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

ALEX DOS PRAZERES MACHADO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS UTILIZANDO MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO SEM DERIVADAS

Rio de Janeiro 2017

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

ALEX DOS PRAZERES MACHADO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS UTILIZANDO MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO SEM DERIVADAS

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e 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

Rio de Janeiro 2017

Machado, Alex dos Prazeres

M149d

Determinação de Parâmetros do Método dos Elementos Discretos Utilizando Métodos de Otimização sem Derivadas / Alex dos Prazeres Machado. – Rio de Janeiro, 2017. 139 f.: il.

Orientador: Marcello Goulart Teixeira.

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, 2017.

1. Métodos dos Elementos Discretos. 2. MED. 3. YADE. 4. Otimização. 5. Geotecnia. 6. Calibração. 7. Ensaio de Tração. 8. Cisalhamento Direto. 9. Compressão Uniaxial. 10. T-Bar. – Teses. I. Teixeira, Marcello Goulart (Orient.). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática, Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Programa de Pós-Graduação em Informática. III. Título

CDD:

ALEX DOS PRAZERES MACHADO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS UTILIZANDO MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO SEM DERIVADAS

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e 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, <u>8</u> de <u>DEEMBRO</u> de <u>2017</u>

M/ Jallo Sato an

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

Idian Marino de llench lit

Adriano Maurício de Almeida Côrtes, D.Sc., UFRJ

r. de lat

(João Antônio Recio da Paixão, D.Sc., UFRJ

Jain Jandie Jorbon

Maria Claudia Barbosa, D.Sc., UFRJ

A todos aqueles que me ajudaram na conclusão deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus pela por te me dado forças para poder chegar até esse momento.

Agradeço do fundo meu coração ao meu orientado Marcello Teixeira Goulart por toda sua dedicação, paciência, colaboração, puxões de orelha em todas as etapas deste trabalho e por acreditar que ele seria possível.

Agradeço ao Amauri Aguiar por te me ajudado muito na fase final de produção desta dissertação. Sua ajuda foi fundamental.

Agradeço a amizade e o acolhimento tanto nos momentos bons, quanto ruins dos amigos e colegas do LC3. Vocês foram fundamentais nessa minha trajetória até este momento.

Agradeço a todos os professores das disciplinas que cursei pela oportunidade que me deram de aprender coisas novas.

Agraço a Daniele Tavares por toda força que me deu para eu conseguir chegar ao fim de mais essa etapa da minha vida.

Agradeço, por fim, ao PPGI e a UFRJ pela grande oportunidade de poder fazer o mestrado em Informática e por toda a infraestrutura e suporte disponibilizado para a viabilização deste trabalho.

RESUMO

O Método dos Elementos Discretos (MED) é um método utilizado para a determinação do comportamento mecânico de um corpo ou meio a partir de parâmetros micromecânicos de contato. Na grande maioria dos casos, resultados precisos somente são atingidos se os parâmetros, que são sensíveis ao modelo utilizado, forem ajustados. A modelagem adotada no contato deve ser feita de modo bem cuidadoso, pois pois isso pode afetar de modo significativo a busca dos parâmetros que estão sendo modelados. Desse modo, existe a necessidade de se obter um procedimento para fazer a calibração dos parâmetros antes de fazer a modelagem do problema. O programa utilizado para a obtenção dos parâmetros de calibração foi o YADE, que é um programa de código aberto com foco no MED. Foi realizado um comparativo entre quatro métodos de otimização sem derivadas (Nelder-Mead, Refinamento Progressivo, Simulated Annealing e Evolução Diferencial) a partir da realização dos seguintes ensaios: tração, cisalhamento direto, compressão uniaxial e T-Bar. Neste trabalho é mostrado que o Nelder-Mead é o melhor método de otimização sem derivadas a ser utilizado quando comparado o número de chamadas da função a ser otimizada.

Palavras-chave: Métodos dos Elementos Discretos. MED. YADE. Otimização. Geotecnia. Calibração. Ensaio de Tração. Cisalhamento Direto. Compressão Uniaxial. T-Bar.

ABSTRACT

The Discrete Element Method (MED) is a method used to determine the mechanical behavior of a body or medium from micromechanical contact parameters. In the vast majority of cases, accurate results are only achieved if the parameters, which are sensitive to the model used, are adjusted. The modeling adopted in the contact must be done in a very careful way, because this can significantly affect the search of the parameters being modeled. Thus, there is a need to obtain a procedure to calibrate the parameters before modeling the problem. The program used to obtain the calibration parameters was the YADE, which is an open source program focused on the MED. (Nelder-Mead, Progressive Refinement, Simulated Annealing and Differential Evolution) were performed using the following tests: traction, direct shear, uniaxial compression and T-Bar. In this work it is shown that Nelder-Mead is the best method of optimization without derivatives to be used when comparing the number of calls of the function to be optimized.

Keywords: Discret Element Method. DEM. YADE. Optimization. Geotechnical. Calibration. Traction Test. Simple Shear. Uniaxial Compression. T-Bar.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Elementos dispostos de modo aleatório (figura da esquerda) e de	
	modo não aleatório (figura da direita).	18
2.2	Determinação das forças de contato em que R_1 e R_2 são os raios	
	das partículas esféricas, $F_N \in F_T$ são as forças normal e tangencial	
	aplicadas ao ponto de contato - Adaptado de (MARTIN et al., 2014)	20
2.3	Ciclo de Cálculo no MED extraído de (VELLOSO, 2010)	20
2.4	Contato entre duas partículas em que $R^{[A]}$ e $R^{[B]}$ são os raios	
	da esfera, $x_i^{[A]}$ e $x_i^{[B]}$ são os vetores posição de A e B, $x_i^{[C]}$ é o	
	ponto de contato entre A e B, d é a distância entre os centros das	
	esferas, n_i é o vetor normal e U^N é a superposição dos elementos	
	$-$ Adaptado de (ITASCA, 2004) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	22
2.5	Contato entre uma parede e um partícula. $R^{[b]}$ é o raio da esfera,	
	$x_i^{[o]}$ é o vetor posição de b , n_i é o vetor normal, $x_i^{[o]}$ é o ponto de	
	contato entre a parede e a esfera, d é a distância entre o centro a	
	esfera e máximo de interpenetração U^N – Adaptado de (ITASCA,	
	$2004) \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	23
2.6	Movimento de duas partículas e a atualização da componente	~~
~ -	tangencial a cada novo ponto de contato (DUARTE, 2009)	25
2.7	Série de 2 molas que representam rigidez normal de contato entre	~ -
	2 esteras.	27
2.8	Reflexão isométrica - Adaptado de (CORREIA, 2010)	44
2.9	Movimentos do Nelder-Mead - Adaptado de (CORREIA, 2010) .	46
2.10	Operação de reflexão	47
2.11	Operação de expansão	47
2.12	Operação de contração externa	48
2.13	Operação de contração interna	48
2.14	Operação de redução	49
2.15	Região inicial dividida para aplicação do método refinamento pro-	
	gressivo	51
2.16	Região depois de alguns passos do algoritmo	52
2.17	Fluxograma da Evolução Diferencial.	56
3.1	Representação esquemática das fases de pré-processamento e da	
	busca	65
3.2	Corpo de prova padrão com seção circular. Adaptado de (CAL-	
	LISTER, 2007) \ldots	67

3.3	Esquema da máquina de tração. Adaptado de (CALLISTER, 2007)	68
3.4	Curva tensão-deformação até a fratura do material. Adaptado de (CALLISTER, 2007)	69
3.5	Comportamento típico da curva tensão-deformação de um metal. Adaptado de (CALLISTER, 2007)	70
3.6	Esquema do equipamento do ensaio de cisalhamento direto (PINTO, 2006)	72
3.7	Representação esquemática do ensaio uniaxial	74
3.8	Penetrômetro T-Bar para ensaio de campo (STEWART; RAN- DOLPH, 1994)	78
4.1	Exemplo de malha utilizada nos algoritmos Nelder-Mead e Simu- lated Annealing.	85
4.2	Simplex inicial utilizado no algoritmo Nelder-Mead	86
4.3	Exemplo de ponto inicial para iniciar o algoritmo Simulated An- nealing	86
4.4	Amostra antes (azul) e depois (vermelho) da realização do expe- rimento	88
4.5	Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de refe- rência e o gráfico do polinômio de ajuste	89
4.6	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação	90
4.7	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação	91
4.8	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste.	92
4.9	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste para o valor inicial 250 kPa	93
4.10	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste para o valor inicial 450 kPa	94
4.11	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste.	95
4.12	Amostra antes e depois da realização do experimento.	96
4.13	Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de refe-	20
 / 1/	rência e o gráfico do polinômio de ajuste	96
4.14	linômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação	97
4.15	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação	98

4.16	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste da terceira simulação	99
4.17	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste.	00
4.18	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste valor inicial de $E = 2,5$ GPa e $\theta = 20^{\circ}$	01
4.19	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 2, 5$ GPa e $\theta = 70^{\circ}$.	02
4.20	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 5.5e9$ e $\theta = 20^{\circ}$	03
4.21	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 5,5$ GPa	00
4.22	$e \theta = 70^{\circ}$	03
4 23	Amostra antes e depois da realização do experimento	06
4.24	Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de refe-	00
1.21	rência e o gráfico do polinômio de ajuste.	07
4.25	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po-	
	linômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação com malha	07
4.26	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô- mio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação	08
4.27	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste da terceira simulação 1	09
4.28	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste.	10
4.29	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 200$ kPa e $\theta = 20^{\circ}$	11
4.30	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po- linômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 200$ kPa e $\theta = 70^{\circ}$	12
4.31	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô-	
	mio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 400$ kPa e $\theta = 20^{\circ}$	13

4.32	Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do po-
	linômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 400$
	kPa e $\theta = 70^{\circ}$
4.33	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô-
	mio ajustado e do melhor ajuste.
4.34	Amostra antes (vermelho) e depois da realização do experimento. 116
4.35	Gráfico Su versus z extraído de (OLIVEIRA, 2005)
4.36	Gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLI-
	VEIRA, 2005) e do polinômio encontrado
4.37	Gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLI-
	VEIRA, 2005) e do polinômio encontrado
4.38	Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de
	(OLIVEIRA, 2005) e do polinômio encontrado
4.39	Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de
	(OLIVEIRA, 2005) e do polinômio encontrado com valor de ${\cal E}=$
	$2,5\mathbf{e}5 \in \theta = 20^{\circ}120$
4.40	Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de
	(OLIVEIRA, 2005) e do polinômio encontrado com valor inicial
	de $E = 250$ kPa e $\theta = 70^{\circ}$
4.41	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô-
	mio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 300 \text{ kPa}$
	$e \theta = 20^{\circ} \dots \dots$
4.42	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô-
	mio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de $E = 300 \text{ kPa}$
	$e \theta = 70^{\circ} \dots \dots$
4.43	Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinô-
	mio ajustado e do melhor ajuste

LISTA DE TABELAS

4.1	Valores encontrados em cada uma das estratégias de busca 90
4.2	Erros relativos encontrados do Módulo de Young em cada uma
	das estretégias de busca
4.3	Valores encontrados em cada uma das buscas
4.4	Erros encontrados na busca do Módulo de Young em cada uma
	das estratégias de busca
4.5	Valores encontrados em cada um dos experimentos 99
4.6	Erros encontrados na busca do Módulo de Young em cada um dos
	experimentos. \ldots 99
4.7	Valores encontrados em cada um dos experimentos
4.8	Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em
	cada um dos experimentos
4.9	Valores encontrados em cada um dos experimentos
4.10	Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em
	cada um dos experimentos
4.11	Valores encontrados em cada um dos experimentos
4.12	Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em
	cada um dos experimentos
4.13	Valores encontrados em cada um dos experimentos
4.14	Valores encontrados em cada um dos experimentos

SUMÁRIO

1 1	NTRODUÇÃO	14
1.1	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	16
2 R	REFERENCIAL TEÓRICO	17
2.1	MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS	17
2.2	FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS	21
2.2.1	Forças de Contato	21
2.2.2	Modelo de Rigidez	26
2.2.3	Lei de Movimento	28
2.2.4	Determinação do Passo de Tempo	31
2.3	YADE - YET ANOTHER DYNAMIC ENGINE	32
2.3.1	Visão Geral da Arquitetura do YADE	34
2.4	MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO	40
2.4.1	Otimização	41
2.4.2	Método Nelder-Mead	43
2.4.3	Refinamento Progressivo	49
2.4.4	Evolução Diferencial – ED	51
2.4.5	Simulated Annealing – SA	58
3 E	NSAIOS REALIZADOS	65
3.1	ENSAIO DE TRACÃO	66
3.2	ENSAIO DE CISALHAMENTO DIRETO	71
3.3	ENSAIO DE COMPRESSÃO UNIAXIAL	73
3.4	ENSAIO T-BAR	75
/ R	PESULTADOS E DISCUSSÕES	81
- N		81
4.1		87
4.2 191	Ensaio de Tração	87
4.2.1	Ensaio de Cisalhamonto Diroto	05
4.2.2	Ensaio de Compressão Uniavial	90 105
4.2.0	Ensaio de Compressao Omaxiai	115
43	DISCUSSÕES	123
<u>т.</u> Л 2 1	Ensaio de Tração	192
439	Ensaio de Cisalhamento Direto	120 124
4.3.3	Ensaio de Compressão Uniaxial	126
1.0.0	Endulo de compressão e maxim :	140

4.3.4	Ensaio T-Bar	127
5 C	ONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	130
REFE	RÊNCIAS	132

1 INTRODUÇÃO

Vários problemas, não só de engenharia como de outras áreas do conhecimento, necessitam que sejam criados modelos e que com eles sejam realizadas simulações computacionais.

Na engenharia civil, áreas que são tradicionais tais como estruturas, geotecnia, recursos hídricos, construção e assuntos que são voltados para a análise, simulação e modelagem de problemas físicos fazem uso da mecânica computacional, que é uma área que abrange setores como a mecânica, informática e programação.

A forma mais comum de resolver problemas complexos em geotecnia, tais como construção de fundações, escavações, estruturas de contenção, túneis e problemas de estabilidade de taludes, é assumir o meio como contínuo. Porém, sabe-se que diversos materiais em sua microestrutura são descontínuos. O solo, em especial, é um material granular que é formado por partículas e poros que contêm algum tipo de fluido.

O MED é um método de simulação numérica, que não utiliza malha, que foi formualdo por Cundall (CUNDALL, 1971) para estudar o comportamento mecânico de um corpo por meio de um modelo capaz de simular a interação entre partículas com a finalidade de analisar problemas de mecânica das rochas.

O MED foi utilizado em vários problemas além dos relacionados a mecânica das rochas tais como Mecânica Computacional do Descontínuo (MUNJIZA, 2004), Dinâmica Molecular (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005), comportamento de dutos enterrados (CINTRA; JÚNIOR, 2006), problemas envolvendo partículas e fluídos com superfícies livre (CLEARY et al., 2007), modelagem de avalanche de neve (FAVIER et al., 2009), simulações de moinhos (XU et al., 2011), solos moles (YAO; ANANDA-RAJAH, 2003), (CARVALHO, 2012) e (INDRARATNA et al., 2015), modelogem de explosões (SABATUCCI et al., 2013) e modelagem de microfratura (TEIXEIRA et al., 2017).

Infelizmente, parâmetros macroscópicos não podem ser extrapolados para o mundo microscópico, e vice-versa. Além disso, as propriedades macromecânicas de cada material podem ser medidas, porém se forem aplicadas diretamente no modelo a ser representado não há garantia de resultados coerentes na simulação.

Com isso, tem-se um grande desafio a ser enfrentado que é a determinação de quais parâmetros macroscópicos devem ser usados para que o meio se comporte de forma coerente com o material modelado. Se não forem inseridos os valores adequados, o que está sendo modelado pode não representar de forma confiável os experimentos reais.

Neste trabalho será feito um estudo acerca de métodos de otimização sem derivadas para resolver o problema de busca de parâmetros macroscópicos para a modelagem numérica de ensaios utilizando o MED. Para a realização da busca destes parâmetros serão realizados quatro tipos de ensaios: de tração, de cisalhamento direto, de compressão uniaxial e T-Bar.

Nos ensaios de tração, de cisalhamento direto e de compressão uniaxial serão realizados ensaios de referência para obtenção dos parâmetros macroscópicos. Os parâmetros a serem buscados nos ensaios de cisalhamento direto e no de compressão uniaxial serão o Módulo de Young e o ângulo de atrito. No ensaio de tração será buscado apenas o Módulo de Young. No ensaio T-Bar os dados foram coletados de (OLIVEIRA, 2005), referentes ao perfil médio da argila da Baia de Guanabara. Segundo afirma (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVIC, 2007), sem qualquer comprovação, o melhor método para esta parametrização é o método Nelder-Mead. Para corroborar ou não esta afirmação a busca pelos parâmetros dos ensaios citados foi realizada com quatro métodos de otimização sem derivadas: Nelder-Mead, Refinamento Progressivo, Evolução Diferencial e Simulated Annealing. O objetivo é mostrar qual método de otimização é, de fato, o melhor na busca pelos parâmetros macroscópoicos, em termos de eficiência e precisão.

1.1 Estrutura da Dissertação

No capítulo 2 são apresentados os conceitos básicos para o entendimento dos assuntos tratados. É mostrada uma breve descrição do Método dos Elementos Discretos e a sua formulação matemática, do programa YADE que foi utilizado nesta dissertação e os métodos de otimização - Nelder-Mead, Refinamento Progressivo, Evolução Diferencial e Simulated Annealing.

No capítulo 3 é feita a descrição dos ensaios que foram realizados: ensaio de tração, ensaio de cisalhamento direto, ensaio de compressão uniaxial e ensaio T-Bar.

No capítulo 4 primeiramente são apresentados os resultados obtidos em cada um dos ensaios e depois uma discussão dos resultados.

No capitulo 5 são apresentadas as conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Este referencial teórico visa abordar os aspectos fundamentais ao entendimento dos conceitos que são apresentados e abordados nesta dissertação. Na seção (2.1) será dado um panorama do Método dos Elementos Discretos, na seção (2.2) será dada a formulação do MED: Lei Força-Deslocamento (2.2.1), Modelo de Rigidez (2.2.2), Lei de Movimento (2.2.3), e a Determinação do Passo de Tempo (2.2.4).

Na seção (2.3) aborda o programa YADE, juntamente, com uma breve descrição do seu funcionamento (2.3.1).

Na seção (2.4) será mostrado o conceito de otimização (2.4.1) e os métodos de otimização sem derivadas utilizados aqui: Método Nelder-Mead (2.4.2), Refinamento Progressivo (2.4.3), Evolução Diferencial (2.4.4) e o Simulated Annealing (2.4.5).

2.1 Método dos Elementos Discretos

O Método dos Elementos Discretos (MED) é um método de simulação numérica do movimento de um grande número de partículas dentro de um sistema fixo ou móvel variante com o tempo que não utiliza malha(MESQUITA et al., 2012).

O MED foi formulado por Cundall (CUNDALL, 1971) e seu objetivo era definir o comportamento mecânico de um corpo ou meio tendo como ponto de partida uma discretização em um conjunto de elementos que compõem o meio como um todo. Em 1979 o MED foi aplicado em materiais granulares por Cundall e Strack (CUNDALL P.; STRACK, 1979) Segundo Cundall as partículas que compõem o conjunto são consideradas como corpos rígidos que não possuem qualquer deformação e isto é relevante para a geotecnia, pois as partículas sofrem deformação, a qual depende da carga aplicada e do mineral que compõem a partícula. A deformação do conjunto como um todo é a que se produz com os pequenos espaços vazios existentes devido a discretização entre as partículas. É importante notar que esta deformação apenas ocorre quando há alguma ação mecânica no conjunto.

O MED faz a simulação do comportamento mecânico de um meio formado por um conjunto de partículas que interagem entre si através de seus pontos de contato. Tais partículas podem ser dispostas dentro do sistema ou meio de modo aleatório ou não, figura (2.1), e, com isso, pode-se formar diferentes tipos de meios com variados tamanhos de partículas.



Figura 2.1: Elementos dispostos de modo aleatório (figura da esquerda) e de modo não aleatório (figura da direita).

As propriedades mecânicas são definidas através das interações de contato entre os elementos discretos que formam o meio. A interação é definida, principalmente, a partir de uma rigidez normal e uma rigidez de cisalhamento (tangencial), que relacionam as forças produzidas entre as partículas com os deslocamentos que há entre eles.

Segundo (MELLADO, 2005) as seguintes propriedades básicas definem de forma global o MED:

- As partículas como elementos discretos formam em conjunto um sistema complexo de partículas;
- Elementos distintos se deslocam independentemente um dos outros e interagem entre si nas zonas de contato;
- Os elementos discretos estão submetidos unicamente a movimentos de corpo rígido.

No MED a interação entre as partículas sólidas é dinâmica e, segundo (VEL-LOSO, 2010), as forças que ocorrem no contato e nos deslocamentos de um conjunto de partículas são determinadas pelo acompanhamento dos movimentos das partículas individuais. Os movimentos são causados através de forças que são impostas às paredes ou às partículas.

Os cálculos são realizados utilizando um algoritmo cíclico que possui dois estágios: a determinação das forças de contato e a aplicação da segunda lei de Newton individualmente a cada partícula para a posterior determinação de sua nova posição.

O primeiro estágio de cálculo, ou seja, a determinação das forças de contato, figura (2.2), é realizado através da permissão de uma interpenetração entre os elementos, que representa a deformação física dos elementos, e a utilização desta informação para o cálculo da relação das forças de contato (DONZÉ; RICHEFEU; MAGNIER, 2008; NEVES, 2009).



Figura 2.2: Determinação das forças de contato em que R_1 e R_2 são os raios das partículas esféricas, F_N e F_T são as forças normal e tangencial aplicadas ao ponto de contato - Adaptado de (MARTIN et al., 2014)

O segundo estágio de cálculo utiliza a segunda Lei de Newton para que seja determinada a aceleração e a velocidade de cada partícula individualmente. Em cada intervalo de tempo as velocidades e as acelerações são consideradas constantes. Isto é feito utilizando-se o método das diferenças finitas com passo de tempo suficientemente pequeno a fim de que a perturbação induzida se propague entre um elemento e seus vizinhos. Assim, a cada passo de tempo, o equilíbrio de forças para um determinado elemento é calculado com base em todas as forças aplicadas (DONZÉ; MANGIER, 1997).

De forma bastante simplificada o processo de cálculo pode ser visto na figura (2.3).



Figura 2.3: Ciclo de Cálculo no MED extraído de (VELLOSO, 2010)

No processo de cálculo, em cada instante de tempo os contatos são atualizados e são determinados os diferentes pontos de contatos entre elementos discretos e entre elementos e obstáculos. Uma lei para modelar o contato, aqui chamada de força-deslocamento, é aplicada em cada contato tendo como base o movimento relativo entre elementos que estão em contato e o modelo constitutivo que está sendo empregado.

É importante ressaltar que é necessário impor algum amortecimento nas vibrações das partículas, pois caso contrário o sistema oscilaria indefinidamente sempre que fosse carregado. Já o comportamento geral de um determinado material no MED é simulado através de modelos constitutivos para a determinação das forças de contato (VELLOSO, 2010).

2.2 Formulação do Método dos Elementos Discretos

Nesta seção será apresentada de forma resumida a formulação numérica que está presente nas simulações do MED, com referência à implementação no YADE destes algoritmos. As descrições são dadas, de modo aproximado, na ordem em que aparecem nas simulações. A partir desta seção serão consideradas apenas partículas esféricas.

2.2.1 Forças de Contato

A relação entre as forças de contato que atuam em duas entidades com movimentos relativos entre elas é estabelecida pela lei força-deslocamento. Como se sabe do MED a força de contato para os contatos partícula-partícula e partícula-parede surge do toque que ocorre em um ponto. A lei força-deslocamento atua apenas em um contato e pode ser descrita em relação a um ponto de contato, chamado de $x_i^{[C]}$, em um plano que é definido pelo vetor normal a ele, chamado de n_i . Esse ponto de contato se dá dentro do volume de interpenetração entre as partículas.

No contato do tipo partícula-partícula, figura (2.4), o vetor normal se encontra ao longo da reta que une os centros das referidas partículas. No contato partícula-parede, figura (2.5), o vetor normal está ao longo da reta que define a menor distância entre o centro da partícula e a parede.



Figura 2.4: Contato entre duas partículas em que $R^{[A]} \in R^{[B]}$ são os raios da esfera, $x_i^{[A]} \in x_i^{[B]}$ são os vetores posição de A e B, $x_i^{[C]}$ é o ponto de contato entre A e B, d é a distância entre os centros das esferas, n_i é o vetor normal e U^N é a superposição dos elementos – Adaptado de (ITASCA, 2004)

A força atuante no contato é decomposta em um componente normal e em um componente de cisalhamento que atua no plano de contato entre as duas partículas e entre uma partícula e uma parede. A lei força-deslocamento relaciona os dois componentes de força aos componentes correspondentes de deslocamento relativo, por meio de uma rigidez normal e outra tangencial nos contatos (NEVES, 2009). No contato entre duas partículas o vetor normal, n_i , que define o plano de contato entre elas, é dado de acordo com (NEVES, 2009) pela fórmula (2.1),

$$n_i = \frac{x_i^{[B]} - x_i^{[A]}}{d} \tag{2.1}$$

em que $x_i^{[A]}$ e $x_i^{[B]}$ são os vetores posições dos centros de A e B, respectivamente, e d representa a distância entre os centros das esferas e é determinado do seguinte modo (2.2), ainda de acordo com (NEVES, 2009):

$$d = |x_i^{[B]} - x_i^{[A]}| = \sqrt{(x_i^{[B]} - x_i^{[A]})(x_i^{[B]} - x_i^{[A]})}$$
(2.2)

Quando o contato for entre uma partícula e a parede, figura (2.5), o vetor normal n_i , tem a direção da reta de menor distância entre o centro da partícula e a parede. A definição da superposição (*overlap*), que será representada por U^N , de uma partícula sobre a outra é dada pelo deslocamento relativo das partículas na direção normal.



Figura 2.5: Contato entre uma parede e um partícula. $R^{[b]}$ é o raio da esfera, $x_i^{[b]}$ é o vetor posição de **b**, n_i é o vetor normal, $x_i^{[C]}$ é o ponto de contato entre a parede e a esfera, d é a distância entre o centro a esfera e máximo de interpenetração U^N – Adaptado de (ITASCA, 2004)

Como os raios dos elementos discretos em contato e a distância inicial entre eles são conhecidas, a superposição U_N dos elementos que estão em contato pode ser determinado do seguinte modo (2.3), com $R^{[\alpha]}$ o raio da partícula α :

$$U_N = \begin{cases} R^{[A]} + R^{[B]} - d & \text{se contato entre partículas } A \in B \\ R^{[b]} - d & \text{se contato entre partícula e parede} \end{cases}$$
(2.3)

Determinado o valor das variáveis anteriores, a localização do ponto de contato, $x_i^{[C]}$, é determinada do seguinte modo:

$$x_i^{[C]} = \begin{cases} x_i^{[A]} + (R^{[A]} - \frac{1}{2}U_N)n_i & \text{contato partícula-partícula} \\ x_i^{[b]} + (R^{[b]} - \frac{1}{2}U_N)n_i & \text{contato partícula-parede} \end{cases}$$
(2.4)

O vetor força de contato, F^i , gerado no contato é baseado na interpenetração de partículas. Observe que F^i representa a ação da partícula A na partícula Bno contato entre duas partículas e a ação da partícula na parede no contato entre uma partícula e uma parede. Este vetor pode ser decomposto em um componente normal e em um componente cisalhante em relação ao plano de contato. A força total atuante no contato (F^i é a soma vetorial da força normal (F^i_N) e da força cisalhante (F^i_T). A magnitude de F^i , equação (2.5), está condicionada a lei de rigidez que será adotada (NEVES, 2009; PINTO, 2005).

$$F^i = F^i_N + F^i_T \tag{2.5}$$

Os elementos discretos atuam como se fossem unidos por molas nos seus contatos. De acordo com esta hipótese, a força gerada no contato entre as partículas será o produto da deformação da mola pela sua rigidez. Desse modo, o deslocamento no sentido normal, que é a deformação da mola nessa orientação, é a superposição de duas entidades (PINTO, 2005). Assim, com K_N a rigidez normal do contato determinada pelo modelo de contato de rigidez atual, a força normal (F_N) é determinada pela equação 2.6.

$$F_N^i = -K_N U^N n_i. (2.6)$$

Sendo adotado o critério de resistência a tração nula, tem-se que, caso $U^N < 0$, então $F_N = 0$ e $F_T = 0$. Se F_N for de compressão $(U^N > 0)$, F_T é calculada de modo incremental, isto é, quando um novo contato é formado, tem-se que F_T é nula

e os subsequentes deslocamentos tangenciais resultam em incrementos desta força. O movimento do ponto de contato deve ser considerado durante tal procedimento. Para isto acontecer é necessário atualizar o vetor de força normal n_i e o novo ponto de contato $x^{[C]}$ a cada passo de integração, figura (2.6).



Figura 2.6: Movimento de duas partículas e a atualização da componente tangencial a cada novo ponto de contato (DUARTE, 2009).

As componentes da força tangencial devem ser atualizadas para a nova posição de contato antes do acréscimo da força. Desse modo é possível determinar o incremento do deslocamento tangencial usando a equação (2.7), a cada passo de tempo Δt com V_T^i a velocidade cisalhante:

$$\Delta U_T^i = V_T^i \Delta t \tag{2.7}$$

Com isso determina-se o incremento da força elástica cisalhante com a equa-

ção (2.8) em que K_T é a rigidez cisalhante.

$$\Delta F_T^i = -K_T \Delta U_T^i \tag{2.8}$$

Para finalizar, a nova força de contanto cisalhante é determinada somando o antigo vetor força de cisalhamento existente no início da iteração com o incremento de força cisalhante elástica (GENG, 2010):

$$F_T^i = F_T^j + \Delta F_T^i \tag{2.9}$$

Os valores esperados de F_N e F_T determinados em (2.6) e (2.9) devem ser ajustados para satisfazer as relações constitutivas do contato.

2.2.2 Modelo de Rigidez

Uma interação básica no MED define dois tipos de rigidezes: uma rigidez normal K_N e uma rigidez de cisalhamento K_T . É desejável que K_N esteja relacionado com o módulo de Young (E) do material das partículas, enquanto que K_T é normalmente determinada como uma fração de K_N . A razão $\frac{K_N}{K_T}$ determina o coeficiente de Poisson (ν) que pode ser demonstrada por análise dimensional: o contínuo elástico tem dois parâmetros $(E \in \nu)$ e o modelo básico do MED também tem dois parâmetros com as mesmas dimensões $K_N \in \frac{K_N}{K_T}$. Por conseguinte, o coeficiente de Poisson é determinado por $\frac{K_N}{K_T}$ e o módulo de Young é, então, proporcional a K_N e é afetado por $\frac{K_N}{K_T}$ (SMILAUER; CHAREYRE, 2010).

É claro que a análise feita acima é altamente simplificadora e não leva em consideração a distribuição do raio da partícula, a configuração do pacote de partículas e outros possíveis parâmetros, tais como o raio de interação que é introduzido mais tarde (SMILAUER; CHAREYRE, 2010).

O modelo de rigidez adotado no contato dos elementos associa os deslocamen-

tos relativos no contato às forças de contato, podendo ser denominado de modelo linear. Neste modelo cada entidade possui uma rigidez normal e uma cisalhante de modo que a rigidez total é calculada supondo que a rigidez entre dois corpos em contato agem em série (GENG, 2010).

No YADE o algoritmo mais utilizado calcula a interação normal como a rigidez de duas molas, figura (2.7), em configuração em série com comprimentos iguais aos raios das esferas como mostra a figura 2.7.



Figura 2.7: Série de 2 molas que representam rigidez normal de contato entre 2 esferas.

A rigidez normal K_N é definida do seguinte modo.

Seja $l = l_1 + l_2$ em que l_i é a distância entre o ponto de contato e o centro da esfera *i*, que inicialmente, a grosso modo, é igual ao raio da esfera. A variação da distância entre os centros das esferas é dada por $\Delta l = \Delta l_1 + \Delta l_2$, onde Δl_i é a variação da distância entre o centro da esfera *i* e o ponto de contato. Mudanças de deslocamento Δl_i geram uma força $F_i = K_i \Delta l_i$, na qual K_i tem significado físico de rigidez. Os valores K_i são proporcionais ao valor do módulo de Young E_i com constante de proporcionalidade \tilde{l}_i definida em função do raio r_i . Como a força em cada partícula é, na verdade, igual à força de contato F entre as partículas, tem-se então o seguinte

$$K_{N}\Delta l = F = F_{1} = F_{2}$$

$$K_{N}(\Delta l_{1} + \Delta l_{2}) = F$$

$$K_{N}(\frac{F}{K_{1}} + \frac{F}{K_{2}}) = F$$

$$K_{1}^{-1} + K_{2}^{-1} = K_{N}^{-1}$$

$$K_{N} = \frac{K_{1}K_{2}}{K_{1} + K_{2}}$$

$$K_{N} = \frac{E_{1}\tilde{l}_{1}E_{2}\tilde{l}_{2}}{E_{1}\tilde{l}_{1} + E_{2}\tilde{l}_{2}}$$
(2.10)

O valor de \tilde{l}_i mais comumente utilizado no YADE é $\tilde{l}_i = 2r_i$.

2.2.3 Lei de Movimento

Realizado o cálculo da força de contato e a sua contribuição em cada elemento discreto o movimento de um elemento pode ser determinado pelos vetores força e o momento resultante que atuam sobre ele. Tal cálculo pode ser deduzido em termos de movimento de translação de um ponto na partícula e do movimento de rotação da mesma. O movimento de translação do centro de massa de um elemento pode ser descrito em função de sua posição x_i , da sua velocidade \dot{x}_i e de sua aceleração \ddot{x}_i e o movimento de rotação é descrito em termos de sua velocidade angular ω_i e da sua aceleração angular $\dot{\omega}_i$ (DONZÉ; MANGIER, 1997; NEVES, 2009).

As equações de movimento são escritas usando duas equações vetoriais: uma que relaciona a força resultante ao movimento de translação e a outra que relaciona o momento resultante ao movimento de rotação. A equação para o movimento de translação na forma vetorial pode ser escrita como segue:

$$F_i = m(\ddot{x}_i - g_i) \tag{2.11}$$

em que F_i é a força resultante — que é a soma de todas as forças externas que são aplicadas atuando no elemento, m é a massa total do elemento e g_i é o vetor aceleração das forças no corpo.

A equação para o movimento de rotação pode ser escrita como segue

$$M_i = H_i \tag{2.12}$$

em que M_i é o momento resultante atuando no elemento discreto e H_i o momento angular do elemento.

A relação (2.12) refere-se a um sistema de coordenadas locais em um elemento discreto no seu centro de massa. Caso este sistema local esteja orientado sobre os eixos principais de inércia do elemento, então a equação (2.12) fica reduzida às equações do movimento de Euler (NEVES, 2009):

$$M_{1} = I_{1}\dot{\omega}_{1} + (I_{3} - I_{2})\omega_{3}\omega_{2}$$

$$M_{2} = I_{2}\dot{\omega}_{2} + (I_{1} - I_{1})\omega_{1}\omega_{3}$$

$$M_{3} = I_{3}\dot{\omega}_{3} + (I_{2} - I_{1})\omega_{2}\omega_{1}$$
(2.13)

onde I_1 , I_2 e I_3 são os elementos de inércia principais dos elementos discretos; $\dot{\omega}_1$, $\dot{\omega}_2$ e $\dot{\omega}_3$ são as acelerações angulares sobre os eixos principais e M_1 , M_2 e M_3 são os componentes do momento resultante, também, em relação aos eixos principais.

Para elementos discretos de raio R, com massa distribuída uniformemente, o centro de massa coincide com o centro da esfera. Em um elemento esférico, qualquer sistema de coordenadas preso ao centro de massa é um sistema de eixos principais com momentos de inércia iguais entre si. Neste caso, o momento de inércia I para um elemento discreto é dado pela seguinte equação

$$I = \frac{2}{5}mR^2.$$
 (2.14)

Em sistema global a equação (2.13) pode ser escrita do seguinte modo (PINTO, 2005):

$$M_i = I\dot{\omega}_i = \frac{2}{5}mR^2\dot{\omega}_i . \qquad (2.15)$$

As equações de movimento que são dadas em (2.11) e em (2.14) são integradas usando diferença finitas centrais que envolvem um valor Δt para o passo de tempo. Os valores \dot{x}_i e $\dot{\omega}_i$ são determinados para intervalos de $t \pm n \frac{\Delta t}{2}$. Porém, os valores de \dot{x}_i , \ddot{x}_i , $\dot{\omega}_i$, F_i e M_i são determinados em intervalos primários $t \pm n\Delta t$. As acelerações são calculadas como segue:

$$\ddot{x}_{i}^{t} = \frac{1}{\Delta t} (\dot{x}_{i}^{t+n\frac{\Delta t}{2}} - \dot{x}_{i}^{t-n\frac{\Delta t}{2}}), \qquad (2.16)$$

$$\dot{\omega}_i^t = \frac{1}{\Delta t} (\dot{\omega}_i^{t+n\frac{\Delta t}{2}} - \dot{\omega}_i^{t-n\frac{\Delta t}{2}}).$$
(2.17)

As equações (2.16) e (2.17) podem ser substituídas em (2.11) e em (2.13) para determinar as velocidades para o tempo $t + n\frac{\Delta t}{2}$. Desse modo tem-se o seguinte resultado:

$$\dot{x}_i^{t+n\frac{\Delta t}{2}} = \dot{x}_i^{t-n\frac{\Delta t}{2}} + \left(\frac{F_i^t}{m} + g_i\right)\Delta t$$
(2.18)

$$\dot{\omega}_i^{t+n\frac{\Delta t}{2}} = \dot{\omega}_i^{t-n\frac{\Delta t}{2}} + \left(\frac{M_i^t}{I}\right)\Delta t \tag{2.19}$$

A velocidade mostrada nas equações (2.18) e (2.19) são utilizadas para atualizar a posição do centro do elemento discreto. A posição do elemento pode ser determinada do seguinte modo:

$$x_i^{t+\Delta t} = x_i^t + \dot{x}_i^{t+\frac{\Delta t}{2}} \Delta t.$$
(2.20)

2.2.4 Determinação do Passo de Tempo

Com a finalidade de garantir a estabilidade para o esquema de integração explícita um limite superior é imposto sobre Δt :

$$\Delta t_{cr} = \frac{2}{\omega_{max}} \tag{2.21}$$

em que ω_{max} é a maior frequência angular própria do sistema.

Um sistema massa-mola simples é regido pela equação,

$$m\ddot{x} = -kx \tag{2.22}$$

onde m é a massa dos sistema, k é a rigidez e x é a distância até a posição de equilíbrio. A equação (2.21) tem como solução de oscilação harmônica o seguinte:

$$x(t) = A\cos(\omega t + \varphi) \tag{2.23}$$

em que A é a amplitude de oscilação (determinada a partir das condições iniciais), $\omega t + \varphi$ é a fase, ω é a frequência angular e φ é a constante de fase que também é determinada a partir das condições iniciais.

A frequência angular é determinada pela equação,

$$\omega^{[A]} = \sqrt{\frac{k}{m}} . \tag{2.24}$$

Observe que $\omega^{[A]}$ não depende das condições iniciais uma vez que o sistema massa-mola é simples, isto é, apenas existe um única massa, $\omega = \omega_{max}$. Igualando as equações (2.21) e (2.24) obtemos o passo de tempo para um único oscilador:

$$\Delta t_{cr}^{[A]} = 2\sqrt{\frac{k}{m}} . \qquad (2.25)$$

Em um sistema massa-mola para um número infinito de pontos, o período mínimo de vibração ocorrerá quando as massas estiverem movimentando-se em sentido oposto.

Em um sistema geral massa-mola, a frequência máxima ocorrerá se duas massas $m_i e m_j$ estão em movimento oposto. Supondo suas velocidades iguais e que elas estão conectadas por uma mola com rigidez k_i o deslocamento Δx_i de m_i será acompanhado por $\Delta x_j = -\Delta x_i$ de m_j . Voltando a equação (2.21) e substituindo os deslocamentos das massas tem-se as seguintes equações:

$$\Delta F_i = k_i (\Delta x_i - (-\Delta x_i)) ,$$

$$\Delta F_i = 2k_i (\Delta x_i) .$$
(2.26)

Daí chegamos a uma rigidez aparente $k_i^{[B]} = 2k_i$, sendo assim possível apresentar a frequência máxima própria de todo o sistema:

$$\omega_{max} = \max_{i} \sqrt{\frac{k_i^{[B]}}{m_i}} \,. \tag{2.27}$$

Assim, o passo de tempo crítico geral é dado por

$$\Delta t_{cr} = \frac{2}{\omega_{max}} = m_i n \sqrt{2} \sqrt{\frac{m_i}{k_i}} . \qquad (2.28)$$

2.3 YADE - Yet Another Dynamic Engine

YADE é um *framework* de código aberto extensível para modelos numéricos discretos com foco no Método dos Elementos Discretos (MED). Foi desenvolvido em 2004 por Frédéric Donzé no Laboratoire 3SR - Sols, Solides, Structures - Risques da Universidade de Grenoble-Alpes a partir do software SDEC, que começou a

ser desenvolvido na década de 1990 por Donzé (DONZÉ et al., 1999). Devido à natureza de software livre do YADE ele vem sendo expandido rapidamente devido à contribuição da comunidade científica.

A implementação do YADE é feita em C++ e utiliza o paradigma orientado a objetos, que permite a implementação independente de novos algoritmos e interfaces com outros pacotes de software e importação/exportação de dados e rotinas. Para criar e manipular as simulações, controle de cenários, controle de simulação, pósprocessamento e depuração o YADE utiliza a linguagem de programação Python.

No YADE, os elementos discretos, segundo (DONZÉ; RICHEFEU; MAG-NIER, 2008) possuem vários tipos de geometrias, tais como poliédrica, elipsoide, esférica ou um aglomerado desses elementos. Contudo, somente trabalhos com esferas, aglomerados de esferas e caixas foram validados, enquanto que pesquisas com as outras formas geométricas citadas anteriormente ainda estão em desenvolvimento.

É bastante conhecido nos últimos anos o crescimento a favor do uso do software livre. Como o YADE é um software livre é claro que sua utilização vem crescendo de modo significativo, sendo utilizado em diversas pesquisas em várias áreas do conhecimento.

O YADE vem sendo utilizado em diversas áreas de pesquisa tais como modelagem do comportamento mecânico de rochas infiltradas (DURIEZ; DARVE; DONZÉ, 2011), detecção de contato para partículas não esféricas (BOON; HOULSBY; UTILI, 2012), modelagem do comportamento micromecânico de neve (HAGENMULLER; G.; NAAIM, 2015), solos granulares (DURIEZ; WAN, 2016) e em estudos sobre microfaturação em rochas de xisto (TEIXEIRA et al., 2017).

O YADE possui ainda um módulo que permite trabalhar com Método dos

Elementos Finitos (MEF) e o Smoothed Particle. Hydrodynamics (SPH).

A seguir será dada uma visão geral de alto nível da arquitetura YADE.

2.3.1 Visão Geral da Arquitetura do YADE

Neste tópico será dada uma visão geral da arquitetura de alto nível do YADE.

A flexibilidade do design do software é assegurada pelo estabelecimento no YADE de duas classes: componentes de dados e componentes funcionais. O primeiro armazena somente dados sem oferecer funcionalidade enquanto que o segundo define as funções que operam nos dados.

Uma simulação completa, isto é, com dados e funções, são armazenadas em um único objeto Cena (Scene). Esse objeto é acessível através da classe Omega que é armazenado por padrão em uma variável global chamada O.

2.3.1.1 Componentes de Dados

Os componentes de dados são formados por Corpos, Interações e Forças Generalizadas. A seguir serão vistos de modo breve cada um deles.

Corpos

Uma simulação YADE é representada por Corpos (Bodies), suas interações (Interactions) e as forças resultantes generalizadas — todas armazenadas internamentes em contêineres especiais. Cada corpo compreende o seguinte:
- Forma (Shape): representa a geometria das partículas tais como esfera, faces ou parede (wall) infinita;
- Material: armazena propriedades relativas ao comportamento mecânico, tais como o módulo de Young, que são independentes da forma e das dimensões das partículas. Geralmente são constante e pode ser compartilhada entre múltiplos corpos;
- Estado (State): contém variáveis de estado, em particular posição espacial e orientação, velocidades linear e angular e aceleração linear e angular. É atualizado em cada passo de tempo;
- Fronteira (Bound): é utilizado para detecção aproximada de contato entre partículas e é atualizado conforme necessário após o movimento de cada corpo.

As quatro propriedades acima podem ser de diferentes tipos. No YADE decisões sobre computação com base nos tipos citados anteriormente, ou seja, a colisão entre duas esferas é tratada de modo diferente da colisão entre uma face e uma esfera.

Interações

As interações geralmente são criadas entre pares de corpos. De modo geral, eles são criados por um provocador de colisões (collider) com base na proximidade espacial. No entanto, eles podem ser criados explicitamente e existir independentemente da distância. Cada interação possui 2 componentes:

IGeom: mantém a configuração geométrica das duas partículas em colisão.
 É atualizado de modo automático à medida que as partículas em questão se

movem e neste momento podem ainda ser consultadas várias características geométricas tais como a distância de penetração ou a tensão de cisalhamento;

• IPhys: representa as características não geométricas da interação. Algumas características são calculadas a partir do tipo do material das partículas que estão em contato e outras são consideradas variáveis internas como dano.

Forças Generalizadas

As forças generalizadas incluem a força, o torque, o deslocamento forçado e a rotação. Eles são apenas armazenados temporariamente durante um passo da computação e são redefinidos para zero depois.

2.3.1.2 Componentes de Função

Os componentes de Funções são as Engines, os Dispatchers e Functors.

Em uma simulação típica do MED a seguinte sequência de passos é executada repetidamente:

- Zerar as forças nos corpos referentes ao passo anterior;
- Detecção da colisão aproximada;
- Detectar colisões exatas dos corpos, atualizar as interações, conforme o necessário;
- Determinar e aplicar as forças de interação nos corpos;
- Aplicar outras condições externas (por exemplo, gravidade);

• Mudar a posição dos corpos com base nas forças, integrando as equações de movimento.

Engines

Este conjunto de ações é definida por uma Engine, que é o elemento funcional da simulação. Vale salientar que em cada simulação deve ser definido um tipo de material e uma engine apropriada que serão utilizados na simulação. Caso o material não seja definido, será considerado um material padrão previamente definido pelo YADE.

Uma Engine é uma unidade básica de simulação que define a sequência de passos descrita acima. O loop de simulação pode ser descrito em Python do seguinte modo:

```
O.engines=[
```

```
# reseta as forças
ForceResetter(),
# detecta uma colisão aproximada e cria as interações
InsertionSortCollider([Bo1_Sphere_Aabb(),Bo1_Facet_Aabb()]),
# lida com as interações
InteractionLoop(
        [Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom(),Ig2_Facet_Sphere_ScGeom()],
        [Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys()],
        [Law2_ScGeom_FrictPhys_CundallStrack()],
),
# aplica outras condições
GravityEngine(gravity=(0,0,-9.81)),
# atualiza as posições usando as equações de Newton
```

NewtonIntegrator()

]

Existem três tipos fundamentais de Engines:

- GlobalEngines: Opera sobre toda a simulação;
- PartialEngine: Opera somente sobre alguns corpos pré-selecionados;
- Dispatchers (expedidores): Não realiza nenhuma computação. Eles apenas chamam outras funções.

Dispatchers and functors

Para a detecção de uma provável colisão quer-se determinar as fronteiras para todos os corpos que estão na simulação. Uma vez que o algoritmo exato é diferente para cada forma em particular é preciso que se forneça funções para lidar com todos os casos específicos.

A linha seguinte:

InsertionSortCollider([Bo1_Sphere_Aabb(),Bo1_Facet_Aabb()])

cria uma estrutura de dados com as prováveis colisões. Ele atravessa todos os corpos com base na forma de cada corpo e envia para uma função específica para criar/atualizar esse corpo específico. Na linha mostrada acima há duas funções uma para esferas (Bo1_Sphere_Aabb()) e outra para faces (Bo1_Facet_Aabb()). Por exemplo, em Bo1_Sphere_Aabb() temos Bo é uma função que cria um corpo (Bound) que aceita o tipo 1 de esfera e cria uma caixa delimitadora alinhada pelo eixo (Aabb) para a detecção da colisão entre dois corpos

Um algoritmo de detecção de colisão é utilizado para passar por todos os corpos presentes na simulação e com base no tipo de forma de cada corpo é enviada uma função específica para criar/atualizar o corpo específico.

Logo após a linha vista anteriormente vem a parte do código que lida com as interações propriamente ditas:

```
InteractionLoop(
```

```
[Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom(),Ig2_Facet_Sphere_ScGeom()],
[Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys()],
[Law2_ScGeom_FrictPhys_CundallStrack()],
```

),

O código acima esconde 3 expedidores (dispatchers) internos no motor de interação. Eles funcionam juntos, por razões de desempenho, em todas as interações. São eles:

• IGeomDispatcher: Esse expedidor usa o primeiro conjuntos de funções (Ig2) que são "despachados" com base na combinação de dois objetos. Esta função específica resolve a configuração da colisão exata e cria um objeto (Ig) associado à interação caso haja colisão. Ele também pode falhar nas interações aproximadas, indicando que não há contato real entre os corpos, mesmo que eles se sobreponham na detecção da colisão aproximada. No exemplo dados temos dois expedidores:

- O primeiro, Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom(), é chamado para a interação de duas esferas e cria uma instância do ScGeom¹ caso se necessite.
- O segundo, Ig2_Facet_Sphere_ScGeom() é chamado para a interação entre uma face com uma esfera e pode criar (novamente) uma instância do ScGeom.
- IPhysDispatcher: Envia para o segundo conjunto de funções específicas baseado na composição de dois materiais. Estes expedidores retornam um instância de IPhys² de retorno (o prefixo Ip).

No código tem-se apenas um expedidor, Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys, que cria um interação com ângulo de fricção (FrictPhys) a partir da interação de um material elástico com fricção de contato (FrictMat_FrictMat).

• LawDispatcher: Envia para o terceiro conjunto de funções específicas com base nas combinações de IGeom e IPhys (por isso o 2 em seu nome) de cada interação em particular que é criada pelos expedidores precedentes. Os expedidores do tipo Law representam a "lei constitutiva". Eles resolvem a interação ao computatar as forças que estão sendo realizadas nos corpos da interação ou atualizam as variáveis de estado da interação.

2.4 Métodos de Otimização

Aqui serão estudados o conceito de otimização e os métodos de otimização sem derivadas utilizados nesta dissertação.

 $^{^1 \}mathrm{Classe}$ que representa a geometria de um ponto de contato entre dois corpos.

²Classe que cria as propriedades físicas, ou seja, materiais da interação.

2.4.1 Otimização

A busca por soluções ótimas faz parte de diversas áreas do conhecimento, tais como negócios, ciências físicas, químicas e biológicas, engenharia, arquitetura, economia e administração. Segundo (BAZZO; PEREIRA, 2006) o processo de otimização busca por uma solução ótima que forneça o máximo benefício de acordo com algum critério e afirma, ainda, tratar-se de uma busca, pois nem sempre a solução ótima é alcançada, embora ela seja uma meta.

A otimização é uma área do conhecimento multidisciplinar que faz uso de modelos matemáticos e algoritmos computacionais para buscar, dentre todas as possíveis, a melhor solução de acordo com um ou vários critérios.

Problemas de otimização aparecem em diversas situações em que escolhas devam ser realizadas, tendo como guia uma função objetivo e um conjunto de restrições que são dados em função das variáveis de decisão. Em tais problemas busca-se determinar os valores das variáveis de decisão que maximizem ou minimizem tal função objetivo que satisfaça o conjunto de restrições.

Segundo (SARAMAGO, 2003) otimizar visa melhorar algo que já existe, projetar o novo de modo mais eficiente e com custo reduzido e, também, determinar a melhor configuração de um projeto sem ter que experimentar todas as possibilidades. A otimização tem como vantagens possibilitar:

- a diminuição do tempo dedicado ao projeto;
- o tratamento simultâneo de um número grande de variáveis e restrições que dificultem a visualização gráfica;
- a obtenção de "algo melhor" com um custo menor;

• a obtenção de soluções não tradicionais.

Ainda segundo (SARAMAGO, 2003), o processo de otimização tem as seguintes limitações:

- aumento do tempo computacional quando o número de variáveis aumenta;
- possibilidade de surgirem funções descontínuas com convergência lenta;
- funções com muitos mínimos locais onde o mínimo global raramente é obtido.

Vários problemas de otimização em aplicações científicas ou industriais recaem em problemas em que derivadas ou são muito difíceis de ser calculadas, ou mesmo não é possível sua solução. São enumerados, de acordo com (EHRHARDT; FERREIRA, 2012), algumas situações em que o método com derivadas é bastante complicado:

- problemas de simulações;
- problemas em que a função objetivo é a medida de desempenho computacional de um algoritmo;
- problemas que têm como função objetivo um arquivo executável cujo código não está disponível ao usuário (caixa-preta³);
- situações em que o custo computacional de calcular as derivadas da função é muito alto, tornando inviável o uso de métodos que fazem uso de derivadas.

 $^{^3} Caixa-preta$ se refere a objetos cujas entradas e saídas podem ser observadas, porém o interior é inacessível.

Os métodos que são utilizados para a resolução de um problema de otimização podem ser classificados basicamente em métodos com derivadas e métodos sem derivadas. Neste trabalho serão utilizados métodos de otimização sem derivadas devido a dificuldade de acesso ao código fonte (caixa-preta) e para fazer o processo de otimização serão utilizados quatro métodos sem derivadas: Simplex Nelder-Mead, Evolução Diferencial, Simulated Annealing e Refinamento Progressivo.

2.4.2 Método Nelder-Mead

O método de Simplex⁴ Nelder-Mead (NM) (não confundir com método Simplex desenvolvido por Dantzig para resolver problemas de Programação Linear) foi motivado pelo interesse em se solucionar problemas de otimização não linear que ocorrem no mundo real. Problemas deste tipo são extremamente difíceis de se resolver devido à complexidade de se obter a primeira derivada de uma função f. O método NM foi apresentado em 1965 pelos estatísticos John Nelder e Roger Mead do National Vegetable Research Station no artigo A simplex method for function minimization publicado no ComputerJournal (NELDER J. A.; MEAD, 1965). O método apresentado baseia seu funcionamento no trabalho apresentado por (SPENDLEY; HEXT; HIMSWORTH, 1962).

O algoritmo de Nelder-Mead é um método de busca direta muito utilizado em problemas de minimização sem restrições de uma função de n variáveis. Segundo (GONÇALVES, 2013) este algoritmo se tornou um método bastante popular devido a diversos fatores, dentro os quais:

• a simplicidade de sua implementação computacional;

⁴Um Simplex S é um conjunto de n + 1 pontos, $\{x_i\}_{i=1}^{n=1}$ em \mathbb{R}^n , ou seja, é um poliedro em \mathbb{R}^n com n + 1 faces, onde x_i é o i-ésimo vértice do Simplex S.

- a não necessidade do cálculo explícito ou implícito de quaisquer derivadas da função objetivo, usando apenas valores da função;
- em cada iteração são feitas poucas avaliações da função objetivo;
- o acentuado decréscimo do valor da função objetivo nas primeiras iterações.

A ideia do método de (SPENDLEY; HEXT; HIMSWORTH, 1962) consiste em construir um simplex não degenerado⁵ em \mathbb{R}^n e utilizá-lo para a condução da pesquisa da melhor solução.

O algoritmo proposto por Spendley especifica um único movimento, reflexão isométrica ⁶, figura (2.8), do pior vértice em relação ao centróide dos n melhores vértices. Espera-se que esse movimento melhore o valor encontrado pela função objetivo. Se o objetivo for minimizar a função objetivo, o algoritmo substitui o pior vértice do simplex por um ponto que tem um valor inferior ao que será encontrado.



Figura 2.8: Reflexão isométrica - Adaptado de (CORREIA, 2010)

Como se disse anteriormente o método proposto por Nelder e Mead é do tipo

⁵Um simplex S não degenerado em \mathbb{R}^n é um conjunto de n+1 pontos $\{x_1, x_2, \ldots, x_{n+1}\}$, também em \mathbb{R}^n , tal que o conjunto de vetores $\{x_1 - x_i, x_2 - x_i, \ldots, x_{i-1} - x_i, x_{i+1} - x_i, \ldots, x_{n+1} - x_i\}$ for linearmente independente.

 $^{^{6}}$ Uma reflexão é isométrica se o ponto refletido está à mesma direção do eixo de reflexão.

Simplex. Este método não trata de restrições para o problema, encontra apenas mínimos locais e pode, ainda, falhar em convergir para um mínimo. No entanto, ele é bastante compacto do ponto de vista computacional, pois não necessita de estruturas de dados complexas e efetua poucas avaliações da função objetivo a cada iteração (máximo de n + 2).

Os métodos do tipo Simplex são caracterizados por modificarem as direções de pesquisa no final de cada iteração. É importante notar que se refletirmos um dos vértices a partir do centróide da face oposta o resultado é um simplex. Isso significa que na busca por um valor ótimo podemos simplesmente refletir um vértice de cada vez.

Nelder e Mead tiveram como inspiração o método de (SPENDLEY; HEXT; HIMSWORTH, 1962). Os autores acrescentaram ao movimento de reflexão isométrica os movimentos de expansão, contração (para o interior e para o exterior) e um movimento de redução ou encolhimento de todo o simplex em direção ao melhor vértice quando tudo falhar, figura (2.9). Tais movimentos foram acrescentados com o intuito de acelerar a pesquisa pelo melhor valor.

A ideia básica deste método é comparar o valor da função objetivo dos n + 1vértices de um simplex genérico inicial e tentar substituir o pior vértice do simplex por outro com um valor melhor.

Iniciando o algoritmo as operações de reflexão, expansão, contração e redução são realizadas ao longo da reta que passa por este vértice e o centróide dos n melhores vértices. Para cada uma das operações há coeficiente α , γ , β e σ que são os coeficientes de reflexão, expansão, contração e redução, respectivamente. A cada nova iteração o pior vértice é substituído por um novo vértice ou o simplex é reduzido em torno do melhor vértice.



Figura 2.9: Movimentos do Nelder-Mead - Adaptado de (CORREIA, 2010)

Os coeficientes citados anteriormente de acordo (NELDER J. A.; MEAD, 1965) devem satisfazer às seguintes restrições $\alpha > 0$, $\gamma > 1$, $0 < \beta < 1$ e $0 < \sigma < 1$. No entanto, após análise de diversos resultados (NELDER J. A.; MEAD, 1965) concluíram que a adoção dos seguintes valores $\alpha = 1$, $\beta = 0, 5$, $\gamma = 2$ e $\sigma = 0, 5$ seria a melhor configuração e vem sendo adotada com padrão na maioria dos softwares e implementações desde então.

Antes de se ver como é feita cada uma das operações do Nelder-Mead vamos definir \hat{x} como centroide da face oposta e x_h o vértice de maior valor da função objetivo. O centroide é dado pela seguinte fórmula:

$$\hat{x} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1, \\ i \neq h}}^{n+1} x_i$$
(2.29)

• Reflexão (x_r) : esta operação tem por objetivo rejeitar a pior solução (maior) e direcionar o simplex na direção de melhora. Ela pega o pior ponto e o reflete sobre a face oposta.

$$x_r = (1+\alpha)\hat{x} - \alpha x_h \tag{2.30}$$



Figura 2.10: Operação de reflexão.

 Expansão(x_e): esta operação expande o simplex na direção de melhora de modo a gerar um ponto além do ponto de reflexão;

$$x_e = (1+\gamma)\hat{x} - \gamma x_h \tag{2.31}$$



Figura 2.11: Operação de expansão.

• Contração (x_c) : Contrai o simplex na direção de melhora.

- Contração Externa (x_{ce}) : vértice da contração externa

$$x_{ce} = (1+\beta)\hat{x} - \beta x_h \tag{2.32}$$



Figura 2.12: Operação de contração externa.

– Contração Interna (x_{ci}): vértice da contração interna

$$x_{ci} = (1 - \beta)\hat{x} - \beta x_h \tag{2.33}$$



Figura 2.13: Operação de contração interna.

• Redução (x_i) : se nenhuma das operações resultar em um novo vértice pelo menos melhor do que aquele correspondente ao vértice a ser rejeitado deve-se encolher o simplex. Esta operação é feita preservando o vértice x_b e aproximando os demais na direção de x_b .

$$x_i = x_b + \sigma(x_i - x_b), i = 1, \dots, n+1, i \neq b$$
 (2.34)



Figura 2.14: Operação de redução.

O critério de parada que define quando a convergência foi alcançada que está em (NELDER J. A.; MEAD, 1965) leva em consideração o valor da função nos vértices do simplex e é adotado um critério baseado na variância do valor das funções nos diferentes pontos do simplex,

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n+1} \frac{(f(x_i) - f(\bar{x}))^2}{n}} < \Delta_{tol}.$$
(2.35)

Repere que a parada do algoritmo independe da posição dos pontos.

2.4.3 Refinamento Progressivo

O método Refinamento Progressivo (RP) é baseado na estrutura de dados Quadtrees e no método da bissecção. Antes de se falar especificamente ver-se-á a seguir o que são os Quadtrees.

2.4.3.1 Quadtree

Quadtree é uma estrutura de dados de árvore em que cada nó possui exatamente quatro nós filhos ou são nós folha. Esta estrutura é uma adaptação da árvore binária para dados bidimensionais ordenados. Quadtrees são muito utilizadas para processamento de imagens, geração de malhas, Sistemas de Informações Geográficas (SIGs) entre outras áreas.

O termo Quadtree, segundo (SAMET, 1990) serve para descrever uma família de estruturas hierárquicas de dados, que se baseiam no princípio da decomposição recursiva do espaço.

As Quadtrees possuem diversas aplicações em tipos variados de dados. Os dados podem ser exemplificados como pontos, áreas, curvas e superfícies. De modo geral a decomposição do espaço é realizada de forma regular, isto é, a divisão do espaço é feita em partes iguais nos níveis que estão presentes na árvore.

Com esta estrutura de dados pode-se realizar uma indexação do espaço que considerará que cada nó corresponderá a uma região que pode ser quadrada ou não do espaço. Se um nó v qualquer tiver filhos, então estes filhos correspondem aos quatro quadrantes de v que serão representados por NW, NE, SW e SE.

A definição recursiva de uma quadtree gera um algoritmo recursivo, ou seja, a região é dividida em quatro quadrantes de modo a criar uma partição que seja conveniente do conjunto de pontos e, de modo, recursivo a árvore para cada quadrante com os seus pontos até que seja um atingido um critério de parada.

2.4.3.2 Refinamento Progressivo

O método Refinamento Progressivo teve como inspiração a estrutura de dados Quadtree. Define-se uma região quadrangular ou retangular e esta região é dividida em quatro outras, figura (2.15). Pega-se então o centro de cada uma dessas regiões



Figura 2.15: Região inicial dividida para aplicação do método refinamento progressivo

e aplica-se na função objetivo, figura (2.16).

A região cujo centro der o menor resultado é adotada como nova região de busca. O procedimento anterior segue recursivamente até se obter uma região cuja área tenha, no máximo, uma determinada porcentagem da área original.

2.4.4 Evolução Diferencial – ED

O algoritmo evolutivo Evolução Diferencial (ED), que foi desenvolvido por Rainer Storm e Kenneth Price em 1995 é um método heurístico que não usa derivadas. Os autores introduziram a ideia de utilizar diferença de vetores a fim de perturbar a população de indivíduos (vetores). Isso acarreta em um método que não requer muitas variáveis de controle, com rápida convergência, robusto e fácil.

A ED é um método de busca direta paralelo que utiliza vetores de parâmetros



Figura 2.16: Região depois de alguns passos do algoritmo.

 N_p multi-dimensionais $x_{i,G}$, $i = 1, 2, 3, ..., N_p$ em que G é a geração e N_p é o número de indivíduos com N_p não alterado durante o processo de minimização e o vetor inicial de população é escolhido de modo aleatório e deve cobrir de modo completo todo o espaço de parâmetros.

A escolha do algoritmo ED para problemas de otimização numérica, de acordo com (CHENG; HWANG, 2001), está baseada nas seguintes características:

- é um algoritmo de busca estocástica que é originado dos mecanismos de seleção natural;
- raramente fica preso em ótimos locais, porque busca a solução ótima global fazendo a manipulação de uma população de soluções prováveis, isto é, faz uma busca em um número de diferentes áreas simultaneamente no espaço de busca;
- é extremamente eficaz na resolução de problemas de otimização com função

objetivo descontínua, pois não precisa de informações sobre suas derivadas;

- permite que parâmetros de entrada e saída sejam manipulados como números de ponto flutuante sem nenhum processamento extra e, com isso, os recursos do computador são utilizados de forma eficiente;
- é um bom otimizador local, pois os diferenciais gerados por uma população convergente eventualmente tornam-se bem pequenas (infinitesimais);
- na maioria das vezes não necessita de grandes populações para funcionar de modo eficiente.

Na ED tradicional cada indivíduo (variável) é representada por um ponto flutuante. O algoritmo cria inicialmente uma população inicial totalmente aleatória que deve cobrir todo o espaço de busca. Na maioria das vezes é criada por uma distribuição uniforme do problema quando não existe nenhuma informação sobre o problema.

A Evolução Diferencial tem como principal ideia gerar indivíduos novos, que são chamados de vetores modificadores ou doadores, pela adição da diferença vetorial ponderada entre dois indivíduos escolhidos de modo aleatório da população a um terceiro indivíduo.

As componentes do novo indivíduo doador são misturadas com as componentes de um indivíduo escolhido de modo aleatório (chamado de vetor alvo) para dar como resultado o denominado vetor tentativa (ou vetor experimental). O processo de misturar os parâmetros é referido como cruzamento (OLIVEIRA, 2006)

Caso o valor da função objetivo do vetor tentativa for menor do que o valor da função para o vetor alvo, então o vetor experimental substitui o vetor alvo na geração seguinte. Esta operação realizada é chamada de seleção. O procedimento é parado a partir de algum critério de parada.

A geração de novos indivíduos, chamados de vetores modificadores ou doadores, é realizada pela adição da diferença vetorial ponderada entre dois indivíduos aleatórios da população a um terceiro indivíduo. A operação realizada é chamada de mutação.

A seguir serão mostrados os operadores da Evolução Diferencial.

2.4.4.1 Operador de Mutação

Seja $x_{i,G}$ o vetor alvo com $i = 1, 2, 3, ..., N_p$. Para cada vetor $x_{i,G}$ um vetor mutante é gerado conforme é definido por

$$v_{i,G+1} = x_{1,G} + F(x_{2,G} - x_{3,G})$$
(2.36)

com $x_{1,G}, x_{2,G} \in x_{3,G} \in \{1, 2, 3, ..., N_p\}$ índices aleatórios, inteiros, diferentes entre si e F > 0. Os números inteiros $x_{1,G}, x_{2,G} \in x_{3,G}$ que são escolhidos de modo aleatório com todos diferentes do índice *i* executado tal que N_p tem que ser maior ou igual a quatro para garantir que a quantidade de indivíduos escolhidos seja suficiente para a execução do método. O fator F de perturbação é um número real, positivo que pertence ao intervalo [0, 2] e controla a amplitude do vetor diferença $(x_{2,G} - x_{3,G})$.

2.4.4.2 Operador de Cruzamento

A estratégia de mutação é complementada com a operação de cruzamento. Com isso a diversidade dos vetores de parâmetros são perturbados. Para esta finalidade, o vetor experimental é definido por

$$u_{i,G+1} = (u_{1i,G+1}, u_{2i,G+1}, u_{3i,G+1}, \dots, u_{Di,G+1})$$
(2.37)

em que

$$u_{ji,G+1} = \begin{cases} v_{ji,G+1} & \text{se } (randb(j)) \le CR \text{ ou } j = rnbr(i) \\ x_{ji,G} & \text{se } (randb(j)) > CR \text{ e } j \ne rnbr(i) \end{cases}$$
(2.38)

com $j = 1, 2, 3, \dots, D$.

Na equação (2.38) tem-se que randb(j) é a j-ésima avaliação de um gerador uniforme de números aleatórios com resultado dentro do intervalo [0,1]. A probabilidade de cruzamento CR é determinada pelo usuário e um índice rnbr(i)em 1, 2, 3, ..., D escolhido de modo aleatório garante que $u_{i,G+1}$ traz ao menos um parâmetro de $v_{i,G+1}$.

2.4.4.3 Operador de Seleção

O processo de seleção visa a produção de filhos melhores. De modo diferente de outros algoritmos evolutivos, a evolução diferencial não utiliza hierarquia (elitismo) nem seleção proporcional (BRANDÃO, 2014).

A decisão se um membro deve ou não se tornar membro da geração G + 1deve ser feita com a comparação do vetor tentativa $u_{i,G+1}$ com o vetor alvo $x_{i,G}$ utilizando o critério greed. Caso o vetor $u_{i,G+1}$ chegue a um valor de função custo que seja menor do que $x_{i,G}$, então $x_{i,G+1}$ é um elemento para $u_{i,G+1}$, senão o antigo valor $x_{i,G}$ é mantido. A figura (2.17) apresenta o fluxograma da evolução diferencial.



Figura 2.17: Fluxograma da Evolução Diferencial.

De acordo com (STORN; PRICE, 1995) o seguinte conjunto de regras podem ajudar na escolha do número de indivíduos (N_p) , a probabilidade de cruzamento (CR) e o fator de escala ou taxa de perturbação (F):

- A população inicial deve ser gerada de modo a ser o mais próximo possível da função objetivo;
- Geralmente a probabilidade de cruzamento CR deve ser considerada menor do que 1, por exemplo CR = 0, 3. Se a convergência não ocorrer adotar um valor de $CR \in [0, 8; 1, 0]$ pode ajudar;
- A medida que o valor da população escolhida aumenta, menor deve ser o valor de F;
- Tem-se um bom sinal da convergência quando os parâmetros do melhor componente da população variam muito de geração para geração. Especificamente durante o início do processo de minimização, mesmo se o valor da função objetivo decrescer lentamente;
- O valor da função objetivo do melhor indivíduo não pode cair de forma brusca.
 Se isto acontecer, então a otimização está com um mínimo local.

2.4.4.5 Estratégias da Evolução Diferencial

A ED possui diferentes estratégias que foram obtidas a partir da forma com que os operadores de mutação e cruzamento trabalham. As Estratégias podem mudar de acordo com o tipo de indivíduo a ser modificado no momento de formação do vetor. O número de indivíduos que será levados em consideração para a perturbação e o tipo de cruzamento que será utilizado pode ser escrito como ED/a/b/c em que o **a** especifica o vetor a ser perturbado que pode ser *rand* - um vetor da população escolhido de modo aleatório, ou *best* - o vetor de menor custo da população, o **b** determina o número de diferenças ponderadas usadas para a perturbação e o **c** denota o tipo de cruzamento - exp para exponencial e bin para binomial.

Segundo (BRANDÃO, 2014) a ED possui vários aspectos positivos, porém às vezes o desempenho não é tão bom quanto se espera, podendo deixar de prosseguir em direção a um ótimo global tendendo a um estado de estagnação. Ainda de acordo com (BRANDÃO, 2014) a ED sofre com o problema de convergência prematura que ocorre quando há perda de diversidade da população.

2.4.5 Simulated Annealing – SA

O Simulated Annealing é um algoritmo que foi proposto por (METROPOLIS et al., 1953). Ele foi desenvolvido a partir da teoria sobre recozimento de metais cuja finalidade é eliminar a dureza de uma placa de metal temperada ou normalizar materiais com tensões internas que podem ser resultantes do forjamento.

Os primeiros a mostrar a analogia entre o comportamento de problemas de otimização combinatorial e grandes sistemas físicos estudados em mecânica estatística foram (KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983) e (CERNY, 1972). Eles mostraram que o modelo utilizado por (METROPOLIS et al., 1953) para simular o processo de recozimento (annealing) podia ser estendido para resolver problemas de otimização em geral. Desde então o Simulated Annealing (SA) vem recebendo uma atenção muito grande de muitos pesquisadores.

2.4.5.1 Analogia Física

O algoritmo Simulated Annealing foi originado na mecânica estatística que agrupa métodos que visam analisar as propriedades de agregação de átomos que estão presentes tanto em substâncias sólidas quanto em líquidas.

O processo de recozimento (annealing) é o processo de aquecimento de um sólido até que chegue ao seu ponto de fusão seguido de um resfriamento gradual e lento até que o resfriamento seja alcançado novamente. O resfriamento lento é essencial para se manter o equilíbrio térmico em que os átomos encontrarão tempo suficiente para se reorganizarem em uma estrutura uniforme e mínima. Caso haja o resfriamento brusco os átomos formarão uma estrutura irregular e fraca com alta energia em consequência do esforço.

O processo físico de recozimento foi modelado por (METROPOLIS et al., 1953) que introduziu um algoritmo bastante simples para simular como se dá a evolução da temperatura de um sólido em um banho quente até o equilíbrio térmico. De acordo com os autores, quando os átomos encontram-se em equilíbrio, em uma dada temperatura T qualquer a probabilidade de que a energia seja E é proporcional a $e^{-\frac{E}{k_bT}}$, em que k_b é conhecida como constante de Bolzmann.

A probabilidade de que a energia de um sistema qualquer passe de E para E + dE pode ser expressa por

$$P(E+dE) = P(E)P(dE) = P(E)e^{-\frac{E}{k_bT}} = e^{-\frac{E}{k_bT}}$$
(2.39)

sendo P(X), a probabilidade de X ocorrer.

Veja que a probabilidade do sistema passar de E para E + dE é expressa por $e^{-\frac{E}{k_bT}}$. Como na expressão $e^{-\frac{E}{k_bT}}$ o valor de k_b é constante, tem-se que a medida que

T diminui a probabilidade da energia se alterar é cada vez menor.

O algoritmo SA é baseado em técnicas de Monte Carlo gerando uma sequência de estados sólidos, ou seja, dado um estado corrente *i* em energia E_i o estado subsequente *j* é gerado aplicando uma perturbação que transforma o estado atual no estado seguinte. Se a diferença $E_j - E_i$ for menor do que zero o estado *j* é aceito como estado atual. Caso $E_j - E_i > 0$ o estado *j* é aceito com certa probabilidade dada por

$$e^{-\frac{E_j - E_i}{k_b T}}.$$
(2.40)

A regra acima é conhecida como critério de Metropolis e o algoritmo que a utiliza é conhecido como algoritmo de Metropolis.

Para que um sólido encontre o equilíbrio térmico em cada temperatura é necessário que a temperatura seja reduzida lentamente. No algoritmo de Metropolis tal fato é obtido com a geração de um grande número de transições para uma determinada temperatura. O equilíbrio térmico caracteriza-se pela distribuição de Boltzmann. A distribuição citada é dada pela seguinte fórmula:

$$P_T\{X=i\} = \frac{1}{Z(T)}e^{-\frac{E}{k_b T}}$$
(2.41)

em que X (variável estocástica) denota o estado corrente do sólido e Z(T) é a função partição dada por

$$Z(T) = \sum_{j} e^{-\frac{E_j}{k_b T}}.$$
 (2.42)

em que o somatório abrange todos os possíveis estados.

O método computacional que imita o processo de recozimento de um sólido é denominado de Simulated Annealing.

2.4.5.2 Descrição do Algoritmo

O Simulated Annealing oferece uma maneira de fugir do ótimo local analisando a vizinhança da solução atual aceitando a que trás melhoria e, também, soluções que piore a solução atual com uma probabilidade menor quanto for a distância entre a solução e a solução atual.

A condição utilizada para aceitar ou não um movimento que faça a função custo aumentar, isto é, uma solução pior, é determinada por uma sequência de números aleatórios. Porém, com uma probabilidade que está sob controle.

A probabilidade de se aceitar ou não um movimento que aumente o valor da função é chamada de função de aceite e é de modo geral dada por $e^{\frac{-\Delta}{T}}$, em que Δ é a diferença entre as soluções e T é um parâmetro de controle que corresponde a temperatura analogamente ao processo de recozimento simulado.

A função de aceite determina que pequenos aumentos na função são mais aceitos que os grandes e que quando T se aproxima de zero muitos movimentos realizados que fazem a função aumentar sejam rejeitados.

O algoritmo Simulated Annealing deve ser iniciado com um valor de temperatura T relativamente alto. Com isso evita-se que ele fique preso a um mínimo local e segue tentando certo número de movimentos na vizinhança em cada valor de temperatura enquanto o parâmetro é gradualmente reduzido.

O SA pode ser observado, computacionalmente falando, como um processo estocástico de determinação de uma organização dos átomos de um determinado sólido apresentando energia mínima. Quando a temperatura está alta os átomos se movem livremente e com alta probabilidade podem se mover para determinadas posições que farão um incremento na energia total do sistema.

Conforme a temperatura vai baixando os átomos se movimentam de modo gradual em direção a uma estrutura regular e com um probabilidade bem baixa de suas energias serem incrementadas.

Nos trabalhos de (KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983) e (CERNY, 1972) é mostrado a semelhança ao método original proposto por (METROPOLIS et al., 1953) pode ser utilizado em problemas de otimização em que a função objetivo corresponde à energia dos estados do sólido. Para isso (KIRKPATRICK; GELATT; VECCHI, 1983) e (CERNY, 1972) assumiram uma analogia entre o sistema físico de partículas e um problema de otimização combinatória:

- soluções do problema de otimização é equivalente à energia de uma estado;
- custo da solução é equivalente à energia de um estado;
- seleção de uma solução vizinha em um problema de otimização é equivalente à perturbação de um estado físico;
- ótimo global de um problema combinatório equivale ao estado fundamental de um sistema de partículas;
- ótimo local de um problema combinatório equivale ao resfriamento no sistema físico.

A seguir o pseudocódigo do Simulated Annealing. Oberserve que sua implementação computacional é bastante simples.

Algoritmo 1: Simulated Annealing	
Entrada: $f() N() \alpha SAmar T_0 TMinm s$	
1 início	
$2 \mid s^* \leftarrow s \{ \text{melhor solução obtida até então} \}$	
$\frac{1}{3} iter T \leftarrow 0 \{ \text{número de iterações na temperatura } T \}$	
$\begin{array}{c} \mathbf{J} \\ $	
$ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	
6 enquanto $iterT < SAMax$ faca	
$7 \mid iterT \leftarrow iterT + 1$	
s gerar um vizinho (s') aleatoriamente na vizinhança de $N^k(s)$	
9 $ \Delta \leftarrow f(s') - f(s)$	
10 if $\Delta < 0$ then	
11 $s \leftarrow s'$	
12 if $f(s') < f(x^*)$ then	
13 $s^* \leftarrow s'$	
14 else	
15 Tome $x \in [0, 1]$	
16 if $x < e^{\frac{-\Delta}{T}}$ then	
17 $s \leftarrow s'$	
18 end	
19 fim	
20 $T \leftarrow T\alpha$	
21 $iterT \leftarrow 0$	
22 fim	
23 retorne s^*	
24 fim	

A expressão $T \leftarrow \alpha T$ corresponde ao processo de diminuição da temperatura. De modo geral o parâmetro no qual a temperatura é reduzida, α , é uma constante com valor menor do que um.

De acordo com a teoria o valor da temperatura deve ser reduzida de modo lento e gradual. O valor de α comumente utilizado está entre 0,8 e 0,99 com uma

tendência para valores próximos de 1.

O valor de α que é utilizado no algoritmo o afeta no tempo de execução e na qualidade que se deseja para a solução problema. Caso o valor dele seja pequeno, a temperatura resfria de modo bem rápido o que leva ao algoritmo a parar rapidamente. No entanto, as soluções encontradas são bem pobres. Por outro lado, se o valor de α estiver próximo de 1, a temperatura é reduzida de modo lento o que exige maior tempo de execução e soluções de melhor qualidade.

3 ENSAIOS REALIZADOS

Nesta seção serão descritos os ensaios que foram realizados neste trabalho. São eles: Tração, Cisalhamento Direto, Compressão Uniaxial e T-Bar. Para cada um dos ensaios foram realizados duas fases: uma chamada de pré-processamento e outra de busca (3.1).



Figura 3.1: Representação esquemática das fases de pré-processamento e da busca.

Na primeira fase foi realizado um ensaio numérico para os ensaios de tração, cisalhamento direto e de compressão uniaxial. A partir dos dados coletados foi gerada uma curva de referência e um polinômio de ajuste de referência. Para o ensaio T-Bar a curva de referência e o polinômio foram extraídos de (OLIVEIRA, 2005) Na fase de busca foram realizadas diversas simulações em cada um dos ensaios. Para cada uma das simulações foi gerado um polinômio de ajuste. O objetivo consiste em minimizar o erro relativo entre os coeficientes do polinômio de referência e o polinômio de ajuste.

3.1 Ensaio de Tração

O ensaio de tração é um tipo de ensaio que consiste em submeter o material a uma carga axial que tende a alongá-lo até a ruptura. Este ensaio tem como objetivo o estudo da resistência de um determinado tipo de material e a análise do seu comportamento quando submetido à tração.

Os resultados do ensaio de tração permitem tomar conhecimento de que modo os materiais utilizados reagem aos esforços de tração, quais são os limites de tração que são suportados e a carga aplicada no qual o corpo se rompe. Trata-se de um ensaio muito utilizado na indústria de componentes mecânicos.

Neste ensaio as forças que são impostas ao material são, praticamente, distribuídas de modo uniforme por todo o corpo de prova, pelo menos até que seja atingida uma carga máxima próxima ao final do ensaio. Como é possível fazer com que a carga cresça numa velocidade razoavelmente lenta durante todo o ensaio ele permite a medição da resistência do material.

O corpo de prova utilizado nos ensaios de tração têm seção reta circular ou retangular e segundo (SOUZA, 1982) isso depende da forma e do tamanho do produto acabado do qual foi extraído o corpo de prova.

Caso os corpos de prova sejam retirados de placas, chapas ou lâminas que

possuem seção retangular a sua espessura deve ser igual à espessura da placa, chapa ou lâmina. Já os corpos de prova, figura (3.2), com seção circular serão produzidos se o produto for de seção circular ou irregular, ou produzido por fundição, ou que tenha espessura muito grande que exija um esforço grande para que se possa rompêlo (SOUZA, 1982).



Figura 3.2: Corpo de prova padrão com seção circular. Adaptado de (CALLISTER, 2007)

A amostra é deformada em uma máquina de ensaios, figura (3.3), que é projetada para alongar a mesma a uma taxa constante e mede de modo contínuo e simultâneo a carga instantânea que é aplicada e os alongamentos. Na máquina o corpo de prova é preso pelas suas extremidades nas garras de fixação do dispositivo de testes. Tanto a carga quanto o alongamento são normalizados com os parâmetros de tensão e deformação, respectivamente.

Vale salientar que a uniformidade das deformações termina no momento em que a carga máxima suportada pelo material é atingida. Com isso começa a aparecer o fenômeno da estricção ou da redução da seção do corpo de prova em materiais que possuem certa ductilidade. Durante os ensaios a deformação do corpo de prova se dá na região em que o material mais se estreita e possui uma seção reta uniforme ao longo do seu comprimento. Isto ocorre somente se nenhum defeito interno no material, fora dessa região, faça com que o material se rompa. Porém, isso é muito raro de acontecer.



Figura 3.3: Esquema da máquina de tração. Adaptado de (CALLISTER, 2007)

A figura (3.4) apresenta o comportamento da curva tensão-deformação de engenharia até a fratura do material. O limite de resistência a tração (LRT) está situado no ponto máximo da tensão e a deformação elástica, a deformação plástica uniforme, a estricção e a fratura, que é momento de rompimento do material, estão representados nos detalhes em destaque na figura.

De acordo com (CALLISTER, 2007) a tensão (σ) é definida pela seguinte relação, em que F é a carga instantânea aplicada em uma direção perpendicular à seção reta da amostra e A_0 representa a área da seção reta original antes da aplicação de qualquer carga:

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \tag{3.1}$$

Ainda de acordo com (CALLISTER, 2007) a deformação de engenharia é calculada de acordo com a expressão:

$$\epsilon = \frac{l_i - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \tag{3.2}$$

em que ϵ é a deformação, l_0 é o comprimento original antes de qualquer carga ser aplicada e l_i é o comprimento instantâneo. Em algumas situações a grandeza $l_i - l_0$



Figura 3.4: Curva tensão-deformação até a fratura do material. Adaptado de (CAL-LISTER, 2007)

é simbolizada por Δl que representa o alongamento da deformação ou a variação no comprimento em determinado instante, em relação ao comprimento original.

Quando uma amostra é submetida ao ensaio de tração é fornecido um gráfico que exibe as relações entre a força que é aplicada e as deformações que ocorrem durante o ensaio. Nos ensaios deste tipo segue-se a convenção que a área utilizada para os cálculos é a área da seção inicial S_0 . Com a aplicação da relação anterior obtém-se os valores de tensão que, quando plotados em um gráfico, mostra as relações entre a tensão e a deformação no decorrer do ensaio.

A elasticidade de um material consiste na sua capacidade de voltar a sua forma original em um ciclo de carregamento e descarregamento. A deformação elástica é reversível, isto é, quando a tensão é removida ela desaparece.

A relação entre os valores da tensão e da deformação linear na fase de elasti-

cidade é o Módulo de Elasticidade (E). Sendo σ a tensão aplicada e ϵ a deformação linear específica a expressão matemática do módulo de elasticidade é:

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon}.\tag{3.3}$$

Uma peça de metal sob efeito de tensões de compressão e tração vai sofrer deformações que podem ser elásticas ou plásticas. Até determinado ponto de tensão aplicada o material analisado trabalha no regime elástico seguindo a lei de Hooke e a deformação específica sendo diretamente proporcional ao esforço aplicado.



Figura 3.5: Comportamento típico da curva tensão-deformação de um metal. Adaptado de (CALLISTER, 2007)

No gráfico, figura (3.5), pode-se observar a proporcionalidade no trecho retilíneo do gráfico tensão-deformação - até o ponto P - e a constante de proporcionalidade é o módulo de elasticidade. Veja que após o ponto P, ou seja, o limite de proporcionalidade, passa a ter lugar a fase plástica. Quando o limite de proporcionalidade é ultrapassado tem lugar a fase plástica.

O valor da tensão é uma característica importante do material, chamada de
tensão de escoamento. O limite de resistência ao escoamento é determinado a partir de uma pré-deformação específica, de modo geral 0,2% para o aço, traçando uma reta paralela a região da curva tensão deformação, figura (3.5), (CALLISTER, 2007)

3.2 Ensaio de Cisalhamento Direto

O ensaio de cisalhamento direto foi desenvolvido, basicamente, para se determinar a resistência ao corte de um corpo de prova de solo com a forma de um prisma e seção quadrada ou circular e com pequena espessura. Este ensaio, segundo (PINTO, 2006), é o procedimento mais antigo para determinar a resistência ao cisalhamento do solo e se baseia de modo direto no critério de Mohr-Coulomb.

Pode-se definir a resistência ao cisalhamento de um solo segundo (VARGAS, 1977) pela tensão máxima de cisalhamento que um determinado tipo de solo pode resistir até antes da ruptura ou, ainda, a tensão de cisalhamento do solo no plano em que estiver acontecendo a ruptura.

O cisalhamento direto relaciona de modo direto as tensões normal e cisalhante que são aplicadas a um corpo de prova confinado em uma caixa bipartida, figura (3.6). Quando a amostra é levada à ruptura os valores da tensão de cisalhamento e da tensão normal definem um ponto sobre a envoltória de tensões.

O ensaio é caracterizado por impor um plano de cisalhamento ao corpo de prova. O princípio deste ensaio é muito simples e consiste em mover uma porção de solo sobre outra de modo a aumentar a força horizontal e mantendo constante a carga normal ao plano de movimento.

As vantagens e limitações do ensaio de cisalhamento direto foram extraídas



Figura 3.6: Esquema do equipamento do ensaio de cisalhamento direto (PINTO, 2006)

de (PITANGA, 2002):

- 1. Vantagens:
 - o ensaio é relativamente rápido e simples de ser realizado;
 - os princípios básicos do ensaio são fáceis de serem entendidos;
 - os princípios do ensaio podem ser estendidos aos solos pedregulhosos e outros materiais contendo partículas maiores, os quais podem ser mais caros se ensaiados por outros meios;
 - o equipamento pode ser usado para ensaios drenados e para a medida da resistência ao cisalhamento residual por meio do processo de multireversão da caixa de corte.
- 2. Limitações:
 - a amostra de solo é forçada a romper ao longo de um plano de cisalhamento pré-determinado;
 - a distribuição de tensões sobre esta superfície não é uniforme;
 - o modelo de tensões reais é complexo e as direções dos planos de tensões principais rotacionam durante o cisalhamento da amostra;

- nenhum controle pode ser exercido sobre a drenagem, exceto pela variação da velocidade de carregamento;
- as poro-pressões não podem ser medidas;
- o deslocamento que pode ser aplicado ao solo é limitada pelo máximo comprimento de viagem do equipamento;
- a área de contato entre o solo nas duas metades da caixa de corte diminui com o prosseguimento do ensaio.

O cisalhamento direto possui, ainda, uma grande limitação: dificuldade em se obter boas amostras no que se refere a distribuição dos tamanhos das partículas e a representatividade na composição do material coletado e nas dimensões dos equipamentos que são utilizados nos ensaios (KÖNIG; JESSBERGER, 1997).

3.3 Ensaio de Compressão Uniaxial

O ensaio de compressão uniaxial consiste em aplicar a um corpo de prova previamente preparado uma carga compressiva a uma taxa constante, figura (3.7). Este ensaio é o mais utilizado devido à sua simplicidade para determinar parâmetros de rocha.

O valor da tensão de ruptura é definido como sendo a resistência a compressão uniaxial da rocha, que é definida por

$$\sigma_c = \frac{F}{A_0} \tag{3.4}$$

em que σ_c é a resistência a compressão uniaxial dada em Pa, F é força aplicada na ruptura em $N \in A_0$ é a área da secção inicial, transversal à aplicação da força em m^2 .



Figura 3.7: Representação esquemática do ensaio uniaxial

O ensaio uniaxial é utilizado para estudar a resistência e a deformabilidade das rochas e permite determinar, além da resistência à compressão uniaxial, que é o parâmetro fundamental na classificação de maciços rochosos, outros parâmetros mecânicos tais como o Módulo de Young ou Módulo de Elasticidade (E) e o coeficiente de Poisson (ν) .

Durante a ocorrência do ensaio de compressão uniaxial é realizada a aquisição da tensão axial, deformação axial e radial. Com esses dados anteriores determina-se o Módulo de Poisson e o Módulo de Elasticidade.

O ensaio uniaxial aparenta ser muito simples e de fácil realização. No entanto, isso na prática não se verifica. Segundo (PINHO, 2003) os resultados dos ensaios podem ser influenciados tanto por fatores interiores, quanto por fatores exteriores. Tais fatos podem dificultar a interpretação dos resultados.

Ainda segundo (PINHO, 2003) os fatores internos que influenciam o ensaio uniaxial são os seguintes: composição mineralógica, a relação dimensional entre os tamanhos do grão e do corpo de prova, a porosidade e as descontinuidades. Os fatores externos são os seguintes: geometria do corpo de prova, velocidade de deformação, condições ambientais e o atrito entre os pratos da prensa e o topo do corpo de prova.

3.4 Ensaio T-Bar

O ensaio de T-Bar foi desenvolvido originalmente em pequena proporção para o estudo de argilas moles, para ensaios em centrífugas na University of Western Australia (UWA) e apresentada por (STEWART; RANDOLPH, 1991). A motivação dos idealizadores foi obter uma melhoria na ferramenta de ensaio utilizada para argilas moles em laboratório e em modelos de centrífuga. A ideia foi fazer a associação da vantagem do ensaio de palheta com a vantagem do ensaio de piezecone para com isso fornecer um perfil contínuo de resistência com valores de resistência ao cisalhamento menos dependente de correlações empíricas (CARVALHO, 2012; OLIVEIRA, 2005).

Uma vantagem adicional ao equipamento de T-Bar vem do fato de que a tensão vertical in situ é equilibrada ao redor do equipamento e, com isso, não há necessidade da correção do nível de tensão no terreno (STEWART; RANDOLPH, 1991). Porém, na execução de ensaios em centrífugas surgem dificuldades quando se minimizam as dimensões de equipamentos como o penetômetro de cone ou palheta.

Nos trabalhos de (STEWART; RANDOLPH, 1991) foram realizados vários ensaios de T-Bar tanto em centrífuga quanto em laboratório, cujos resultados foram comparados a resultados encontrados em ensaios de palheta, de cone e triaxiais adensados e não drenados isotropicamente e de acordo com (OLIVEIRA, 2005) os testes de laboratório chegaram a valores bem satisfatórios com resultados mais próximos dos ensaios triaxiais e de palheta do que os resultados do cone tradicional.

Após a realização dos ensaios citados no parágrafo anterior o ensaio de T-Bar foi realizado em campo (STEWART; RANDOLPH, 1994) nas proximidades do Rio Swan, na Burswood Peninsular em Perth, Western Australia, em um depósito de argila mole relativamente homogêneo com aproximadamente 18m de espessura. Os ensaios forneceram valores de resistência não drenada ao cisalhamento consistentes com os que foram obtidos de vários outros métodos de ensaio (STEWART; RANDOLPH, 1994).

Uma série de ensaios de campo foi realizada no Brasil por (MACEDO, 2004) na argila cinza do Rio de Janeiro com um penetrômetro barra-T confeccionado pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (COOPE/UFRJ). Os resultados obtidos nestes ensaios foram comparados aos ensaios de piezocone e de palheta, e a ensaios triaxiais, sendo os primeiros realizados no mesmo local e os segundos com amostras também do local. O penetrômetro cilíndrico (T-Bar) que foi desenvolvido por (STEWART; RANDOLPH, 1994) consistiu na retirada da extremidade cônica do piezocone e na adaptação de uma barra cilíndrica horizontalmente. A barra cilíndrica é de alumínio e possui medida de 50mm de diâmetro e 200mm de comprimento. A superfície cilíndrica da barra é jateada com areia, gerando assim uma superfície um tanto quanto rugosa, enquanto que as extremidades do cilindro são suavizadas de modo mecânico.

Ainda no Brasil foi realizado por (JANNUZZI, 2009) a caracterização da argila mole do Sarapuí II por meio de vários ensaios de campo, dentre eles os ensaios de T-Bar. Chegou-se a conclusão que os resultados obtidos pela pesquisa foram muito satisfatórios e que o ensaio de T-Bar é uma ótima ferramenta para estimativa de um perfil contínuo da resistência ao cisalhamento não-drenado (Su) de um solo. Tal resultado foi conseguido tendo em vista a comparação dos resultados do ensaio de T-Bar com os ensaios de cone e palheta.

O Su é o valor máximo do esforço a qual um solo saturado pode ser submetido sem que se rompa ou sofra deformação excessiva quando a água que está no solo não seja drenada devido a condições de contorno ou a velocidade aplicada ao solo.

RONALD (2012)

A barra é empurrada para dentro do solo com uma velocidade de 2cm/s e a resistência a esta penetração é medida com a utilização de uma célula de carga similar à utilizada no ensaio de cone. A área que é projetada para o T-Bar é de 10.000mm² o que equivale a dez vezes a área de um cone padrão. Com isso a precisão com que é computada a força de penetração neste ensaio é consideravelmente maior do que a de um ensaio de cone realizado no mesmo solo.



Figura 3.8: Penetrômetro T-Bar para ensaio de campo (STEWART; RANDOLPH, 1994)

É possível interpretar o ensaio T-Bar baseando-se na solução analítica encontrada por (RANDOLPH; HOULSBY, 1984) quando analisaram a resistência lateral última de uma estaca circular num solo coesivo utilizando a teoria clássica da plasticidade.

A solução considera o solo perfeitamente plástico e coesivo e o carregamento é determinado sob um cilindro longo que se move de modo lateral através de um meio infinito. O valor da resistência não drenada ao cisalhamento (Su) é calculado determinando a solução anterior e assumindo que o solo envolve de modo completo o cilindro, de modo a não permitir a ocorrência de vazios na parte posterior do cilindro (RANDOLPH; HOULSBY, 1984) (STEWART; RANDOLPH, 1994).

Para um força limite atuando em um cilindro de comprimento infinito tem-se a seguinte expressão para a solução

$$\frac{P}{Su.d} = N_b \tag{3.5}$$

onde:

- P é a força por unidade de comprimento atuando no cilindro;
- *d* é o diâmetro do cilindro;
- N_b é o fator da barra.

Os valores obtidos numericamente para N_b dependem da rugosidade da superfície do cilindro, que é representada pelo fator de adesão (α), e convergem para um valor aproximado de $N_b = 12$ para uma superfície totalmente rugosa da barra e divergem de modo suave para valores de α com um mínimo em torno de $N_b = 9$. A utilização de um valor intermediário, $N_b = 10$, para os casos mais gerais é recomendado por (RANDOLPH; HOULSBY, 1984). O fator da barra (N_b) possui uma faixa de valores que são possíveis, pequena em termos relativos, acarretando erros menores que ±13% entre os limites superior e inferior, respectivamente.

O modelo que será proposto busca reproduzir o comportamento de solos moles por meio do Método dos Elementos Discretos.

Solos moles é o termo utilizado em geotecnia para se referir aos solos coesivos e de baixa resistência. Estes podem ser, também, denominados como depósitos de solos com predominância de partículas siltosas e argilosas de formação argilosa recente.

Solos moles encontram-se de modo geral em estado normalmente adensado ou ligeiramente pré-adensado. Algumas exceções ocorrem nas partes superficiais devido ao ressecamento em decorrência da oscilação do lençol freático ou devido à existência de aterros ou de camadas sobrejacentes que produzem sobrecarga (HALLAL, 2003).

Os solos moles têm como características a grande compressibilidade, pequena permeabilidade e baixa consistência. Devido a estas características, solos desse tipo apresentam problemas do ponto de vista da geotecnia. Estes solos podem apresentar variação espacial considerável de suas propriedades físicas - tais como resistência não drenada, umidade, granulometria, índice de vazios - que resultam do processo de formação fazendo, com isso, que ocorram comportamentos distintos de um mesmo depósito.

O meio a ser modelado, argila, é discretizado por meio de elementos discretos. Neste trabalho não será representada cada partícula como um elemento. Cada elemento discreto será considerado como um conjunto de partículas. Esta abordagem foi utilizada por (ASAF; RUBINSTEIN; SHMULEVIC, 2007), (PLASSIARD; BELHEINE; DONZÉ, 2009) e (CARVALHO, 2012).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentadas algumas observações sobre o processo de obtenção dos resultados na seção (4.1). Em seguida serão apresentados os resultados obtidos nos experimentos numéricos na seção (4.2) e, por fim, as discussões acerca dos resultados obtidos na seção (4.3).

4.1 Dificuldades e Soluções

Nesta seção serão analisadas as dificuldades e as soluções encontradas na fase de ajuste dos experimentos numéricos realizados. Os experimentos realizados visam a busca de parâmetros que foram coletados a partir de um ensaio de referência e de (OLIVEIRA, 2005).

O primeiro método de otimização aplicado foi o Nelder-Mead. Ainda na fase de ajustes desse método, utilizou-se um tamanho pequeno para o simplex inicial, no entanto, não se obteve sucesso na busca dos valores de referência, pois o método convergia para um mínimo local, fornecendo valores para $E \in \theta$ bastante diferentes daqueles das referências. Assim, o tamanho do simplex inicial foi aumentado, fazendo com que o algoritmo melhorasse os resultados.

Nos experimentos que buscavam o ângulo de atrito foi utilizado, a princípio, um intervalo de variação de 0° a 360°. No entanto, como o valor do ângulo de atrito é determinado pela tangente, decidiu-se alterar o valor do intervalo de busca, de 0° a 90°. Após os experimentos de ajuste verificou-se que os valores encontrados para os parâmetros eram muito próximos aos valores arbitrados inicialmente. Então, a variação do ângulo de atrito foi alterada para todos os experimentos.

Na fase de ajustes do Refinamento Progressivo percebeu-se que o número de chamadas de função, ou seja, número de vezes que a simulação é chamada pelo algoritmo, realizadas depende do critério de parada adotado. Após alguns testes, decidiu-se por considerar a relação entre as áreas da nova região de busca e a área do domínio original de busca, como abordado em (2.4.3.2), e o valor adotado neste trabalho é igual a 5%.

Para estimar a quantidade de iterações necessárias para a minimização do problema com os métodos Simulated Annealing e ED nos ensaios de Cisalhamento Direto, Compressão Uniaxial e T-Bar, foi considerado um problema com função objetivo definida por

$$f(x,y) = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - 1.$$
(4.1)

sendo que $x_0 e y_0$ são os valores de Módulo de Young e ângulo de atrito, respectivamente, utilizados no ensaio de referência para a busca nos experimentos realizados. Observe o valor mínimo deste parabolóide é -1.

Uma boa aproximação para o valor mínimo de (4.1) foi obtida com mais de 100.000 iterações, tanto para o SA quanto para o ED.

No algoritmo SA os experimentos realizados com os ensaios Cisalhamento Direto, Uniaxial e T-bar duraram em média 2, 8, 1, 5, e 2, 2 dias, respectivamente, executando 1002 iterações. Segundo a estimativa encontrada na fase de calibração, ou sejam, 100.000 iterações, a busca dos parâmetros do Teste Uniaxial levaria cerca de 5 meses para encontrar um bom resultado, sendo totalmente inviável. No algoritmo ED os experimentos realizados com os ensaios Cisalhamento Direto, Uniaxial e T-bar duraram em média 2, 2, 3, 5, e 1, 3 dias, respectivamente, executando 1002 iterações. Ainda de acordo com a estimativa utilizando o polinômio (4.1), a busca dos parâmetros do teste T-bar levaria cerca de 4,3 meses, tornando inviável a aplicação desse algoritmo.

Para estimar a quantidade de iterações a serem realizadas na simulação do Ensaio de Tração pelos métodos Simulated Annealing e Evolução Diferencial, foi utilizada como função objetivo a ser minimizada a parábola

$$f(x) = (x - x_0)^2 - 1.$$
(4.2)

onde x_0 é o valor do Módulo de Young utilizado no ensaio de referência para a busca neste experimento. Observe que -1 é valor mínimo desta função objetivo.

Uma boa aproximação para o valor mínimo de (4.2) foi obtida novamente com mais de 100.000 iterações, tanto para o SA quanto para o ED. Estipulou-se então o valor de 1000 iterações para esses métodos, uma vez que, como citado acima, a estimativa indicou que o método SA levaria cerca de 42,5 dias e o ED levaria 3,5 dias. Novamente, determinou-se o valor máximo de 1000 iterações.

Para cada um dos quatro experimentos numéricos realizados para cada um dos métodos de otimização utilizados neste trabalho, foram adotadas três formas determinar o erro: o erro relativo dos coeficientes dos polinômios de ajuste E_c , o erro integral E_I e o erro médio E_M .

O erro relativo dos coeficientes dos polinômios obtidos pelo ajuste dos dados provenientes da simulação numérica em relação ao coeficientes do polinômio ajustado aos dados da simulação de referência dado por

$$E_{c} = \frac{\sum_{i=0}^{n} (\bar{a} - a_{i})^{2}}{\sum_{i=0}^{n} \bar{a}^{2}}$$
(4.3)

em que \overline{a} são os coeficientes do polinômio ajustado aos dados de referência e a_i são os coeficientes do polinômio ajustado a cada nova simulação.

O erro integral é definido como o erro relativo da área entre os polinômios de ajuste dos dados de referência e dos dados obtidos na simulação, em relação à área do polinômio de ajuste dos dados de referência, ou seja,

$$E_{I} = \frac{\int_{a}^{b} (|P_{ref}(x) - P_{i}(x)|) dx}{\int_{a}^{b} |P_{ref}(x)| dx}.$$
(4.4)

onde P_{ref} é o polinômio de referência e P_i o polinômio obtido pelo ajuste dos dados resultantes da simulação.

O erro médio (E_M) é definido pela média aritmética entre o erro relativo na norma L^2 e o erro integral, ou seja:

$$E_M = \frac{E_c + E_I}{2}.\tag{4.5}$$

No início do processo de realização dos experimentos utilizou-se apenas o erro relativo dos coeficientes dos polinômios de ajuste dos dados de referência e dos dados obtidos nas simulações. Porém, verificou-se que os erros encontrados eram pequenos mesmo para valores dos parâmetros otimizados bem diferentes dos valores de referência. Decidiu-se então trocar a abordagem adotada para o cálculo do erro, incluindo a determinação do erro integral para que se pudesse determinar o valor do erro médio. Porém, após alguns experimentos verificou-se que o erro integral foi a mais conservativa das três abordagens. A região de busca é definida baseando-se em valores viáveis de $E e \theta$, segundo as referências. Para evitar que na busca pelo ponto ótimo os algoritmos saíssem dessa região, eles foram adaptados de modo a retornar um valor alto para a função objetivo toda vez que fornecessem pontos fora do domínio de busa.

Para os algoritmos Nelder-Mead e Simulated Annealing, que necessitam de ponto inicial para dar início à busca, foi considerada uma discretização do domínio de busca para gerar um conjunto de pontos iniciais. O intervalo de busca do Módulo de Young, $[E_{mín}, E_{máx}]$, foi dividido em M partes iguais com M+1 pontos e o intervalo de busca do ângulo de atrito, $[\theta_{mín}, \theta_{máx}]$, foi dividido em N partes iguais com N+1pontos, como apresentado na figura (4.1). Assim, cada nó de malha define um ponto inicial de busca para o algoritmo SA e, no caso particular do NM, cada subregião da malha define um simplex inicial, como mostrado na figura (4.2). Este esquema, que aumenta a chance de encontrar o mínimo global dentro da região de busca, foi aplicado nos ensaios de cisalhamento direto, compressão uniaxial e T-Bar.



Figura 4.1: Exemplo de malha utilizada nos algoritmos Nelder-Mead e Simulated Annealing.

Para algoritmo Nelder-Mead foi adotado como simplex inicial o triângulo

abaixo de cada retângulo da malha, figura (4.1), como indicado na figura (4.2).



Figura 4.2: Simplex inicial utilizado no algoritmo Nelder-Mead.

Para o algoritmo Simulated Annealing foi adotado apenas um ponto inicial dentro da região de busca para a busca dos parâmetros conforme figura (4.3).





No caso do Teste de Tração, a malha gerada é unidimensional pois apenas é parametrizado o valor de E.

Este esquema não é aplicável aos algoritmos ED, uma vez que ele gera uma população inicial aleatória, e ao RP, por trabalhar recursivamente com a subdivisão do domínio de busca.

A seguir serão mostrados os resultados obtidos em cada um dos ensaios lis-

tados anteriormente.

4.2 Resultados

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com a realização dos ensaios que foram descritos no capítulo anterior. O ambiente utilizado para os experimentos foi um computador com processador Intel[®] i7-4790K, CPU4.00GHz×8 com 32GiB.

Nos ensaios de tração, cisalhamento direto e uniaxial foi realizado um ensaio numérico de referência. A partir dos dados coletados foi gerado um gráfico tensãodeformação e o seu respectivo polinômio de ajuste com o software *LibreOffice Calc* 5. O polinômio ajustado do ensaio T-bar foi retirado de (OLIVEIRA, 2005).

Com a obtenção do polinômio de ajuste a partir dos dados gerados pelo ensaio de referência buscou-se com os métodos de otimização citados anteriormente os coeficientes de um novo polinômio.

4.2.1 Ensaio de Tração

O Ensaio de Tração foi realizado com uma amostra com 0.80×0.80 de seção transversal e 1m de comprimento, figura (4.4). Este corpo de prova foi discretizado com 100 elementos discretos com raio médio 0.2m.

Foi realizado um ensaio de referência com Módulo de Young (E), coeficiente de Poisson (ν) , densidade (d), ângulo de atrito (θ) , coesão normal (c_n) e coesão cisalhante (c_t) com os seguintes valores: E = 222 kPa, $\nu = 0, 3$, $d = 356, 78 \frac{kg}{m^3}$,



Figura 4.4: Amostra antes (azul) e depois (vermelho) da realização do experimento.

 $\theta = 30^{\circ}, c_n = 90.000, e c_t = 85.000.$

Neste experimento será considerado apenas o Módulo de Young como parâmetro de busca, com a região de busca definida pelo intervalo [100, 500] kPa.

Com os dados gerados com o experimento de referência obtivemos o gráfico tensão-deformação apresentado na figura (4.5), onde em azul é o gráfico tensãodeformação obtido pelo ensaio experimental e em vermelho o gráfico do polinômio de ajuste para esses dados, dado por

$$P(x) = -422,768633703x + 106437,279425.$$
(4.6)



Figura 4.5: Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de referência e o gráfico do polinômio de ajuste.

4.2.1.1 Nelder-Mead

A busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Nelder-Mead neste experimento foi realizada de dois modos distintos: o primeiro utilizando um eixo dividido em duas partes e o outro não considerando divisão alguma, ou seja, apenas o valor inicial e o final do eixo. Em ambos os casos pegou-se o melhor dos valores encontrados.

Na primeira busca o valor do Módulo de Young encontrado foi 222 kPa e erro integral de 0,049%. Tais valores foram encontrados com 26 chamadas de função.

Na figura (4.6) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado.

Na segunda busca foi encontrado para Módulo de Young o valor de 224 kPa e erro integral de 1,08%. Estes valores foram encontrados com 11 chamadas de



Figura 4.6: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação.

função.

Na figura (4.7) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados para o segundo experimento numérioco.

A tabela (4.1) mostra um resumo dos parâmetros obtidos na busca pelos valores de referência em que #Ch é o número de chamadas de função.

Tabela 4.1: Valores encontrados em cada uma das estratégias de busca

Busca	Young (kPa)	#Ch	Erro (%)
1	2,22e2	26	0,0494
2	2,24e2	11	1,08



Figura 4.7: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação.

A tabela (4.2) mostra o erro relativo obtido em cada um dos experimentos nos valores buscados.

Tabela 4.2: Erros relativos encontrados do Módulo de Young em cada uma das estretégias de busca.

Busca	Erro Relativo de E (%)
1	0%
2	0,9%

4.2.1.2 Refinamento Progressivo

Na busca pelo valor de referência o experimento realizado obteve para Módulo de Young 2212 kPa e erro integral de 0,656%, após 13 chamadas de função.

Na figura (4.8) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca do valor de referência.



Figura 4.8: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

Foi determinado também o valor do
erro relativo do Módulo de Young, sendo igual a 0,45%.

4.2.1.3 Simulated Annealing

Foram realizados dois experimentos, cada um deles iniciando com um valor inicial para Módulo de Young.

No experimento que teve como valor inicial E = 250 kPa foi obtido para Módulo de Young o valor E = 242 kPa, com erro integral de 0,979%.

Na figura (4.9) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca pelos valores de referência.



Figura 4.9: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste para o valor inicial 250 kPa.

No experimento que teve como valor inicial de E = 450 kPa foi obtido para Módulo de Young o valor E = 270 kPa com erro integral de 19,6%.

Na figura (4.10) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca pelos valores de referência.

A tabela (4.3) mostra o erro relativo integral do polinômio de ajuste, obtido em cada um dos experimentos e a tabela (4.4) mostra o erro relativo do valor do Módulo de Young buscados, obtido em cada um dos experimentos.

Busca	Young (kPa)	#Ch	Erro (%)
1	2422	1002	0,979
2	270	1002	19, 6

Tabela 4.3: Valores encontrados em cada uma das buscas.



Figura 4.10: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste para o valor inicial 450 kPa.

Tabela 4.4: Erros encontrados na busca do Módulo de Young em cada uma das estratégias de busca.

Busca	Erro Relativo de E (%)	
1	9	
2	21,62	

4.2.1.4 Evolução Diferencial

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve E = 222 kPa após 815 chamadas de função, ficando abaixo do valor estimado na fase de ajustes.

Na figura (4.11) estão representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca dos valores de referência.

Nesse experimento o valor do Módulo de Young encontrado foi o mesmo do



Figura 4.11: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

valor de referência. O erro integral foi de 0,0000595%.

4.2.2 Ensaio de Cisalhamento Direto

O Ensaio de Cisalhamento Direto foi realizado com uma amostra com 0,1m de comprimento, 0,02m de largura e 0,04m de altura, figura (4.12). Este corpo de prova foi discretizado com 841 elementos discretos com raio médio de 0,0023m.

Conforme dito anteriormente foi realizado um ensaio de referência onde foram definidos o Módulo de Young (E), coeficiente de Poisson (ν) , densidade (d) e ângulo de atrito (θ) com os valores E = 4GPa, $\nu = 0,04$, $d = 2600 \frac{kg}{m^3}$, $\theta = 34,4^{\circ}$. Os parâmetros utilizados como objetivo de busca serão o Módulo de Young e o ângulo de atrito. A região de busca para todos os experimentos tem Módulo de Young variando no intervalo [1, 9] GPa.



Figura 4.12: Amostra antes e depois da realização do experimento.

Na figura (4.13) estão representados os dados gerados com o experimento de referência, onde em azul é o gráfico tensão-deformação obtido pelo ensaio experimental de referência e em vermelho o gráfico do polinômio de ajuste.



Figura 4.13: Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de referência e o gráfico do polinômio de ajuste.

O polinômio de ajuste encontrado é o dado a seguir

$$P(x) = -1.18\mathbf{e}13x^5 + 3.77\mathbf{e}12x^4 - 4,97\mathbf{e}11x^3 + 3,25\mathbf{e}10x^2 + 9,85\mathbf{e}6x + 1,35\mathbf{e}7.$$
(4.7)

4.2.2.1 Nelder-Mead

Para a busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Nelder-Mead com ensaio de cisalhamento direto foram realizados três estratégias de busca. As duas primeiras a busca foram iniciadas a partir de vários simpleces iniciais dentro da região de busca. A terceira busca foi iniciada com apenas um simplex em que os vértices coincidiam com três vértices da região de busca. Na primeira busca os valores encontrados foram de E = 3,25 GPa e $\theta = 38^{\circ}$ e erro integral 4,41%. Os valores anteriores foram obtidos com 26 iterações do algoritmo.

Na figura (4.14) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados.



Figura 4.14: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação.

Na segunda busca foram encontrados os valores E = 3,75 GPa, $\theta = 54^{\circ}$ e erro integral 5,23%. Tais valores foram encontrados com 13 chamadas de função.

Na figura (4.15) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados.



Figura 4.15: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação.

Na terceira busca foram encontrados os valores E = 3,94 GPa, $\theta = 54,38^{\circ}$ e erro integral 1,14%. Esses anteriores foram encontrados com 18 chamadas de função.

Na figura (4.16) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca.

A tabela (4.5) mostra uma compilação dos resultados obtidos nos três experimentos.



Figura 4.16: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da terceira simulação.

Tabela 4.5: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

Busca	Young (GPa)	Âng Atrito	#Ch	Erro (%)
1	3,25	$38,00^{\circ}$	26	4,41
2	3,75	$54, 38^{\circ}$	13	$5,\!38$
3	3,94	$34,86^{\circ}$	18	1,14

A tabela (4.6) mostra o erro relativo obtido em cada um dos experimentos nos valores buscados. Claramente os melhores valores foram aqueles obtidos no terceiro experimento numérico.

	Erro Relativo		
Busca	Módulo de Young (%)	Âng Atrito (%)	
1	18,75	9,47	
2	6,25	58,08	
3	1,50	1,34	

Tabela 4.6: Erros encontrados na busca do Módulo de Young em cada um dos experimentos.

A busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Refinamento Progressivo foi realizada em uma região em que o Módulo de Young varia de 1 a 7 GPa.

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve E = 4,05GPa, $\theta = 35,86^{\circ}$, erro integral 1,27% e 25 chamadas de função.

Na figura (4.17) estão representados as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca dos valores de referência.



Figura 4.17: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

Foi determinado também o valor do erro relativo do Módulo de Young e do ângulo de atrito encontrados no processo de busca. Os valores encontrados foram 1,25% e 4,24%, respectivamente.

4.2.2.3 Simulated Annealing

A busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Simulated Annealing foi realizada em uma região em que o Módulo de Young varia de 1 a 7 GPa. Porém, foram realizados quatro buscas cada uma delas iniciando com um valor inicial para Módulo de Young e ângulo de atrito.

Na busca com valores iniciais E = 2,5 GPa e $\theta = 20^{\circ}$ foram obtidos os valores E = 1,05 GPa e $\theta = 44,35^{\circ}$, com erro integral 45,3%.

Na figura (4.18) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca pelos valores de referência.



Figura 4.18: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste valor inicial de E = 2,5 GPa e $\theta = 20^{\circ}$.

A busca seguinte teve como valores iniciais E = 2,5 GPa e $\theta = 70^{\circ}$, obtendo como ponto de mínimo E = 1,34 GPa e $\theta = 81,95^{\circ}$ com erro integral 28,2%.

Na figura (4.19) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca pelos valores de referência.



Figura 4.19: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 2,5 GPa e $\theta = 70^{\circ}$.

Na terceira estratégia de busca os valores iniciais foram E = 5,5 GPa e $\theta = 20^{\circ}$, sendo obtidos E = 4,46 GPa e $\theta = 8,73^{\circ}$ como ponto de mínimo com erro integral 26,4%.

Na figura (4.20) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca pelos valores de referência.

Na última busca, com os valores iniciais E = 5,5 GPa e $\theta = 70^{\circ}$, o ponto de mínimo encontrado foi E = 5,51 GPa e $\theta = 63,45^{\circ}$ com erro integral 28,2%.

Na figura (4.21) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca pelos



Figura 4.20: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 5,5e9 e $\theta = 20^{\circ}$.

valores de referência



Figura 4.21: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 5,5 GPa e $\theta = 70^{\circ}$.

A tabela (4.7) mostra o Módulo de Young, o ângulo de atrito, a quantidade de chamadas de função e o erro integral em cada um dos experimentos.

Busca	Young (GPa)	Âng Atrito	#Ch	Erro(%)
1	1,50	$14,35^{\circ}$	1002	45,3
2	1, 34	$81,95^{\circ}$	1002	28,2
3	4,46	$8,73^{\circ}$	1002	26,4
4	5, 51	$63,95^{\circ}$	1002	28,2

Tabela 4.7: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

A tabela (4.8) mostra o erro relativo dos valores buscados obtido em cada um dos experimentos.

Tabela 4.8: Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em cada um dos experimentos.

	Erro Relativo		
Busca	Módulo de Young (%)	Âng Atrito (%)	
1	73,75%	$58,\!28\%$	
2	$65,\!25\%$	$138,\!22\%$	
3	11,50%	$74,\!62\%$	
4	37,75%	$84,\!45\%$	

4.2.2.4 Evolução Diferencial

A busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Evolução Diferencial realizou-se em uma região em que o Módulo de Young varia de 1 a 7 GPa.

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve E = 4,21GPa e $\theta = 36,51^{\circ}$, com erro integral 3,13% em 602 chamadas de função. O número de chamadas de função ficou abaixo do valor estabelecido na fase de ajustes.

Na figura (4.22) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca dos valores de referência.



Figura 4.22: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

Foi determinado também o valor do erro relativo do Módulo de Young e do ângulo de atrito encontrados no processo de busca. Os valores encontrados foram 5,25% e 6,13%, respectivamente.

4.2.3 Ensaio de Compressão Uniaxial

O Ensaio de Compressão Uniaxial foi realizado com uma amostra de $0, 1 \times 0, 1$ de seção transversal e 0, 2m de comprimento, figura (4.23). Este corpo de prova foi discretizado com 1500 elementos discretos com raio médio 0,007m.

Conforme feito anteriormente, foi realizado um ensaio de referência onde foram definidos o Módulo de Young (E), poisson (ν) , densidade (d), ângulo de atrito (θ) , coesão normal (c_n) e coesão cisalhante (c_t) com os valores E = 222 kPa, $\nu = 0,3$, $d = 356,78 \frac{kg}{m^3} \theta = 30^\circ$, $c_n = 100$, e $c_t = 100$, sendo objetivos da busca os valores de referência do Módulo de Young e do ângulo de atrito.



Figura 4.23: Amostra antes e depois da realização do experimento.

A região de busca para todos os experimentos para o ensaio de compressão uniaxial tem Módulo de Young variando de 100 a 500 kPa.

A figura (4.24) apresenta, em azul, o gráfico tensão-deformação obtido na simulação de referência e, em vermelho, o gráfico do polinômio de ajuste.

O polinômio de ajuste encontrado é o dado a seguir

$$P(x) = 166264, 414417x^2 + 24447, 8810361x + 115, 137667727.$$
(4.8)

4.2.3.1 Nelder-Mead

Para a busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Nelder-Mead com ensaio de compressão uniaxial foram realizadas três estratégias de busca.

O Módulo de Young encontrado foi 218 kPa e ângulo de atrito $30, 2^{\circ}$ com erro integral de 1,71%, em 19 chamadas de função.


Figura 4.24: Gráfico tensão-deformação obtido a partir de um ensaio de referência e o gráfico do polinômio de ajuste.

Na figura (4.25) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado.



Figura 4.25: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da primeira simulação com malha.

Na segunda busca o valor encontrado foi E = 213 kPa e $\theta = 35,63^{\circ}$, erro integral 1,45% após 13 iterações.

Na figura (4.26) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados.



Figura 4.26: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da segunda simulação.

Na terceira busca efetuada os valores encontrados para o ponto de mínimo foram E = 213 kPa e $\theta = 36,52^{\circ}$, com erro integral 1,46% após 13 chamadas de função.

Na figura (4.27) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

A tabela (4.9) mostra o Módulo de Young, o ângulo de atrito, o número de iterações e o erro integral em cada um dos experimentos nos valores buscados.



Figura 4.27: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste da terceira simulação.

Tabela 4.9: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

Busca	Young (kPa)	Âng Atrito	#Ch	Erro (%)
1	222	$30, 2^{\circ}$	19	1,73
2	213	$35,63^\circ$	13	2,90
3	2135	$36, 52^{\circ}$	13	1,46

A tabela (4.10) mostra o erro relativo dos valores buscados obtido em cada um dos experimentos .

Tabela 4.10: Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em cada um dos experimentos.

	Erro Relativo			
Busca	Módulo de Young (%)	Âng Atrito (%)		
1	1,80	0,66		
2	4,05	$15,\!80$		
3	4,05	17,85		

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve para Módulo de Young 209 kPa, ângulo de atrito 49,92°, erro integral de 2,14% e 25 iterações.



Figura 4.28: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

Na figura (4.28) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca dos valores de referência.

Foi determinado também o valor do erro relativo do Módulo de Young e do ângulo de atrito encontrados no processo de busca. Os valores encontrados foram 5,85% e 39,90% para o Módulo de Young e ângulo de atrito, respectivamente. Na busca com valores iniciais E = 200 kPa e $\theta = 20^{\circ}$ foram obtidos os seguintes valores E = 150 kPa e $\theta = 15, 42^{\circ}$, com erro integral de 9, 52%.

Na figura (4.29) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca pelos valores de referência.



Figura 4.29: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 200 kPa e $\theta = 20^{\circ}$.

A busca seguinte teve como valor inicial E = 200 kPa e $\theta = 70^{\circ}$, sendo obtidos E = 134 kPa e $\theta = 85, 24^{\circ}$ com erro integral de 3, 10%.

Na figura (4.30) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca pelos valores de referência. Na terceira busca os valores iniciais foram E = 400 kPa e $\theta = 20^{\circ}$, sendo obtidos E = 410 kPa e $\theta = 0,05^{\circ}$ com erro integral de 22,9%.



Figura 4.30: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 200 kPa e $\theta = 70^{\circ}$.

A figura (4.31) apresenta os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrado na busca pelos valores de referência.

Na última busca foram utilizados os valores iniciais E = 400 kPa e $\theta = 70^{\circ}$ e o ponto de mínimo encontrado foi E = 475 kPa e $\theta = 46,96^{\circ}$, com o erro integral de 58,1%.

Na figura (4.32) pode-se observar os resultados do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca pelos valores de referência



Figura 4.31: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 400 kPa e $\theta = 20^{\circ}$.



Figura 4.32: Gráfico tensão-deformação com os dados experimentais, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 400 kPa e $\theta = 70^{\circ}$.

A Tabela (4.11) resume os resultados obtidos em cada uma das buscas, ou seja, Módulo de Young, ângulo de atrito, interções e erro integral.

Busca	Young (kPa)	Âng Atrito	#Ch	$\operatorname{Erro}(\%)$
1	150	$14, 42^{\circ}$	1002	9,52
2	134	$85, 24^{\circ}$	1002	3,10
3	410	$0,050^{\circ}$	1002	22,9
4	475	$46,96^{\circ}$	1002	58,1

Tabela 4.11: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

Tabela (4.12) relaciona os erros relativos encontrados para o Módulo de Young e para o ângulo de atrito.

Tabela 4.12: Erros encontrados do Módulo de Young e ângulo de atrito em cada um dos experimentos.

	Erro Relativo		
Busca	Módulo de Young (%) Âng Atrito		
1	34,43	52,00	
2	39,63	184,13	
3	84,68	99,83	
4	113,96	$56,\!53$	

4.2.3.4 Evolução Diferencial

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve E = 227kPa e ângulo de atrito $\theta = 24,76^{\circ}$, com erro integral de 1,01% após 638 iterações, sendo este valor menor do que o estabelecido na fase de ajustes.

Na figura (4.33) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio experimental de referência, do polinômio ajustado e do melhor ajuste encontrados na busca dos valores de referência.

Foi determinado também o valor do erro relativo do Módulo de Young e do



Figura 4.33: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

ângulo de atrito encontrados no processo de busca. Os valores encontrados foram 2,25% e 39,90% para o Módulo de Young e ângulo de atrito, respectivamente.

4.2.4 Ensaio T-Bar

O Ensaio T-Bar foi realizado com uma amostra com 0, 2m de comprimento, 1, 0m de largura e 1, 2m de altura, discretizada com 2.748 elementos discretos com raio médio 0, 0225m, figura (4.34).

A região de busca para todos os experimentos para o ensaio T-Bar tem Módulo de Young variando de 100 a 500 kPa.

Diferentemente do que ocorreu nos outros experimentos, o polinômio de ajuste não foi obtido através de um ensaio de referência, mas sim extraído de (OLI-



Figura 4.34: Amostra antes (vermelho) e depois da realização do experimento.

VEIRA, 2005). Este polinômio representa o perfil médio para a argila da Baía de Guanabara e é dado por

$$Su = -1,2827z + 0,1002 \tag{4.9}$$

em que Su é a resistência ao cisalhamento não-drenada, em kPa, e z é a profundidade, em metros. Na figura (4.35) tem-se o gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído da referência citada.



Figura 4.35: Gráfico Su versus z extraído de (OLIVEIRA, 2005)

Os experimentos a seguir foram realizados visando buscar os valores do Módulo de Young e do ângulo de atrito que melhor representem o polinômio dado em (4.9).

4.2.4.1 Nelder-Mead

Para a busca pelos parâmetros de referência utilizando o algoritmo Nelder-Mead com ensaio T-Bar foram realizadas duas estratégias de busca.

Na primeira busca foram encontrados os valores de E = 400 kPa e $\theta = 15^{\circ}$ com erro integral de 1,42% de novo o lance do erro, após 13 chamadas de função.

Na figura (4.36) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo Nelder-Mead.



Figura 4.36: Gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLIVEIRA, 2005) e do polinômio encontrado.

No segundo experimento foram encontrados os valores E = 400 kPa e $\theta = 90^{\circ}$,

com erro integral de 5,32%, após 6 chamadas de função.

Na figura (4.37) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo Nelder-Mead.



Figura 4.37: Gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLIVEIRA, 2005) e do polinômio encontrado.

A tabela (4.13) mostra o Módulo de Young, o ângulo de atrito, o número de chamadas de função e o erro integral obtidos em cada um dos experimentos.

Busca	Young (kPa)	Âng Atrito	#Ch	Erro (%)
1	400	15°	13	1,42
2	400	90°	6	5,32

Tabela 4.13: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

4.2.4.2 Refinamento Progressivo

Na busca pelos valores de referência o ponto de mínimo encontrado foi E = 406 kPa e $\theta = 68,91^{\circ}$, com erro integral de 8,90%, após 21 chamadas de função.

Na figura (4.38) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo Refinamento Progressivo.



Figura 4.38: Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLI-VEIRA, 2005) e do polinômio encontrado.

4.2.4.3 Simulated Annealing

Na busca pelos valores de referência o experimento numérico realizado com ponto inicial E = 250 kPa e $\theta = 20^{\circ}$ obteve-se como ponto de mínimo E = 131 kPa e $\theta = 10, 57^{\circ}$, com erro integral de 1,62%.

Na figura (4.39) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo Simulated Annealing.



Figura 4.39: Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLI-VEIRA, 2005) e do polinômio encontrado com valor de E = 2, 5e5 e $\theta = 20^{\circ}$.

A busca seguinte teve como valores iniciais E = 250 kPa e $\theta = 70^{\circ}$, sendo obtidos como ponto de mínimo E = 198 kPa e $\theta = 17,54^{\circ}$, com erro integral de 0,79%.

Na figura (4.40) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo Simulated Annealing.

A terceira busca teve como valores iniciais E = 300 kPa e $\theta = 20^{\circ}$ e os valores obtidos para o ponto de mínimo foram E = 467 kPa e $\theta = 13,59^{\circ}$ com erro integral de 1,22%.

Na figura (4.41) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo SA.

Na última busca os valores iniciais considerados foram E = 300 kPa e $\theta = 70^{\circ}$, tendo sido obtidos E = 212 kPa e $\theta = 81, 81^{\circ}$, com erro integral de 22, 2%.



Figura 4.40: Gráfico gráfico Su versus z do polinômio de ajuste extraído de (OLI-VEIRA, 2005) e do polinômio encontrado com valor inicial de E = 250 kPa e $\theta = 70^{\circ}$.



Figura 4.41: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 300 kPa e $\theta = 20^{\circ}$.

Na figura (4.42) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo SA.



Figura 4.42: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste com valor inicial de E = 300 kPa e $\theta = 70^{\circ}$.

A tabela (4.14) mostra o Módulo de Young, o ângulo de atrito, o número de iterações e o erro integral obtidos em cada um dos experimentos nos valores buscados.

Busca	Young (kPa)	Âng Atrito	#Ch	Erro (%)
1	131	$10,57^{\circ}$	1002	1,62
2	198	$17,54^{\circ}$	1002	0,79
3	467	$13, 59^{\circ}$	1002	1,22
4	212	$81, 81^{\circ}$	1002	22,2

Tabela 4.14: Valores encontrados em cada um dos experimentos.

4.2.4.4 Evolução Diferencial

Na busca pelos valores de referência o experimento realizado obteve para Módulo de Young 386 kPa e ângulo de atrito 11,07°, com erro integral de 1,71% após 781 chamadas de função, sendo este valor menor do que o valor estimado na fase de ajustes. Na figura (4.43) tem-se representados no mesmo gráfico as curvas do ensaio referência e do melhor valor encontrado pelo DE.



Figura 4.43: Gráfico tensão-deformação com os dados experimental, do polinômio ajustado e do melhor ajuste.

4.3 Discussões

Nesta seção serão apresentados as discussões acerca dos resultados encontrados.

4.3.1 Ensaio de Tração

Dos algoritmos utilizados para a busca dos parâmetros, o Nelder-Mead foi o que apresentou o melhor desempenho em relação à quantidade de chamadas de função, ou seja, onze no total.

Nos algoritmos Nelder-Mead e Evolução Diferencial os valores encontrados

para o Módulo de Young estão bem próximos ao valor de referência. Neste caso, não há diferença em usar quaisquer desses algoritmos, porém, a escolha pelo ED não seria apropriada tendo em vista a quantidade de iterações realizadas. Vale lembrar que a estimativa da quantidade de interações do ED era de pelo menos 100.000 iterações.

Pode-se observar que o menor erro foi encontrado (0,0000595%) pelo algoritmo Evolução Diferencial. No entanto, isso não significa que ele seja o mais apropriado, pois o NM, alcançou o mínimo com um número menor de iterações, forneceu um erro relativamente pequeno, igual a 1,08%.

Vale salientar que o experimento executado com o Simulated Annealing, considerando 1002 iterações, encontrou um bom resultado para E, com erro de 0,979% em um dos experimentos. Embora tenha um bom resultado, seu uso não se justifica devido ao seu alto custo computacional.

O algoritmo Refinamento Progressivo fez apenas 13 iterações encontrou erro de 0,656%, ou seja, duas a mais que o Nelder-Mead. O desempenho do RP foi muito bom na busca, mesmo em relação ao MN que fez a busca em menos iterações. Veja que o erro encontrado pelo RP foi menor do que o encontrado pelo NM, porém ambos os valores são aceitáveis

4.3.2 Ensaio de Cisalhamento Direto

Dos algoritmos utilizados o NM alcançou o ponto de mínimo com o menor número de iterações. Neste experimento foram encontrados os valores de 3,75 GPa para o Módulo de Young e 54,36° para ângulo de atrito. No terceiro experimento, em que o tamanho do simplex inicial é maior do que o primeiro e segundo experimentos, percebeu-se que houve melhora nos resultados obtidos, apesar do número de iterações ter sido maior do que na busca anterior. Os valores encontrados neste experimento foi 3,94 GPa para Módulo de Young, 34,86° para ângulo de atrito e 1,14% para erro dos coeficientes.

Os erros relativos encontrados nos valores buscados foram de 6,25% para Módulo de Young e 58,08% para ângulo de atrito para o experimento com o menor número de iterações (segundo experimento). Para o terceiro experimento os erros relativos foram 1,50% e 1,34% Módulo de Young e âgnulo de atrito, respectivamente. Observe que realmente os valores encontrados no terceiro experimento melhoraram quando o valor do simplex inicial aumentam.

Os valores encontrados com o Refinamento Progressivo foram: 4,05 GPa para Módulo de Young, 35,86°, erro integral de 1,27% e 25 iterações. Os erros relativos dos parâmetros buscados, $E \in \theta$, foram 1,25% e 4,24%, respectivamente. Estes valores encontrados foram bons, porém não foram melhores que o encontrado no terceiro experimento do Nelder-Mead mesmo se for comparado com o número de iterações.

O experimento realizado com o algoritmo Simulated Annealing não apresentou nenhum valor que merecesse destaque em relação aos valores encontrados com os algoritmos anteriores, mesmo após as 1002 iterações executados.

O experimento executado com o Evolução Diferencial os valores encontrados são considerados bons. O Módulo de Young foi 4,21 GPa, ângulo de atrito 36,51°, com erros relativos 5,25% e 6,13% para $E \in \theta$, respectivamente. Tais valores não foram tão ruins e poderiam melhorar tendo em vista que o algoritmo não executou a quantidade de iterações estimada. Porém, o uso deste algoritmo não é recomendado devido ao alto custo computacional e de tempo gastos neste processamento.

4.3.3 Ensaio de Compressão Uniaxial

Neste caso o algoritmo que realizou o menor número de iterações foi o Nelder-Mead, havendo um empate o segundo e o terceiro experimentos, ambos com 13 iterações. Os valores encontrados para o Módulo de Young foram os mesmos (213 kPa). Para o ângulo de atrito os valores foram 35,63° e 36,52° para os segundo e terceiro experimentos.

Um fato que chamou a atenção em relação ao Nelder-Mead foi que, neste caso, o segundo ensaio obteve um resultado melhor tanto para o Módulo de Young quanto para o ângulo de atrito, com erros relativos de $E \in \theta$ menores do que os encontrados nas outras duas buscas (1,80% e 0,66%, respectivamente).

O algoritmo Refinamento Progressivo não apresentou resultado melhor do que o NM, apesar do relativamente pequeno número de iterações realizadas, ou seja, 25.

O Simulated Annealing, neste caso, não encontrou qualquer valor próximo aos valores de referência. Os valores encontrados com o valor estabelecido de iterações sugere que, mesmo se o algoritmo executasse as mais de 100.000 iterações, ele não chegaria a um valor razoável para os parâmetros. O menor valor de erro relativo do Módulo de Young foi de 34,43% e o menor valor de erro relativo para o ângulo de atrito foi de 52%, sendo valores bastante altos.

O erro integral obtido pelo algoritmo Evolução Diferencial foi de apenas 1,01% e o erro relativo do Módulo de Young foi de 2,25%, ambos valores aceitáveis.

Porém o erro encontrado para o ângulo de atrito foi alto, 39,90%.

4.3.4 Ensaio T-Bar

Neste conjunto de experimentos o algoritmo que conseguiu o menor número de iterações foi, novamente, o Nelder-Mead. Foram feitas apenas 6 iterações deste algoritmo no segundo experimento para se chegar a convergência. O valor encontrado para Módulo de Young foi o mesmo nos dois conjuntos de experimentos.

Os valores encontrados para o ângulo de atrito no primeiro e segundo experimentos foram 15° e 90°, respectivamente. Tais valores chamam a atenção pois, se os valores para o E foram os mesmos, era esperado um resultado similar para θ .

Os erros encontrados no primeiro e segundo experimentos foram, respectivamente, 1,41% e 5,32%. No primeiro experimento os valores encontrados para os coeficientes do polinômio que representam o Su foram -1,2564 para o coeficiente de z e 0,0947 para o termo independente do polinômio e erro relativo dos coeficientes de 0,0436%. No segundo experimento, os coeficientes encontrados foram -1,1726 para o coeficiente de z e 0,057 para o termo independente e erro relativo 0,8450%.

Vê-se que os valores ficaram bem próximos aos valores extraídos de (OLI-VEIRA, 2005), mesmo com os valores de ângulo de atrito não tão próximos.

O valor encontrado para o Módulo de Young (406 kPa) no algoritmo Refinamento Progressivo foi bem parecido com o valor encontrado pelo Nelder-Mead. Já o ângulo de atrito encontrado (68,91°) foi bem diferente dos valores encontrados nos dois experimentos realizados com o NM (15° e 90°). O valor do erro da função encontrado foi de 8,90%, bem superior aos valores encontrados pelo Nelder-Mead (1, 41% e 5, 32%). Os coeficientes de Su encontrados neste experimento foram - 1,4753 para o coeficiente de z e 0,1946 para o termo independente. O algoritmo RP fez 25 iterações, enquanto que o Nelder-Mead fez fez 13 e 6 iterações no primeiro e no segundo experimentos, respectivamente.

Em três experimentos realizados com o Simulated Annealing foram encontrados valores pequenos para o erro da função objetivo 1,62%, 0,79% e 1,22%. No entanto, os valores encontrados para Módulo de Young foram todos diferentes e distantes um do outro e iguais a 131, 198 e 467 kPa. Comparando estes valores com os valores encontrados nos experimentos anteriores, Nelder-Mead e Refinamento Progressivo, observa-se que são valores muito díspares.

A busca realizada com o Simulated Annealing encontrou um valor bem diferente dos outros três experimentos: Módulo de Young 212, kPa, ângulo de atrito 81,81° e erro integral de 22,2%. Vale salientar que tais valores foram muito diferentes de todos os outros encontrados nos outros experimentos realizados. Talvez o algoritmo tenha encontrado um valor mínimo local.

O algoritmo Evolução Diferencial obteve um erro da função objetivo pequeno (1,71%) e valor de Módulo de Young 386 kPa, diferente dos outros encontrados até então.

Dentre todos os valores encontrados para os coeficientes, o de menor erro foi aquele obtido no segundo experimento do algoritmo Simulated Annealing, ou seja, 0,79%. Porém, vale lembrar que este algoritmo executou 1002 iterações para encontrar esse valor, enquanto que o menor erro encontrado com o Nelder-Mead (1,42%) foi obtido após apenas 13 iterações, ou seja, um custo computacional muito menor para encontrar um resultado equivalente. Outro ponto que chamou atenção foi que todos os experimentos realizados com o T-Bar encontraram bons resultados para o erro da função objetivo, apesar de os valores do Módulo de Young e do ângulo de atrito não convergirem para um mesmo valor.

A maior dificuldade em encontrar os valores fornecidos na referência para o teste T-Bar pode ser explicado pelo fato de não haver, até o momento, uma forma adequada de modelagem de solos moles, como a argila em questão, pelo Método dos Elementos Discretos.

5 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foram aplicados quatro algoritmos de otimização sem derivadas na parametrização de simulações de ensaios de rochas e solos utilizando o Método dos Elementos Discretos.

Os métodos estudados foram Nelder-Mead, Evolução Diferencial e Simulated Annealing, além de ter sido implementado um método derivado do algoritmo quadtree e no método da bisseção, chamado de Refinamento Progressivo. Cada um dos métodos foi aplicado na busca de parâmetros macroscópicos de quatro simulações numéricas: tração, compressão uniaxial, cisalhamento direto e teste T-bar.

Foi realizada uma comparação entre esses quatro métodos, aplicados a cada uma das simulações, em relação ao número de iterações, aqui definida como sendo a quantidade de vezes que a função objetivo é executada, e ao erro obtido com os valores calculados quando comparados com os valores de referência.

Verificou-se o que havia sido afirmado, sem comprovação, em referências bibliográficas, ou seja, o método Nelder-Mead é o mais eficiente por realizar menos avaliações da função objetivo do que os outros algoritmos, apesar do erro obtido não ser, necessariamente, o menor.

O método Refinamento Progressivo também mostrou-se viável, apresentando resultados satisfatórios e uma quantidade relativamente pequena de chamadas da função objetivo. Já os métodos Evolução Diferencial e Simulated Annealing são de aplicação inviável, podendo levar dias até encontrar o ponto de mínimo, devido ao caráter fortemente aleatório da busca desses métodos. A determinação do ângulo de atrito não foi conclusiva em nenhum dos métodos estudados, pois foram encontrados resultados satisfatórios para o erro da função objetivo com diferentes valores de ângulo de atrito. Isso pode indicar presença de mínimos locais.

Não houve um algoritmo que foi melhor na busca de todos os parâmetros em todos os experimentos. Por exemplo, o menor erro da função objetivo na busca pelo Módulo de Young foi encontrado no ensaio de tração utilizando o algoritmo Evolução Diferencial. O melhor ângulo de atrito encontrado foi o encontrado no ensaio de compressão uniaxial com o algoritmo Nelder-Mead.

Como trabalhos futuros, sugere-se:

- estudo da real importância do ângulo de atrito em cada simulação realizada;
- a realização da busca de parâmetros para outros ensaios, além dos estudados aqui;
- paralelização do código de modo a diminuir o tempo de busca;
- estudo da viabilidade da aplicação dos métodos Nelder-Mead e Refinamento Progressivo na busca simultânea de uma quantidade maior de parâmetros.
- determinação dos parâmetros de solos moles para modelagem e simulação de problemas utilizando o Método dos Elementos Discretos.

REFERÊNCIAS

ASAF, Z.; RUBINSTEIN, D.; SHMULEVIC, I. Determination of Discrete Element Model Parameter Required for Soil Tillage. **Soil and Tillage Research**, Israel, n. 97, p. 227–242, 2007.

BAZZO, W. A.; PEREIRA, L. Introdução à engenharia: conceitos, ferramentas e comportamentos. Florianópolis: Editora UFSC, 2006.

BOON, C. W.; HOULSBY, G. T.; UTILI, S. A new contact detection algorithm for three-dimensional non-spherical particles. **Powder Technology**, [S.l.], n. 248, p. 94–102, 2012.

BRANDÃO, M. A. L. Evolução Diferencial Melhorada Implementada em Processamento Paralelo. 2014. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal de Uberlândia, 2014.

CALLISTER, W. D. Material Science and Engineering: an introduction. 7. ed. Utah: John Wiley & Sons, Inc., 2007. 975 p.

CARVALHO, L. S. Simulação Numérica de Solos Moles Através Ensaio de T-Bar Utilizando o Método dos Elementos Discretos para Aplicação em Infraestrutura de Transportes. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Transportes) — Instituto Militar de Engenharia, 2012.

CERNY, V. Thermodynamical Approach to the Traveling Salesman Problem: an efficient simulation algorithm. **Operational Research Quarterly**, [S.l.], n. 23, p. 511–518, 1972.

CHENG, S. L.; HWANG, C. Optimal Approximation of Linear Systems by a Differential Evolution Algorithm. **IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics - Part A:Systems and Humans**, [S.l.], v. 31, n. 6, p. 698–707, 2001. CINTRA, T. D.; JÚNIOR, H. C. Aplicação do Método dos Elementos Discretos no Estudo do Comportamento Mecânico de Dutos Enterrados. XIII Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica, [S.l.], 2006.

CLEARY, P. et al. CBubbling and frothing liquids. **ACM Transactions on Graphics**, [S.l.], v. 26, n. 26, 2007.

CORREIA, A. I. A. **Métodos de Pesquisa Directa**: optimização não linear. 2010. Tese (Doutorado em Matemática) — Universidade de Trás-Os-Montes e Alto Douro, 2010.

CUNDALL, P. A computer model for simulating progressive, large scale movements in blocky rock systems. **PROC. SYMP. INT. SOC. ROCK MECH.**, [S.l.], p. 129–136, 1971.

CUNDALL P.; STRACK, O. A discrete numerical model for granular assemblies. Géothecnique, [S.l.], p. 47–65, 1979.

DONZÉ, F. V. et al. Numerical study of compressive behavior of concrete at high strain rates. J.Eng. Mech., Am. Soc. Civil Eng., [S.l.], n. 125, p. 1154–1163, 1999.

DONZÉ, F. V.; MANGIER, S. A. Spherical Discrete Element Code Spherical Discrete Element Code SDEC V. 2.00. [S.l.]: GEOTOP, Université du Québec à Montréal, 1997.

DONZÉ, F. V.; RICHEFEU, V.; MAGNIER, S. Advances in Discrete Element Method Applied to Soil, Rock and Concrete Mechanics. **Eletronic Journal of Geotechnical Engineering**, [S.l.], v. 13, p. 45, 2008.

DUARTE, L. S. **Simulação de Grãos em GPU**. 2009. Dissertação (Mestrado em Informática) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2009.

DURIEZ, J.; DARVE, F.; DONZÉ, F. A discrete modeling-based constitutive relation for infilled rock joints. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, [S.l.], v. 48, p. 458–468, 2011.

DURIEZ, J.; WAN, R. Contact angle mechanical influence in wet granular soils. Acta Geotechinica, Pará, p. 17, 2016.

EHRHARDT, M. A. D.; FERREIRA, D. G. Sobre métodos sem derivadas para a minimização de funções com restrições lineares. XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, [S.l.], v. 2012, p. 1–17, 2012.

FAVIER, L. et al. Validation of a DEM granular flow model aimed at forecasting snow avalanche pressure. **AIP Conference Proceedings**, [S.l.], p. 1145, 2009.

GENG, Y. Discrete Element Modelling of Cavity Expansion in Granular Materials. 2010. Tese (Doutorado em Filosofia) — University of Nottingham, 2010.

GONÇALVES, A. M. S. O Problema de Min-Max-Min com restrições pelo Método de Nelder-Mead. 2013. Tese (Doutorado em Ciências em Engenharia de Sistemas e Computação) — COPPE, UFRJ, 2013.

HAGENMULLER, P.; G., C.; NAAIM, M. Microstructure-based modeling of snow mechanics: a discrete element approach. **The Cryosphere**, [S.l.], n. 9, p. 1969–1982, 2015.

HALLAL, R. S. Características de Depósitos de Argilas Moles no Estado do Rio Grande do Sul. 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2003.

INDRARATNA, B. et al. Coupled discrete element–finite difference method for analysing the load-deformation behaviour of a single stone column in soft soil. **Computers and Geotechnics**, [S.l.], v. 65, p. 267–278, 2015.

ITASCA. Particle Flow Code in 2 Dimensions (Online Manual Table of Contents, Version 3.1). [S.l.]: Itasca Consulting Group, 2004.

JANNUZZI, G. M. F. Caracterização do depósito de solo mole de Sarapuí II através de ensaios de campo. 2009. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil)
— Instituto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa em Engenharia - COPPE, UFRJ, 2009.

KIRKPATRICK, S.; GELATT, J. C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by Simulated Annealing. Science, [S.I.], n. 220, p. 671–680, 1983.

KÖNIG, D.; JESSBERGER, H. Waste Mechanics. Proc., 14th International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering, Special Report of the TC5 Technical Committee on Waste Mechanics, Germany, v. 2000, n. 64, p. 35–76, 1997.

MACEDO, E. O. Investigação da resistência não drenada in situ através de ensaios de penetração de cilindro. 2004. Tese (Doutorado em Engenharia Civil)
— COPPE, UFRJ, 2004.

MARTIN, S. et al. Simulation of sintering using a Non Smooth Discrete Element Method. Application to the study of rearrangement. **Computational Materials** Science, [S.l.], n. 84, p. 31–39, 2014.

MELLADO, C. J. Aplicación del método de los elementos discretos a problemas de desgaste. 2005. Dissertação (Mestrado em Enginyeria de Camins, Canals i Ports) — Universitát Politécnica de Catalunya BarcelonaTech, 2005.

MESQUITA, A. et al. Uso do Métodos dos Elementos Discretos em Manuseio de Minérios e sua Contribuição para a Pós-Graduação e Graduação no Curso de Engenharia Mecânica da UFPA. Anais: Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia - COBENGE., Pará, p. 8, 2012. METROPOLIS, W. et al. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. Journal of Chemical Physics, [S.l.], n. 21, p. 1087–1092, 1953.

MUNJIZA, A. The Combined Finite-Discrete Element Method. London: John Wiley Sons Ltd, 2004.

NELDER J. A.; MEAD, D. G. A simplex method for function minimization. Computer Journal 7, [S.l.], v. 2012, 1965.

NEVES, C. E. V. Comportamento de Materiais Granulares Usando o Método dos Elementos Discretos. 2009. Dissertação (Mestrado em Geotecnia) — Universidade de Brasília, 2009.

OLIVEIRA, G. T. S. Estudo e aplicações da evolução diferencial. 2006. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal de Uberlândia, 2006.

OLIVEIRA, J. R. M. S. Modelagem em Centrífuga de um Problema de Interação Solo-Estrutura. 2005. Tese (Doutorado em Ciências em Engenharia de Sistemas e Computação) — COPPE, UFRJ, 2005.

PINHO, A. B. Caracterização Geotécnica de Maciços Rochosos de Baixa Resistência: o flysch baixo alentejo. 2003. Dissertação (Mestrado em Geologia) — Universidade de Évora, 2003.

PINTO, C. N. Uso de Elementos Discretos na Modelagem Numérica da Perfuração de Poços de Petróleo por Brocas PDC. 2005. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2005.

PINTO, C. S. Curso Básico de Mecânica dos Solos em 16 aulas. São Paulo: Oficina do Texto, 2006. 363 p. PITANGA, H. N. Influência da Velocidade de Carregamento e do Tempo de Inundação na Resistência ao Cisalhamento de Solos Estruturados. 2002. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) — Universidade Federal de Viçosa, 2002.

PLASSIARD, J. P.; BELHEINE, N.; DONZÉ, F. V. A Spherical Discrete Element Model: calibration procedure and incremental response. **Granular Matter**, Berlin, n. 11, p. 293–306, 2009.

PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. Computational Granular Dynamics - Models and Algorithms. **Springer**, Berlim, 2005.

RANDOLPH, M. F.; HOULSBY, G. T. The Limiting Pressure on a Circular Pile LoadedLaterally in Cohesive Soil. **Géotechnique**, London, v. 34, p. 613–624, 1984.

RONALD, R. G. Aspéctos teóricos sobre um sistema termoelástico dissipativo não linear. 2012. Dissertação (Mestrado em Matemática) — Programa de Pós-Graduação em Matemática, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade Federal Fluminense, 2012.

SABATUCCI, T. et al. Modelagem de explosões acima do nível do solo usando o método dos elementos discretos. **34th Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering**, Pirinópolis, GO, 2013.

SAMET, H. The Design and Analysis of Spatial Data Structures. Utah: Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 1990. 493 p.

SARAMAGO, S. Métodos de Otimização Randômica: algoritmos genéticos e simulated annealing. **Notas em Matemática Aplicada**, SP, v. 6, n. 4, 2003.

SMILAUER, V.; CHAREYRE, B. Yade DEM Formulation. [S.l.]: V. Smilauer, ed, 2010.

SOUZA, S. A. Ensaios Mecânicos de Materiais Metálicos. Fundamentos Teóricos e Práticos. 5. ed. São Paulo: Editora Edgard Blücher, 1982.

SPENDLEY, W.; HEXT, F.; HIMSWORTH, F. Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation. **Technometrics**, [S.l.], p. 441–461, 1962.

STEWART, D. P.; RANDOLPH, M. F. A new site investigation tool for the centrifuge. **International Conference on Centrifuge Modeling**, Colorado, p. 531– 538, 1991.

STEWART, D. P.; RANDOLPH, M. F. T-bar Penetration Testing in Soft Clay. Journal of Geotechnical Engineering Division, [S.l.], v. 120, n. 12, p. 2230– 2235, 1994.

STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution: a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces. **Technical Report TR-95-012**, Berkley, CA, USA, 1995.

TEIXEIRA, M. G. et al. Microfracturing during primary migration in shales. **Tec-tonophysics**, Amsterdam, v. 694, n. 4, p. 268–279, 2017.

TEIXEIRA, M. G. et al. Microfracturing during primary migration in shales. **Tec-**tonophysics, [S.l.], n. 694, p. 268–279, 2017.

VARGAS, M. Introdução à Mecânica dos Solos. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, Editora da Universidade de São Paulo, 1977.

VELLOSO, R. Q. Simulações Numérica de Problemas de Acoplamento Fluidomecânico em Meios Porosos Utilizando o Método dos Elementos Discretos. 2010. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2010. XU, J. et al. Quasi-real-time simulation of rotating drum using discrete element method with parallel GPU computing. **Particuology**, Colorado, v. 9, n. 4, p. 446–450, 2011.

YAO, M.; ANANDARAJAH, A. Three-Dimensional Discrete Element Method of Analysis of Clays. J. Engineering Mechanics, [S.l.], 2003.