238	2,681	0,188
819	16,5	0,516	1,936	0,220	1,548	0,120

Tabela 8 – A tabela apresenta o resultado do ajuste para os dados numéricos recuperados utilizando dinâmica molecular.

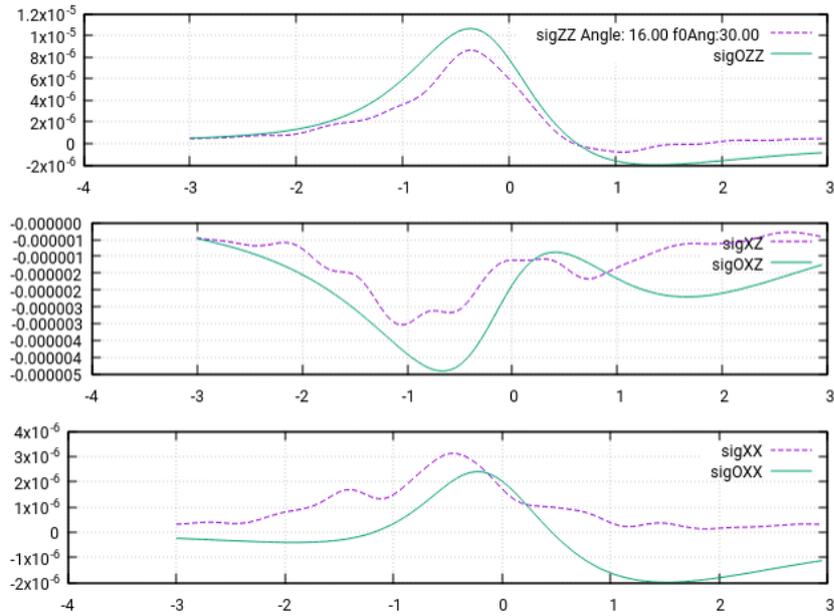


Figura 48 – Gráfico resultado do ajuste da função  $\Delta$  para inclinação de 16 graus e ângulo de  $F_0$  de 30 graus.

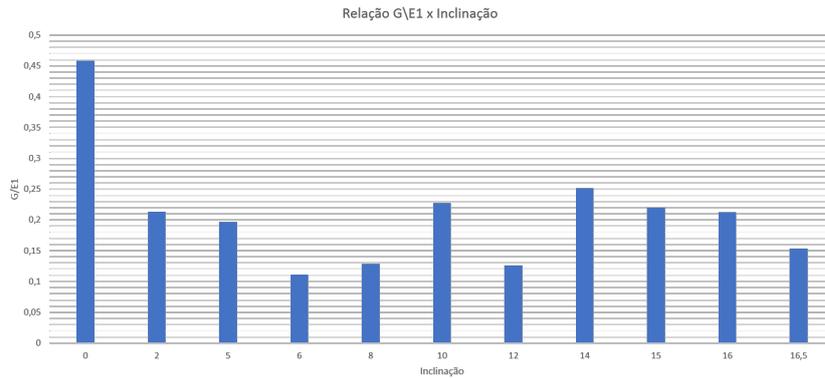


Figura 49 – Gráfico que apresenta a relação encontrada entre o ângulo de inclinação do arranjo de grãos e a relação  $\frac{G}{E_1}$ .

molecular. Por outro lado, a quantidade de instância de simulação não foi suficiente para permitir avaliar o comportamento do coeficiente de cisalhamento de maneira definitiva.

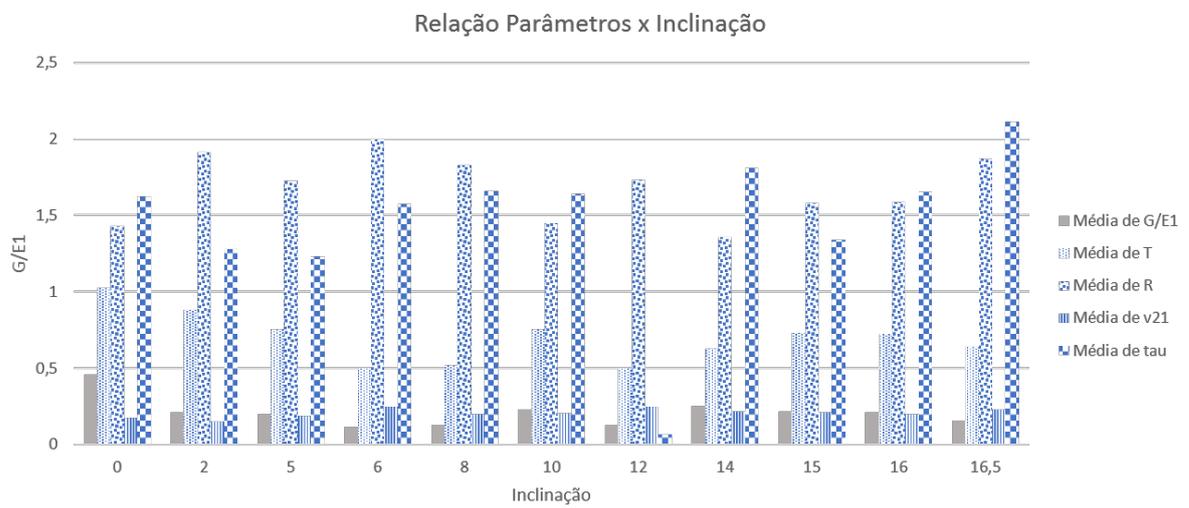


Figura 50 – Gráfico que apresenta a média para as variáveis da otimização e a inclinação do arranjo de grãos. Baseado na Tabela 4.0.2

# Capítulo 5

## Conclusão

Neste trabalho de dissertação buscamos utilizar um algoritmo de otimização para encontrar os parâmetros elásticos de um arranjo bidimensional de grãos circulares. Para isso desenvolvemos um conjunto de programas (*framework*) para permitir a execução e visualização dos resultados de simulações de dinâmica molecular, realizar processos de otimização direcionados às instâncias de dinâmica molecular desejadas e visualizar os resultados da otimização. A otimização aqui utilizada para ajustar o modelo teórico de materiais granulares aos resultados numéricos encontrados. Utilizamos o processo de preparação “*Rain Like*” para as simulações de dinâmica molecular sujeita a uma inclinação do arranjo e avaliamos os resultados dos ajustes obtidos do processo de otimização para verificar o comportamento do coeficiente de cisalhamento, na relação  $G/E_1$ . A relação procurada não foi confirmada, entretanto, não existem dados suficientes para descartar sua existência.

Todo o processo de simulação da Dinâmica Molecular pode ser considerado maduro o suficiente para permitir a geração dos dados necessários. A abordagem adotada entretanto pode não ter sido a mais adequada. Conforme descrito anteriormente, realizamos a preparação dos grãos como *Rain Like*, em seguida executamos a simulação, já com o ângulo de inclinação do arranjo definido, dessa forma, a geração de dados em várias inclinações significa trabalhar com arranjos diferentes. A dificuldade é realizar a preparação do arranjo de grãos para permitir acessar o ângulo de máxima estabilidade ao invés do ângulo de repouso. É possível que uma abordagem mais adequada seja realizar a preparação, por qualquer meio, realizar a simulação até a estabilização do arranjo e em seguida efetuar o aumento gradativo da inclinação, sempre aguardando o equilíbrio. Nesta situação, a cada incremento, o cálculo da função resposta seria realizado e posteriormente utilizado na função  $\Delta$ . Uma avaliação de qual melhor configuração para variação tanto da inclinação quanto do ângulo de  $F_0$  pode ser adequada. Para obtenção de melhores dados numéricos é necessário que mais instâncias de simulação para cada cenário sejam gerados. Um número que pode ser adequado é de 30 instâncias filhas para cada ângulo  $F_0$  considerado na análise. Neste trabalho a média de instâncias filhas utilizada é 10. Apesar de não confirmar

o comportamento do coeficiente de cisalhamento, o trabalho agrega à pesquisa da área ao indicar um caminho possível para avaliação dos parâmetros elásticos da simulação.

Em relação ao processo de otimização, a utilização do AGRP em conjunto com a busca local se mostrou acertada, desde que o AGRP seja utilizado somente para se aproximar do ótimo e com o número de indivíduos da população limitado. A utilização de um número maior de indivíduos não resultou em ajustes melhores. Os ajustes resultantes do processo de otimização podem ser considerados bons, mas acreditamos que poderiam ser melhores caso a massa de dados resultantes da dinâmica molecular fosse maior.

Ressaltamos também a produção dos programas para avaliação e ajuste de resultados da dinâmica molecular. Todos os dados e gráficos apresentados foram gerados com base nos programas e sua utilização permitiu gerar os resultados utilizados no ajuste de maneira automática.

## 5.1 Trabalhos Futuros

Consideramos como importante a expansão desse *framework* para permitir a utilização em modelos 3D a própria utilização do mesmo para avaliação de outras situações relacionadas a materiais granulares. Outras possibilidades são:

- Implementação de outros modelos de preparação de camadas granulares para avaliar os parâmetros da simulação.
- Separação completa do processo de preparação dos grãos para a simulação da simulação em si. Atualmente os dois processos são executados na mesma instância de dinâmica molecular.
- Definição de *scripts* de simulação molecular que simplifiquem o passo-a-passo a ser realizado no cenário em estudo.
- Centralização da base de dados de resultados da Dinâmica Molecular. Os resultados de uns são facilmente visualizados e utilizados em outros cenários.
- Utilização de ferramentas de análise estatística de dados para análise dos resultados de Dinâmica Molecular e da Otimização.
- Alteração do algoritmo de dinâmica molecular para suporte a simulação 3D com diferentes opções de preparação e barreiras.
- Desenvolvimento de outros algoritmos de otimização para avaliação de adequação na análise dos resultados.
- Inclusão de suporte à outras características físicas no processo de simulação, tais como umidade, campos magnéticos ou elétricos e temperatura.

# Referências

Atman, A. P. F.; BRUNET, P.; GENG, J.; REYDELLET, G.; CLAUDIN, P.; BEHRINGER, R.; CLEMEMENT, E. From the stress response function to the sandpile. v. 17, p. 93, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 3.

Atman, A. P. F.; BRUNET, P.; GENG, J.; REYDELLET, G.; COMBE, G.; CLAUDIN, P.; BEHRINGER, R.; CLEMEMENT, E. Sensitivity of the stress response function to packing preparation. v. 17, p. S2391, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 2, 3 e 23.

Atman, A. P. F.; CLAUDIN, P.; COMBE, G. Departure from elasticity in granular layers: investigation of a crossover overload force. v. 180, p. 612, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 3.

Atman, A. P. F.; CLAUDIN, P.; COMBE, G.; MARTINS, G. H. B. Mechanical properties of inclined frictional granular layers. v. 16, p. 193–201, 2014. Citado 14 vezes nas páginas 1, 2, 3, 5, 6, 12, 13, 14, 25, 30, 32, 33, 42 e 45.

BOYD, S.; VANDENBERGHE, L. **Convex Optimization**. [S.l.: s.n.], 2004. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.

BUCHHOLTZ, V.; POSCHEL, T. Static friction phenomena in granular materials: Coulomb law vs. particle geometry. 1993. Citado na página 7.

BUCHHOLTZ, V.; POSCHEL, T. Avalanche statistics of sand heaps. 1996. Citado na página 7.

CAMPOS, f. F. F. **Algoritmos Numéricos**. [S.l.: s.n.], 2007. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 9.

CUNDALL, P. A. A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. 1971. Citado na página 7.

D. Serero; G. Reydellet; P. Claudin; É. CLÉMENT; D. Levine. Stress response function of a granular layer: Quantitative comparison between experiments and isotropic elasticity. **Eur. Phys. J. E**, v. 6, n. 2, p. 169–179, 2001. Disponível em: <[https://doi.org/epje/v6/p169\(epje01111\)](https://doi.org/epje/v6/p169(epje01111))>. Citado na página 2.

DO ALEJANDRO M. ARAGÓN, D. L. S. H. Q. A calibration framework for discrete element model parameters using genetic algorithms. 2018. Citado na página 3.

DURAN, J.; REISINGER, A.; GENNES, P. de. **Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials**. Springer New York, 2012. (Partially Ordered Systems). ISBN 9781461204992. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=x9TiBwAAQBAJ>>. Citado na página 7.

GOLDBERG, D. E. **Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning**. [S.l.: s.n.]. Citado na página 17.

GOLDENBERG, C.; ATMAN, A. P. F.; CLAUDIN, P.; COMBE, G.; GOLDBIRSCHE, I. Scale separation in granular packings: stress plateaus and fluctuations. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.

LUDING, S. **Models and Simulations of Granular Materials**. Thesis — Universidade de Freiburg, 1994. Citado na página 4.

LUENBERGER, D. G. **Introduction to Linear and Nonlinear Programming**. [S.l.: s.n.], 1973. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.

MAGALHÃES, C. F. M. **Simulação de materiais granulares**. Dissertação — Universidade Federal de Minas Gerais, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 1, 3, 9, 11 e 12.

MANDL, G.; JONG, L. N. J. de; MALTHA, A. Shear zones in granular material. 1977. Citado na página 1.

MARONE, C.; KILGORE, B. Scaling of the critical slip distance for seismic faulting with shear strain in fault zones. **Nature**, **362**, 1993. Citado na página 1.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equation of state calculations by fast computing machines. 1953. Citado na página 6.

MISSEL, A. The brazil nut and reverse brazil nut effects. 2005. Citado na página 2.

MOREAU, J. J. Liasons unilaterales sans frottement et chocs inelastiques. 1983. Citado na página 7.

Otto, M.; BOUCHAUD, J.; CLAUDIN, P.; SOCOLAR, J. Anisotropy in granular media: classical elasticity and directed force chain network. 2003. Citado 4 vezes nas páginas 2, 13, 14 e 31.

RAMOS, R. M.; SALDANHA, R. R.; TAKAHASHI, R. H. C.; MOREIRA, F. J. S. The real-biased multiobjective genetic algorithm and its application to the design of wire antennas. 2003. Citado 3 vezes nas páginas 3, 18 e 33.

RAPAPORT, D. C. Mechanism for granular segregation. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 64, p. 061304, Nov 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.061304>>. Citado na página 7.

SANTOS, H. S. O.; ALMEIDA, P. E. M.; CARDOSO, R. T. N. Fuel costs minimization on a steel billet reheating furnace using genetic algorithms. 2017. Citado na página 3.

SARUBBI, J. F. M.; MARTINS, F. V. C.; SILVA, C. M. A genetic algorithm for deploying roadside units in vanets. In: **2016 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)**. [S.l.: s.n.], 2016. p. 2090–2097. Citado na página 3.

SHINBROT, T. The brazil nut effect — in reverse. **Nature**, **429**, 2004. Citado na página 2.

SOMFAI, E.; HECKE, M. van; ELLENBROEK, W. G.; SHUNDYAK, K.; SAARLOOS, W. van. Critical and noncritical jamming of frictional grains. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 75, p. 020301, Feb 2007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.75.020301>>. Citado na página 2.

STARON, L.; VILOTTE, J.-P.; RADJAI, F. Preavalanche instabilities in a granular pile. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 89, p. 204302, Oct 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.204302>>. Citado na página 1.

SWOPE, W. C.; ANDERSEN, H. C.; BERENS, P. H.; WILSON, K. R. A computer-simulation method for the calculation of equilibrium-constants for the formation of physical clusters of molecules: application to small water clusters. 1982. Citado na página 10.

TAKAHASHI, R. H. **Otimização Escalar e Vetorial: Notas de aula**. [S.l.: s.n.], 2007. Citado 3 vezes nas páginas 3, 17 e 20.

THORNTON, C. **Granular Dynamics, Contact Mechanics and Particle System Simulations**. [S.l.: s.n.], 2015. Citado 4 vezes nas páginas 6, 7, 11 e 12.

# Apêndices

# APÊNDICE A – Códigos Dinâmica Molecular

## A.1 Códigos

Caso deseje visualizar ou mesmo baixar os códigos fonte basta criar uma conta em [bitbucket.org](https://bitbucket.org) e solicitar acesso a:

- <https://bitbucket.org/luizvieira82/dm2doriginal>
- <https://bitbucket.org/luizvieira82/geneticalgorit>
- <https://bitbucket.org/luizvieira82/graphgen>

Esses projetos compõe todo o framework para simulação e otimização de Materiais Granulares. As seguintes bibliotecas ou softwares devem estar disponíveis para funcionamento do programa:

- Pugixml - <https://pugixml.org>
- Eigen - <http://eigen.tuxfamily.org>
- OpenMP - <https://www.openmp.org>
- SOCI - <http://soci.sourceforge.net/>
- PostgreSQL - <https://www.postgresql.org/>
- Gnuplot - <http://www.gnuplot.info/>
- Gnuplot IO Stream - [gnuplot-iostream](http://gnuplot-iostream.com/)
- Boost - <https://www.boost.org/>