## UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO INSTITUTO DE MATEMÁTICA INSTITUTO TÉRCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS COMPUTACIONAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

## THIAGO SABATUCCI DA SILVA

## OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM DE SOLOS ARENOSOS USANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Rio de Janeiro

### UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO INSTITUTO DE MATEMÁTICA INSTITUTO TÉRCIO PACITTI DE APLICAÇÕES E PESQUISAS COMPUTACIONAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

### THIAGO SABATUCCI DA SILVA

## OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM DE SOLOS ARENOSOS USANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Informática, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

Orientador: Marcello Goulart Teixeira, UFRJ Co-orientador: Gabriel Pereira da Silva, UFRJ

Rio de Janeiro

S586 Silva, Thiago Sabatucci da

Otimização e Modelagem de Solos Arenosos Usando o Método dos Elementos Discretos / Thiago Sabatucci da Silva. – 2015. 75 f.: il.

Dissertação (Mestrado em Informática) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Programa de Pós-Graduação em Informática, Rio de Janeiro, 2015.

> Orientador: Marcello Goulart Teixeira, UFRJ. Co-orientador: Gabriel Pereira da Silva, UFRJ.

1. MED. 2. Método dos Elementos Discretos. 3. Explosão. 4. Solo. 5. Areia. 6. Penetração. 7. Cone. 8. Otimização. 9. Calibração. – Teses. I. Teixeira, UFRJ, Marcello Goulart (Orient.). II. Silva, UFRJ, Gabriel Pereira da (Co-orient.). III. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Programa de Pós-Graduação em Informática. IV. Título

CDD

### THIAGO SABATUCCI DA SILVA

## Otimização e Modelagem de Solos Arenosos Usando o Método dos Elementos Discretos

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Informática, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

Aprovado em: Rio de Janeiro, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_\_.

D.Sc. Marcello Goulart Teixeira, UFRJ (Orientador)

D.Sc. Gabriel Pereira da Silva, UFRJ (Co-orientador)

D.Sc. Daniel G. Alfaro Vigo, UFRJ

D.Sc. Luziane F. de Mendonça, UFRJ

D.Sc. Maria Cláudia Barbosa, UFRJ

Rio de Janeiro

Dedico esta página em eterna gratidão a Luzia Sabatucci da Silva. Que a paz esteja com você para sempre.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente devo agradecer a meus pais, pois estes são responsáveis por tudo que somos.

Agradeço a paciência, colaboração, companheirismo e dedicação de meu orientador Marcello Goulart, que foi quem inicialmente me apresentou o método e tornou possível este trabalho, além de dar grande suporte e atenção em todas as etapas do trabalho.

Também sou grato ao meu co-orientador Gabriel Pereira também por sua igual colaboração, dedicação e grande conhecimento na parte do algoritmo genético e paralelismo e por abrir novos caminhos a trilhar com este trabalho, além também do suporte sempre presente quando necessário.

Agradeço a Teodomiro Firmo, por tornar possível o trabalho de explosões acima do solo. Seu trabalho inspirou este, e junto com a grande assistência de Maria Cláudia Barbosa foi possível a publicação do artigo no CILAMCE. Além disso, agradeço a Maria Cláudia pelo seu conhecimento e auxílio na área de geotecnia, e por mostrar-se disponível quando foi necessário, inclusive fornecendo vários testes *in situ*.

Agradeço também a Luziane Mendonça pela colaboração na parte de otimização. Foi durante sua disciplina que cursei durante o mestrado que inspirou o uso do algoritmo genético. Ela auxilou e apresentou vários outros possíveis métodos alternativos ao Nelder-Mead, que possivelmente serão utilizados para solução do problema de otimização em trabalhos futuros.

Agradeço ao corpo docente do DCC por ter fornecido um ensino superior de qualidade, e também a todos os funcionários que me auxiliaram durante os processos internos, em especial Deise Lobo e Aníbal, cuja dedicação em seus postos auxiliaram várias vezes durante toda graduação e pós-graduação respectivamente.

Agradeço também a amizade e o senso de humor de todos os colegas do LC3, além da oportunidade oferecida por Mauro Rincon de trabalhar e montar a infraestrutura do laboratório.

Por fim, agradeço ao PPGI e a UFRJ pela oportunidade de cursar o mestrado e pela infraestrutura, suporte e alta capacitação de todos os profissionais, viabilizando este trabalho.

## RESUMO

SILVA, Thiago Sabatucci da. Otimização e Modelagem de Solos Arenosos Usando o Método dos Elementos Discretos. 2015. 62 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

Um dos grandes desafios do Método dos Elementos Discretos (MED) é encontrar os valores corretos para os parâmetros micromecânicos de contato. Em geral, os modelos são sensíveis a estes parâmetros e resultados precisos só podem ser atingidos se estes valores estiverem ajustados. Para o modelo de contato linear, os parâmetros micromecânicos como a rigidez, o coeficiente de fricção, assim como também o tamanho dos elementos e o seu formato são cruciais para a modelagem. Portanto, há uma necessidade de um procedimento para calibrar estes parâmetros antes de modelar ou tentar fazer qualquer previsão com um modelo. Um comparativo entre dois tipos diferentes de métodos de otimização sem derivada foi explorado. Um deles é o mais utilizado para este problema específico, o algortimo de Nelder-Mead. O outro é o Algoritmo Genético que ainda não foi testado para resolver este tipo de problema em particular.

Num outro norte, foram modelados os efeitos de cargas explosivas, de diferentes intensidades, detonadas acima da superfície do solo. A simulação do fenômeno permite uma melhor compreensão dos efeitos que uma explosão acarreta no solo de acordo com a profundidade. Além disso, torna possível observar os efeitos da propagação da onda de choque dado as imperfeições do solo e em diferentes escalas de tempo. Outros métodos, como o MEF, tratam o meio como contínuo e apenas modelam o resultado do fenômeno. Para que fosse possível simular a geração de crateras, um código específico para o método foi implementado para este fim e um novo modelo de contato foi proposto para o problema. Diversos problemas de modelagem, implementação e desempenho computacional foram solucionados e os resultados obtidos foram comparados com testes em campo encontrados na literatura. Conclui-se neste trabalho que o MED é um métodos capaz de modelar o fenômeno em questão.

**Palavras-chave:** MED, Método dos Elementos Discretos, Explosão, Solo, Areia, Penetração, Cone, Otimização, Calibração.

## ABSTRACT

SILVA, Thiago Sabatucci da. Otimização e Modelagem de Solos Arenosos Usando o Método dos Elementos Discretos. 2015. 62 f. Dissertação (Mestrado em Informática) - PPGI, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

One of the main challenges in using the Discrete Element Method (DEM) is to specify the correct input parameter values. In general, the models are sensitive to the input parameter values and accurate results can only be achieved if the correct values are specified. For the linear contact model, micro parameters such as the particle stiffness, coefficient of friction, as well as the particle size and shape distributions are required. Thus, there is a need for a procedure to accurately calibrate these parameters before any attempt can be made to accurately model a system or make predictions. A comparison between two different optimization techniques were explored. One is the most commonly used for this type of problem, the Nelder-Mead algorithm. The other is the Genetic Algorithm that has not yet been tested for this particular problem.

At another front, the effects of explosive charges above the ground were modelled using different intensities. The simulation of the phenomenon allows a better comprehension of the effects of an explosion as the depth changes. The simulation also makes it possible to observe the wave propagation across the soil imperfections in many distinct scales of time. Others methods, such as the Finite Element Method, models only the result of the explosion. To make the simulation of crater generation possible, a specific code was developed and a new contact model was proposed. Many problems with modelling, implementation and computational cost were studied and solved and the results were compared with *in situ* tests found in literature. It is concluded that the DEM is capable of modelling the phenomenon with appropriate calibration.

Keywords: DEM, Explosion, Soil, Sand, Calibration, Optimization.

# LISTA DE FIGURAS

2.1	Modelo de Cundall: Os dois sistemas de mola-amortecedor nor- mal $(F_n)$ e tangencial $(F_t)$	8
2.2	Representação dos movimentos possíveis do simplex 2D do algo- ritmo de Nelder-Mead (BAULAC; DEFRANCE; JEAN, 2007)	9
2.3	Ilustração da aplicação dos operadores genéticos de (a) cruza- mento e (b) mutação (SPOLAÔR, 2010)	12
2.4	Configurações possíveis em paralelo	14
2.5	Representação esquemática da metade da seção de solo impactada pela explosão e da cratera formada (SABATUCCI et al., 2013)	16
3.1	Medições da explosão (AMBROSINI; LUCCIONI, 2007) $\ .$	20
3.2	Funcionamento simplificado do Hybrid Stress Blast Model (HSBM) da <i>Itasca</i> (FURTNEY; CUNDALL; CHITOMBO, 2009)	21
3.3	Modelo de (KINGERY; BULMASH, 1984) para determinação de parâmetros de uma explosão baseado na distância escalada $W$ .	23
3.4	Gráfico mostrando o comportamento da equação de (SADOVS-KIY, 2004), (KINGERY; BULMASH, 1984), e (WU; HAO, 2005)	24
4.1	Figura ilustrando a fonte da explosão (ponto G)	31
4.2	Diferentes valores de $\zeta$ e suas implicações no amortecimento [Wi-kipedia]	33
4.3	Gráfico original do artigo de ASAF; RUBINSTEIN; SHMULE- VICH (2007) usado como base para minimização	34
4.4	A equação geométrica aproximada da função que representa o resultado <i>in situ</i>	35
4.5	Exemplo de aproximação por variância	36
4.6	Modelo usado para otimização	39
5.1	Demonstração da mensuração da cratera. Programa em modo de visualização do momento linear $(m\vec{v})$ . A carga não é visível	42
5.2	Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m de altura do solo e 1 kg de TNT. Com	
5.3	$k_n = 2.74e5$ Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m de altura do solo e 1 kg de TNT. Com $k_n = 2.75e4$	43
	$\kappa_n = 2.1024$	40

5.4	Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m do altura do solo o 1kg do TNT. Com	
	$k_{\perp} = 1.1e4$	43
5.5	Tempo até o pico de energia, para diferentes valores de $k_n$ e dife-	10
	rentes profundidades.	43
5.6	Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.3, porém com	
	elementos de 3mm de diâmetro	44
5.7	Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.3, porém com	
	elementos de 6mm de diâmetro	44
5.8	Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.2, porém com	
	uma camada de 4mm sobre outra de 6mm de diâmetro $\ .\ .\ .$ .	44
5.9	Gráfico da solução encontrada com parâmetros iniciais da Ta-	
	bela 5.5. $F(x) = 8001$	46
5.10	Gráfico da função encontrada após apenas aumentar o passo $\ .$ .	46
5.11	Gráfico da função encontrada após uma busca manual para oti-	
	mizar o passo	47
5.12	Gráfico da função encontrada na segunda simulação	47
5.13	Gráfico da função encontrada na segunda simulação após uma	
	busca manual para otimizar o passo	48
5.14	Resultados do algoritmo genético com espaço reduzido compara-	
	dos com a curva experimental $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	50
5.15		51
5.16	Melhor resultado obtido com o algoritmo genético com filtro com-	
	parando com o resultado experimental. $F(x)=339$	53
5.17	Resultado obtido com o algoritmo genético com filtro comparando	
	com o resultado experimental. $F(x)=420$	53
5.18	Resultado obtido com o algoritmo genético com filtro comparando	
	com o resultado experimental. $F(x)=473$	54
5.19	Resultado obtido com o Nelder-Mead com filtro comparando com	
	o resultado experimental. $F(x)=425$	54

# LISTA DE TABELAS

Parâmetros da simulação	38
Parâmetros do solo utilizados	41
Tabela com os valores utilizados para a simulação	41
Tamanhos de cratera encontrados com $1 \text{Kg}$ de TNT a $0.5 \text{ m}$ de	
altura com grãos de 4mm	45
Tamanhos de cratera encontrados com $1 \text{Kg}$ de TNT a $0.5 \text{m}$ de	
altura e $k_n = 2.75 \times 10^4 \mathrm{N/m}$	45
Início da simulação 1	45
Resultados com $0.001 < k_n < 0.6$	49
Evolução da solução $F(x) = 633$	49
Testes com espaço reduzido. Resultados com $0.001 < k_n < 0.01$ .	49
Resultados do algoritmo genético com a média móvel e $10^{-3}$ <	
$k_n < 10^{-2}$	51
Resultados do algoritmo genético com a média móvel e $10^{-3}$ <	
$k_n < 10^{-2}$	52
	Parâmetros da simulaçãoParâmetros do solo utilizadosTabela com os valores utilizados para a simulaçãoTabela com os valores utilizados para a simulaçãoTamanhos de cratera encontrados com 1Kg de TNT a 0.5 m dealtura com grãos de 4mmTamanhos de cratera encontrados com 1Kg de TNT a 0.5 m deTamanhos de cratera encontrados com 1Kg de TNT a 0.5 m dealtura e $k_n = 2.75 \times 10^4 \text{N/m}$ Início da simulação 1Resultados com 0.001 < $k_n < 0.6$ Evolução da solução F(x)=633Testes com espaço reduzido. Resultados com 0.001 < $k_n < 0.01$ Resultados do algoritmo genético com a média móvel e $10^{-3} < k_n < 10^{-2}$ Resultados do algoritmo genético com a média móvel e $10^{-3} < k_n < 10^{-2}$

# **SUMÁRIO**

1 1	NTRODUÇÃO	1
1.1	Descrições de Capítulos	4
2 F	UNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	5
2.1	MED	5
2.2		9
2.2.1	Algoritmo de Nelder-Mead	9
2.2.2	Algoritmo Genetico	10
2.2.3		15
2.3	Explosoes em solo	15
3 P	ROPOSTA E OBJETIVOS	19
3.1	Explosões acima do solo	20
3.2	Otimização	24
4 N	ΛΈΤΟDΟ EXPERIMENTAL	27
4.1	Ambiente	27
4.2	Explosão	27
4.2.1	Modelagem	27
4.2.2	Modelagem usando o MED	29
4.2.3	Aspectos Computacionais	30
4.3	Penetração de Cone	32
4.3.1	Simplificação do Modelo de Contato	32
4.3.2	Otimização	34
4.3.3	Construção do modelo	37
4.3.4	Escolha dos parâmetros iniciais	37
4.3.5	Novos Ensaios	38
5 R	ESULTADOS	41
5.1	Explosões em Solo	41
5.2	Penetração de Cone	45
5.2.1	Novos Ensaios	47
6 C	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	55
6.1	Explosões em Solo	55
6.2	Penetração de Cone	56

REFERÊNCIAS			
-------------	--	--	--

## 1 INTRODUÇÃO

A mecânica computacional é uma área muito utilizada pela engenharia para a modelagem do comportamento de estruturas e abrange setores como mecânica, informática e programação. Existem diversas formas de solucionar os problemas dessa área, sendo que assumir o meio como contínuo é a forma que normalmente é utilizada em muitos problemas complexos de engenharia geotécnica, como por exemplo, construção de fundações, escavações, estruturas de contenção, túneis, problemas de estabilidade de taludes, entre outros. A microestrutura dos materiais é descontínua por natureza, em especial o solo, que é um material granular formado por partículas que dão origem a macroporos, microporos, poros contendo fluido (água, ar, etc.). Estas características discretas geram comportamentos complexos sob condições de carregamento e descarregamento, uma vez que possuem características especiais como anisotropia, vazios interiores, micro-fraturas e instabilidades locais, que são dificilmente modeladas por meios contínuos (JIANG; YU, 2006).

Por este motivo, boa parte dos problemas podem ser modelados de forma discreta. Alguns dos desafios onde essa estratpegia é aplicada envolvem colisões entre materiais que se quebram e racham (como rochas e projéteis colidindo com paredes, ou barras afundando em um solo de areia) ou que contenham fluxo de material granular. Estes problemas são um exemplo, cujo o tamanho dos elementos comparado ao tamanho total do problema, não são desprezíveis.

Um dos problemas recentemente estudados com este método envolve explosões em solos. As explosões são um fenômeno complexo de ser simulado, devido a intensa expansão de volume em pouquíssimo tempo, gerando um pico sobrepressão. Este pico é um desafio para o Método dos Elementos Discretos (MED), pois a propagação e intensidade dependem de diversas variáveis, como distância, meio (solo e ar), tipo de material explosivo, formato do explosivo, etc. Aliado a isso, há a dificuldade de se obter estudos práticos sobre o fenômeno, pois os testes são geralmente realizados por empresas (como mineradoras) e os resultados são mantidos como segredo da empresa. Além dos desafios da engenharia para modelar e simular sistemas complexos, um aspecto crucial do MED está na aquisição precisa e confiável dos parâmetros macroscópicos materiais a serem simulados. Como os materiais são geralmente complexos e tem comportamento não-linear, e estão sujeitos às condições externas e geográficas, obter estes parâmetros já é um desafio.

No entanto, o MED é uma ferramenta poderosa que representa o comportamento micromecânico de materiais descontínuos. Uma vez que atualmente não há um método universal ou robusto para determinação destes parâmetros de contato, as propriedades macromecânicas, como o módulo de *Young*, podem ser obtidas. Contudo, estes parâmetros macroscópicos não podem ser facilmente extrapolados para o mundo micro, isto ainda se limita a alguns casos específicos como em HENTZ (2003). Há como medir as propriedades micromecânicas de cada material, mas mesmo aplicando-as diretamente ao modelo, não há garantias de um comportamento preciso do material (DAVID; FAVIER; LAROCHE, 2009).

Portanto, um dos desafios enfrentados pelos pesquisadores é a determinação e inserção desses parâmetros no modelo de contato. Sem os valores adequados, o modelo pode não representar de forma confiável os experimentos reais.

Neste trabalho foi proposta a análise de dois aspectos do problema: em primeiro lugar um estudo foi feito acerca das explosões acima do solo, a fim de tornar o método dos elementos discretos capaz de simular tal fenômeno. Foi observado que a explosão pode ser modelada modificando o modelo de contato. Em seguida, é feito um estudo sobre métodos de otimização para solução do problema de busca de parâmetros de contato microscópicos. Esta busca foi baseada em testes *in situ* presentados em (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH, 2007), que serão utilizados como base para a função objetivo de duas heurísticas de resolução: o algoritmo genético e o Nelder-Mead. Foi observado que o algoritimo genético tem um gasto computacional elevado, mas não é tão sensível às condições iniciais. Além disso, obteve resultados equivalentes ou melhores, além de ser um método altamente paralelizável.

Apresenta-se como contribuição um novo modelo de contato capaz de modelar explosões acima do solo, um algoritmo para cálculo da pressão do ar nas partículas decorrentes da detonação, além de afirmar que algoritmo genético não só é uma alternativa viável, como pode ser uma alternativa melhor ao uso do Nelder-Mead.

## 1.1 Descrições de Capítulos

No Capítulo 2 são apresentados os conceitos básicos para a compreensão dos temas apresentados nesta dissertação, como uma breve descrição do funcionamento do Método dos Elementos Discretos, do algoritmo de Nelder-Mead, do algoritmo genético, e por fim uma introdução ao fenômeno da explosão.

No Capítulo seguinte são apresentados os trabalhos relacionados, incluindo do estado da arte, quanto à calibração e explosões em solo.

Os objetivos de cada um dos dos assuntos abordados, tanto o de otimização de parâmetros como o de modelagem do fenômeno da explosão, são delineados no Capítulo 4.

No Capítulo 5 são descritos os ensaios para penetração do cone no solo, e as consequentes modificações feitas na função de aptidão com intuito de aprimorar o resultado da otimização. Além destes ensaios, é descrito como o MED foi modificado para ser possível modelar o fenômeno da explosão em solo.

No Capítulo 6 são apresentados e analisados os resultados e finalmente, no Capítulo 7, descrevemos as conclusões sobre os resultados obtidos e sobre os ensaios em geral.

# 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo serão apresentados os conceitos básicos utilizados por este trabalho. Na Seção 2.1 será abordado o Método dos Elementos Discretos (MED), principalmente a mecânica de contato utilizada.

Na Seção 2.2 são apresentados dois métodos de otimização heurística, um largamente utilizado para fins de calibração de parâmetros do MED, o Nelder-Mead, e o algoritmo genético.

### 2.1 MED

O método dos elemento discretos (MED) é parte de uma família de métodos numéricos sem malha, utilizado para calcular o movimento de um grande número de elementos com tamanho na escala de micrômetros e acima. Embora o MED esteja intimamente relacionado à dinâmica molecular, o método geralmente distingue-se pela inclusão de graus de liberdade de rotação, bem como estado de contato e frequentemente geometrias complexas do elementos, como poliedros. Com os avanços no poder computacional e algoritmos numéricos para a classificação do vizinho mais próximo, tornou-se possível simular numericamente milhões de elementos em um único processador. Hoje o MED está se tornando amplamente aceito como um método eficaz de abordar os problemas de engenharia em materiais granulares e descontínuos, especialmente na modelagem da dinâmica das rochas, dos solos e de fluxos granulares.

O método original, concebido por CUNDALL (1971), envolve o uso de um

modelo de molas acopladas com amortecedores para simular o efeito das colisões entre os elementos. Este modelo mola-amortecedor gera um sistema de equações diferenciais para as forças normal e tangencial, que irão determinar a nova posição e velocidade de cada partícula no instante seguinte.

O método é um ciclo que começa na determinação das condições de fronteira, depois na detecção e cálculo das forças resultantes do contato entre elementos, cálculo de demais forças (molas de coesão e forças de campo, por exemplo) e por fim a integração numérica para o cálculos das velocidades, determinando as novas posições dos elementos.

As condições de fronteira podem ser simples, como uma simples inversão do momento das partículas em contato com a fronteira e seu respectivo reposicionamento para dentro dos limites estabelecidos. Também podem ser desenvolvidos outras fronteiras a fim de, por exemplo, amortecer ondas de choque ou impacto com a fronteira.

A detecção e o cálculo da força resultante do contato é uma etapa crucial, que determina propriedades do material sendo simulado. Em testes realizados com um analisador de código dinâmico (Gprof), a detecção do contato entre os elementos toma a maior porcentagem de tempo de computacional (70%). Por isso, todo o código foi implementado em paralelo, usando a biblioteca OpenMP.

O modelo de contato entre os elementos determina as propriedades do material e não é único. A forma geral da força normal de contato é dada pela Eq. (2.1).

$$F_n = F_n^{el} + F_n^{diss}$$

$$F_n^{el} = k_n x^{\alpha}$$

$$F_t^{el} = k_t x^{\alpha}$$
(2.1)

O modelo original de CUNDALL (1971) é linear e envolve o uso de uma mola

 $(\alpha = 1)$  para a direção normal (com coeficiente  $k_n$ ) e para a direção tangencial (com coeficiente  $k_t$ ). Também são incluídos dois amortecedores com coeficiente  $\beta$  para as componentes tangencial  $(c_t)$  e normal  $(c_n)$ , que são uma proporção de  $k_n$  e  $k_t$ , dado pela equação 2.2:

$$c_n = \beta k_n \tag{2.2}$$
$$c_t = \beta k_t$$

A força normal ou tangencial são dadas pela soma da força elástica  $(F^{el})$ com a força dissipativa  $(F^{diss})$ , com o sinal dependendo da referência adotada. A força elástica pode ser também não-linear, como o de TSUJI; TANAKA; ISHIDA (1992) que é baseado no modelo de contato de *Hertz*  $(\alpha = \frac{3}{2})$ . No entanto, os modelos não-lineares tem a desvantagem de ter diversas equações para o modelo, como o coeficiente de restituição ou o passo de tempo crítico, determinadas de forma heurística. Já no modelo linear, as equações são bem conhecidas, bastando fazer um ajuste dos valores das constantes.

No MED a interação entre os elementos de um modelo corresponde a resposta do solo ao nível microscópico do material. As propriedades microscópicas incluem, mas não são limitados a: rigidez, tipo de coesão, força de coesão, coeficiente de atrito, raio da partícula e sua distribuição (WANG et al., 2013). Os testes feitos em laboratório (triaxial, biaxial, cisalhamento, entre outros) apenas proveem parâmetros macroscópicos do solo (Young, Poisson). As informações a nível microscópico são escarsas devido a falta de experimentos para medi-las. Portanto, a falta de entendimento sobre o comportamento dos solos pode ser parcialmente atribuída à falta de consenso sobre o comportamento do solo ao nível microscópico e suas consequências nos parâmetros macroscópicos (HUANG; YANG; WANG, 2008). Este tem sido um tópico recentemente estudado em geotecnia.



**Figura 2.1:** Modelo de Cundall: Os dois sistemas de mola-amortecedor normal  $(F_n)$  e tangencial  $(F_t)$ 

O modelo de determinação da força de contato entre elementos usado neste trabalho é o de HAFF; WERNER (1986) para a força resultante de contato tangencial, dado por:

$$F_t = -min \begin{cases} \mu F_n \\ \gamma_t g_t(t) \end{cases}$$
(2.3)

onde ( $\mu$ ) é o coeficiente de atrito dinâmico e o  $\gamma_t$  o coeficiente de amortecimento tangencial. Para a força normal é usado o modelo linear de amortecimento (*linear dashpot*), dado por BECKER; SCHWAGER; PÖSCHEL (2008):

$$F_n = -k_n x - \gamma_n \frac{\partial x}{\partial t} \tag{2.4}$$

sendo  $(k_n)$  a rigidez normal,  $(\gamma_n)$  o amortecimento normal, (x) a interpenetração e  $(\frac{\partial x}{\partial t})$  a velocidade na direção da penetração.

Como citado anteriormente, o método consiste em realizar a verificação de contatos para posteriormente calcular as forças resultantes das colisões. A partir destas forças e de outras, como por exemplo a gravitacional e a de atrito com o ar, pode-se calcular a velocidade e a posição dos elementos utilizando um método de integração temporal explícito.

## 2.2 Otimização

#### 2.2.1 Algoritmo de Nelder-Mead

O algoritmo é um método simplex concebido por NELDER; MEAD (1965). Este algoritmo é heurístico e do tipo "guloso", uma vez que não delibera sobre a função a ser minimizada e os passos são dados baseados na provável melhor escolha a ser feita naquele passo. A sua convergência só foi demonstrada para casos específicos, e na maioria das vezes não pode ser determinada BYATT (2000). Ele foi desenvolvido para funções determinísticas, mas comumente é usado em aplicações onde a função em cada ponto é difícil de ser calculada ou até mesmo em simulações estocásticas.

O algoritmo se baseia em construir um simplex da dimensão em que será feita a busca pelo ótimo. Os pontos do simplex são avaliados e ordenados e, com base nisso, o simplex se estende para a parte onde a função foi melhor avaliada, tentando melhorar o resultado. Se não conseguir, o simplex se contrai.



**Figura 2.2:** Representação dos movimentos possíveis do simplex 2D do algoritmo de Nelder-Mead (BAULAC; DEFRANCE; JEAN, 2007)

Como é possível ver na figura 2.2, os pontos da reflexão, extensão e de contração são baseados no ponto médio entre os dois melhores pontos  $(x_1 e x_2)$ . No entanto, é razoável assumir que, sendo f(x) uma função de avaliação do erro em um ponto, se  $f(x_2) \gg f(x_1)$ , o ponto  $x_1$  pode estar bem mais próximo da solução. Levando isso em consideração, o novo ponto, localizado entre  $x_1 e x_2$ , é dado por uma média ponderada de suas funções de avaliação. Dessa forma, espera-se que o triângulo poderá convergir mais rápido se a solução estiver mais próxima de  $x_1$ . Portanto, para o cálculo do novo ponto  $\bar{x}$ , que será usado para reflexão do ponto do triâgulo com menor avaliação, foi usado  $\bar{x} = \frac{f(x_2)x_1+f(x_1)x_2}{x_1+x_2}$ . O mesmo método também foi usado para a contração, fazendo com que o triângulo convirja mais rapidamente, caso encontre uma solução muito melhor.

Outras modificações foram feitas no algoritmo para lidar com valores inválidos ou não aceitáveis. A maneira usada para limitar o algoritmo foi retornar um valor de erro muito alto, caso algum ponto esteja fora de um retângulo definido inicialmente. Assim, o algoritmo evita as bordas e previne que o programa perca tempo em cálculos desnecessários.

#### 2.2.2 Algoritmo Genético

A idéia do algoritmo foi proposta por John Henry (HOLLAND, 1975) como um algoritmo de busca meta-heurístico baseado no processo de seleção natural e genética. O algoritmo é utilizado para encontrar soluções para problemas em diversas áreas de conhecimento e com frequência em problemas cuja solução ótima é difícil e o espaço de busca é muito grande, conseguindo obter soluções aceitáveis com certa rapidez e confiança (GOLDBERG, 1994). O algoritmo genético é especialmente muito resiliente a ruídos na função objetivo ao usar uma população com tamanho suficientemente grande (GOLDBERG; DEB; CLARK, 1992), portanto pode ser ideal no caso estudado, pois a curva de força pode alterar o comportamento devido ao arqueamento

#### 2.2.2.1 Seleção

A seleção é a primeira etapa do algoritmo, em que certos indivíduos são escolhidos para gerarem novos indivíduos da próxima geração. Existem diversas técnicas de seleção de um indivíduo para a próxima geração. As duas mais comuns são a roleta e o torneio. Na roleta os indivíduos com maior aptidão tem uma maior chance de serem escolhidos para reproduzir. Neste esquema, os indivíduos mais aptos são privilegiados, o que pode acelerar a convergência. No entanto, isto também é uma desvantagem, pois o algoritmo pode convergir para um ótimo local com mais facilidade. Além disso, o indivíduo com maior aptidão pode nem mesmo ser selecionado. Neste esquema nada impede que o mesmo indivíduo seja escolhido mais de uma vez, o que pode aumentar ainda mais a pressão seletiva<sup>1</sup>.

O segundo mais comum é o torneio. Neste esquema, k indivíduos são selecionados aleatoriamente dentre a população para competir entre si. O vencedor, o com maior aptidão, é escolhido para gerar a nova população. O processo é repetido para escolher seu par para execução da próxima etapa, e até toda a nova população ser gerada. A vantagem em relação a roleta é que a pressão seletiva é bem menor se o k for suficientemente pequeno. Caso contrário, se k for grande, o melhor indivíduo será sempre selecionado, e se k = 1 é uma seleção aleatória. Uma desvantagem é que o pior indivíduo só será selecionado se ele for o único do sorteio. Lembrando que a diversidade é importante, pois a melhor solução pode estar em qualquer lugar do espaço, inclusive próxima a pior solução.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Pressão seletiva é qualquer conjunto de condições ambientais que origina o favorecimento de determinados genes em relação a outros em determinada população. No caso da roleta, um gene um pouco mais adaptado pode dominar a solução e convergir para um ótimo local

A seleção por torneio foi escolhida por ser a mais simples e efetiva para a maioria dos problemas de acordo com a literatura (GOLDBERG; DEB, 1991) (NORAINI; GERAGHTY, 2011) (GANDHI; KHAN; SOLANKI, 2012).

#### 2.2.2.2 Recombinação e Mutação

A recombinação (*crossover* ou cruzamento) é o operador usado para gerar um novo filho, e pode utilizar de um até mais de dois pais (multi-recombinação). Há uma probabilidade associada à recombinação, ou seja, depois que os indivíduos passam na etapa de seleção, é testado se eles se recombinarão para gerar um novo indivíduo. Caso não haja cruzamento, os filhos serão clones dos pais.

Há diversos tipos de recombinação. Geralmente o dado é previamente binarizado e posteriormente é feita uma operação com esta lista de *bits*. A operação mais simples é a recombinação em k pontos. Neste são escolhidas k posições aleatórias da lista para ser recortada e trocada com a do parceiro. A figura 2.3 item (a) ilustra o processo de recombinação com k = 1.



**Figura 2.3:** Ilustração da aplicação dos operadores genéticos de (a) cruzamento e (b) mutação (SPOLAÔR, 2010)

Na mutação, primeiro é estipulado se ela ocorrerá ou não dada uma probabilidade associada. Geralmente esta probabilidade é baixa, para evitar que quase todos os indivíduos da população mutem, podendo acarretar num aumento do tempo de convergência para a solução. Caso o indivíduo seja escolhido para fazer a mutação, e assumindo novamente uma representação binária das características do indivíduo a serem manipuladas, a mutação é um operador que irá agir em qualquer um dos *bits* da sequência do código genético do indivíduo com uma dada probabilidade.

#### 2.2.2.3 Geração e Elitismo

Após a etapa de recombinação e mutação, uma nova população é gerada, chamada de geração. Cada nova geração não contém os indivíduos da população geradora (anterior a ela). No entanto, por ser um processo influenciado pela probabilidade, pode ser que ao gerar uma nova geração um indivíduo com características excelentes seja descartado. Para evitar que isto aconteça, pode-se usar o elitismo (ou hall da fama) que força a permanência dos n melhores indivíduos de cada geração. Portanto, para uma população p, serão gerados p - n indivíduos. É importante atentar que o número de indivíduos na elite deve ser muito baixo ou a população poderá ficar estagnada.

#### 2.2.2.4 Paralelismo e Migração

O algoritmo tem sido alvo de estudos de diversas formas de paralelismo, as três principais configurações: Mestre-Escravo, população única fine-grained e coarsegrained de população múltipla.

Na configuração fine-grained uma população é dividida espacialmente em seções que serão distribuídas aos processadores. Na Fig 2.4a mostra a divisão espacial, onde os pontos pretos são os processadores atuando num espaço de busca e as arestas denotam a migração que pode ocorrer de duas formas: síncrona ou



Figura 2.4: Configurações possíveis em paralelo

assíncrona. Na síncrona, a migração ocorre em intervalos de tempo determinados. Na assíncrona, há um evento que pode acionar a mutação, como um limiar de convergência. Ou seja, quando uma população inteira estiver muito enviesada (tendendo para um determinado ponto) ocorre a migração. Assim, novos indivíduos são inseridos na população local, diversificando-a.

Já na configuração coarse-grained, ilustrado na Fig 2.4b, cada processador tem sua própria população englobando todo o espaço. A migração pode ocorrer da mesma forma que na fine-grained. A vantagem desta técnica é que estender um código de mestre-escravo para coarse-grained é muito mais simples, já que basta a implementação da comunicação (migração) entre as diversas populações. Já na *fine*, a comunicação é mais complexa devido ao grande número de áreas em comum no espaço.

A mestre-escravo (Fig 2.4c) há uma única população e as avaliações de aptidão são distribuídas para os processadores. Neste caso, o crossover e a mutação levam em conta toda a população.

#### 2.2.3 Utilização no MED

Os dois algoritmos de otimização, genético e Nelder-Mead, serão comparados para tentar encontrar a melhor solução possível para um problema real realizado por (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH, 2007), mas usando um modelo de contato distinto. Neste caso, o modelo de (HAFF; WERNER, 1986) foi utilizado para a força tangencial e os parâmetros de rigidez normal e fricção compõem o espaço de busca. Os resultados obtidos são apresentados no Capítulo 5, Seção 5.2.

### 2.3 Explosões em solo

Existe uma literatura bastante extensa e consolidada sobre o fenômeno da explosão (BAKER, 1973) (KINNEY; GRAHAM, 1962) (PERSSON; HOLMBERG; LEE, 1993) (HETHERINGTON; SMITH, 1994) (BANGASH, 2009) (BULSON, 1997) (NEEDHAM, 2010). O fenômeno engloba vários campos do conhecimento, com aplicações militares (para fins bélicos ou para planejamento de proteção contra ações terroristas) e civis (abertura de túneis e escavações em rocha, demolição de estruturas). O estudo da propagação das ondas de choque em solos causadas por explosões tem, em geral, como objetivo determinar a magnitude e a distância do impacto sobre estruturas nas vizinhanças do fenômeno explosivo (MENDONÇA FI-LHO, 2006) (SILVA, 2007). O estudo do fenômeno em rochas é bem mais frequente do que em solos e existe uma extensa literatura a respeito (PERSSON; HOLM-BERG; LEE, 1993). Embora existam semelhanças entre o comportamento das ondas de choque em rochas e em solos, também existem diferenças significativas na descrição do fenômeno, como, por exemplo, a rigidez muito inferior dos solos em relação às rochas e a sua natureza particulada, com presença de água e ar nos vazios.

A explosão química, como no caso da operação de Detonação a Céu Aberto

(OD), libera uma grande quantidade de energia em um intervalo de tempo muito pequeno, da ordem de milissegundos, a partir do ponto de detonação. Essa energia aquece o meio circundante e produz pressões locais e dinâmicas muito elevadas que irão avançar pelo meio com velocidade supersônica. Este movimento da perturbação das pressões para fora da origem da explosão constitui as ondas de choque, dotadas de grande poder de destruição. Segundo Persson, Holmberg e Lee (1994) a temperatura da explosão é da ordem de 1726°C a 4726°C, e a sobrepressão inicial na origem é da ordem de 1 a 20 GPa, dependendo da quantidade e do tipo de explosivo, portanto muito superior à magnitude das tensões produzidas em obras de engenharia. Quando a explosão se dá na superfície ou próximo à superfície de solo, o fenômeno ocorre no ar e também no solo, que irão responder de forma diferenciada entre si, porém relacionada.



Figura 2.5: Representação esquemática da metade da seção de solo impactada pela explosão e da cratera formada (SABATUCCI et al., 2013)

O pulso de pressão é considerado hemisférico em cada um dos meios (ar e solo). Em frações de segundo, são geradas no solo fraturas e regiões plastificadas, que podem ficar preenchidas por gases explosivos com determinadas temperaturas e pressões, devido à condição supersísmica do evento, e forma-se uma cratera na superfície, como ilustrado esquematicamente na Figura 2.5 (KINNEY; GRAHAM, 1962) (BANGASH, 2009). Na explosão as partículas de solo próximas ao centro da detonação são expelidas para a atmosfera e parte delas retorna preenchendo a cratera, como mostrado na Figura 2.5.

Para explosão em campo aberto, o impacto no ar se dá através da onda de choque que surge abruptamente em frações de segundo após a detonação, e cuja frente de avanço pode ser representada por curvas de pico de sobrepressão com a distância e o tempo, com uma fase positiva e uma fase negativa antes do retorno à condição de equilíbrio (KINNEY; GRAHAM, 1962) (HETHERINGTON; SMITH, 1994).

A curva de sobrepressão com o tempo em cada posição é usualmente descrita pela equação de Frielander a seguir (BAKER, 1973):

$$P_e = P_s \left[ 1 - \frac{t - t_a}{t_d} \right] e^{-\frac{\beta(t - t_a)}{t_d}}$$

$$\tag{2.5}$$

Onde:

 $P_e$  é o valor da sobrepressão na distância R e tempo t (FL-2)  $P_s$  é o pico de sobrepressão (FL-2) t é o tempo decorrido ou de simulação (T)  $t_a$  é o tempo de chegada da onda de sobrepressão no ponto R (T)  $t_d$  é o tempo de duração da fase positiva da onda de choque no ponto R

Esta é uma equação empírica que pretende representar o comportamento de decaimento exponencial da sobrepressão no ar com o tempo para a fase positiva da onda de choque. O comportamento no solo é semelhante, mas neste caso são geradas diferentes ondas de tensão (PERSSON; HOLMBERG; LEE, 1993) (HETHERING-

TON; SMITH, 1994) (FISEROVA, 2006) (ELNASHAI; SARNO, 2008) (BANGASH, 2009), cuja velocidade de avanço no meio depende não apenas da energia do evento explosivo e da velocidade das partículas, mas também das propriedades tensão x deformação e da velocidade sísmica dos materiais que constituem o meio onde se propagam. Com o aumento da distância ao centro da explosão a relevância da velocidade das partículas diminui e a velocidade de avanço das ondas de choque tende ao valor da velocidade sísmica do meio (c), enquanto o valor do pico de sobrepressão diminui com a distância devido à dissipação da energia.

A resposta e o mecanismo de formação de cratera são particularmente complexos devido à heterogeneidade característica dos solos e, consequentemente, das suas propriedades mecânicas. Sem falar da coexistência das três fases: sólida, líquida e gasosa, e a relação do fenômeno em questão com as propriedades dinâmicas do solo, do ar e da interface solo-ar (AMBROSINI; LUCCIONI; DANESI, 2004)).

No Capítulo 4, Seção 4.2 é discutido como a explosão é modelada usando os conceitos apresentados, em especial a equação 2.5 de Friedlander que será útil para modelar a força exercida em cada elemento.

# **3 PROPOSTA E OBJETIVOS**

A proposta deste trabalho foi solucionar dois problemas distintos, ambos na área do Método dos Elementos Discretos. Um deles concerne à modelagem de um fenômeno físico, a explosão, cujo estudo utilizando o MED é recente e não há relatos da modelagem usando apenas o MED, sem acoplamento. Um novo modelo de contato foi desenvolvido para tratar a grande pressão exercida pela carga explosiva, com intuito de prevenir a divergência. Além disso, um algoritmo para o cálculo direto da pressão da explosão no solo foi criado.

A segunda proposta deste trabalho foi analisar a viabilidade do uso do algoritmo genético como uma alternativa ao Nelder-Mead, na otimização dos parâmetros que determinam a força resultante do contato. Estes parâmetros de contato são únicos para um material e devem ser calibrados usando resultados obtidos com testes *in situ*, a fim de ser possível fazer predições com outros modelos (ASAF; RU-BINSTEIN; SHMULEVICH, 2005). Atualmente as predições usando o MED estão em fase de estudo e, mesmo após as calibrações, geralmente se limitam a um tipo de material homogêneo em tamanho e forma, com uma saturação e porosidade específicas. As predições ainda são sempre validadas e ainda podem ocorrer um erro muito alto com os experimentos reais devido a diversas simplificações no modelo, principalmente a adoção do formato estritamente esférico ou discóide, a exemplo dos trabalhos de (OWEN; CLEARY, 2009) e (DELANEY et al., 2010), cujos desvios podem ser atribuídos ao formato simplificado.

### 3.1 Explosões acima do solo

Como a explosão é um fenômeno que envolve liberação de grande quantidade de energia em um pequeno espaço de tempo, uma das formas mais usadas para comparar a acurácia de modelos que simulem o fenômeno é feita através da medição do tamanho da cratera e dos efeitos da propagação de ondas ao longo do solo. Um estudo feito por (AMBROSINI et al., 2002) ilustra diversos casos de estudo de explosões acima, no nível e abaixo do solo. Além disso, conta com explosivos esféricos de diferentes cargas. Para cada um dos testes foi feita uma medição das dimensões da cratera junto com os parâmetros do solo. As dimensões foram medidas segundo



Figura 3.1: Medições da explosão (AMBROSINI; LUCCIONI, 2007)

(Kinney and Graham, 1985), onde na figura (3.1) D é o diâmetro aparente da cratera,  $D_r$  é o diâmetro real, que é a distância medida na altura onde originalmente se encontrava a carga. A altura é dada pela média das três medidas  $H_1, H_2 \in H_3$ . Os valores e o método de medição de (AMBROSINI et al., 2002) foram adotados como verificação e validação das simulações realizadas através do MED.

Há muitos novos trabalhos recentes publicados na FRAGBLAST (MUN-JIZA; VLADIMIR; MOHANTY, 2012), uma conferência patrocinada pela companhia *Itasca*, cujo fundador também é o idealizador do MED. Nesta conferência discute-se o uso do MED para o cálculo dos efeitos de explosões em rochas usando o *software* proprietário *Blo-Up* da própria *Itasca*, resumidamente descrito em (SEL-LERS et al., 2013). O programa usa um modelo que acopla o DEM com o método das diferenças finitas bidimensional com uma malha bem espaçada (*coarse*) para modelar a explosão, com a pressão e velocidade de detonação calculados pelo *software Vixen2009*. A malha de diferenças finitas é acoplada a uma simplicação do DEM, que é uma malha de pontos que sofrem apenas translação (*lattice*) interligadas por molas (POTYONDY; CUNDALL, 2004). O acoplamento é feito através de uma camada de partículas, cujas velocidades são controladas pelo FLAC, *software* de malha de diferenças finitas, e recebem as forças dos elementos do modelo discreto. Ambos rodam de forma independente, cada um com seu prórprio ciclo de cálculo. Na Figura 3.2 ilustra a malha de elementos discretos e a transição para a



**Figura 3.2:** Funcionamento simplificado do Hybrid Stress Blast Model (HSBM) da *Itasca* (FURT-NEY; CUNDALL; CHITOMBO, 2009)

malha de diferenças finitas, cuja descrição detalhada está disponível apenas através da compra dos anais do evento.

WU et al. (2007) estudou a formação de crateras devido ao impacto do fluxo de partículas no solo. Os resultados deste trabalho incentivaram a criação do modelo de contato, devido ao estudo da formação de crateras usando o método. Apesar de não estudar efeitos de explosivos, a queda de elementos causa efeitos simulares, como o tamanho da cratera em proporção da energia do impacto. Além de concluir que apenas uma pequena fração da energia é consumida para formação da cratera, e esta é inversamente proporcional a densidade e diâmetro dos elementos.

Antes que o modelo de contato aqui criado pudesse existir, um trabalho preliminar, com um modelo de contato linear foi testado por FIRMO (2013), utilizando o mesmo programa deste trabalho. Durante o estudo, pode-se concluir que um modelo de contato não-linear era necessário, devido a alta energia a que eram submetidos os elementos. Além disso, para que este modelo de contato fosse efetivo, a explosão deveria ocorrer a uma distância consideravelmente maior, para que a expansão do explosivo e dos gases fossem desprezíveis, levando em conta apenas a onda de choque do ar com o solo. Também concluiu-se que era necessário a criação de um algoritmo para o cálculo da contribuição da pressão do ar, devido a carga explosiva, em cada elemento do solo, levando em consideração apenas as áreas onde o ar entra em contato com o elemento.

O programa militar CONWEP simula de forma rudimentar o comportamento de estruturas sob o efeito de ondas de choque oriundas da detonação de explosivos. Ele é de acesso restrito, se baseia no manual do exército americano (TM-5-855-1, 1986), que é amplamente citado como referência sobre valores obtidos em campo para o tempo de chegada da onda, duração da fase positiva e a relação da distância escalada com o pico de sobrepressão. Os gráficos do manual eram originalmente construídos com o eixo X representando a distância em metros. Na Figura 3.3 mostram o valores, como tempo de chegada, tempo de duração da fase positiva, extraidos do manual, porém reconstruídos com o eixo X representando a distância escalada por KINGERY; BULMASH (1984).

Para determinar o tempo da fase positiva da explosão, foi feita uma comparação entre as equações de (SADOVSKIY, 2004), (WU; HAO, 2005) e da curva



Figura 3.3: Modelo de (KINGERY; BULMASH, 1984) para determinação de parâmetros de uma explosão baseado na distância escaladaW

aproximada do gráfico de (KINGERY; BULMASH, 1984).

Como é possível ver no gráfico do comportamento das três equações na Fig. 3.4, descartando o comportamento das curvas quando a distância é pequena (menor que 1m) devido à dificuldade de medir empiricamente os valores tão próximo de uma explosão (WU; HAO, 2005), a Eq. 3.3 de WU; HAO se aproxima mais dos valores obtidos por (KINGERY; BULMASH, 1984) do que a Eq. 3.1 de SADOVS-KIY.

$$t_d = 1.2\sqrt[6]{W\sqrt{R}} \quad (\mathrm{ms}) \tag{3.1}$$

$$t_d = 1.1078 \ln R + 1.5874 \quad (ms) \tag{3.2}$$

$$t_d = 0.5 R^{0.72} W^{0.16} \quad (\text{ms}) \tag{3.3}$$

Os resultados de Wu foram escolhidos por apresentar testes mais recentes


Figura 3.4: Gráfico mostrando o comportamento da equação de (SADOVSKIY, 2004), (KIN-GERY; BULMASH, 1984), e (WU; HAO, 2005)

*in situ* que contrastam e contestam com os resultados do manual, além de ser amplamente mais utilizado. Os valores desta equação serão inseridos na equação de Friedlander (Eq. 2.5), que será calculada para cada partícula em cada passo de tempo

## 3.2 Otimização

Os modelos de contato lineares representam as propriedades micromecânicas de cada material sendo modelado. Como ainda não há consenso entre a relação entre as propriedades macromecânicas com as micromecâncias, são feitos ajustes usando resultados de testes *in situ* como parte da função objetivo.

Alguns trabalhos recentes, como JOHNSTONE (2010) e HORN (2012), fazem o processo de calibração dos micro-parâmetros com o objetivo de tentar ganhar uma maior compreensão de sua relação com os parâmetros macroscópicos.

O estudo de HORN (2012) são estudados materiais granulares com elementos de 4cm ou maiores. No entanto, obteve alguns resultados satisfatórios e, apesar de não ter utilizado nenhum método de busca, o uso da média móvel como forma de suavização da curva da força exercida no solo usado em seu trabalho foi também utilizado como pré-processamento no trabalho desta dissertação.

Já o trabalho de JOHNSTONE (2010) usa o método de Nelder-Mead através do *software Statistica* em conjunto com o *software* EDEM para modelagem e simulação de dois casos de teste. Neste foi utilizado um modelo de contato não-linear de HERTZ (1882) com uma mola distinta para carregamento e descarregamento. As deformações plásticas não foram modeladas, além do ângulo de atrito interno de fricção entre os elementos e entre o elemento e a parede, que é um material que mantém os elementos confinados.

COETZEE; ELS (2009) faz uma calibração em que não usa *damping* para a calibração, e dois testes *in situ*, um triaxial e outro de cisalhamento foram utilizados. Neste artigo, conclui-se que o teste de cisalhamento não encontra um parâmetro único para o valor de fricção.

Apesar da calibração de parâmetros ser comum no MED, com frequência a calibragem é feita sem auxílio de nenhum método de busca até em experimentos recentes como em MÜLLER; TOMAS (2014). Por isso foi feito um estudo de diferentes métodos para encontrar valores que melhor adequam os modelos aos experimentos reais. No trabalho de ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH (2007) foi utilizado um método de otimização mais genérico, o Nelder-Mead, para calibração. Foi demonstrado que é possível utilizá-lo juntamente com o MED para buscar o melhor parâmetro para descrever um modelo físico. No entanto, o autor menciona que este método é o mais eficiente e preciso para o MED, sem revelar o motivo.

A eficiência que se menciona está relacionada com o número de avaliações da função objetivo que o método faz, dado que cada avaliação tem um gasto computacional muito elevado. Quanto à precisão, está relacionada com o quão próximo do resultado ótimo o método consegue chegar, ou se a solução é satisfatória, ou seja, se aproxima dos resultados práticos. Neste trabalho, foi verificada a afirmação do autor de que o método de otimização de Nelder-Mead era o mais eficiente e preciso. Conclui-se no capítulo 7 que o algoritmo genético pode atingir soluções até melhores com o mesmo tempo computacional.

O modelo de contato utilizado depende de duas constantes de contato que precisam ser determinadas a fim de adequar o resultado da simulação com os experimentos reais. Um modelo (estado inicial) foi criado para simular o fenômeno. A partir deste, os parâmetros  $k_n$  e o  $\gamma_t$  do modelo de contato serão ajustados usando um algoritmo de otimização. O objetivo geral deste trabalho foi encontrar os parâmetros do modelo de contato que melhor representem os resultados experimentais, mostrando que é viável utilizar outros métodos de otimização, e que não necessariamente o Nelder-Mead é sempre o ideal.

## 4 MÉTODO EXPERIMENTAL

## 4.1 Ambiente

O ambiente utilizado para os ensaios foi um Core i7 2600 com 16Gb de memória RAM DDR3. Além disso, as funções de Turbo Boost foram desabilitadas para que não alterem a frequencia dos processadores altere o desempenho em favor do algoritmo sequencial, já que ao estar com um núcleo ativo apenas, este recebe um clock maior do que com todos os núcleos habilitados.

## 4.2 Explosão

### 4.2.1 Modelagem

Devido a natureza mecânica da propagação da onda de choque, é esperado que esta se desenvolva a partir do contato entre os elementos mais próximos da fonte explosiva comprimindo-os. Este efeito provoca a propagação da onda no solo.

Para modelagem do pico de sobrepressão foi usada a Equação 4.1 (HENRYCH, 1979), calculada a cada passo de tempo. Esta equação, determinada empiricamente, depende da distância escalada Z (Eq. 4.2). Partindo do centro da explosão é possível saber qual será o valor do pico de sobrepressão dada uma certa distância R e uma certa carga W.

$$P_{s} = \begin{cases} \left(\frac{1407.2}{Z} + \frac{554}{Z^{2}} - \frac{35.7}{Z^{3}} + \frac{0.625}{Z^{4}}\right)(kPa) & 0.05 \le Z \le 0.3 \\ \left(\frac{619.4}{Z} - \frac{326}{Z^{2}} + \frac{213.2}{Z^{3}}\right)(kPa) & 0.3 \le Z \le 1 \\ \left(\frac{66.2}{Z} + \frac{405}{Z^{2}} + \frac{328.8}{Z^{3}}\right)(kPa) & 1 \le Z \le 10 \end{cases}$$
(4.1)

$$Z = \frac{R}{W^{1/3}} \left( m \cdot kg^{-1/3} \right) \tag{4.2}$$

Após o cálculo do valor do pico, este é inserido na equação de Friedlander (Eq.2.5), que calcula a propagação da pressão no ar (BAKER, 1973). Dessa forma, a explosão foi modelada de forma passiva. A Eq.2.5 considera que o pico de sobrepressão acontece no tempo t = 0, mas como cada elemento se localiza a uma distância distinta, o termo  $t_a$ (tempo de chegada da onda) foi inserido na equação. A pressão só é calculada para um elemento se  $t \ge t_a$ . Na Eq.2.5, t é o tempo atual de simulação,  $P_s$  é o pico de sobrepressão.  $\beta$  é o coeficiente que depende do formato do explosivo, cujo valor foi considerado como 1, representando um artefato esférico. Por fim,  $P_e$  é a pressão a ser aplicada em cada elemento da simulação num dado tempo t.

O tempo de chegada da onda  $t_a$  foi calculado através da equação da velocidade da frente de onda da explosão dada por (HETHERINGTON; SMITH, 1994):

$$U_s = \sqrt{\frac{6p_s + 7p_0}{7p_0}} \tag{4.3}$$

Para determinar o tempo da fase positiva, foi usada a Equação 3.3 (WU; HAO, 2005). Outras equações para determinação da fase positiva existem (SADOVSKIY, 2004; HENRYCH, 1979), mas optou-se pela equação de WU; HAO por ser mais coerente com o relatório TM-5-855-1 e mais recente.

Durante a simulação, a fase negativa da explosão é desconsiderada. Sendo assim, logo após o pico de sobrepressão, atingido quando  $t = t_a$  para um determinado elemento, o pico é dissipado através do contato com os elementos em seu entorno, e tenderá a zero quanto maior for o tempo de simulação.

#### 4.2.2 Modelagem usando o MED

O modelo de contato utilizado para a força resultante tangencial foi o de (HAFF; WERNER, 1986). Neste modelo há um amortecedor para suavizar mudança de direção da força até que se atinja o limite, que é a força de atrito (Eq.4.4)

$$F_t = -min \left\{ \begin{array}{l} \mu F_n \\ \gamma_t v_t m_{eff} \end{array} \right. \tag{4.4}$$

onde  $\mu$  é o coeficiente de atrito dinâmico,  $\gamma_t$  o coeficiente de amortecimento tangencial,  $v_t$ a componente tangencial da velocidade no instante do contato, e  $m_{eff}$  é a massa reduzida dos corpos em contato.

Para a força normal, tentou-se inicialmente utilizar o modelo linear de amortecimento (*linear dashpot*), dado por (BECKER; SCHWAGER; PÖSCHEL, 2008):

$$F_n = -k_n x - \gamma_n \frac{\partial x}{\partial t} \tag{4.5}$$

sendo  $(k_n)$  a rigidez normal,  $(\gamma_n)$  o amortecimento normal, (x) a interpenetração e  $(\frac{\partial x}{\partial t})$ a velocidade na direção da penetração. A rigidez normal  $(k_n)$  adotada pelo programa depende também de uma média harmônica da densidade dos elementos em contato  $(\rho^*)$ , uma média harmônica entre os módulos de Young  $(E^*)$  e uma constante arbitrária de rigidez  $k_c$ . Esta constante é ajustada para correlacionar as micropropriedades do modelo com as macropropriedades do material. No entanto, devido ao comportamento altamente não-linear do fenômeno estudado, este modelo linear diverge com extrema frequência, sendo necessário utilizar valores de rigidez altíssimos para que não haja instabilidade.

Para contornar esta limitação, foi permitido que a interpenetração do elementos fosse maior. Esta interseção não é um fenômeno natural, e sim um artifício do modelo de contato. No entanto, a explosão causa deformações extremas nos elementos mais próximos da fonte, que são levados a altas velocidades, causando dissipação de energia por deformações plásticas e fraturas. Levando estes fatores em consideração, o modelo de contato foi alterado. Dependendo da porcentagem de penetração  $\delta$ , dado pela interpenetração dividido pelo raio do menor dos dois elementos, há um aumento da rigidez dado por um multiplicador  $\lambda$ . A Eq.4.6 mostra o comportamento quando a mola está comprimindo:

$$F_n = \begin{cases} -k_n x - \gamma_n \frac{\partial x}{\partial t} & \text{Se } \delta < 0.1\\ -k_n \lambda x - \gamma_n \frac{\partial x}{\partial t} & \text{Se } 0.1 < \delta < 0.7\\ -k_n \lambda^2 x - \gamma_n \frac{\partial x}{\partial t} & \text{Se } 0.7 < \delta < 0.9 \end{cases}$$
(4.6)

Na distensão da mola, a rigidez não sofre alteração (não há  $\lambda$ ), exceto no caso da compressão ser excessiva, ou seja,  $\delta \geq 70\%$ . Neste caso, a mola não fará mais força de

distensão, assumindo que houve uma ruptura. Ainda neste caso, os dois elementos em contato são marcados, e estes terão a força de distensão nula pelo resto da simulação. Os elementos marcados não alteram a marcação de outros elementos, cuja força de distensão não foi alterada. Porém a força de compressão obedece a Eq. 4.6 em qualquer situação, ou seja, no caso de interpenetração entre elementos marcados com não-marcados, e marcados com marcados. Este foi o artifício encontrado para solucionar a tendência do retorno dos elementos à posição inicial, após um tempo significativo sob compressão.

No modelo de contato para a força normal, o amortecimento pode ser considerado dependente da rigidez normal e da massa de ambos os elementos em contato através da relação  $c_n = \alpha c_n^{\ c} = \zeta \sqrt{2m_{eff}k_n}$  (HU et al., 2011), onde  $c_n^{\ c}$  é o coeficiente de amortecimento crítico,  $\zeta$  é a razão de amortecimento (ou *damping ratio*), e  $m_{eff}$  a massa reduzida dos elementos em contato. O amortecimento crítico representa o amortecimento que causa o retorno à posição inicial no menor tempo possível e sem oscilações.

A razão de amortecimento é uma propriedade intrínseca de cada material e é importante no modelo, uma vez que determina a dissipação e absorção do impacto e das ondas de choque. Além disso, este parâmetro depende de muitos fatores, e pode ser variável com a tensão cisalhante, por exemplo. Em (DELFOSSE-RIBAY, 2004) é mostrado como esse parâmetro se comporta para cada caso específico de tensão cisalhante para a areia. Este valor também é usado em testes de propagação de abalos sísmicos para mesma condição e tipo de solo (MASOUMIA; DEGRANDEA; HOLEYMANB, 2009). Os valores encontrados para a razão de amortecimento são da ordem de 0.01.

#### 4.2.3 Aspectos Computacionais

#### 4.2.3.1 Pressão do Explosivo

Para determinar a força resultante e sua direção devido à detonação de um explosivo, primeiro ordenam-se todos os elementos do modelo em ordem crescente de distância ao centro da explosão (ponto G da Figura 4.1). O espaço é dividido em segmentos radiais partindo do centro da explosão, inicialmente com um segmento (intervalo) único de  $[0, 2\pi)$ . Com o primeiro elemento, define-se as duas retas tangentes ao círculo do elemento. O segmento correspondente ao ângulo entre estas retas é removido do intervalo  $[0, 2\pi)$ . A pressão é multiplicada pela área de um cilindro de profundidade 1 dada pelo arco formado pelos pontos tangentes de ambas as retas (pontos I e H da Figura 4.1). A pressão a ser aplicada a cada elemento é obtida a partir da Equação 2.5.



Figura 4.1: Figura ilustrando a fonte da explosão (ponto G)

A partir do segundo elemento em diante, a área a ser aplicada a pressão dependerá da área de sombra, dada pelos elementos logo a frente. A força é gerada multiplicando a pressão pela área correspondente a soma das seções do elemento, formadas pelas interseções das retas de incidência da fonte até o elemento. Como exemplo, a área a ser aplicada à pressão no círculo com centro em E na Fig. 4.1 será dada apenas pelo arco formado pelas retas C e D. Isto se deve ao fato do primeiro círculo já ter eliminado o segmento radial correspondente ao ângulo entre as retas A e C.

O algoritmo é aplicado a todos os elementos do modelo a cada passo de tempo e tem um alto custo computacional. Isto se deve ao fato de que em cada passo de tempo, há a necessidade de ordenar todos os elementos do modelo (O(nlog(n))), além do uso de funções de ponto flutuante de execução lenta (como o pow() em C/C++) devido aos expoentes racionais de certas equações.

Tendo em vista que o efeito da explosão tem decaimento exponencial, seu efeito é muito curto. Assim, sua execução pode ser limitada. Após vários testes com os modelos, determinou-se que 2.5ms era tempo suficiente para que a onda de choque no ar chegasse aos elementos, transmitisse a energia e terminasse a sua fase positiva.

#### 4.2.3.2 Algoritmo de Contato

O algoritmo usado para detecção de contato é o método de classificação (ou *Screening*) (MUNJIZA, 2004). Esse algorimo tem a vantagem de ser facilmente paralelizável, pois envolve percorrer uma matriz em paralelo, porém com a restrição de determinar o contato entre elementos localizados em células vizinhas. A força resultante da interação entre os elementos é calculada e gravada em ambos elementos. Portanto, deve-se apenas ter cuidado para que duas *threads* não acessem a mesma célula ao mesmo tempo, ou haverá o risco de uma condição de corrida.

O método utilizado itera na matriz em dois passos. No primeiro passo todas linhas ímpares serão computadas, na segunda todas as pares. As colunas são calculadas de forma sequencial por cada processador. Para casos onde haja uma distribuição dos elementos que se concentrem em apenas parte do espaço, pode ocorrer um desbalancemento. No entanto, os modelos utilizados preenchem o espaço de forma simétrica e garantem um melhor aproveitamento deste algoritmo.

### 4.3 Penetração de Cone

#### 4.3.1 Simplificação do Modelo de Contato

No modelo de força tangencial de HAFF; WERNER (1986), a função que representa a força tangencial resultante aumenta de forma proporcional à velocidade tangencial até um limite, que é o atrito dinâmico ( $\mu F_n$ ). Para este trabalho, a dependência da velocidade foi removida, fazendo com que a força resultante dependa apenas da força normal, eliminando a necessidade de avaliação do coeficiente  $\gamma_t$ . Ou seja, a força tangencial se resume a  $F_t = \mu F_n$ . No entanto é esperado que exista um impacto na precisão da simulação e nos resultados.

No modelo de contato normal o amortecimento pode ser considerado dependente da constante de rigidez e da massa de ambos os elementos em contato através da relação  $c_n = \zeta c_n^{\ c} = \zeta \sqrt{2m^*k_n}$  HU et al. (2011), onde  $c_n^{\ c}$  é o coeficiente de amortecimento crítico,  $\zeta$  é a razão de amortecimento (ou *damping ratio*), e  $m^*$  a média harmônica das massas dos elementos em contato. O amortecimento crítico representa o amortecimento que causa o retorno a posição inicial no menor tempo possível e sem oscilações. Na Figura 4.2 é possível ver o comportamento para diversos valores de  $\zeta$ .



Figura 4.2: Diferentes valores de  $\zeta$  e suas implicações no amortecimento [Wikipedia]

A razão de amortecimento é uma propriedade intrínseca de cada material e é importante no modelo uma vez que determina a dissipação e absorção do impacto e das ondas de choque. Além disso este parâmetro depende de muitos fatores, e pode ser variável com a tensão cisalhante, por exemplo. Em DELFOSSE-RIBAY (2004) é mostrado como esse parâmetro se comporta encontrados diversos valores para cada caso específico de tensão cisalhante para a areia. Em KARL; HAEGEMAN; DEGRANDE (2006) são testados os valores para testes de penetração de um cone sísmico num solo de areia e no caso de profundidades baixas e com areia seca homogênea, os valores encontrados para a razão de amortecimento são da ordem de 0.01. Este valor também é usado para testes de propagação de abalos sísmicos em solos de areia de baixa profundidade (MASOUMIA; DEGRANDEA; HOLEYMANB, 2009).

Além disso, em ZHANG; WHITEN (1996), é discutido um modelo não-linear de colisão para cobrir as deficiências do modelo linear. O modelo de amortecimento linear sofre várias oscilações com  $0 < \zeta < 1$ , gerando forças de repulsão e atração ao mesmo tempo, o que não reflete o cenário real (TSUJI; TANAKA; ISHIDA, 1992).

#### 4.3.1.1 O passo

O passo do algoritmo é um outro desafio do trabalho, uma vez que ele depende muito da configuração dos elementos no modelo. A aglomeração, a energia cinética, tipo de método de integração e o número de contatos são fatores que influenciam no tamanho do passo a ser tomado. No entanto, levando estes fatores em consideração, em RAJI; FAVIER (2004) é citado uma maneira genérica de determinar o passo, dependendo da rigidez da mola. Os fatores citados anteriormente podem ser simplificados em uma constante f que tenta quantificar a configuração do modelo. A relação é:

$$\Delta t = f \sqrt{massa/k_n}$$

No entanto, assumindo a massa como uma constante e igual para todo o modelo, é possível simplicar para:

$$\Delta t = f_2 \sqrt{1/k_n}$$

Resta encontrar o termo  $f_2$  através de testes com o modelo, reduzindo-se o passo até que seja possível rodar a simulação até o fim. Quando atingido calcula-se o  $f_2$  com  $f_2 = \frac{passoEncontrado}{\sqrt{1/k_n}}$  e é possível usar a relação para encontrar o passo aproximado para uma dada rigidez.

No entanto é preciso atentar para o limite do passo, pois o f é apenas uma aproximação fixa, e como o modelo é dinâmico, a velocidade das partículas se altera a todo o passo. Sendo assim, um passo grande demais pode permitir que um elemento com uma grande velocidade se sobreponha de forma excessiva. Isto pode ser minimizado colocandose um valor mais conservador para f e adicionando um teto para o passo, limitando o valor máximo que o passo pode atingir, evitando  $\Delta t$  grande demais.

#### 4.3.2 Otimização

Com os dois parâmetros a serem determinados  $(k_n e f_r)$ , resta encontrar os parâmetros que melhor aproximam o modelo dos resultados obtidos *in situ*. A forma utilizada para aproximar os resultados foi através da força total necessária para penetração do cone de 30 graus. Como os valores utilizados para otimização do artigo ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH (2007) não foram citados, optou-se por usar a Figura 4.3 como base para minimização. Foram usados pontos da figura para estimar a curva que melhor representa o grafico.



**Figura 4.3:** Gráfico original do artigo de ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH (2007) usado como base para minimização

A curva geométrica  $63820x^{1.5284}$  foi escolhida por aproximar a função da Figura 4.3, pois obteve menor erro  $R^2 \approx 0.999$  dentre outras testadas: linear, quadrática e cúbica. Na Figura 4.4 é possível observar o comportamento da equação frente à função do comportamento obtido *in situ* no artigo.



Figura 4.4: A equação geométrica aproximada da função que representa o resultado in situ

Portanto, o problema se resume a minimizar o erro do resultado obtido em cada simulação, que é dado pelos coeficientes a e b da equação geométrica  $y = ax^b$ . Para calcular os termos a e b, podemos aplicar um logaritmo em ambos os lados, tendo:  $\log y =$  $\log a + b \log x$ . Sendo  $\hat{y} = \log y$  e  $\hat{x} = \log x$ , então:  $\hat{y} = \hat{a} + b\hat{x}$ , que é uma reta, onde bpermanece inalterado.

Assim, ao rodar uma simulação e obter os resultados das forças, basta fazer uma regressão linear no logaritmo da altura (ou penetração), e da força necessária para mover o cone à uma taxa constante. Como qualquer base pode ser usada para o logaritmo, por conveniência optou-se pelo neperiano. Já que *b* permanece inalterado, basta saber o termo  $\hat{a}$  para completar a função de otimização. Então como  $\hat{a} = \log a$  o termo  $\hat{a} \approx \ln(63830) \approx 11.0638346318.$ 

Com isto, é possível montar uma equação  $\Phi$  que estima o erro da simulação:

$$\Phi = \frac{|a_{modelo} - 11.0638346318| + |b_{modelo} - 1.5284558501| + \sigma^2}{3}$$

Sendo  $a_{modelo}$  e  $b_{modelo}$  os valores de  $\hat{a}$  e  $\hat{b}$  obtidos a partir da regressão linear do logaritmo dos valores encontrados no final de uma simulação. O  $\sigma^2$  é a variância, dada pela diferença

entre o y da função esperado no ponto  $\hat{x}$  e o y experimental. A inclusão dos dois primeiros termos é importante devido às características da simulação, pois a dispersão dos dados não importanta tanto quanto a aproximação da reta.

Os dados obtidos *in situ*, por natureza do próprio problema, são muito ruidosas e a equação mostrada é uma aproximação. As muitas oscilações em torno da equação são provenientes das deformações plásticas do solo. Portanto, se fosse levado em conta apenas a variância, os modelos menos dispersos poderiam ser mais privilegiados em detrimento da tendência, porém com os pontos bem mais próximos da curva.



Figura 4.5: Exemplo de aproximação por variância

Na Figura 4.5, ao considerar apenas a variância como um erro, como a penetração não se estende até uma penetração maior que 5cm, a curva foi aproximada melhor no início, porém no final chegou-se a um platô. Para poder amenizar este efeito indesejado, sem aumentar a profundidade de penetração, usou-se uma variância poderada. Assim, o final da curva tem um peso maior, forçando o final dos dados a serem melhor aproximados. Um efeito negativo de usar essa função de erro é que o início pode também ficar prejudicado. Também é possivel que o final do gráfico seja bem ajustado, mas o resto tenha um comportamento mais errático. Tudo pode depender do peso a ser utilizado e da parte em que será utilizado. Para este trabalho, a primeira metade final da curva foi escolhido para receber o dobro de peso. Assim, o efeito será como se esta metade final fosse contada duas vezes. Durante os testes este foi o peso que melhor preservou a tendência.

Assim, a variância foi ponderada de forma a partir da metade do intervalo dobrar

a contribuição, então:

$$\sigma_{pond} = \frac{\sum_{i=1}^{n/2} (f(x_i) - y)^2 + \sum_{i=n/2}^n 2(f(x_i) - y)^2}{\frac{n}{2} + n}$$

#### 4.3.3 Construção do modelo

Para reproduzir os resultados foram usados dois modelos para o processo de otimização. O intuito é construir um modelo mais simples e que rode mais rapidamente, a fim de acelerar a computação, que pode levar de minutos até horas. Posteriormente um modelo mais completo é usado para testar o resultado dos parâmetros encontrados na otimização. Para isso, foi construído um modelo com as mesmas características do artigo, porém com menor profundidade, e assim com metade dos elementos. Ou seja, o novo modelo tem 5000 elementos. Além disso o tempo total de computação foi reduzido, fazendo com a condição de parada seja uma penetração 3cm do cone e o intervalo de amostragem foi de  $10^{-3}$ . Ou seja, considerando um tempo total de  $3 \times 10^{0}$  segundos de simulação, teremos 3000 amostras, ou pontos a serem avaliados que correspondem a soma das forças dos elementos que compõem o aparato (cone) em cada instante.

A penetração do Cone de 90 graus foi escolhida para os testes, pois como é possível ver na Figura 4.3 o cone de 30 graus só começa a exercer uma força significativa no gráfico a partir de 4cm de profundidade, o que faria a simulação demorar mais tempo. Usando o cone de 90 graus é possível ir até 3cm, numa etapa inicial, para procurar o mínimo, depois utilizar um modelo mais completo e que alcance uma maior profundidade para fazer um ajuste mais fino.

#### 4.3.4 Escolha dos parâmetros iniciais

A escolha dos parâmetros para o início do algoritmo é decisivo para o sucesso da otimização. Se os parâmetros estiverem muito próximos e longe do mínimo global, o algoritmo pode tender rapidamente para um mínimo local, sem nunca sair. Porém é preciso escolher os pontos de forma a também não aumentar demais o tempo de computação. Durante os testes, um modelo com a constante de rigidez maior que  $1.0 \times 10^{-8}$  s, frequentemente necessita de mais de 10 minutos para calcular cada ponto da função.

Portanto, valores menores que este são desejáveis para o tempo total do algoritmo

intervalo de $k_n$	$10^{-8} - 10^{-9}$		Cone de Aço	Areia
f	$10^{-5}$	Densidade	7.8500000e+03	1.5170000e+03
gravidade	9.81	Young (GPa)	8.3000000e+01	2.1000000e+02
$\mu$	0.1/0.5	Diâmetro	0.4mm	1.1mm

Tabela 4.1: Parâmetros da simulação

ser viável, mas tendo em mente que valores menores de  $k_n$  tendem a diminuir a qualidade dos resultados, pelo fato que ela altera o tempo total de colisão.

#### 4.3.5 Novos Ensaios

Simuladores mais atuais como o Yade (ŠMILAUER et al., 2010) usam uma estimativa diferente para o valor da rigidez. A estimativa leva em conta não somente o módulo de Young para o coeficiente  $k_n$ , mas também o raio do elemento (SCHOLTÈS et al., 2009). Isto faz sentido físico, pois se os elementos de um modelo não forem de tamanho homogêneo, um elemento maior em contato com um menor terá uma rigidez distinta, que é dada pela média harmônica da rigidez dos dois elementos em contato. Então:

$$k_n = \tilde{k_n} \frac{E_1 \tilde{l_1} E_2 \tilde{l_2}}{E_1 \tilde{l_1} + E_2 \tilde{l_2}}$$

Sendo  $k_n$  a rigidez normal, E o módulo de Young,  $\tilde{l_1}$  uma proporção do raio do elemento (que aqui é assumido como seu próprio raio) e  $\tilde{k_n}$  é o fator de correção usado para calibração da rigidez normal.

Em (KARL; HAEGEMAN; DEGRANDE, 2006) são obtidos os valores médios de 10% para o damping crítico em testes de penetração de um cone sísmico para profundidades baixas em areia seca homogênea. Então este valor será usado para os novos testes com este modelo de contato.

Para estes novos ensaios, o modelo foi alterado com intuito de reduzir o tempo de computação, e adequar melhor os valores com os do artigo de ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH (2007). A velocidade do cone de penetração foi alterada de forma a estar de acordo com a especificação exata usada pelo artigo: 6,67mm/s. Para garantir a estabilidade, foi criado um modelo onde previamente esperou-se que todos os elementos se assentassem à caixa com a ação da gravidade. Posteriormente foram os elementos correspondentes ao cone, já numa posição onde a ponta já estivesse quase tocando o solo. Um programa em Python foi criado para levar em conta o momento exato em que o cone entra em contato com os elementos que representam o solo, sendo este ponto no eixo Y considerado como zero. A fim de reduzir o tempo de computação, o número de elementos do modelo foi reduzido pela metade e o tempo total de simulação foi alterado para 3 segundos. Com esta redução, a penetração máxima ao fim da simulação é de aproximadamente 2cm. Os elementos retirados pertenciam ao fundo da caixa, de modo a não interferir com o resultado.



Figura 4.6: Modelo usado para otimização

A estimativa do erro foi modificada para utilizar a soma do quadrado dos resíduos. Uma nova curva foi usada para otimização, baseada em novos pontos obtidos com ajuda da ferramenta gratuita e disponível via navegador: WebPlotDigitizer. Nela foi possível extrair pontos da Figura 4.3 do trabalho de ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH (2007) com mais precisão. Então foi usada a ferramenta CorePolyGUI para gerar um polinômio que melhor aproximasse dos pontos obtidos, forçando-o a passar pela origem. Como o tempo de cálculo de uma solução é da ordem de alguns minutos, o uso de um polinômio de maior grau não interfere de forma significativa no tempo de computação. Portanto, a cúbica 20,023147x + 39.3009553x<sup>2</sup> - 3.724983<sup>3</sup> foi escolhida pois seu  $R^2 = 0,99997$ , e a aproximação de segunda ordem teve  $R^2 = 0,998$  e a de quarta ordem  $R^2 = 0,99998$ . Ou seja, enquanto cúbica obteve uma vantagem significativa em relação a quadrática, a quártica não obteve uma melhoria considerável.

#### 4.3.5.1 Média Móvel

Após realizadas as simulações, foi posssível notar o comportamento ruidoso da curva de força vertical de penetração no solo. A cada intervalo definido de  $1 \times 10^{-2}$  s medese pontualmente a força total no aparato, que está sujeita a oscilações normais decorrentes do fluxo dos elementos. Baseando-se em (HORN, 2012), adotou-se a idéia do uso de um filtro passa-baixa para suavização. Neste caso, ao invés de observar a força pontualmente

no aparato em um intervalo definido de tempo, todos os passos são considerados para a média.

Portanto o número de itens para serem considerados para a média foi baseado no tamanho do passo de tempo, que pode variar de  $1 \times 10^{-7}$  s a  $1 \times 10^{-5}$  s. Como o tempo total de simulação é de 3 segundos, é possível que numa única simulação, com um conjunto de parâmetros a serem testados, seja preciso calcular uma quantidade de passos da ordem de  $10^{10}$ . A fim de acelerar a computação, evitando gravar a força a cada passo num arquivo, a média da força vertical é calculada dentro do próprio programa, gravando apenas esta média num arquivo de saída. Uma média com  $10^4$  passos é gravada no arquivo, junto com a posição X e Y do elemento que representa a ponta do cone e a força acumulada do cone durante o último passo calculado até aquele momento.

#### 5 **RESULTADOS**

O equipamento utilizado em todas as simulações foi um Core i7 2600 com 16Gb de memória RAM DDR3. O sistema operacional utilizado foi o Ubuntu 14.04 usando a IDE Code::Blocks e compilador GCC/G++ (versão 4.8.2). A versão do Python utilizada nos scripts é a 2.7.6, com as bibliotecas Deap (versão 1.0.1) e Scoop (versão 0.7.1).

#### 5.1Explosões em Solo

O algoritmo de explosão é executado de forma sequencial. Após atingido o tempo de simulação de 2.5ms, o cálculo da explosão é desabilitado e a execução passa a ser totalmente em paralelo usando 4 threads. O tempo total de execução é, em média, 25 minutos para os modelos com 35mil elementos, usando sempre o passo de tempo de  $1.0 \times 10^{-7}$  s. O tempo total de simulação foi de  $4.0 \times 10^{-2}$  s para todos os modelos. Os gráficos apresentados mostram até o tempo de 15ms para maior legibilidade.

Para as simulações foram utilizados parâmetros de solo equivalentes aos encontrados em (AMBROSINI et al., 2002). Na Tabela 5.1 estão descritos os parâmetros de solo usados pelo programa. Em todos os modelos, o diâmetro é igual para todos os elementos, com exceção da simulação da Fig.5.8, onde há duas camadas, mas com elementos de mesmo tamanho. No modelo de contato foram adotados os parâmetros indicados na Tabela 5.2.

Young $(E)$	0.44 GPa		$k_n$	[2.75e+03, 2.75e+05]
Densidade	$1250 \ Kg/m^{3}$		$\gamma_t$	100 (fixo)
$\mu$	0.2		$\lambda$	50 (fixo)
ζ	0.01		$\Delta t$	1.0e-07 (fixo)
diâmetro	4mm (const.)	] '	<b>.</b>	
Tabela 5.1: H	Parâmetros do		<b>Tabe</b> valore	a 5.2: Tabela com os s utilizados para a si-
solo utilizados			mulaç	ão

Inicialmente foram feitas três simulações para testar o comportamento do solo com a variação da rigidez normal. As três simulações assumem 3 valores distintos para  $k_n$ :  $2.75 \times 10^5$  N/m,  $2.75 \times 10^4$  N/m e  $1.1 \times 10^4$  N/m. A cada passo do algoritmo foram observadas 4 alturas distintas (0.05 m, 0.1 m, 0.2 m, 0.3 m). Em cada uma destas 4 alturas foi feita uma média da energia cinética com pelo menos 6 elementos de mesma altura, e no centro da largura do domínio.

O domínio é uma caixa de 1.2 m de largura e 0.527 m de altura, sendo que o material ocupa toda a largura e preenche até 0.427 m da altura da caixa com 36783 elementos. A carga não interage diretamente com os elementos e foi colocada no centro do eixo horizontal e a 0.5 m acima do nível do solo. Para os testes foi usada uma carga de 1Kg de TNT para esta altura.



Figura 5.1: Demonstração da mensuração da cratera. Programa em modo de visualização do momento linear  $(m\vec{v})$ . A carga não é visível.

A profundidade da cratera formada em cada uma das simulações é determinada a partir das 3 posições (indicadas com H1,H2 e H3) na Fig. 5.1. A média dos três valores é a profundidade da cratera. Este critério é o mesmo usado por (AMBROSINI et al., 2002). Já no diâmetro, foi considerado o início e o fim onde os valores da profundidade batiam com o do nível do solo inicial, partindo do centro do eixo horizontal da explosão.

O resultado para os parâmetros na Tabela 5.1 com o  $k_n = 2.75e5$  pode ser observado na Fig. 5.2. Nos resultados desta simulação é possível ver o efeito da pressão da explosão propagada pelo ar no solo, ao longo de diversas profundidades. A cratera formada tem 0.027 m de profundidade em t = 40ms e nota-se que, com o aumento da profundidade, o decaimento muda de forma, e a chegada da onda é menos súbita. Também foi obtido o tempo entre os picos de pressão nas profundidades de 0.05 m e 0.1 m, sendo este de 0.72ms.

Na simulação da Fig. 5.3 foi usado  $k_n = 2.75e4$  e a cratera formada após 40ms de simulação tem 0.053m de profundidade, em conformidade com os resultados encontrados em experimentos de campo em (AMBROSINI et al., 2002). O tempo de chegada da onda na profundidade de 0.05m até 0.1m foi de 1.4412ms. Já na simulação Fig. 5.4 foi usado  $k_n = 1.1e4$ , e a cratera formada tem 0.066m de profundidade. O tempo de chegada da onda na profundidade de 0.05m até 0.1m foi de 2.2042ms. Comparando com o tempo encontrado de 0.72ms da simulação com  $k_n = 2.75e5$ , conclui-se que a velocidade aumentou com o aumento do  $k_n$ .



**Figura 5.2:** Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m de altura do solo e 1 kg de TNT. Com  $k_n = 2.74e5$ 



**Figura 5.3:** Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m de altura do solo e 1 kg de TNT. Com  $k_n = 2.75e4$ 

Combinando os dados das três simulações, foram escolhidos os picos de energia cinética para cada uma das 4 profundidades. Na Fig. 5.5 é possível ver com maior clareza o tempo de chegada do pico (eixo y) dada uma certa profundidade. Nota-se que um aumento do  $k_n$  acarreta uma diminuição do tempo necessário para atingir-se o pico de energia da onda. Ao observar a queda do pico de energia nas Figs. 5.2, 5.3 e 5.4 na profundidade de 0.05 m, é possível notar uma queda mais acentuada para maiores valores de  $k_n$ . Como o aumento da rigidez normal provoca uma diminuição no tempo de contato entre os elementos, esta pode ser uma das razões para o fenômeno observado.



**Figura 5.4:** Energia cinética ao longo do tempo para 4 profundidades distintas no solo. Carga a 0.5 m de altura do solo e 1kg de TNT. Com  $k_n = 1.1e4$ 



**Figura 5.5:** Tempo até o pico de energia, para diferentes valores de  $k_n$  e diferentes profundidades.

Também foi analisado a influência do tamanho dos elementos na onda de choque. A Fig. 5.6 demonstra o resultado de uma simulação com os parâmetros idênticos ao da segunda simulação (Fig. 5.3), porém com elementos de 3mm de diâmetro e na Fig. 5.7 foram utilizados elementos com 6mm de diâmetro. Na simulação com 6mm de diâmetro foi obtida uma cratera de 0.053 m de profundidade, utilizando 16 mil elementos e levando em torno de 10 minutos de processamento. Já na de 3mm foi obtida uma cratera de 0.054 m , utilizando 65 mil elementos e levando em torno de 55 minutos de processamento. Ao comparar os três gráficos, é possível perceber que a média do pico nos elementos de

mesma profundidade foi maior ao aumentar o diâmetro dos elementos. Não foi observada alteração significativa no tempo de propagação.



Figura 5.6: Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.3, porém com elementos de 3mm de diâmetro



Figura 5.7: Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.3, porém com elementos de 6mm de diâmetro.

Outra simulação, com os mesmos parâmetros da segunda simulação, foi realizada para observar o comportamento da onda ao transitar de um meio com elementos de menor para maior diâmetro. Para isso, criou-se uma camada de 0.15 m de profundidade com elementos de 4mm e outra abaixo com 6mm de diâmetro até o limite inferior da fronteira. Neste modelo, foram usados 32 mil elementos, levando em torno de 25 minutos de processamento. A profundidade da cratera formada foi de 0.055 m. Na Fig.5.8 é possível ver o efeito da camada na propagação da onda. Ao comparar com a primeira, é possível observar que o tempo de chegada do pico para a profundidade de 0.2 m e a intensidade foram menores.



**Figura 5.8:** Simulação com os mesmos parâmetros da Figura 5.2, porém com uma camada de 4mm sobre outra de 6mm de diâmetro

Em (AMBROSINI et al., 2002), dois valores são encontrados para a profundidade em testes realizados *in situ*: Em um teste (B1a) a profundidade da cratera foi de 0.05m e no outro (B1b) foi encontrado 0.045m para profundidade. Ao comparar estes valores

com os encontrados pelas simulações com os 3 valores distintos de  $k_n$  na Tabela 5.3 e diâmetro de elemento 4mm, nota-se o valor da rigidez normal que mais se aproxima é  $k_n = 2.75 \times 10^4 \,\text{N/m}$ . Na tabela 5.4 estão os resultados obtidos com grãos de 3mm, 6mm e outra com duas camadas, uma de 4mm outra de 6mm usando  $k_n = 2.75 \times 10^4 \,\text{N/m}$ . Nota-se que não houve mudança significativa na profundidade ao alterar o tamanho do grão.

Teste	Profundidade
$k_n = 2.75 \times 10^5 \mathrm{N/m}$	$0.027\mathrm{m}$
$k_n = 2.75 \times 10^4 \mathrm{N/m}$	$0.053\mathrm{m}$
$k_n = 1.1 \times 10^4 \mathrm{N/m}$	$0.066\mathrm{m}$

**Tabela 5.3:** Tamanhos de cratera encontrados com 1Kg de TNT a 0.5 m de altura com grãos de 4mm

Teste	Profundidade
3mm	$0.054\mathrm{m}$
6mm	$0.053\mathrm{m}$
4mm - 6mm	$0.055\mathrm{m}$

**Tabela 5.4:** Tamanhos de cratera encontrados com 1Kg de TNT a 0.5 m de altura e  $k_n = 2.75 \times 10^4 \text{ N/m}$ 

## 5.2 Penetração de Cone

A primeira simulação com os parâmetros iniciais na Tabela 5.5 foi feita, com  $f_{passo} = 1.05e - 5$ . Usando apenas a equação de erro da variância ponderada, após aproximadamente 20 iterações o algoritmo estacionou em um ponto cuja imagem é dada por 8001. As variáveis melhores foram:  $k_n = 2.12321921923e - 9$  e  $\mu = 0.25172994819184533865$ 

Na Figura 5.9 é possível notar que o erro de aproximação é grande no início. Dois grandes desvios podem ser observados o início do gráfico da figura 5.9 podendo ser atribuídos a um erro numérico no cálculo do modelo devido ao passo de tempo. Se o passo for pequeno demais e o  $k_n$  baixo, os elementos tendem a permanecer em colisão por mais tempo, acarretando numa pressão que não condiz com o que acontece na realidade. Após um certo tempo esta pressão cessa empurrando os elementos para cima rapidamente. O esperado é que os grãos de areia se empurrem e formem lentamente os montes de areia. Neste caso, a força se acumula lentamente e é liberada muito rapidamente.

Pontos	1	2	3
$k_n$	1.0e-8	1.0e-9	5.0e-9
$\mu$	0.1	0.3	0.5

Tabela 5.5: Início da simulação 1



Figura 5.9: Gráfico da solução encontrada com parâmetros iniciais da Tabela 5.5. F(x) = 8001

No entanto, como a tendência parece estar próxima, outros testes foram feitos com passos de tempo diferentes. Na Figura 5.10 foi utilizado o passo de  $7.0\times10^{-6}$ s. Podese perceber que a função está mais suave no início e a tendência mudou muito apenas alterando o passo. Por isso, uma busca em torno desse valor foi feita e na Figura 5.11 é possível ver o melhor resultado encontrado manualmente, com passo  $6.17\times10^{-6}\,\mathrm{s}$ . A linha de tendência da figura 5.11 foi muito melhor do que no gráfico da Figura 5.9, como é possível ver nos gráficos do logaritmo de ambos os resultados.



Figura 5.10: Gráfico da função encontrada após apenas aumentar o passo

Uma segunda simulação foi feita, dessa vez substituindo o Ponto 3 da tabela 5.5 pelos parâmetros ótimos encontrados no teste anterior. Os novos valores encontrados foram  $k_n = 0.0000000212321921923$  e  $\mu = 0.25172994819184533865$ . Nota-se na figura 5.12 um comportamento inicial semelhante ao do gráfico da figura 5.9, porém com melhor tendência e um erro inicial maior. Como proposto anteriormente, o passo foi alterado buscando melhorar a solução.

Após realizar novamente uma busca manual por uma solução melhor, foi obtido



Figura 5.11: Gráfico da função encontrada após uma busca manual para otimizar o passo



Figura 5.12: Gráfico da função encontrada na segunda simulação

o resultado demonstrado na Figura 5.13. É possível perceber desta vez uma melhora drástica no comportamento da função apenas ao alterar o passo. Neste caso, o passo foi aumentado, e no gráfico do logaritmo da função, os coeficientes da equação aproximada estão muito próximos.

#### 5.2.1 Novos Ensaios

#### 5.2.1.1 Algoritmo Genético

Usando os novos ensaios, um programa foi implementado na liguagem *Python* para fins de otimização usando o algoritmo genético com a biblioteca *Deap* (FORTIN et al., 2012). A escolha pelo seu uso foi a facilidade de implementação e integração com a biblioteca *Scoop* (HOLD-GEOFFROY; GAGNON; PARIZEAU, 2014) que permite o paralelismo nas avaliações dos pontos da função e uso de clusters de alto desempenho,



Figura 5.13: Gráfico da função encontrada na segunda simulação após uma busca manual para otimizar o passo

apesar desta última funcionalidade não ter sido explorada neste trabalho.

O algoritmo genético necessita também de alguns parâmetros iniciais para que se inicie a busca. Dentre eles estão a probabilidade de cruzamento, de mutação do cromossomo, de mutação do gene, tamanho da população inicial e número de gerações. Encontrar valores ótimos para estes parâmetros é um problema difícil (EIBEN et al., 2007) e nem sempre os parametros ótimos encontrados para um problema podem ser transportados a outro (LUNACEK; WHITLEY, 2006).

Assim, como o uso deste algoritmo para a solução deste tipo de problema ainda não foi estudado, os valores para as probabilidades foram estipulados arbitrariamente. Desta forma, os valores escolhidos para estas probabilidades podem não ser ótimos, impactando a velocidade de convergência. Já a população foi incrementada gradualmente para analisar seu impacto na solução.

A função de recombinação utilizada foi cxSimulatedBinaryBounded() que permite que os genes (*floats*) sejam binarizados e recombinados com restrições de fronteira. A função de mutação utilizada foi a mutPolynomialBounded() (DEB et al., 2000)

O espaço de busca foi o mesmo do Nelder-Mead, usando um gerador de números pseudo-aleatórios com  $0.001 < k_n < 0.6$  e  $0.1 < f_r < 0.4$ . O número de avaliações, execuções do programa de simulação e cálculo do F(x), depende do tamanho da população e do número gerações. Portanto, levando em consideração o alto custo computacional das avaliações, e que uma população de um algoritmo genético pode variar de 20 até 100 ou mais, dependendo do número de gerações, o término do algoritmo pode levar dias. Assim, o uso de paralelismo pode ajudar nesta tarefa. Inicialmente foi feita a configuração mais simples, onde cada população é executada em um nó. Assim, pode-se usar diversas

máquinas ao mesmo tempo para executar populações iniciais distintas. Nesta configuração, foram rodadas simulações com populações de 20, 40 e 60. Na Tabela 5.6 estão os resultados para as diferentes populações iniciais. Na Tabela 5.7 mostra a evolução até a solução usando uma população inicial de 40 e com 4 gerações.

Tempo(minutos)	$k_n$	$f_r$	F(x)	População	Gerações
1427	0.00907333	0.35761	617.91	60	4
1300	0.00480551	0.301	571.55	60	4
513	0.00929	0.2469	845.56	40	4
497	0.00678	0.2952	672.81	40	4
544	0.006971	0.3061	633.07	40	4
413	0.006563	0.15886	736.38	20	3
562	0.00774	0.30934	931.91	20	4

**Tabela 5.6:** Resultados com  $0.001 < k_n < 0.6$ 

Geração	População	F(x)
0	40	1565.28
1	38	779.371
2	32	865.043
3	36	669.087
4	32	633.073

Tabela 5.7: Evolução da solução F(x)=633

Após examinar os resultados da Tabela 5.6, é possível notar que o algoritmo parece sempre tender a um valor de  $k_n$  próximo de 0.001. Devido ao valor do passo ser inversamente proporcional ao valor de  $k_n$ , as avaliações tendem a ser mais rápidas ao diminuir o  $k_n$ . Assim, uma população maior e com mais gerações é possível de ser executada em menos tempo se o espaço de busca for reduzido.

Na Tabela 5.8 mostra o resultado de populações com o espaço de busca para o parâmetro  $k_n$  reduzido para o intervalo  $0.001 < k_n < 0.01$ . Já para a fricção foi mantido o intervalo anterior de  $0.1 < f_r < 0.4$ , já que ao analisar os resultados da Tabela 5.6, não há como concluir que haja alguma região específica de convergência para este parâmetro.

Tempo(min)	$k_n$	$f_r$	F(x)	População	Gerações
615	0.004696559765624	0.219337675781	564	40	6
1205	0.0054154	0.31946	472	60	6
964	0.00649800007883	0.317789998815	494	60	4

**Tabela 5.8:** Testes com espaço reduzido. Resultados com  $0.001 < k_n < 0.01$ 

Na Figura 5.14 são exibidos os resultados das curvas obtidas pelos resultados dos parâmetros obtidos na Tabela 5.8, e comparados com a curva aproximada do resultado experimental.



Figura 5.14: Resultados do algoritmo genético com espaço reduzido comparados com a curva experimental

#### 5.2.1.2 Nelder-Mead

Usando o novo método de contato, foram refeitos os testes com o método Nelder-Mead. Os pontos iniciais de busca foram  $(k_n, f_r) = (0.6, 0.3), (0.15, 0.6), (0.01, 0.16)$ . Estes valores foram escolhidos como iniciais, após diversos testes com valores de  $k_n$ , cujos valores inferiores ou maiores que os apresentados quase sempre divergiam. No caso do  $f_r$ , seu valor não afetava diretamente a divergência do modelo, portanto foi colocado um valor máximo de 0.6, pois o encontrado pelo artigo (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULE-VICH, 2007) se aproxima de 0.3. A Figura 5.15 mostra o comportamento do simplex ao longo das iterações do algoritmo. A solução encontrada para esta configuração foi  $k_n = 0.004754268527030948, f_r = 0.15393848419189454, f(x) = 528.3249184964553$  após 31 rodadas. Cada uma destas rodadas o algoritmo pode realizar outras avaliações, e no caso desta configuração, um total de 71 avaliações foram feitas.

Sabendo que o resultado do algoritmo é muito dependente das condições iniciais, outros 3 pontos iniciais foram testados: (0.01, 0.4), (0.6, 0.1), (0.001, 0.08). Após 50 roda-

das, totalizando 97 avaliações, o melhor resultado encontrado fo<br/>i $k_n=0.0105997604541, f_r=0.398535533268, f(x)=644.87$ 



O Nelder-Mead também foi testado com o espaço reduzido. Na Tabela 5.9 estão os parâmetros usados para criação do simplex inicial, junto com a solução, o valor do mínimo atingido e o tempo total de computação.

Tempo	$\begin{array}{c} k_{n1} \\ f_{r1} \end{array}$	$\begin{array}{c} k_{n2} \\ f_{r2} \end{array}$	$\begin{array}{c} k_{n3} \\ f_{r3} \end{array}$	k <sub>n</sub>	$f_r$	F(x)
300m	$\begin{array}{c} 0.008\\ 0.08\end{array}$	$\begin{array}{c} 0.006 \\ 0.4 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.001 \\ 0.05 \end{array}$	0.00800358016527	0.0802707628818	648
336m	$0.001 \\ 0.009$	$\begin{array}{c} 0.003\\ 0.4 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.009 \\ 0.09 \end{array}$	0.00706249713292	0.22099982103	554
379m	0.002 0.03	0.004 0.3	0.1 0.01	0.00618989610672	0.375286755562	479
314m	0.001 0.08	$0.005 \\ 0.4$	0.1 0.01	0.00762487792969	0.246745605469	628

Tabela 5.9: Resultados do algoritmo genético com a média móvel e  $10^{-3} < k_n < 10^{-2}$ 

#### 5.2.1.3 Média Móvel

As simulações foram feitas usando o espaço de busca reduzido, comentado anteriormente, com  $10^{-3} < k_n < 10^{-2}$  e mantendo o intervalo do parâmetro de fricção interna inalterado.

Tempo	$k_n$	$f_r$	F(x)	População	Gerações
372m	0.00742165074122982	0.124670989197741	339	40	4
402m	0.00860989034473294	0.11502720055471993	420	40	4
480m	0.008871605421717443	0.17455959420674305	474	40	4

Tabela 5.10: Resultados do algoritmo genético com a média móvel e  $10^{-3} < k_n < 10^{-2}$ 

Na Tabela 5.10 estão os 3 resultados obtidos usando a média móvel como filtro, em conjunto com o algoritmo genético. A melhor solução encontrada foi com F(x) = 339 e seu resultado foi comparado com a curva aproximada do resultado experimental na Figura 5.16. Nas Figuras 5.17 e 5.18 estão os outros dois gráficos do resultado da força vertical do aparato no solo (eixo y) e a profundidade no solo (eixo x).

Na Figura 5.19 está o resultado obtido com o Nelder-Mead com a média móvel e o espaço reduzido, usando como base  $[k_n = 0.01, f_r = 0.1], [k_n = 0.005, f_r = 0.4],$  $[k_n = 0.001, f_r = 0.08]$ . A simulação demorou 332 minutos, que é proximo do tempo que levou o algoritmo genético.



Simulação com kn=0,00742165074122982 fr=0.124670989197741

Figura 5.16: Melhor resultado obtido com o algoritmo genético com filtro comparando com o resultado experimental. F(x)=339



Simulação com kn=0,00860989034473294 fr=0,11502720055471993

**Figura 5.17:** Resultado obtido com o algoritmo genético com filtro comparando com o resultado experimental. F(x)=420



**Figura 5.18:** Resultado obtido com o algoritmo genético com filtro comparando com o resultado experimental. F(x)=473



Simulação com kn=0,00752800076166 fr=0,25715377209

Figura 5.19: Resultado obtido com o Nelder-Mead com filtro comparando com o resultado experimental. F(x)=425

# **6** CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Neste capítulo serão discutidos os resultados e gráficos obtidos no capítulo anterior. Primeiramente serão apresentadas as conclusões da modelagem de explosões acima do solo, e logo em seguida é discutida a otimização dos parâmetros micromecânicos de contato.

## 6.1 Explosões em Solo

Foram simulados e estudados os efeitos de uma explosão usando exclusivamente o método dos elementos discretos. Foi encontrada uma relação direta entre a rigidez normal da mola e a profundidade da cratera, mantendo-se a carga constante. Desta forma, ao alterar e ajustar o parâmetro de rigidez normal, é possível encontrar um valor que melhor se aproxime da profundidade alcançada no teste *in situ*.

Com a Tabela 5.3 é encontrada uma relação direta entre a rigidez da mola normal e a profundidade da cratera, mantendo-se a carga constante. Portanto, um ajuste de parâmetros é necessário para que o tamanho da cratera se ajuste com a literatura.

Além disso, notou-se uma relação entre o  $k_n$  e a velocidade de propagação da onda de choque. Um aumento no  $k_n$  acarreta um aumento da velocidade de propagação no solo. Além disso, é importante notar que solos granulares tem propriedades de atenuação de ondas de choque (BEN-DOR et al., 1997), tendo sido este comportamento observado nas simulações.

Também foi estudado a relação da onda de choque com o raio dos elementos. A velocidade da onda não sofreu alterações significativas, porém houve um aumento do pico de energia para um elemento de menor raio. No entanto, ao simular a onda transitando de um meio com elementos de menor diâmetro para um de maior, foi observada uma diminuição do tempo de propagação da onda.

## 6.2 Penetração de Cone

Ao observar os resultados e os tempos de computação, foi possível notar que o algoritmo de Nelder-Mead converge mais rápido e com menos avaliações do que algoritmo genético. No entanto, este algoritmo depende muito da configuração inicial do simplex, que pode ou não levar a uma boa solução. Já o algoritmo genético, depende de uma população que preencha o espaço de forma que os pontos fiquem o mais dispersos possíveis no espaço de busca. Assim, apesar do algoritmo genético também depender da população inicial, ao garantir que a população seja bem diversa e grande o suficiente, é possível varrer o espaço de forma a encontrar soluções melhores.

Através da Tabela 6.6, é possível notar que diante das diversas populações e resultados, uma população de 40 indivíduos foi suficiente para atingir o resultado obtido usando o Nelder-Mead, levando o mesmo tempo de computação que o mesmo. Aqui deve se levar em conta que o resultado do Nelder-Mead é dependente de uma escolha razoável para o simplex inicial, e que uma nova solução depende de uma reconfiguração deste simplex. Já no algoritmo genético não há a necessidade de uma boa escolha para os parâmetros iniciais, uma vez que este é determinado aleatoriamente. As más soluções, ou soluções divergentes, tem alta probabilidade de serem extintas pelo processo de seleção na próxima geração.

Observando os resultados, é possível concluir que o algoritmo genético não só é uma alternativa viável ao Nelder-Mead, como tem mais vantagens, além de facilmente paralelizável. Isto contradiz a afirmação de (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVICH, 2007), onde afirma-se que o Nelder-Mead é o melhor método para os problemas utilizando o MED.

Conclui-se também que a suavização de curvas, neste caso usando a média móvel, auxiliou no processo de otimização, já que as características do problema geram saídas muito ruidosas.

Seria válido testar com outros tipos de filtro, e variar a escala da média, suavizando com mais ou menos intensidade e avaliar se o resultado é melhor ou pior.

Quanto a validação, poderiam ser utilizados mais formas de avaliação das soluções finais encontradas. A exemplo de (JOHNSTONE, 2010) que utilizou mais de uma forma de avaliação com testes *in situ*, e para validação comparou o ângulo de repouso de cada resultado com os experimentais.

## REFERÊNCIAS

AMBROSINI, D. et al. Size of craters produced by explosive charges on or above the ground surface. **Shock Waves**, [S.l.], v.12, n.1, p.69–78, 2002.

AMBROSINI, D.; LUCCIONI, B. Craters Produced by Explosions Above the Soil Surface. **Mecánica Computational**, [S.l.], v.XXVI, p.2253–2266, 2007.

AMBROSINI, D.; LUCCIONI, B.; DANESI, R. Influence of the soil properties on craters produced by explosions on the soil surface. **Proc. Mecánica Computacional**, Bahía Blanca, Argentina, v.XXIII, p.571–590, 2004.

ASAF, Z.; RUBINSTEIN, D.; SHMULEVICH, I. Determination of discrete element model parameters using in-situ tests and inverse solution techniques. **Proceedings of the 15th international conference of the ISTVS**, Hayama, Japan, 2005.

ASAF, Z.; RUBINSTEIN, D.; SHMULEVICH, I. Determination of discrete element model parameters required for soil tillage. Soil and Tillage Research, [S.l.], v.92, p.227–242, 2007.

BAKER, W. E. Explosions in Air. [S.l.]: University of Texas Press, 1973.

BANGASH, M. Y. H. Shock, Impact and Explosion: structural analysis and design. [S.l.]: Springer Verlag, 2009.

BAULAC, M.; DEFRANCE, J.; JEAN, P. Optimization of multiple edge barriers with genetic algorithms coupled with a Nelder–Mead local search. Journal of Sound and Vibration, [S.l.], v.300, n.1–2, p.71 – 87, 2007.

BECKER, V.; SCHWAGER, T.; PÖSCHEL, T. Coefficient of tangential restitution for the linear dashpot model. **Phys. Rev. E**, [S.l.], v.77, p.011304, Jan 2008.

BEN-DOR, G. et al. Experimental investigation of the interaction between weak shock waves and granular layers. **Experiments in Fluids**, [S.l.], v.22, n.5, p.432–443, 1997.

BULSON, P. Explosive loading of engineering structures. [S.l.]: E e FN Spon, 1997.

BYATT, D. **Convergent Variants of the Nelder-Mead Algorithm**. 2000. Dissertação de Mestrado — University of Canterbury.

COETZEE, C. J.; ELS, D. N. J. Calibration of discrete element parameters and the modelling of silo discharge and bucket filling. **Computers and Electronics in Agriculture**, [S.1.], v.65, n.2, p.198 – 212, 2009. CUNDALL, P. A. A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. **Proceedings of the Symposium of International Society of Rock Mechanics**, Nancy, v.2, n.8, 1971.

DAVID, C.; FAVIER, J.; LAROCHE, R. A systematic approach to DEM material model calibration. Proceedings of the 6th International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids, Queensland, Australia, p.51–54, 2009.

DEB, K. et al. A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: nsga-ii. **IEEE Transactions on Evolutionary Computation**, [S.I.], p.849–858, 2000.

DELANEY, G. W. et al. Validation of DEM predictions of granular flow and separation efficiency for a horizontal laboratory scale wire mesh screen. **Proceedings of the Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries**, Melbourne, Australia, 2010.

DELFOSSE-RIBAY. Shear modulus and damping ratio of grouted sand. Soil Dynamics and Earthquake Engineering, [S.l.], v.24, n.6, p.461–471, Aug. 2004.

EIBEN, A. et al. Parameter Control in Evolutionary Algorithms. In: LOBO, F.; LIMA, C.; MICHALEWICZ, Z. (Ed.). **Parameter Setting in Evolutionary Algorithms**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2007. p.19–46. (Studies in Computational Intelligence, v.54).

ELNASHAI, A.; SARNO, L. D. Fundamentals of Earthquake Engineering. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.

FIRMO, T. Estudo Inicial da Modelagem da Destruição de Munições inservíveis no Solo pelo Método dos Elementos Discretos. 2013. Dissertação de Mestrado — Universidade Federal do Rio de Janeiro.

FISEROVA, D. Numerical analysis of buried mine explosions with emphasis on effect of soil properties on loading. 2006. Tese de Doutorado — Cranfield University.

FORTIN, F.-A. et al. DEAP: evolutionary algorithms made easy. Journal of Machine Learning Research, [S.l.], v.13, p.2171–2175, jul 2012.

FURTNEY, J. K.; CUNDALL, P. A.; CHITOMBO, G. P. Frontiers and challenges in numerical simulation of the blasting process using the combined finite discrete element method. Rock Fragmentation by Blasting - Proceedings of the 9th International Symposium on Rock Fragmentation by Blasting, FRAGBLAST 9, [S.1.], 2009.

GANDHI, S.; KHAN, D.; SOLANKI, V. S. A Comparative Analysis of Selection Scheme. International Journal of Soft Computing and Engineering, [S.l.], v.2, n.4, 2012.

GOLDBERG, D. E. Genetic and Evolutionary Algorithms Come of Age. Communications of the ACM, New York, NY, USA, v.37, n.3, p.113–119, Mar. 1994. GOLDBERG, D. E.; DEB, K. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms. **Proceedings of Foundations of Genetic Algorithms**, [S.l.], p.69–93, 1991.

GOLDBERG, D. E.; DEB, K.; CLARK, J. H. Genetic algorithms, noise, and the sizing of populations. **Complex Systems**, [S.I.], p.333–362, 1992.

HAFF, P.; WERNER, B. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. **Pow-der Technology**, [S.l.], v.48, p.239–245, 1986.

HENRYCH, J. Dynamics of explosion and its use. [S.l.]: Elsevier Scientific Publishing Company, 1979.

HENTZ, S. Modélisation d'une structure en béton armé soumise à un choc par la méthode des eléments discrets. 2003. Tese de Doutorado — Université Grenoble.

HERTZ, H. Ueber die Berührung fester elastischer Körper. Journal Fur Die Reine Und Angewandte Mathematik, [S.l.], p.156–171, 1882.

HETHERINGTON, J.; SMITH, P. Blast and Ballistic Loading of Structures. [S.l.]: CRC Press, 1994.

HOLD-GEOFFROY, Y.; GAGNON, O.; PARIZEAU, M. Once you SCOOP, no need to fork. Proceedings of the 2014 Annual Conference on Extreme Science and Engineering Discovery Environment, Atlanta, GA, USA, p.60, 2014.

HOLLAND, J. H. Adaptation in Natural and Artificial Systems. Ann Arbor, MI, USA: University of Michigan Press, 1975.

HORN, E. The Calibration of Material Properties for Use in Discrete Element Models. 2012. Tese de Doutorado — University of Stellenbosch.

HU, G. et al. On the Determination of the Damping Coefficient of Non-linear Springdashpot System to Model Hertz Contact for Simulation by Discrete Element Method. Journal of Computers, [S.l.], v.6, 2011.

HUANG, Z. yi; YANG, Z. xuan; WANG, Z. yu. Discrete element modeling of sand behavior in a biaxial shear test. Journal of Zhejiang University SCIENCE A, [S.1.], v.9, n.9, p.1176–1183, 2008.

JIANG, M.; YU, H.-S. Application of Discrete Element Method to Geomechanics. In: WU, W.; YU, H.-S. (Ed.). Modern Trends in Geomechanics. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2006. p.241–269. (Springer Proceedings in Physics, v.106).

JOHNSTONE, M. W. Calibration of DEM models for granular materials using bulk physical tests. 2010. Tese de Doutorado — University of Edinburgh.
KARL, L.; HAEGEMAN, W.; DEGRANDE, G. Determination of the material damping ratio and the shear wave velocity with the Seismic Cone Penetration Test. Soil Dynamics and Earthquake Engineering, [S.l.], v.26, 2006.

KINGERY, C. N.; BULMASH, G. Airblast Parameters from TNT Spherical Air Burst and Hemispherical Surface Burst. **Defence Technical Information Center**, [S.l.], 1984.

KINNEY, G. F.; GRAHAM, K. J. **Explosive Shocks in Air**. [S.l.]: UMacmillan Publishers, 1962.

LUNACEK, M.; WHITLEY, D. The Dispersion Metric and the CMA Evolution Strategy. Proceedings of the 8th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, New York, NY, USA, p.477–484, 2006.

MASOUMIA, H.; DEGRANDEA, G.; HOLEYMANB, A. Pile response and free field vibrations due to low strain dynamic loading. Soil Dynamics and Earthquake Engineering, [S.l.], v.29, 2009.

MENDONÇA FILHO, L. G. de. Propostas de distâncias de segurança para edificações com base em estudos de efeitos de explosões referenciados ao equivalente TNT. 2006. Tese de Doutorado — Universidade Estadual de Campinas (UNI-CAMP).

MUNJIZA, A. A. The Combined Finite-Discrete Element Method. [S.l.]: Wiley, 2004.

MUNJIZA, A.; VLADIMIR, D.; MOHANTY, B. Developments in numerical modeling of blast induced rock fragmentation: updates from the hsbm project. **10th International Symposium on Rock Fragmentation by Blasting**, Dehli, India, 2012.

MÜLLER, P.; TOMAS, J. Simulation and calibration of granules using the discrete element method. **Particuology**, [S.l.], v.12, n.0, p.40 – 43, 2014. Special issue on conveying and handling of particulate solids – Challenges of discrete element simulation, application and calibration.

NEEDHAM, C. E. Blast Waves. [S.l.]: Springer-Verlag Co, 2010.

NELDER, J. A.; MEAD, R. A Simplex Method for Function Minimization. The Computer Journal, [S.l.], v.7, n.4, p.308–313, Jan. 1965.

NORAINI, M. R.; GERAGHTY, J. Genetic Algorithm Performance with Different Selection Strategies in Solving TSP. **Proceedings of the World Congress on Engineering**, London, UK, 2011.

60

OWEN, P.; CLEARY, P. Prediction of screw conveyor performance using the Discrete Element Method (DEM). **Powder Technology**, [S.l.], v.193, n.3, p.274 – 288, 2009. Special Issue: Discrete Element Methods: The 4th International conference on Discrete Element Methods The 4th International Conference on Discrete Element Methods, Brisbane, August 2007.

PERSSON, P.-A.; HOLMBERG, R.; LEE, J. Rock Blasting and Explosives Engineering. [S.l.]: CRC Press, 1993.

POTYONDY, D.; CUNDALL, P. A bonded-particle model for rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, [S.l.], v.41, n.8, p.1329 – 1364, 2004. Rock Mechanics Results from the Underground Research Laboratory, Canada.

RAJI, A.; FAVIER, J. Model for the deformation in agricultural and food particulate materials under bulk compressive loading using discrete element method. I: theory, model development and validation. **Journal of Food Engineering**, [S.l.], v.64, n.3, p.359 – 371, 2004.

SABATUCCI, T. et al. Modelagem de explosões acima do nível do solo usando o Método dos Elementos Discretos. XXXIV Ibero Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, Pirenópolis-GO, 2013.

SADOVSKIY, M. Mechanical effects of air shockwaves from explosions according to experiments. **Geophysics and physics of explosion**, [S.l.], 2004.

SCHOLTÈS, L. et al. Micromechanics of granular materials with capillary effects. International Journal of Engineering Science, [S.l.], v.47, n.1, p.64 – 75, 2009.

SELLERS, E. et al. Improved understanding of explosive-rock interactions using the hybrid stress blasting model. Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy, [S.I.], 2013.

SILVA, W. C. L. Efeitos da onda de choque no ser humano e nas estruturas. 2007. Dissertação de Mestrado — Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA).

SPOLAÔR, N. Aplicação de Algoritmos Genéticos Multiobjetivo ao Problema de Seleção de Atributos. 2010. Dissertação de Mestrado — Universidade Federal do ABC.

TM-5-855-1. Fundamentals of protective Design for Conventional Weapons. Washington DC: U.S. Department of the Army, 1986.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. **Powder Technology**, [S.l.], v.71, p.239–250, 1992.

WANG, H. et al. The relationships between macro and micro-mechanical parameters for modeling diamond rock cutting using DEM. **3rd International FLAC/DEM Symposium**, Hangzhou, China, 2013.

WU, C.; HAO, H. Modeling of simultaneous ground shock and airblast pressure on nearby structures from surface explosions. International Journal of Impact Engineering, [S.l.], v.31, n.6, p.699 – 717, 2005.

WU, S. et al. Numerical Investigation of Crater Phenomena in a Particle Stream Impact onto a Granular Bed. Granular Matter, [S.l.], v.9, n.1-2, p.7–17, 2007.

ZHANG, D.; WHITEN, W. J. The calculation of contact forces between particles using spring and damping models. **Powder Technology**, [S.l.], v.88, n.1, p.59–64+, 1996.

ŠMILAUER, V. et al. The Yade Documentation. [S.l.]: The Yade Project, 2010.