

Aldemon Lage Bonifácio

**Estratégia computacional para avaliação de propriedades mecânicas de
concreto de agregado leve**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Modelagem Computacional.

Orientadora: Prof.^a D.Sc. Michèle Cristina Resende Farage

Coorientador: Prof. D.Sc. Flávio de Souza Barbosa

Coorientador: Prof. D.Sc. Ciro de Barros Barbosa

Juiz de Fora

2017

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Bonifácio, Aldemon Lage.

Estratégia computacional para avaliação de propriedades mecânicas de concreto de agregado leve / Aldemon Lage Bonifácio. - 2017.

152 p. : il.

Orientadora: Michèle Cristina Resende Farage

Coorientadores: Flávio de Souza Barbosa, Ciro de Barros Barbosa

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2017.

1. Modelagem do concreto. 2. Mecânica dos Materiais. 3. Análise via MEF. 4. Rede neural artificial. 5. Workflow científico. I. Farage, Michèle Cristina Resende, orient. II. Barbosa, Flávio de Souza, coorient. III. Barbosa, Ciro de Barros, coorient. IV. Título.

Aldemon Lage Bonifácio

**Estratégia computacional para avaliação de propriedades mecânicas de
concreto de agregado leve**

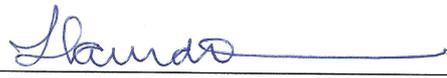
Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Modelagem Computacional.

Aprovada em 16 de Março de 2017.

BANCA EXAMINADORA



Prof.^a D.Sc. Michèle Cristina Resende Farage - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



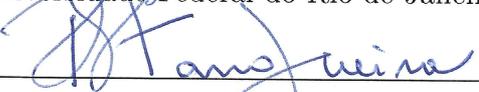
Prof. D.Sc. Flávio de Souza Barbosa - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



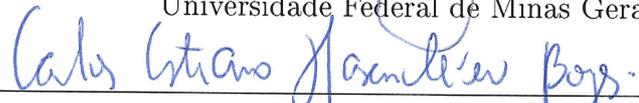
Prof. D.Sc. Ciro de Barros Barbosa - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



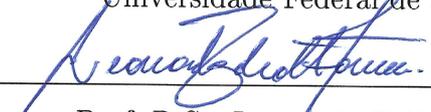
Prof. D.Sc. Marcos Martinez Silvano
Universidade Federal do Rio de Janeiro



Prof. D.Sc. Roque Luiz da Silva Pitangueira
Universidade Federal de Minas Gerais



Prof. D.Sc. Carlos Cristiano Hasenclever Borges
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. D.Sc. Leonardo Goliatt da Fonseca
Universidade Federal de Juiz de Fora

*Dedico este trabalho aos meus
pais Sebastião e Eva,
e aos meus irmãos Raillander,
Sirlaine e Vilton.
E especialmente à minha esposa
Sandra e aos meus filhos
Eybraian e Aryanne.*

AGRADECIMENTOS

À minha esposa Sandra e aos meus filhos Eybraian e Aryanne, pela paciência e pelo apoio durante esse período de estudos.

Aos meus pais Sebastião e Eva, e aos meus irmãos Raillander, Sirlaine e Vilton que sempre me apoiaram.

Aos meus orientadores Michèle, Flávio e Ciro, pela ajuda e ensinamentos durante toda essa etapa em busca do conhecimento.

Aos colegas Rafaela, Rafaelle, Júlia, Lucas, Waldir e Marcelo, por terem contribuído e me ensinado diversos conceitos da engenharia civil.

Aos colegas Fabrízio e Bruno, por terem compartilhado seus conhecimentos e momentos de descontração.

Aos meus colegas da Pós-Graduação em Modelagem Computacional pela oportunidade de tê-los conhecido e convivido em momentos tão diversos.

Ao professor Leonardo Goliatt, pela prestatividade ao contribuir com aperfeiçoamento da minha pesquisa.

Aos professores, pelos conhecimentos passados e dedicação na sua tarefa de formar mestres e doutores.

Agradeço a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) e a Universidade Federal de Juiz de Fora pela concessão de bolsa durante o período de realização deste doutorado e auxílio financeiro para participação de congressos. Também gostaria de agradecer à FAPEMIG (Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Minas Gerais) e ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo apoio financeiro.

Enfim, agradeço a todos que de forma direta ou indireta me apoiaram, auxiliaram e contribuíram não só na realização deste trabalho, mas em todas as atividades realizadas durante o doutorado, meus sinceros agradecimentos.

Muito obrigado a todos!

*A sabedoria da vida não está em
fazer aquilo que se gosta, mas
gostar daquilo que se faz.*

Leonardo da Vinci

RESUMO

O concreto feito com agregados leves, ou concreto leve estrutural, é considerado um material de construção versátil, bastante usado em todo o mundo, em diversas áreas da construção civil, tais como, edificações pré-fabricadas, plataformas marítimas, pontes, entre outros. Porém, a modelagem das propriedades mecânicas deste tipo de concreto, tais como o módulo de elasticidade e a resistência a compressão, é complexa devido, principalmente, à heterogeneidade intrínseca aos componentes do material.

Um modelo de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve pode ajudar a diminuir o tempo e o custo de projetos ao prover dados essenciais para os cálculos estruturais. Para esse fim, este trabalho visa desenvolver uma estratégia computacional para a avaliação de propriedades mecânicas do concreto de agregado leve, por meio da combinação da modelagem computacional do concreto via MEF (Método de Elementos Finitos), do método de inteligência computacional via SVR (Máquina de vetores suporte com regressão, do inglês *Support Vector Regression*) e via RNA (Redes Neurais Artificiais). Além disso, com base na abordagem de *workflow* científico e *many-task computing*, uma ferramenta computacional foi desenvolvida com o propósito de facilitar e automatizar a execução dos experimentos científicos numéricos de predição das propriedades mecânicas.

Palavras-chave: Modelagem do concreto. Sistemas distribuídos. Mecânica dos Materiais. Análise via MEF. Máquina de vetores suporte com regressão. Rede neural artificial. Workflow científico.

ABSTRACT

Concrete made from lightweight aggregates, or lightweight structural concrete, is considered a versatile construction material, widely used throughout the world, in many areas of civil construction, such as prefabricated buildings, offshore platforms, bridges, among others. However, the modeling of the mechanical properties of this type of concrete, such as the modulus of elasticity and the compressive strength, is complex due mainly to the intrinsic heterogeneity of the components of the material.

A predictive model of the mechanical properties of lightweight aggregate concrete can help reduce project time and cost by providing essential data for structural calculations. To this end, this work aims to develop a computational strategy for the evaluation of mechanical properties of lightweight concrete by combining the concrete computational modeling via Finite Element Method, the computational intelligence method via Support Vector Regression, and via Artificial Neural Networks. In addition, based on the approaches scientific workflow and many-task computing, a computational tool will be developed with the purpose of facilitating and automating the execution of the numerical scientific experiments of prediction of the mechanical properties.

Keywords: Concrete Modeling. Distributed Systems. Mechanics of Materials. FEM Analysis. Support Vector Regression. Artificial Neural Network. Scientific Workflow.

SUMÁRIO

1	Introdução	18
2	Conceitos fundamentais	24
2.1	Tensões e deformações	24
2.2	Relações entre tensões e deformações	26
2.2.1	<i>Lei de Hooke</i>	26
2.2.2	<i>Comportamento não linear</i>	27
2.3	Plasticidade computacional	28
2.3.1	<i>Plasticidade unidimensional</i>	29
2.3.2	<i>Plasticidade perfeita</i>	30
2.3.3	<i>Endurecimento plástico isotrópico ou linear</i>	34
2.3.4	<i>Mapeamento de retorno para modelo com endurecimento isotrópico</i>	38
2.4	Critério de escoamento de Drucker-Prager	40
2.5	Rede Neural Artificial (RNA)	41
2.6	Máquina de vetores suporte (SVM - <i>Support Vector Machine</i>)	46
2.7	Métricas para comparar modelos	54
2.8	Técnica de validação cruzada k-fold	56
2.9	Workflow científico	57
2.10	Many-task computing	60
3	SWADE - Ferramenta computacional para automação de experimentos científicos	64
3.1	Arquitetura do SWADE	66
3.2	Descrição geral do exemplo preliminar para a aplicação do SWADE	69
3.3	Automação dos experimentos numéricos empregada para ajuste de parâmetros do exemplo preliminar	73
3.4	Avaliação de desempenho do SWADE	80
4	Programa experimental usado como referência	81

5	Predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve via Método dos Elementos Finitos	87
5.1	Algoritmo para definição da geometria das malhas de elementos finitos	87
5.2	Modelo bidimensional	91
5.3	Modelo tridimensional	99
5.4	Avaliação dos modelos bidimensional e tridimensional	104
5.5	Automação de experimentos empregada em simulações numéricas via MEF	106
5.6	Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de predição via MEF	112
6	Predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve via Inteligência Computacional.....	116
6.1	Avaliação de modelos de regressão para predição das propriedades mecânicas	117
6.2	Predição das propriedades mecânicas via RNA e SVR	120
6.3	Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de predição via RNA e SVR	123
7	Predição das propriedades mecânicas com os métodos combinados....	125
7.1	Síntese dos resultados obtidos via MEF, RNA e SVR	125
7.2	Discussão dos resultados obtidos pelos modelos combinados	130
8	Conclusões.....	135
	REFERÊNCIAS	140

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1.1	One Shell Plaza Tower, Houston, USA.	19
1.2	Barclays Bank Head Office, London, UK	19
1.3	Exemplo de agregado leve - argila expandida (foto: domínio público).	19
1.4	Sessão longitudinal de um corpo de prova de concreto de agregado leve	19
2.1	Tensões nos três planos ortogonais.	24
2.2	Curva tensão deformação.	27
2.3	Curva tensão-deformação típica das barras de aço. Trecho 0-1: fase elástica; trecho 1-2: patamar de escoamento e encruamento; trecho 2-3: fase de ruptura.	28
2.4	Modelo de mola linear elástico e curva tensão-deformação correspondente.	29
2.5	Modelo atrito perfeitamente plástico e curva tensão[Pleaseinsertintopreamble]deformação correspondente.	30
2.6	Modelo mola/atrito de plasticidade perfeita e curva tensão-deformação correspondente.	30
2.7	Modelo mola/atrito com endurecimento isotrópico e curva tensão-deformação correspondente.	30
2.8	Modelo elastoplástico “rate independent” composto por uma mola de constante elástica E e um dispositivo de atrito com constante característica σ_Y	31
2.9	Curva tensão-deformação de um modelo de comportamento plástico perfeito.	35
2.10	a) Plasticidade Perfeita e b) Plasticidade com endurecimento isotrópico.	35
2.11	Estrutura que ilustra o funcionamento de um neurônio artificial.	42
2.12	Estrutura que ilustra as camadas da rede neural artificial.	45
2.13	Classificação perfeita pelo hiperplano ótimo do SVM de margens rígidas.	47
2.14	Classificação imperfeita pelo hiperplano ótimo do SVM de margens flexíveis.	47
2.15	Classificação perfeita pelo hiperplano ótimo do SVM com <i>kernel</i> não-linear.	48
2.16	A função de perda com margem flexível com SVR linear.	51
2.17	Regressão com <i>kernel</i> não linear com função de perda ε -insensível - os círculos em preto são os vetores suportes.	53

2.18	Exemplo do esquema de particionamento e execução de validação cruzada por meio da técnica <i>k-fold</i> , com $k = 4$	56
2.19	Interface gráfica do sistema de <i>workflow</i> científico Taverna.	59
2.20	Exemplo de um modelo de <i>workflow</i> científico criado no sistema de <i>workflow</i> científico Kepler.	59
2.21	Tipos de problemas no que diz respeito ao tamanho dos dados e ao número de tarefas, onde MTC é computação de muitas tarefas (<i>many-task computing</i>), HTC é computação de alto rendimento (<i>high throughput computing</i>) e HPC é computação de alto desempenho (<i>high performance computing</i>).	62
3.1	Arquitetura de rede do sistema SWADE, que ilustra a rede de comunicação dos nós de processamento e interação com o usuário. Os papéis que cada nó também são descritos: interação com o usuário, interpretador de <i>workflow</i> científico e escalador de tarefas.	66
3.2	Interface do usuário para iteração com o sistema SWADE contendo um código exemplo na linguagem LUA.	69
3.3	Amostras de bicamadas feitas de concreto e rocha.	70
3.4	Geometria das amostras e localização dos termopares.	71
3.5	CC-600 depois do aquecimento.	71
3.6	CC-750 depois do aquecimento.	71
3.7	Análise de sensibilidade dos dados de entrada que mais contribuem para a variabilidade da variável de saída no modelo de dano mecânico de Marzars.	75
3.8	Algoritmo desenvolvido para analisar o ajuste de parâmetros na primeira abordagem via progressão aritmética.	75
3.9	Algoritmo desenvolvido para analisar o ajuste de parâmetros na segunda abordagem.	77
3.10	Valores do RMSE obtidos para os 6624 conjuntos de parâmetros simulados na primeira estratégia.	78
3.11	Valores do RMSE obtidos para os 294 conjuntos de parâmetros simulados na segunda estratégia.	79
3.12	Curvas de dano comparando os modelos numéricos em cada estratégia (sem automação, primeira estratégia e segunda estratégia) a dados experimentais.	79

4.1	Seção do agregado leve do tipo 4/10 430 A.	82
4.2	Seção do agregado leve do tipo 4/8 750 S.	82
5.1	Ilustração do resultado de alguns passos na geração da geometria bidimensional; contendo 25,0% de agregado do tipo 0/4 650A e distribuição granulométrica apresentada na Tabela 4.4.	89
5.2	Ilustra a verificação do posicionamento dos agregados.	89
5.3	Exemplo de 1/4 da seção longitudinal de corpos de provas bidimensionais para as cinco diferentes curvas granulométricas (Tabela 4.4) contendo 12,5% de agregados.	90
5.4	Exemplo de 1/8 da geometria de um corpo de prova tridimensional contendo 45,0% de agregados do tipo 4/10 550A. Cada figura apresenta um ângulo diferente da mesma geometria criada.	91
5.5	Análise de convergência do modelo bidimensional: a curva representa a variação do módulo de elasticidade final para nove malhas diferentes. . . .	92
5.6	Representação numérica de uma amostra de concreto de agregado leve: (a) geometria do módulo numérico; (b) seção longitudinal AA' mostrando a matriz de concreto em branco e os agregados em preto; (c) 1/4 da seção utilizada nas simulações.	93
5.7	Malha de Elementos Finitos típica, com o agregado em verde e a argamassa em preto.	93
5.8	Representação da solicitação, consistindo de um deslocamento imposto, Δ , e condições de contorno do modelo Elastoplástico Drucker-Prager.	94
5.9	Evolução da imposição de deslocamento ao corpo de prova.	94
5.10	Gráfico tensão-deformação para um corpo de prova homogêneo composto somente de argamassa (M8) no modelo Drucker-Prager Perfeito. Ver Tabela 4.3	95
5.11	Gráfico tensão-deformação para um corpo de prova homogêneo composto somente de agregado (4/10 550A) no modelo Drucker-Prager Perfeito. Ver Tabela 4.3	96
5.12	Evolução dos níveis de tensões referentes às deformações. Cada material está normalizado de acordo com seus respectivos limites de escoamento.	97

5.13	Curva tensão-deformação para o corpo de prova bidimensional contendo 12,5% de agregado leve do tipo 4/10 550A e argamassa M8 no modelo Drucker-Prager Perfeito (após a deformação 3,0‰, a tensão se mantém constante).	98
5.14	Representação numérica de uma amostra de concreto de agregado leve: (a) geometria do módulo numérico que mostra o concreto e o agregado em cinza; (b) modelo geométrico empregado nas simulações numéricas, que representa 1/8 do corpo de prova cilíndrico; (c) típica malha de Elementos Finitos gerada no Cast3M com elementos de 6 vértices em forma de cunha.	100
5.15	Análise de convergência do modelo tridimensional: a curva representa a variação do módulo de elasticidade final para nove malhas diferentes. . . .	101
5.16	Curva tensão-deformação para o corpo de prova tridimensional contendo 12,5% de agregado leve do tipo 4/10 550A e argamassa M8 no modelo Drucker-Prager Perfeito (após a deformação 3,0‰, a tensão se mantém constante).	102
5.17	Distribuição de resistência à compressão (a e b) e de resistência à tração (c e d), para elementos finitos modelando agregados (a e c) e argamassa (b e d). A escala representa valores normalizados com os limites de resistência à compressão e tração.	103
5.18	Curva tensão-deformação dos materiais envolvidos no modelo 2D: argamassa pura em vermelho (M8); agregado puro em azul (4/10 550A); e a mistura destes (com 12,5% de agregado), formando o corpo de prova, em verde. . .	105
5.19	Curva tensão-deformação dos materiais envolvidos no modelo 3D: argamassa pura em vermelho (M8); agregado puro em azul (4/10 550A); e a mistura destes (com 12,5% de agregado), formando o corpo de prova, em verde. . .	106
5.20	Descrição dos passos dos <i>workflows</i> científicos usados para executar todas as simulações numéricas.	108
5.21	Diagrama que descreve os passos necessários para execução dos <i>workflows</i> científicos empregados nessa etapa do estudo.	108
5.22	Ocupação dos nós do SWADE em cada máquina na rede para simulação numérica tridimensional do primeiro experimento com 30 amostras sintéticas. A mudança de cor representa apenas uma tarefa diferente ocupando a máquina.	109

5.23	Ocupação dos nós do SWADE em cada máquina na rede para simulação numérica bidimensional do terceiro experimento com 180 amostras sintéticas. A mudança de cor representa apenas uma tarefa diferente ocupando a máquina.	110
6.1	Esquema da arquitetura da RNA da resistência à compressão com oito neurônios na camada oculta.	120
6.2	Valores preditos pelo método SVR, do melhor <i>fold</i> , comparados com os valores observados em laboratório.	123
7.1	Gráfico boxplot gerado a partir dos dados experimentais das 60 amostras de concreto do grupo de avaliação e os respectivos dados preditos pelos métodos MEF, SVR e RNA da resistência à compressão.	128
7.2	Gráfico boxplot gerado a partir dos dados experimentais das 60 amostras de concreto do grupo de avaliação e os respectivos dados preditos pelos métodos MEF, SVR e RNA do módulo de elasticidade.	129
7.3	Gráfico da combinação de métodos de predição da resistência à compressão (f_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação. O melhor resultado de um método individual foi a RNA, que é destacado na linha verde.	133
7.4	Gráfico da combinação de métodos de predição do módulo de elasticidade (E_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação. O melhor resultado de um método individual foi o SVR, que é destacado na linha verde.	133

LISTA DE TABELAS

4.1	Propriedades das argamassas.	82
4.2	Propriedades dos agregados leves de acordo com a argamassa e o volume relativo.	83
4.3	Propriedades dos materiais usados como referência para validação dos trinta modelos sintéticos. Os materiais foram argamassa do tipo M8 e agregado do tipo 4/10 550A.	84
4.4	Distribuição Granulométrica para cada tipo de agregado.	84
4.5	Dados de entrada e saída dos compostos de concreto de agregado leve.	85
4.6	Dados da composição das 180 formulações diferentes do concreto.	86
5.1	Resultado numérico do modelo bidimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho.	98
5.2	Resultado dos erros de predição das propriedades mecânicas pelo modelo bidimensional agrupados pelo volume relativo dos agregados.	99
5.3	Resultado numérico do modelo tridimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho.	101
5.4	Resumo dos tempos necessários para execução dos experimentos numéricos sequencialmente e via SWADE.	111
6.1	Resultado das técnicas de aprendizado supervisionado para as predições da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) pelos métodos controles.	118
6.2	Resumo com o MAPE das predições obtidas a partir da execução de uma RNA com a técnica <i>10-fold</i> , executada trinta vezes.	119
6.3	Resumo das predições da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) pelos métodos RNA e SVR após 100 execuções da técnica <i>k-fold</i>	121

7.1	Comparação dos erros dos modelos bidimensional e tridimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado.	125
7.2	Resultado geral dos erros de predição das propriedades mecânicas pelos métodos MEF, SVR e RNA dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação.	126
7.3	Resultado dos erros de predição das propriedades mecânicas pelos métodos MEF, SVR e RNA dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação desses métodos agrupados pelo volume relativo dos agregados.	127
7.4	Resultado dos testes não-paramétricos de Wilcoxon e Mann-Whitney para os erros de cada técnica de predição para a resistência à compressão e módulo de elasticidade.	131
7.5	Resultado da combinação de métodos de predição da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação.	134
8.1	Tempo de execução de um modelo de predição em cada método computacional estudado: MEF 2D e 3D, SVR e RNA.	138

1 Introdução

O concreto feito com agregados leves, ou concreto leve estrutural, é considerado um material de construção versátil, bastante usado em todo o mundo há décadas, em diversas áreas da construção civil, tais como, edificações pré-fabricadas, plataformas marítimas, pontes, entre outros [1, 2, 3].

Algumas de suas principais vantagens sobre o concreto de densidade normal (CN) são: redução do carregamento final devido ao baixo peso específico, melhor isolamento térmico e acústico, e uma boa resistência ao fogo, que pode levar a uma redução do custo total de projeto. O uso desse tipo de concreto permite seções de elementos estruturais menores, vãos maiores, diminuição da quantidade de aço necessário e, portanto, pode ser uma opção econômica e eficiente para vários tipos de construções [4, 5, 6, 7].

Embora o concreto de agregado leve apresente um peso próprio reduzido, o que é uma vantagem estrutural, a sua resistência mecânica é menor do que a de concretos normais. Apesar deste fato, esse material é empregado na construção civil em elementos estruturais e não estruturais. Os exemplos a seguir ilustram a sua eficiência quando aplicado na construção de arranha-céus. O One Shell Plaza Tower, um edifício de 220m de altura em Houston, tem agregados leves incorporados em todos os seus elementos estruturais (Figura (1.1)) [8]. Por sua vez, o banco Barclays Head Office, localizado em Canary Wharf, Londres, é um exemplo de técnica de construção mista - sua estrutura é baseada em molduras de aço, enquanto que as lajes são construídas com um material compósito feito de agregados leves (Figura (1.2)) [9]. Em ambos os casos, o concreto de agregado leve foi utilizado como uma forma de reduzir o peso dos elementos e melhorar o isolamento do ambiente, além de aumentar o tempo de resistência ao fogo sem nenhum custo extra, aliando vantagens econômicas e de segurança.

Diferentemente do concreto de densidade normal ou de alta densidade, onde o agregado é mais resistente do que a argamassa e as fissuras começam na zona de transição da interface, no concreto de agregado leve, o agregado é menos resistente que a argamassa, o que influencia diretamente nas propriedades do concreto [7]. A Figura (1.3) mostra o aspecto dos grãos de argila expandida, enquanto a Figura (1.4) ilustra o corte longitudinal de um corpo de prova cilíndrico feito de concreto de agregado leve.



Figura 1.1: One Shell Plaza Tower, Houston, USA. [8]



Figura 1.2: Barclays Bank Head Office, London, UK [9].

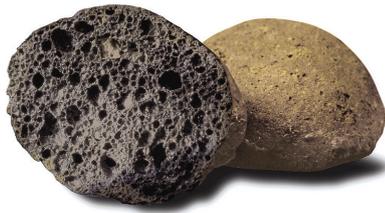


Figura 1.3: Exemplo de agregado leve - argila expandida (foto: domínio público).

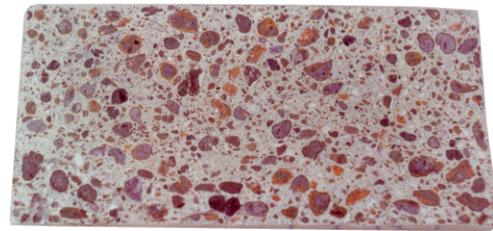


Figura 1.4: Sessão longitudinal de um corpo de prova de concreto de agregado leve [10].

Modelos de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve podem ajudar a diminuir o tempo e o custo de projetos ao prover dados essenciais para os cálculos estruturais.

De forma geral, é possível classificar tais métodos em dois grandes grupos:

- **Métodos baseados em modelos computacionais extraídos da mecânica dos sólidos** ([11, 12, 13]). Para esse grupo, o Método dos Elementos Finitos (MEF) aparece como uma das ferramentas mais importantes para suas implementações computacionais.

Pode-se citar como uma vantagem dos modelos computacionais via MEF a boa exatidão na predição das propriedades mecânicas de materiais, desde que os parâmetros dos modelos estejam bem identificados e que os comportamentos

mecânicos dos materiais estejam associados a modelos físicos adequados.

Como desvantagens, observa-se que, dependendo do grau de refinamento do modelo, é necessário um tempo de processamento razoável, além das dificuldades em se determinar o modelo e parâmetros otimizados para previsão de comportamento devido a incertezas inerentes aos materiais.

- **Métodos baseados em ajustes de parâmetros a um conjunto de resultados experimentais** ([14, 15, 16, 17]). Esses métodos têm por princípio a concepção de que partindo-se de dados que têm papel importante na característica mecânica que se pretende prever e dos valores dessa característica obtidos em ensaios experimentais, é possível aferir modelos de regressão e/ou Inteligência Computacional (IC) capazes de realizar estimativas razoáveis de propriedades mecânicas para o material analisado.

Como vantagens desse grupo de métodos, destaca-se o menor esforço computacional, quando se compara com o grupo precedente, além de, em alguns casos, se obter predições com boa exatidão, quando se dispõe de uma base de dados experimentais suficientemente grande.

Como desvantagens, observa-se a dificuldade de generalização para sua aplicação a materiais diferentes daqueles usados como banco de dados, além do próprio banco de dados em si, uma vez que sua determinação demanda enormes esforços para realização de ensaios experimentais.

Tendo em vista as vantagens e desvantagens de cada grupo de métodos, busca-se, neste trabalho, comparar o resultado da predição de cada grupo e obter um procedimento com características híbridas que consigam extrair o melhor de cada técnica, visando maior exatidão na avaliação das propriedades mecânicas.

A tendência crescente de se usar métodos combinados de predição (*ensemble* em inglês) sugere que as abordagens em conjunto melhoram o resultado final em relação às técnicas de inteligência computacional individuais. Por isso, tem-se tornado cada vez mais comum o uso de métodos híbridos nas mais variadas áreas de pesquisa ([18, 19, 20, 21, 22]). Porém, ainda há poucas pesquisas que usam a abordagem de métodos combinados, principalmente no que se refere à modelagem computacional via MEF como um dos métodos.

Com isso em mente, o objetivo deste trabalho é desenvolver uma estratégia computacional para a avaliação de propriedades mecânicas do concreto de agregado leve. Estas propriedades mecânicas avaliadas são o módulo de elasticidade (E) e a resistência à compressão (f_c). Para tal, três etapas aplicadas na predição dessas propriedades mecânicas são desenvolvidas:

- modelagem computacional do concreto via método dos elementos finitos (MEF). Neste trabalho, as análises via MEF são realizadas através da plataforma computacional Cast3M ([23]);
- inteligência computacional (IC) via redes neurais artificiais (RNA) e máquina de vetores suporte com regressão (SVR - *Support Vector Regression*); e
- métodos híbridos via MEF, SVR e RNA.

Além disso, com base nas abordagens de *workflow* científico¹ e *many-task computing*², uma ferramenta computacional foi desenvolvida com o propósito de facilitar e automatizar a execução dos experimentos científicos de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve. Essa ferramenta foi nomeada como Sistema de Automação de *Workflow* Científico em Ambiente Distribuído (SWADE - *Scientific Workflow Automation in Distributed Environment*).

A ferramenta SWADE tem como principais funcionalidades:

- descrição das etapas necessárias para execução dos experimentos científicos elaborados neste trabalho;
- automação na execução dos experimentos científicos;
- processamento simultâneo das tarefas do experimento; e
- integração com programas de terceiros.

Desta forma, pretende-se responder às seguintes questões, ao final de toda a análise:

1. Qual método computacional é mais preciso na predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve? MEF, SVR ou RNA?

¹ *Workflow* científico: é uma descrição dos passos necessários para executar um experimento particular, incluindo seus artefatos e processos.

² *Many-task computing*: é um termo em ciência da computação para descrever o uso de muitos recursos de computação em curtos períodos de tempo para realizar muitas tarefas computacionais.

2. Será que o uso de uma estratégia que combine resultados do MEF, do SVR e da RNA seria mais precisa na avaliação da F_c e do E ?
3. Uma ferramenta computacional que auxilie e automatize a execução dos experimentos numéricos do método de modelagem computacional ajudaria a melhorar a eficiência desse estudo?

Com objetivo de responder a tais perguntas, uma base de dados experimental foi usada como referência [24]. Esses dados foram obtidos através de ensaios laboratoriais desenvolvidos na Universidade de Cergy-Pontoise, que possui convênio de pesquisa com a UFJF/PGMC.

Visando atender aos objetivos propostos nesse trabalho, conseqüentemente, responder às três perguntas anteriormente descritas, o presente texto foi dividido em nove capítulos, da seguinte forma:

- no primeiro foram destacados o contexto que este trabalho se enquadra, a importância do estudo e o problema a ser abordado;
- no segundo capítulo, tendo em vista o contexto interdisciplinar dessa tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional (PGMC), alguns conceitos fundamentais usados neste texto são apresentados. Isso se faz necessário uma vez que o público alvo ao PGMC nem sempre dispõe de todos os conhecimentos específicos necessários para a compreensão deste trabalho. Dependendo da área de formação do leitor, alguns conceitos apresentados nesse capítulo podem ser triviais. Assim sendo, nesse capítulo é feita uma breve revisão sobre mecânica dos sólidos - que inclui tensões, deformações, plasticidade e critérios de escoamento; os métodos de inteligência computacional - rede neural artificial e máquina de vetores suporte; *workflow* científico e, por fim, *many-task computing*;
- no terceiro capítulo aborda-se o uso da ferramenta computacional SWADE para automação de experimentos numéricos com objetivo de melhorar a eficiência na pesquisa;
- no quarto capítulo é descrito o programa experimental usado como referência nas avaliações dos métodos de predição desenvolvidos neste trabalho;

- no quinto capítulo é descrita a metodologia usada para predição das propriedades mecânicas via MEF, considerando simulações bidimensional e tridimensional;
- no sexto capítulo é apresentada a metodologia empregada para predição das propriedades mecânicas via RNA e SVR;
- no sétimo capítulo é abordado o emprego de métodos combinados com o propósito de prever as propriedades mecânicas do concreto;
- no oitavo capítulo são abordadas as conclusões e discussões com base nos resultados, além de citar alguns trabalhos futuros.

2 Conceitos fundamentais

O presente capítulo apresenta conceitos básicos e nomenclaturas adotadas no texto visando, principalmente, auxiliar o leitor que não possua formação específica acerca do tema aqui abordado, uma vez que o PGMC é um programa multidisciplinar. Para isso são descritos importantes conceitos como: tensões e deformações, relações entre tensões e deformações, plasticidade computacional, critério de escoamento de Drucker-Prager, rede neural artificial, máquina de vetores suporte, métricas para comparar modelos, técnica de validação cruzada k-fold, *workflow* científico e *many-task computing*.

2.1 Tensões e deformações

As tensões e deformações são grandezas que, para sua perfeita definição, demandam mais de uma componente vetorial. Tais grandezas são ditas tensoriais. A organização dessas componentes vetoriais normalmente é expressa de forma composta em matrizes ou tensores, onde cada linha representa um vetor associado às tensões ou às deformações referentes a cada plano cartesiano.

Para o caso das tensões, tomando-se então cada um dos três planos ortogonais yz (vetor normal paralelo ao eixo x), xz (vetor normal paralelo ao eixo y) e xy (vetor normal paralelo ao eixo z) é possível definir três vetores tensões, respectivamente, $\vec{\rho}_x$, $\vec{\rho}_y$ e $\vec{\rho}_z$ (apresentada na Figura 2.1) que serão fundamentais no estudo da grandeza tensão. As Equações 2.1, 2.2 e 2.3 mostram estes vetores e suas componentes no referencial xyz .

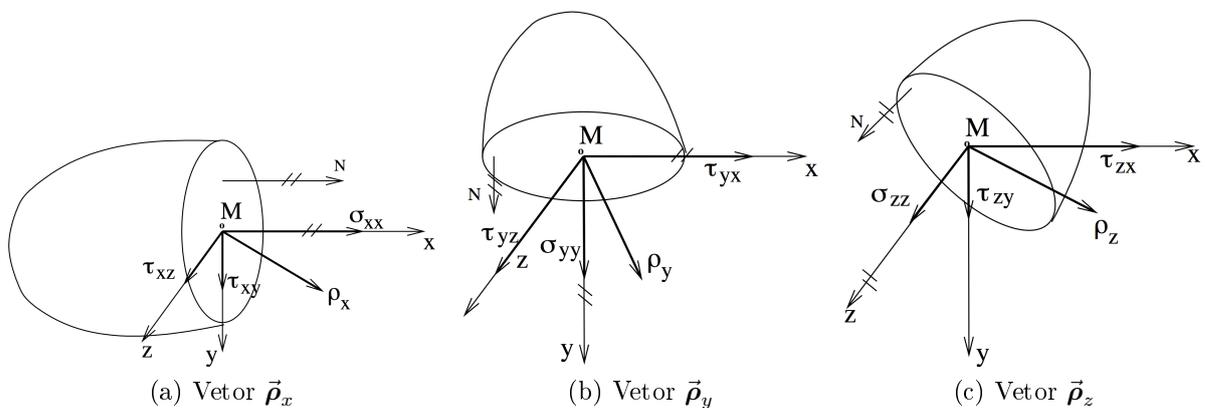


Figura 2.1: Tensões nos três planos ortogonais ([25]).

$$\vec{\rho}_x = [\sigma_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{xz}] \quad (2.1)$$

$$\vec{\rho}_y = [\tau_{yx}, \sigma_{yy}, \tau_{yz}] \quad (2.2)$$

$$\vec{\rho}_z = [\tau_{zx}, \tau_{zy}, \sigma_{zz}] \quad (2.3)$$

A nomenclatura usada nas Equações 2.1, 2.2 e 2.3 é a seguinte:

- as tensões normais são indicadas pela letra σ e as tangenciais pela letra τ ;
- o primeiro índice identifica o plano considerado, pois indica a direção de sua normal. Em um exemplo onde se tem τ_{xy} , o primeiro índice é x e o plano yz ;
- o segundo identifica a direção da componente do vetor tensão. Em um exemplo onde se tem τ_{xy} , o segundo índice é y e a direção da tensão y ;

Geralmente, para índices idênticos, representa-se apenas com um único índice. Desta forma, o tensor de tensões, que usualmente é representado pela letra grega σ , é definido pela Equação (2.4).

$$\sigma = \begin{bmatrix} \vec{\rho}_x \\ \vec{\rho}_y \\ \vec{\rho}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

onde, por razões de equilíbrio, tem-se:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}; \tau_{xz} = \tau_{zx} \text{ e } \tau_{yz} = \tau_{zy} \quad (2.5)$$

Um raciocínio análogo poderia ser aplicado às deformações apresentado na Equação (2.6).

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} & \epsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} & \gamma_{yz} & \epsilon_z \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

onde ϵ_x , ϵ_y e ϵ_z são as deformações longitudinais nas direções x , y e z , respectivamente; e γ_{xy} , γ_{xz} e γ_{yz} são as deformações cisalhantes nos planos xy , xz e yz , respectivamente.

2.2 Relações entre tensões e deformações

Em engenharia é comum dizer que: "as tensões se revelam através das deformações".

De fato, essas grandezas estão intimamente ligadas e suas relações são obtidas através de testes laboratoriais como os ensaio de tração, compressão, cisalhamento e torção, onde, para cada nível de tensão aplicada, são registrados também o respectivo nível de deformação. A relação entre essas medidas define se o material apresenta comportamento linear ou não linear.

2.2.1 Lei de Hooke

Dos ensaios anteriormente citados, é possível concluir que, para uma boa parte dos materiais usualmente empregados em engenharia, de fato há um comportamento elástico linear ou é possível modelá-los de forma razoável, como tal, para pequenas deformações.

A essa relação tensão-deformação no regime elástico linear do material dá-se o nome de Lei de Hooke.

Por razões de isotropia e equilíbrio, pode-se escrever a lei de Hooke na forma:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon} \quad (2.7)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ (Equação 2.8) é o tensor de tensões escrito numa forma vetorial, $\boldsymbol{\epsilon}$ (Equação 2.9) é o vetor de deformação e \mathbf{D} é definido na Equação (2.10).

$$\boldsymbol{\sigma} = \left\{ \begin{array}{c} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{array} \right\} \quad (2.8)$$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{Bmatrix} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{D} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

2.2.2 Comportamento não linear

Analisando-se, por exemplo, o resultado de um modelo que representa o comportamento típico ou aproximado de alguns materiais, como o aço, observa-se dois trechos característicos: uma região elástica linear onde é possível se aplicar a lei de Hooke e uma região onde o comportamento é plástico. Por razões de simplicidade, a região plástica foi representada também por uma reta, como ilustrado na Figura 2.2.

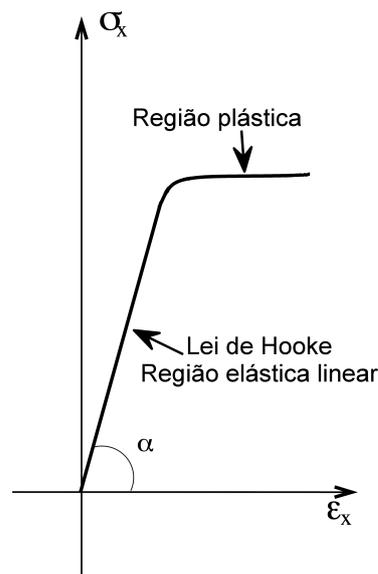


Figura 2.2: Curva tensão deformação.

É comum os modelos que descrevem o comportamento de materiais considerarem o limite de elasticidade coincidente com o limite de linearidade. Faz parte da linguagem informal de engenharia se referir a esse limite de transição entre a elasticidade e a plasticidade como limite de escoamento, uma vez que para muitos materiais, como o aço, é justamente o fenômeno do escoamento que separa a região elástica linear da região plástica não linear.

As relações tensões-deformações para a região plástica não linear são bem mais complexas que a lei de Hooke, e demandam normalmente cálculos mais refinados, quase sempre realizados com o auxílio de computadores. A esse estudo dá-se o nome de plasticidade computacional, que é tratado na próxima seção.

2.3 Plasticidade computacional

Com relação ao conjunto dos materiais componentes típicos de estruturas, poucos se comportam de forma elástica para grandes deslocamentos. No caso do aço, um dos principais materiais de construção civil usados atualmente, pode-se identificar um trecho de deformação elástica, seguida por um patamar de escoamento, encruamento e finalmente a fase de ruptura, semelhante ao apresentado na Figura 2.3.

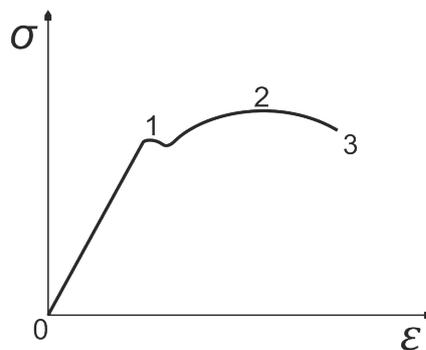


Figura 2.3: Curva tensão-deformação típica das barras de aço. Trecho 0-1: fase elástica; trecho 1-2: patamar de escoamento e encruamento; trecho 2-3: fase de ruptura ([26]).

Para os materiais sujeitos a taxas de deformação modestas e baixas temperaturas, a deformação plástica pode ser considerada, de uma forma geral, independente do tempo, ou “*rate independent*” ([27]). Nessa situação, a tensão a qualquer instante depende dos valores anteriores de deformação, mas não depende da velocidade com que esses valores são atingidos ([28]).

Como sugestão de outras bibliografias para o estudo destes conceitos, sugere-se [29, 30, 31, 32, 33, 34].

2.3.1 Plasticidade unidimensional

A partir da observação de um modelo bastante simples de um sistema mola/atrito unidimensional - 1D ([26]), pode-se avaliar a estrutura matemática de um problema de plasticidade “*rate independent*”. Assim, considerando a tensão aplicada σ e a deformação ϵ , podem-se fazer as seguintes distinções ([35]):

- a) Comportamento linear elástico: a Figura 2.4 ilustra um modelo de mola linear elástico e curva tensão-deformação correspondente.

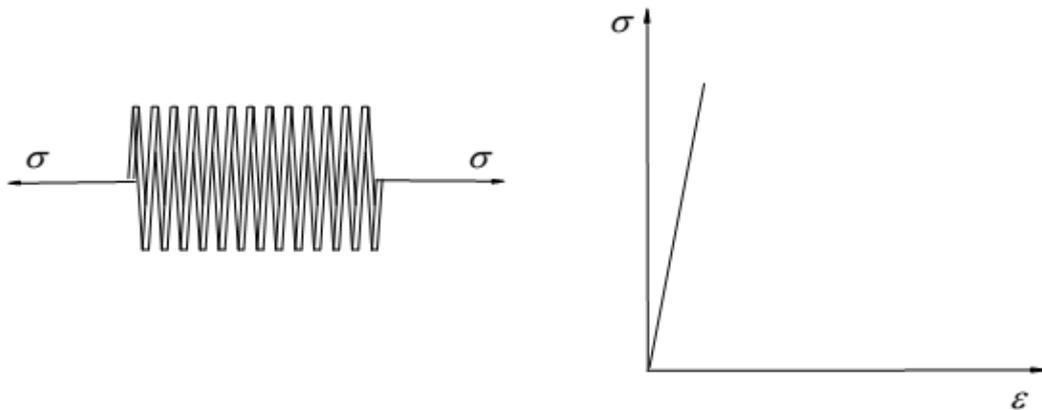


Figura 2.4: Modelo de mola linear elástico e curva tensão-deformação correspondente ([27]).

- b) Comportamento rígido-perfeitamente plástico: a Figura 2.5 mostra um modelo de atrito perfeitamente plástico e curva tensão-deformação equivalente.
- c) Comportamento elástico-perfeitamente plástico: a Figura 2.6 apresenta um modelo mola/atrito de plasticidade perfeita e curva tensão-deformação correspondente.
- d) Comportamento elastoplástico com endurecimento isotrópico: a Figura 2.7, por sua vez, ilustra um modelo mola/atrito com endurecimento isotrópico e curva tensão-deformação relacionado.

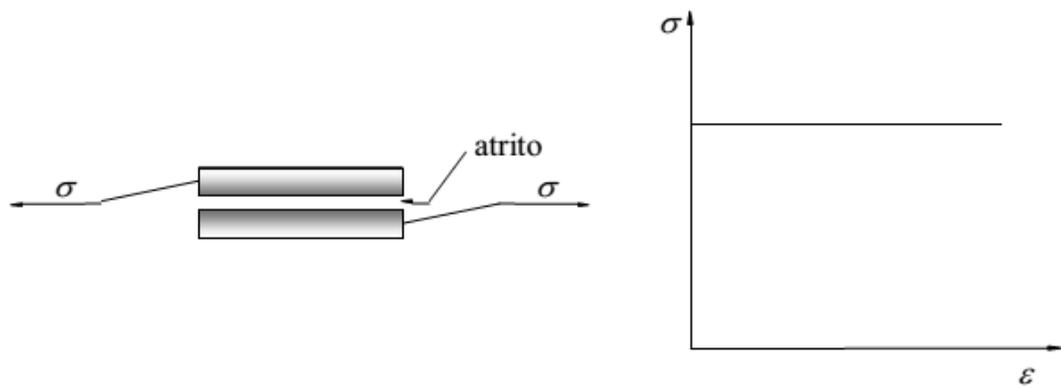


Figura 2.5: Modelo atrito perfeitamente plástico e curva tensão–deformação correspondente ([27]).

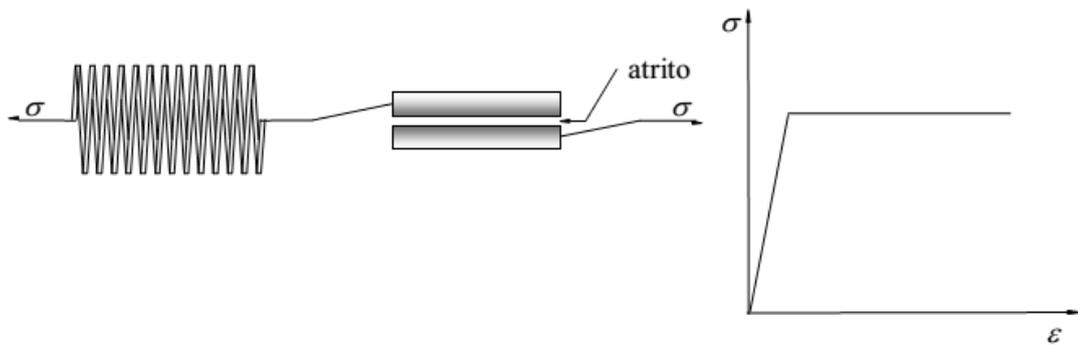


Figura 2.6: Modelo mola/atrito de plasticidade perfeita e curva tensão–deformação correspondente ([27]).

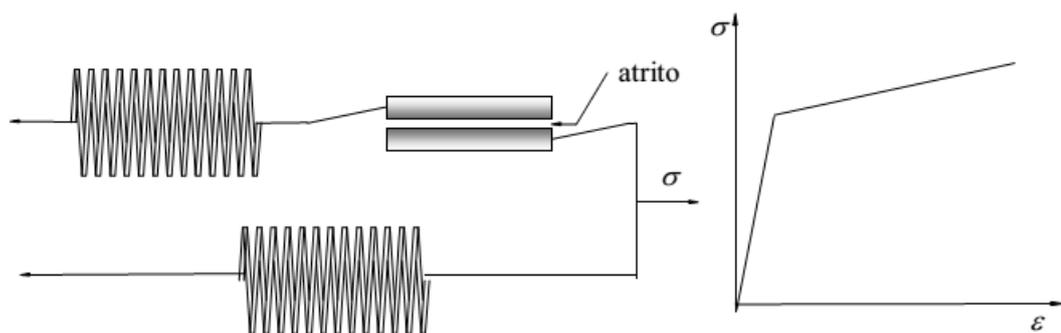


Figura 2.7: Modelo mola/atrito com endurecimento isotrópico e curva tensão–deformação correspondente ([27]).

2.3.2 Plasticidade perfeita

A partir deste ponto será abordado o estudo da resposta de um sistema mola/atrito ilustrado na Figura 2.8. O sistema inicialmente possui área e comprimento unitários; σ é a tensão atuante aplicada no sistema; E é a constante elástica da mola e $\sigma_Y > 0$ é a

constante característica de atrito de Coulomb.

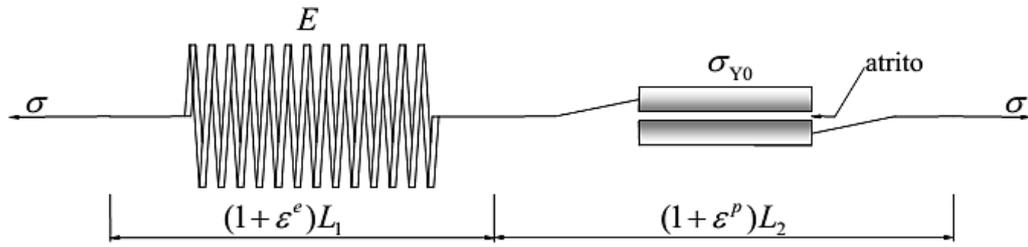


Figura 2.8: Modelo elastoplástico “rate independent” composto por uma mola de constante elástica E e um dispositivo de atrito com constante característica σ_Y ([27]).

Por sua vez, as seguintes observações podem ser feitas a partir da análise da Figura 2.8:

I. a deformação total do sistema pode ser dividida em duas partes:

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^p \quad (2.11)$$

onde ϵ^e é a deformação elástica da mola e ϵ^p é a deformação plástica do dispositivo de atrito;

II. analisando-se o equilíbrio do sistema, tem-se que a tensão na mola de constante E é σ . Pode-se então escrever a relação elástica como:

$$\sigma = E\epsilon^e = E(\epsilon - \epsilon^p) \quad (2.12)$$

Assumindo que ϵ , ϵ^p e σ são funções do tempo, tem-se:

$$\dot{\epsilon} = \frac{\partial}{\partial t}\epsilon \quad (2.13)$$

$$\dot{\epsilon}^p = \frac{\partial}{\partial t}\epsilon^p \quad (2.14)$$

$$\dot{\sigma} = \frac{\partial}{\partial t}\sigma \quad (2.15)$$

Assim, é possível fazer as seguintes considerações:

I. a tensão no dispositivo de atrito não pode ser superior a σ_Y . Logo, os estados de tensões admissíveis formam um intervalo fechado $A_\sigma = [-\sigma_Y, \sigma_Y]$, ou:

$$A_\sigma = \{ \sigma \in \mathbb{R} \mid f(\sigma) = |\sigma| - \sigma_Y \leq 0 \} \quad (2.16)$$

- II. a tensão σ_Y é chamada tensão de escoamento e a equação $f(\sigma) = |\sigma| - \sigma_Y \leq 0$ define o critério de escoamento;
- III. para um valor de tensão σ menor que σ_Y , não haverá deformação plástica, ou seja:

$$\dot{\epsilon}^p = 0 \Rightarrow f(\sigma) = |\sigma| - \sigma_Y < 0 \quad (2.17)$$

Logo, utilizando as equações 2.12, 2.13, 2.14 e 2.15, pode-se escrever:

$$f(\sigma) = 0 \Rightarrow \dot{\sigma} = E\dot{\epsilon} \quad (2.18)$$

Ou seja, para valores de tensão $\sigma < \sigma_Y$, o sistema se comporta como se existisse apenas a mola elástica de constante E ;

- IV. de acordo com a Equação (2.16), os estados de tensões permitidos são tais que $f(\sigma) \leq 0$, e de acordo com a Equação (2.18), para $f(\sigma) < 0$ tem-se somente deformações elásticas. Logo, só haverá deformações plásticas quando $f(\sigma) = 0$. Nesse caso tem-se o dispositivo de atrito deslizando na direção da tensão atuante. Chamando de $\dot{\gamma} \geq 0$ o valor absoluto da taxa de deslizamento do dispositivo de atrito, pode-se escrever:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \quad \text{se } \sigma = \sigma_Y \\ \dot{\epsilon}^p = -\dot{\gamma} \quad \text{se } \sigma = -\sigma_Y \end{array} \right\} \dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \operatorname{sign}(\sigma) \quad (2.19)$$

onde a função $\operatorname{sign}(\sigma)$ pode ser definida como:

$$\operatorname{sign}(\sigma) = \begin{cases} +1 & \text{se } \sigma > 0 \\ -1 & \text{se } \sigma < 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

O conjunto $\partial A_\sigma = \{\sigma \in \mathbb{R} \mid f(\sigma) = |\sigma| - \sigma_Y \leq 0\}$ é chamado de superfície de escoamento. Para o modelo unidimensional tem-se $\partial A_\sigma = \{-\sigma_Y, +\sigma_Y\}$.

Com base nas considerações feitas nos itens de I a IV, passa-se para a demonstração de que é possível determinar o valor das deformações plásticas (ϵ^p) para qualquer estado de tensões admissível.

Ao considerar que $\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{sign}(\sigma)$, uma vez que determinados os valores de $\dot{\gamma}$ e σ , fica também determinado o valor de ϵ^p .

O valor de σ tem que ser um estado de tensões admissível ($f(\sigma) \leq 0$), e $\dot{\gamma}$ tem que ser maior ou igual a zero ($\dot{\gamma} \geq 0$) para que haja deformações plásticas. Portanto:

$$\left. \begin{array}{l} f(\sigma) < 0 \Rightarrow \dot{\gamma} = 0 \\ \dot{\gamma} > 0 \Rightarrow f(\sigma) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} f(\sigma) = 0 \quad (2.21)$$

Em outras palavras, se o sistema não se encontra no regime de escoamento ($f(\sigma) < 0 \Leftrightarrow |\sigma| < \sigma_Y$), não há variação da taxa de deslizamento do dispositivo de atrito ($\dot{\gamma} = 0$) e, conseqüentemente, não há deformações plásticas. Se o dispositivo de atrito estiver deslizando ($\dot{\gamma} > 0$), logo o sistema está no regime de escoamento ($f(\sigma) = 0 \Leftrightarrow |\sigma| = \sigma_Y$). Essas condições são chamadas de “Condições de Kuhn-Tucker”.

As Condições de Kuhn-Tucker permitem determinar o valor real de $\dot{\gamma} \geq 0$ em qualquer instante do tempo.

Uma formulação mais precisa requer uma outra observação: para um instante de tempo t que se tem $\dot{\gamma}(t) > 0$, implica que $f[\sigma(t)] = 0$ (condições de Kuhn-Tucker). E para um instante de tempo $t + \delta t$ onde $\dot{\gamma}(t + \delta t) > 0$, também deve-se ter $f[\sigma(t + \delta t)] = 0$. Conclui-se, então, que sendo $\dot{\gamma} > 0$, para cada intervalo de tempo consecutivo, a variação de $f(\sigma)$ também deve ser zero, ou seja, $\dot{f}(\sigma) = 0$. Por outro lado, para o material trabalhando no regime elástico ($\dot{\gamma} = 0$), a variação de $f(\sigma)$ poderá ser positiva ou negativa, dependendo se o material está sendo carregado ou descarregado. Pode-se resumir essa última observação da seguinte forma:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\gamma} > 0 \Rightarrow \dot{f}(\sigma) = 0 \\ \dot{f}(\sigma) < 0 \text{ ou } \dot{f}(\sigma) > 0 \Rightarrow \dot{\gamma} = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \dot{\gamma} \dot{f}(\sigma) = 0 \quad (2.22)$$

Essa condição acima é chamada de “Condição de Persistência” e corresponde à condição física de que para que haja deformações plásticas, deve-se ter o estado de tensões “persistindo” na superfície de escoamento.

Estando, então, o estado de tensões persistindo na superfície de escoamento, ou seja, sendo válida a condição de persistência, pode-se chegar a uma expressão para $\dot{\gamma} > 0$ para

o modelo considerado:

$$\dot{f}(\sigma) = \frac{\partial f(\sigma)}{\partial t} = \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial t} \text{ (regra da cadeia)} \quad (2.23)$$

Da Equação (2.12), $\partial \sigma / \partial t = \dot{\sigma} = E(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p)$, logo:

$$\dot{f}(\sigma) = \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} E(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p) = \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} E\dot{\epsilon} - \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} E\dot{\epsilon}^p \quad (2.24)$$

E pela Equação (2.19), $\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{ sign}(\sigma)$, tem-se:

$$\dot{f}(\sigma) = \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} E\dot{\epsilon} - \frac{\partial f(\sigma)}{\partial \sigma} E\dot{\gamma} \text{ sign}(\sigma) \quad (2.25)$$

Ainda, $\partial f(\sigma) / \partial \sigma = \partial(|\sigma| - \sigma_Y) / \partial \sigma = \text{sign}(\sigma)$, assim:

$$\dot{f}(\sigma) = \text{sign}(\sigma) E\dot{\epsilon} - E\dot{\gamma} [\text{sign}(\sigma)]^2 \quad (2.26)$$

Sabendo-se que $[\text{sign}(\sigma)]^2 = +1$ e aplicando a condição de persistência ($\dot{f}(\sigma) = 0$), chega-se finalmente a:

$$\begin{cases} 0 = \text{sign}(\sigma) E\dot{\epsilon} - E\dot{\gamma} \\ \dot{\gamma} = \dot{\epsilon} \text{ sign}(\sigma) \end{cases} \quad (2.27)$$

Lembrando que $\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{ sign}(\sigma)$, tem-se:

$$\dot{\epsilon}^p = \dot{\epsilon} \text{ para } f(\sigma) = 0, \dot{f}(\sigma) = 0 \quad (2.28)$$

A resposta do sistema descrito na Figura 2.8 é ilustrada na Figura 2.9.

2.3.3 *Endurecimento plástico isotrópico ou linear*

A diferença básica entre o modelo plástico perfeito e o modelo dotado de endurecimento plástico é que o intervalo de variação das tensões admissíveis (A_σ) na plasticidade perfeita permanece sem se alterar; já no modelo com endurecimento, esse intervalo se expande à medida que ocorre fluxo plástico. A Figura 2.10 ilustra essa diferença.

A exemplo do que foi feito para o modelo anterior, faz-se agora as deduções para se determinar a estrutura matemática do modelo com endurecimento plástico isotrópico.

As considerações básicas que se referem à resposta elástica do modelo permanecem

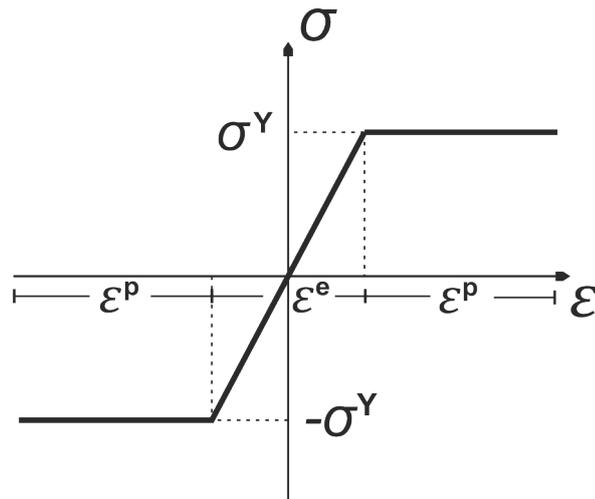


Figura 2.9: Curva tensão-deformação de um modelo de comportamento plástico perfeito.

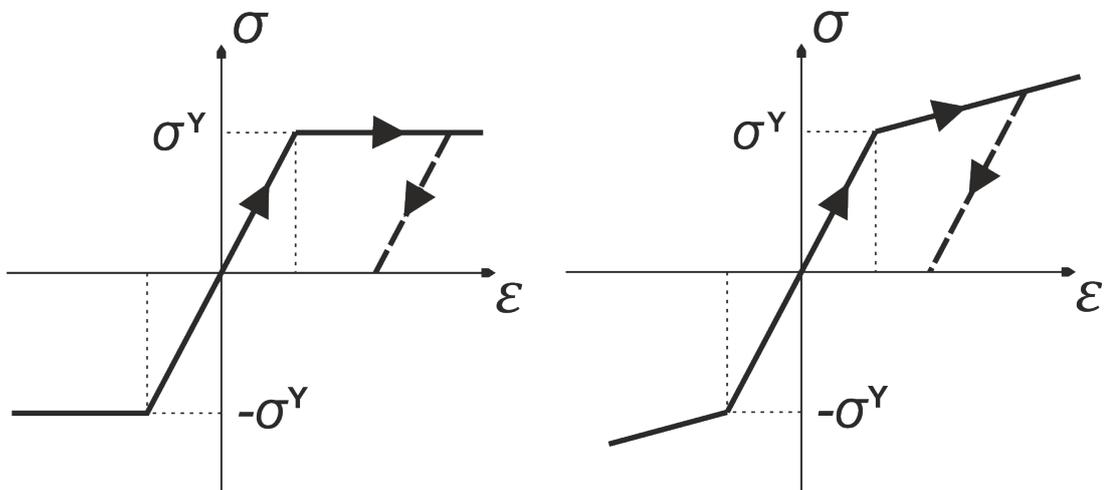


Figura 2.10: a) Plasticidade Perfeita e b) Plasticidade com endurecimento isotrópico.

inalteradas:

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^p \quad (2.29)$$

$$\sigma = E\epsilon^e = E(\epsilon - \epsilon^p) \quad (2.30)$$

As seguintes hipóteses sobre a expansão de A_σ serão feitas com o objetivo de se formular as equações do regime plástico do modelo:

- I. para um endurecimento isotrópico, o centro de A_σ permanece inalterado, ou seja, na origem;
- II. o endurecimento é linear ao longo do fluxo plástico e não depende de $sign(\dot{\epsilon}^p)$.

Estas condições conduzem a um critério de escoamento na forma:

$$f(\sigma, \alpha) = |\sigma| - (\sigma_Y + K\alpha) \leq 0 \quad (2.31)$$

onde $\sigma_Y > 0$ e $K > 0$ são constantes conhecidas, K é chamado de módulo plástico do material e $\alpha > 0$ é chamado de variável de endurecimento interno.

Da hipótese II pode-se concluir que:

$$\dot{\alpha} = |\dot{\epsilon}^p| \quad (2.32)$$

O mecanismo de evolução do fluxo plástico permanece inalterado:

$$\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{sign}(\sigma) \quad (2.33)$$

e a taxa de deslizamento do dispositivo de atrito ($\dot{\gamma}$), para esse modelo, é também determinada utilizando as condições de persistência:

$$\dot{\gamma} \dot{f}(\sigma, \alpha) = 0 \quad (2.34)$$

Logo, as Condições de Kuhn-Tucker neste contexto passam a ser escritas:

$$\dot{\gamma} \geq 0; f(\sigma, \alpha) \leq 0; \dot{\gamma} f(\sigma, \alpha) = 0 \quad (2.35)$$

Visando determinar $\dot{\gamma}$, faz-se o estudo e o desenvolvimento da expressão $\dot{f}(\sigma, \alpha)$. Por inspeção da Equação (2.31) ($f(\sigma, \alpha) = |\sigma| - (\sigma_Y + K\alpha)$), verifica-se facilmente que $f(\sigma, \alpha)$ pode ser escrita na forma de separação de variáveis:

$$f(\sigma, \alpha) = f_1(\sigma) + f_2(\alpha) \quad (2.36)$$

Logo,

$$\dot{f}(\sigma, \alpha) = \dot{f}_1(\sigma) + \dot{f}_2(\alpha) \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \sigma} = \frac{\partial f_1(\sigma)}{\partial \sigma} \text{ e } \frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial f_2(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (2.38)$$

Pela regra da cadeia, tem-se:

$$\dot{f}_1(\sigma) = \frac{\partial f_1(\sigma)}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{\partial f_1(\sigma)}{\partial \sigma} \dot{\sigma} \text{ e } \dot{f}_2(\alpha) = \frac{\partial f_2(\alpha)}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\partial f_2(\alpha)}{\partial \alpha} \dot{\alpha} \quad (2.39)$$

A partir das equações 2.37, 2.38 e 2.39, obtém-se:

$$\dot{f}(\sigma, \alpha) = \frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \sigma} \dot{\sigma} + \frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \alpha} \dot{\alpha} \quad (2.40)$$

Mas, de acordo com a Equação (2.31):

$$\frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \sigma} = \text{sign}(\sigma) \text{ e } \frac{\partial f(\sigma, \alpha)}{\partial \alpha} = -K \quad (2.41)$$

Com isso:

$$\dot{f}(\sigma, \alpha) = \text{sign}(\sigma) \dot{\sigma} - K \dot{\alpha} \quad (2.42)$$

Lembrando que $\dot{\sigma} = E(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p)$, tem-se, então:

$$\dot{f}(\sigma, \alpha) = \text{sign}(\sigma) E(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p) - K \dot{\alpha} \quad (2.43)$$

Observando a partir das equações 2.32 ($\dot{\alpha} = |\dot{\epsilon}^p| = \dot{\gamma}$) e 2.33 ($\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{sign}(\sigma)$):

$$\dot{f}(\sigma, \alpha) = \text{sign}(\sigma) E(\dot{\epsilon} - \dot{\gamma} \text{sign}(\sigma)) - K \dot{\gamma} \quad (2.44)$$

Aplicando a Condição de Persistência ($\dot{f}(\sigma, \alpha) = 0$) e simplificando $[\text{sign}(\sigma)]^2 = 1$, tem-se então, para o regime de escoamento:

$$0 = \text{sign}(\sigma) E \dot{\epsilon} - E \dot{\gamma} - K \dot{\gamma} \quad (2.45)$$

E finalmente:

$$\dot{\gamma} = \frac{\text{sign}(\sigma) E \dot{\epsilon}}{E + K} \quad (2.46)$$

Substituindo a Equação (2.46) na Equação (2.33), e escrevendo-se as respostas nos regimes elástico e plástico do sistema, resume-se:

$$\dot{\sigma} = \begin{cases} E \dot{\epsilon} & \text{se } \dot{\gamma} = 0 \rightarrow \text{regime elástico} \\ \frac{EK}{E+K} \dot{\epsilon} & \text{se } \dot{\gamma} > 0 \rightarrow \text{regime plástico} \end{cases} \quad (2.47)$$

2.3.4 Mapeamento de retorno para modelo com endurecimento isotrópico

Baseado na hipótese de que as grandezas que caracterizam o estado tensorial do domínio do problema $(\sigma_n, \alpha_n, \epsilon_n)$, num certo instante $t = t_n$, são conhecidas, busca-se determinar o novo estado de tensões $(\sigma_{n+1}, \alpha_{n+1}, \epsilon_{n+1})$ num tempo $t = t_{n+1}$ para um dado incremento de deformação.

Para se determinar o novo estado de tensões, admite-se inicialmente, numa primeira tentativa, que o incremento de deformações está num regime elástico. Dessa forma, obtém-se:

$$\alpha_{n+1}^{tent} = E(\epsilon_{n+1} - \epsilon_{n+1}^p) \quad (2.48)$$

Retornando à Equação (2.31) ($f(\sigma, \alpha) = |\sigma| - (\sigma_Y + K\alpha) \leq 0$), a verificação da tensão obtida na Equação (2.48) é feita pela Equação (2.49).

$$f_{n+1}^{tent}(\sigma, \alpha) = |\sigma_{n+1}^{tent}| - (\sigma_Y + K\alpha) \leq 0 \quad (2.49)$$

Caso f_{n+1}^{tent} verifique a Equação (2.49), tem-se o sistema comportando no regime elástico e conseqüentemente:

$$\alpha_{n+1} = \alpha_{n+1}^{tent} \quad (2.50)$$

Porém, caso f_{n+1}^{tent} não verifique a Equação (2.49), significa que existem deformações plásticas no sistema e $\alpha_{n+1} \neq \alpha_{n+1}^{tent}$. Essa tensão α_{n+1}^{tent} está além da superfície de escoamento e, portanto, em um estado inadmissível de tensões. Neste ponto, usa-se o mapeamento de retorno para trazer o estado de tensões de volta para a superfície de escoamento.

Partindo-se da Equação (2.12) ($\sigma = E\epsilon^e = E(\epsilon - \epsilon^p)$), pode-se escrever em uma forma discreta:

$$\begin{aligned} \alpha_{n+1} &= E(\epsilon_{n+1} - \epsilon_{n+1}^p) \\ &= E(\epsilon_{n+1} - \epsilon_{n+1}^p) - E\epsilon_n^p + E\epsilon_n^p \\ &= E\epsilon_{n+1} - E\epsilon_{n+1}^p - E\epsilon_n^p + E\epsilon_n^p \\ &= E(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n^p) - E(\epsilon_{n+1}^p - \epsilon_n^p) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Lembrando novamente que $\dot{\epsilon}^p = \dot{\gamma} \text{sign}(\sigma)$, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}\epsilon_{n+1}^p &= \epsilon_n^p + \Delta\gamma \text{sign}(\sigma_{n+1}) \\ \epsilon_{n+1}^p - \epsilon_n^p &= \Delta\gamma \text{sign}(\sigma_{n+1})\end{aligned}\tag{2.52}$$

Substituindo as equações 2.48 e 2.52 na Equação (2.51), chega-se a:

$$\sigma_{n+1} = \sigma_{n+1}^{tent} - E\Delta\gamma \text{sign}(\sigma_{n+1})\tag{2.53}$$

Considerando $\sigma = |\sigma| \text{sign}(\sigma)$, pode-se escrever a Equação (2.53) na forma:

$$\begin{aligned}|\sigma_{n+1}| \text{sign}(\sigma_{n+1}) &= |\sigma_{n+1}^{tent}| \text{sign}(\sigma_{n+1}^{tent}) - E\Delta\gamma \text{sign}(\sigma_{n+1}) \\ [|\sigma_{n+1}| + E\Delta\gamma] \text{sign}(\sigma_{n+1}) &= |\sigma_{n+1}^{tent}| \text{sign}(\sigma_{n+1}^{tent})\end{aligned}\tag{2.54}$$

Como $\Delta\gamma > 0$ e $E > 0$, observa-se que o termo entre colchetes na Equação (2.54) é positivo. Logo, para que essa equação se verifique,

$$\text{sign}(\sigma_{n+1}) = \text{sign}(\sigma_{n+1}^{tent})\tag{2.55}$$

E a Equação (2.54) passa a ser escrita:

$$|\sigma_{n+1}| = |\sigma_{n+1}^{tent}| - E\Delta\gamma\tag{2.56}$$

Lembrando que $\dot{\alpha} = |\dot{\epsilon}^p| = \dot{\gamma}$, assim, $\alpha_{n+1} - \alpha_n = \Delta\gamma$, pode-se escrever a Equação (2.31) ($f(\sigma, \alpha) = |\sigma| - (\sigma_Y + K\alpha)$) na forma discreta:

$$\begin{aligned}f_{n+1} &= |\sigma_{n+1}| - (\sigma_Y + K\alpha_{n+1}) \\ &= |\sigma_{n+1}| - \sigma_Y + K\alpha_{n+1} + K\alpha_n - K\alpha_n \\ &= |\sigma_{n+1}| - (\sigma_Y + K\alpha_n) - K(\alpha_{n+1} - \alpha_n) \\ &\text{(substituindo a Equação (2.56) e } \Delta\gamma) \\ &= |\sigma_{n+1}^{tent}| - E\Delta\gamma - (\sigma_Y + K\alpha_n) - K\Delta\gamma \\ &= |\sigma_{n+1}^{tent}| - (\sigma_Y + K\alpha_n) - \Delta\gamma(E + K) \\ &\text{(substituindo a Equação (2.49))} \\ &= f_{n+1}^{tent} - \Delta\gamma(E + K)\end{aligned}\tag{2.57}$$

Aplicando-se a condição de consistência ($f_{n+1} = 0$) à Equação (2.57), chega-se finalmente a:

$$\Delta\gamma = \frac{f_{n+1}^{tent}}{E + K} \quad (2.58)$$

Determinando o valor de $\Delta\gamma$ pode-se cumprir o proposto inicialmente, lembrando que $sign(\sigma_{n+1}) = sign(\sigma_{n+1}^{tent})$ (Equação (2.55)):

$$\sigma_{n+1} = \sigma_{n+1}^{tent} - E\Delta\gamma \, sign(\sigma_{n+1}^{tent}) \quad (2.59)$$

$$\epsilon_{n+1}^p = \epsilon_n^p + \Delta\gamma \, sign(\sigma_{n+1}^{tent}) \quad (2.60)$$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \Delta\gamma \quad (2.61)$$

2.4 Critério de escoamento de Drucker-Prager

O escoamento é um fenômeno típico que experimentam algumas ligas metálicas, quando submetidas a testes de carga. Esse fenômeno resulta em deformações plásticas crescentes para o material sem que haja incremento nas tensões. Nesses materiais, o limite entre o regime elástico e o plástico, na prática, é considerado coincidente com o início do escoamento. Um exemplo é o ensaio de tração em aço com baixo teor de carbono.

É comum na linguagem informal da engenharia, entretanto, aplicar o termo “escoamento” para designar o início do regime plástico para materiais que não apresentam esta característica, como é o caso do concreto.

Até aqui, a análise foi feita para 1D. Entretanto, todo o embasamento teórico desenvolvido pode ser adaptado e aplicado a problemas em 2D e em 3D. Uma das adaptações fica por conta da função que define o escoamento do material.

Para problemas em 1D, a função que define o escoamento do material tem apenas uma variável de tensão: σ . Nos problemas 2D e 3D, o estado tensorial de um ponto pertencente a um certo sólido possui 3 ($\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}$) e 6 ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}$) componentes, respectivamente. Em função das tensões principais, esses componentes são reduzidos para σ_1 e σ_2 em 2D; e σ_1, σ_2 e σ_3 em 3D.

Desta maneira, os pesquisadores passaram a buscar funções das componentes de tensão que melhor expressem o limite de escoamento de cada material. Cada uma dessas funções recebem o nome de “critérios de escoamento”.

Drucker e Prager, em 1952, apresentaram um novo critério para ruptura de concreto.

Essa fórmula é uma aproximação ao critério de Mohr-Coulomb, a partir de uma modificação do critério de Von Mises ([36]).

$$f_{DP} = (\alpha I_1 + \sqrt{J_2}) - k \leq 0 \quad (2.62)$$

onde α e k são duas constantes a cada ponto do material relacionáveis a c e Φ (c é a coesão e Φ é o ângulo de atrito interno); e I_1 e J_2 são invariantes do tensor de tensões, sendo:

$$I_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \quad (2.63)$$

$$J_2 = 1/6[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2] \quad (2.64)$$

Assim como o critério de Mohr-Coulomb, o critério de Drucker-Prager é simples em relação à complexidade dos modos de falha do concreto e fornece uma aproximação satisfatória ao comportamento do material com um consumo computacional reduzido.

2.5 Rede Neural Artificial (RNA)

Redes Neurais Artificiais (RNAs) são modelos computacionais formados por sistemas paralelos e distribuídos, compostos por unidades de processamento simples, chamados neurônios, que calculam determinadas funções matemáticas, geralmente não-lineares. Essas unidades são agrupadas em uma ou várias camadas e são interligadas por diversas conexões, chamadas de sinapse, geralmente unidirecionais. Na maioria dos modelos estas conexões estão associadas a pesos, os quais armazenam o conhecimento representado no modelo e servem para ponderar a entrada recebida de cada neurônio da rede ([37]).

Em outras palavras, Redes Neurais Artificiais são técnicas computacionais adaptativas que propõem um modelo matemático inspirado na estrutura neural de organismos inteligentes, cujo objetivo é solucionar problemas a partir da associação de informações previamente conhecidas, com capacidade natural de armazenar conhecimento e disponibilizá-lo para uso futuro ([38, 39]).

O processo habitual na solução de problemas com a RNA passa primeiramente pela etapa de aprendizagem (em ciência da computação é chamado de aprendizado de máquina), em que um conjunto de exemplos é inserido na rede, a qual extrai de

forma automática as características necessárias para reproduzir a informação fornecida. Nessa perspectiva, a capacidade de aprender por meio de exemplos e de generalizar a informação assimilada é o principal interesse na solução de problemas através da RNA. A generalização, que está relacionada à capacidade da rede aprender por meio de um conjunto reduzido de exemplos e futuramente dar respostas coerentes para dados desconhecidos, é uma demonstração de que a técnica da RNA está além do simples mapear relações entre a entrada e a saída. Nesse sentido, a RNA é capaz de extrair informações desconhecidas de forma explícita através dos exemplos. Além disso, o estudo da RNA é naturalmente multidisciplinar devido sua natureza, pois envolve pesquisadores de diversas áreas do conhecimento, tais como, engenharia, estatística, computação, psicologia, física, entre outras.

A primeira modelagem matemática do funcionamento de um neurônio artificial foi proposta por McCulloch & Pitts ([40]), em 1943, cuja estrutura é conhecida como a unidade básica de uma rede neural. A descrição matemática desse modelo continha m terminais de entrada x_1, x_2, \dots, x_m e apenas um terminal de saída y , que é ativado por uma função do somatório de suas entradas ponderadas, como ilustrado na Figura 2.11.

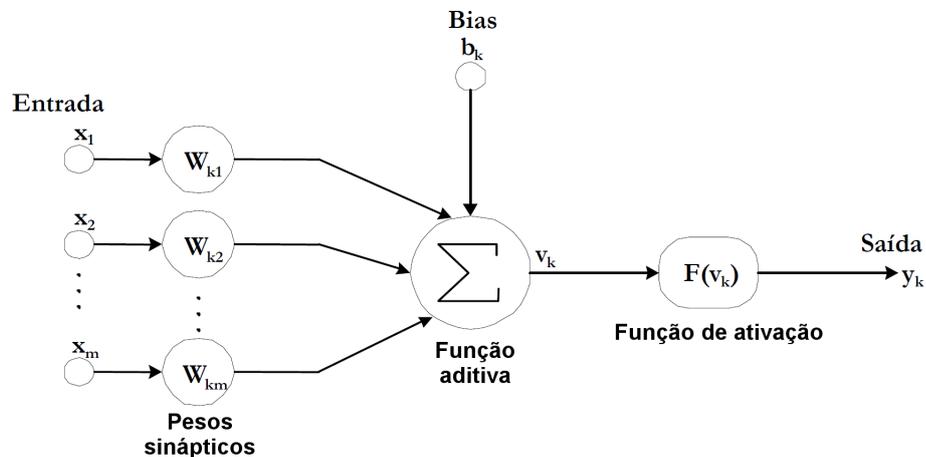


Figura 2.11: Estrutura que ilustra o funcionamento de um neurônio artificial (adaptado de [39]).

Matematicamente, um neurônio pode ser descrito como apresentado na Equação (2.65).

$$y_k = F(v_k + b_k) \quad (2.65)$$

onde

$$v_k = \sum_{j=1}^m w_{kj}x_j, \quad (2.66)$$

onde x_1, x_2, \dots, x_m são os terminais de entrada, $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$ são os pesos sinápticos do neurônio k , v_k é a saída do combinador linear (somador), b_k é o bias, $F()$ é a função de ativação e y_k é a saída do neurônio k .

Para reproduzir o comportamento das sinapses (interligações entre neurônios), os terminais de entrada do neurônio tem pesos vinculados $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$ cujos valores podem ser positivos ou negativos, dependendo das sinapses correspondentes serem inibitórias ou excitatórias. Assim, o resultado de uma sinapse particular j no neurônio pós-sináptico é definido como $w_{kj}x_j$. Nesse sentido, os pesos estabelecem em que grau o neurônio deve considerar sinais de disparo que são gerados naquela conexão.

Nessa perspectiva, um neurônio dispara quando a soma dos impulsos recebidos ultrapassa o seu limiar de excitação (*threshold*). Assim, o corpo do neurônio é simulado por uma técnica simples, o qual faz a soma ponderada dos valores $w_{kj}x_j$ recebidos pelo neurônio e avalia se um disparo deve ou não ocorrer (saída igual a 1 ou a 0) ao comparar o resultado da soma obtida ao limiar do neurônio. A função de limiar é descrita matematicamente como mostrada na Equação (2.67).

$$f(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \quad (2.67)$$

Assim, a ativação do neurônio é alcançada por meio da aplicação de uma “função de ativação”, que depende do valor da soma ponderada das suas respectivas entradas. Na apresentação do modelo original, a função de ativação é dada pela função de limiar e o neurônio terá então a sua saída ativa quando:

$$\sum_{j=1}^m w_{kj}x_j \geq \theta \quad (2.68)$$

onde m é o número de entradas do neurônio, w_{kj} é o peso relacionado à entrada x_j e θ é o limiar do neurônio.

Baseados no modelo de McCulloch & Pitts ([40]), foram criados diversos outros modelos que proporcionaram o desenvolvimento de uma saída diferente do 0 ou 1 do

modelo original, e com diferentes funções de ativação, tais como função linear, função degrau, função rampa e função sigmoide ([37]).

Uma vez que o conhecimento adquirido pelas redes neurais artificiais é por meio de um processo de aprendizado, é preciso então empregar um algoritmo capaz de ajustar iterativamente os pesos nas interligações dos neurônios de maneira que seja alcançado o objetivo projetado. Esse processo iterativo realiza modificações nos pesos com base em estímulos proporcionados pelos dados de entrada. Nesse sentido, o aprendizado é determinado pela maneira como se conduz a adaptação dos parâmetros, e isso pode ser realizado de três modos diferentes:

- aprendizado supervisionado: neste tipo de aprendizagem é fornecido à rede exemplos de dados de entrada e saída, previamente conhecidos que representam a realidade, e o objetivo é desenvolver uma regra geral que relaciona as entradas às saídas;
- aprendizado não supervisionado: nesta forma de aprendizagem não é fornecido um conjunto de exemplos previamente conhecidos. Uma medida de qualidade é estabelecida e fornecida para a rede, que modifica os parâmetros de modo a otimizar esta medida. Este tipo de aprendizado é muito utilizado na área de reconhecimento de padrões.
- aprendizado por reforço: nesta categoria de aprendizagem, o processo é realizado através da interação direta com os dados, sem se basear em uma supervisão ou um modelo completo, visando minimizar um índice escalar de desempenho.

Geralmente as arquiteturas da rede neural são organizadas em camadas, como ilustrado na Figura 2.12, onde suas componentes podem estar conectadas tanto às unidades das camadas posteriores quanto das anteriores. Essas camadas são classificadas em três grupos distintos:

- camada de entrada: sua única função é receber os dados e repassá-los à camada seguinte;
- camadas ocultas: funcionam como extratoras de características, e a maior parte do processamento é feito nessas camadas.
- camada de saída: sua função é receber o resultado final e disponibilizá-lo.

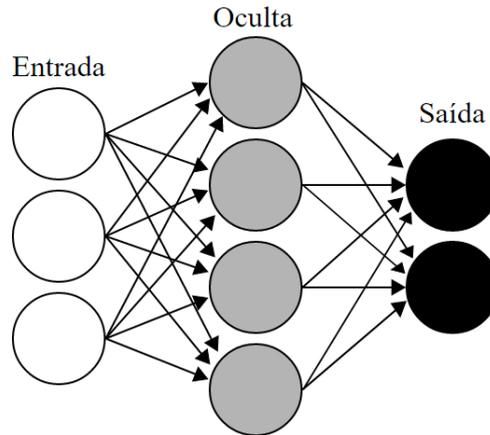


Figura 2.12: Estrutura que ilustra as camadas da rede neural artificial.

A partir das conexões entre as camadas da rede neural podem ser criadas várias estruturas diferentes (arquiteturas). Do ponto de vista dessas conexões, a arquitetura da rede pode ser caracterizada por dois aspectos:

- *feedforward*: os sinais são propagados somente num sentido, a partir da saída de um neurônio para a entrada da camada seguinte;
- *feedback*: o sinal de saída de um neurônio pode retroalimentar a si próprio ou as camadas anteriores ou, ainda, a camada seguinte.

Segundo Hinton & Williams ([41]), é possível treinar de forma eficiente redes com camadas intermediárias (ocultas), resultando no modelo de redes neurais artificiais mais utilizado atualmente, as redes *perceptron* multicamadas (*MultiLayer Perceptron* - MLP), treinadas com o algoritmo *backpropagation*. O *perceptron* pode ser visto como o tipo mais simples de rede neural *feedforward*: um classificador linear.

O algoritmo *backpropagation* utiliza o método de treinamento supervisionado e usa pares (entrada e saída desejada) para ajustar os pesos da rede, por meio de um mecanismo de correção de erros. O treinamento ocorre em duas fases: *forward* e *backward*, e os dados de cada fase percorrem na rede em um único sentido. A fase *forward* define a saída da rede para um dado padrão de entrada, e a fase *backward* confronta esse resultado com a saída desejada para calcular o erro e, em seguida, atualizar os pesos das conexões da rede.

Neste estudo, foi utilizado o algoritmo de Levenberg-Marquardt ([42]), que difere do algoritmo de *backpropagation* no método de aproximação. Enquanto este utiliza a descida

de gradiente como método de aproximação do mínimo da função erro, o algoritmo de Levenberg-Marquardt utiliza uma aproximação pelo método de Newton.

Em suma, uma rede neural artificial pode ser caracterizada por três aspectos principais: pelo esquema de conexões entre as camadas (arquitetura ou estrutura), pelo método de determinação dos pesos dessas conexões (algoritmo de treinamento ou aprendizagem) e pela função de ativação.

Normalmente, os dados fornecidos para uma rede neural são separados em dois grupos: dados de treinamento, que serão usados na fase de treinamento da rede e dados de teste, que serão utilizados para avaliar o desempenho da rede sob condições reais de utilização. Além dessa divisão, pode-se usar também uma subdivisão do grupo de treinamento, criando um subgrupo de validação, que é utilizado para verificar a eficiência da rede quanto a sua capacidade de generalização durante o treinamento, e pode ser empregado como critério de parada do treinamento.

Além disso, esses conjuntos são geralmente enfileirados em ordem aleatória para prevenção de tendências associadas à ordem de exposição dos dados. Como também pode ser necessário realizar um pré-processamento destes dados para torná-los mais apropriados à sua utilização na rede, através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato.

2.6 Máquina de vetores suporte (SVM - *Support Vector Machine*)

O SVM é uma técnica de aprendizado supervisionado que analisa padrões entre os dados de entrada, caracterizados por variáveis numéricas contínuas ou discretas, com os dados de saída, designados por um atributo dicotômico (problema de classificação). Esse modelo foi desenvolvido por Cortes et al. ([43]), e é baseado na ideia de encontrar o hiperplano ótimo que separa duas classes por meio da maximização da margem de separação das classes consideradas. A Figura 2.13 mostra um exemplo de classificação perfeita baseado no SVM linear.

Como o modelo matemático do SVM linear é um problema de programação quadrática, então a solução ótima encontrada é um ótimo global, ou seja, repetindo o algoritmo um número n de vezes, chega-se ao mesmo resultado, diferentemente do que ocorre com redes

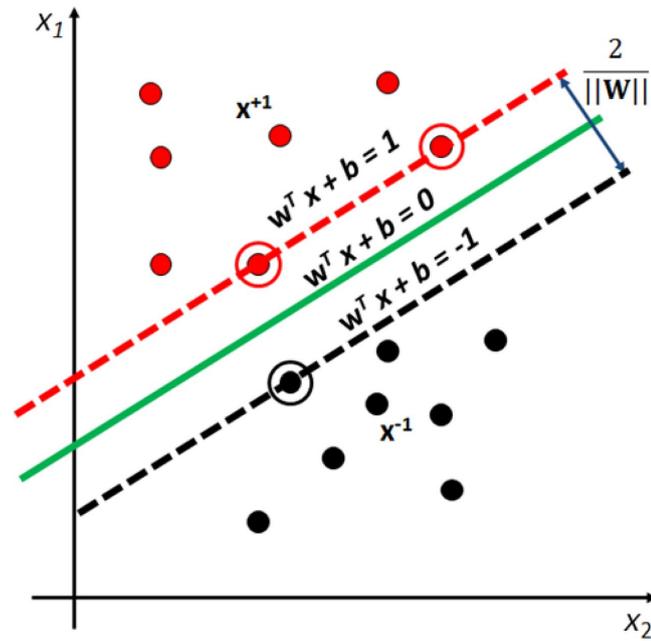


Figura 2.13: Classificação perfeita pelo hiperplano ótimo do SVM de margens rígidas (extraído de [44]).

neurais, as quais podem convergir para diferentes soluções ótimas locais em cada execução.

Posteriormente, o SVM foi adaptado para permitir a flexibilização na classificação, de forma que fosse possível a inclusão de elementos, originalmente de uma classe, classificados na outra classe. Nessa situação, tem-se o SVM linear com margens flexíveis (Figura 2.14).

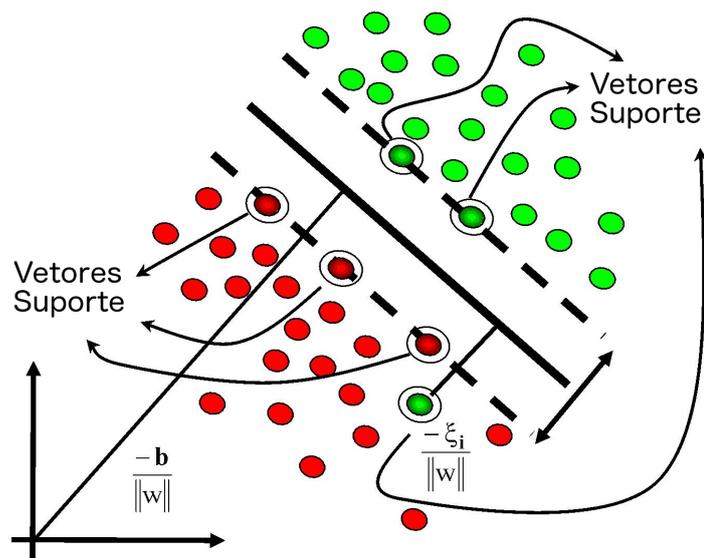


Figura 2.14: Classificação imperfeita pelo hiperplano ótimo do SVM de margens flexíveis (extraído de [45]).

Conforme a referência [46], aplicações complexas no mundo real requerem hipóteses

mais expressivas que espaços de funções lineares. Deste modo, outra forma de avaliar este problema é que frequentemente a variável explicada não pode ser expressa como uma simples combinação linear dos atributos considerados, mas, geralmente, requer que mais características abstratas dos dados sejam exploradas ([46]).

Por outro lado, para generalizar o SVM em problemas de classificação não-linear e com margens flexíveis, as funções *kernel* (Definição 1) foram inseridas no mesmo. Assim, as variáveis iniciais de entrada são mapeadas pela função *kernel* para o espaço de características, com dimensão superior ao espaço de entrada inicial. Tal fato aumenta a probabilidade de separação linear no espaço de características. Essa explicação é ilustrada, e facilita o entendimento desse processo, na Figura 2.15.

Definição 1 (Função *kernel*). *Um kernel é uma função K tal que para todo $\mathbf{x}, \mathbf{z} \in X$ satisfaz $K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z}) \rangle$ onde ϕ é uma função de X para um espaço de características com produto interno F , onde $\phi : \mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x}) \in F$.*

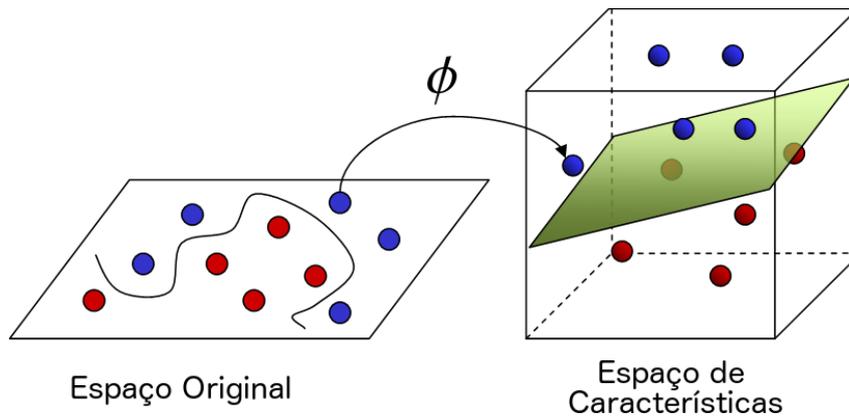


Figura 2.15: Classificação perfeita pelo hiperplano ótimo do SVM com *kernel* não-linear. Classificação perfeita pelo hiperplano ótimo do SVM com *kernel* não-linear (extraído de [47]).

Segue um exemplo extraído da referência [48]: considere um espaço de entrada $X \subseteq \mathbb{R}^2$ juntamente com a função de característica $\phi : \mathbf{x} = (x_1, x_2) \mapsto \phi(\mathbf{x}) = \phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2) \in F = \mathbb{R}^3$.

A hipótese do espaço de funções lineares em F poderia ser:

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z}) \rangle &= \\ \langle (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2), (z_1^2, z_2^2, \sqrt{2}z_1z_2) \rangle &= \\ x_1^2z_1^2 + x_2^2z_2^2 + 2x_1x_2z_1z_2 &= \\ (x_1z_1 + x_2z_2)^2 &= \\ \langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle^2 & \end{aligned}$$

Logo, a função $K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle^2$ é uma função *kernel* com seu espaço de característica $F = \mathbb{R}^3$. De acordo com [48], isto significa que pode-se computar o produto interno entre as projeções de dois pontos no espaço de características sem explicitamente calcular suas coordenadas.

Com a adaptação adequada o SVM pode tratar problemas de regressão, permitindo resolver um leque maior de problemas associados ao mapeamento entre variáveis de entrada explicativas e variáveis de saída explicadas contínuas, o que será abordado com mais detalhes a seguir.

Regressão com Máquina de Vetores Suporte (SVR)

A primeira versão do SVM com regressão foi proposta em 1997 por [49], e foi denominada como Regressão com Máquina de Vetores Suporte (SVR - *Support Vector Regression*). Dentre as vantagens do SVR, vale citar que este método não pressupõe linearidade do modelo, desde que se adote função *kernel* não-linear, não necessita de normalidade dos resíduos e adapta-se facilmente a dados de alta dimensionalidade (número de instâncias menor que o número de atributos).

Seja o conjunto de treinamento $\{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\} \subset (\mathcal{X} \times \mathbb{R})$ composto de n instâncias e d atributos, onde $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$ (sendo $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$) e $y_i \in \mathbb{R}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. O conjunto \mathcal{X} denota o espaço com os padrões de entrada e y_i é a variável de saída a ser predita, que neste caso é contínua para todo i . Conforme a referência [50], na regressão baseada no SVR, o objetivo é encontrar uma função f que tem desvio máximo ε dos alvos y_i efetivamente obtida para todos os dados de treino, e ao mesmo tempo é tão plana quanto possível. Em outras palavras, não se preocupam com os erros, enquanto eles são menores que ε , mas não é permitido qualquer desvio maior do que este.

Inicialmente, serão consideradas somente as funções lineares, as quais podem ser descritas pela Equação (2.69) e que mapeiam linearmente as variáveis do espaço de entrada \mathbb{R}^d na variável do espaço de saída \mathbb{R} .

$$f(x) = \langle w, x \rangle + b \quad (2.69)$$

A notação $\langle w, x \rangle = w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_dx_d$ denota o produto interno em \mathcal{X} . E, matematicamente, quando busca-se por uma função não-linear mais plana quanto possível, pretende-se reduzir sua complexidade, o que pode ser obtido pela minimização da norma do vetor w , isto é, $\|w\|^2 = \langle w, w \rangle$. Com $w, x \in \mathbb{R}^d$ e $b \in \mathbb{R}$, onde w e b significam, respectivamente, a inclinação e o intercepto do hiperplano a serem estimados a partir da otimização do modelo matemático constituído pela função objetivo, indicada pela Equação (2.70), e pelo conjunto de restrições ilustrado em (2.71).

$$\text{Minimizar } Z(w, b) = \frac{1}{2}\|w\|^2 \quad (2.70)$$

sujeita às restrições:

$$\begin{cases} y_i - \langle w, x_i \rangle - b \leq \varepsilon \\ \langle w, x_i \rangle + b - y_i \leq \varepsilon \end{cases} \quad (2.71)$$

Salienta-se ainda, segundo [51], que uma premissa no modelo expresso pela função objetivo (2.70) e pelas restrições (2.71) é indicativo que existe a função f que aproxima todos os pares (x_i, y_i) com uma precisão ε , ou seja, o problema de otimização convexo é viável. Entretanto, algumas vezes, tal problema pode ser inviável, ou até mesmo, pode-se permitir alguns erros superiores à margem ε . Deste modo, para flexibilizar o modelo anterior a aceitar erros superiores ao desvio ε , são introduzidas as variáveis de folga ξ_i e ξ_i^* . Com isso, obtém-se a formulação proposta pela referência [50] denotada pelas Equações (2.72) e (2.73).

$$\text{Minimizar } Z(w, b, \xi_i, \xi_i^*) = \left[\frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \right] \quad (2.72)$$

sujeita às restrições:

$$\begin{cases} y_i - \langle w, x_i \rangle - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ \langle w, x_i \rangle + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \quad (2.73)$$

Outra forma de escrever a Equação (2.72) é mostrada em (2.74).

$$\text{Minimizar} \left[\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n L_\varepsilon(f(x_i), y_i) \right] \quad (2.74)$$

Assim, a função de perda ε -insensível é definida como indicado em (2.75).

$$L_\varepsilon(f(x_i), y_i) = \begin{cases} 0 & \text{se } |y_i - f(x_i)| \leq \varepsilon; \\ |y_i - f(x_i)| - \varepsilon & \text{se } |y_i - f(x_i)| > \varepsilon. \end{cases} \quad (2.75)$$

Por outro lado, de acordo com a Equação (2.74), o termo $\frac{1}{2} \|w\|^2$ controla a complexidade do modelo e o termo $L_\varepsilon(f(x_i), y_i)$ traduz a função de perda ε -insensível que penaliza somente os valores fora do tubo, ou seja, com erros maiores que ε . Já o parâmetro C é chamado de constante de regularização e traduz o equilíbrio entre a complexidade de f e a quantidade de desvios maiores do que ε que podem ser tolerados ([52]). Assim, quanto menor o tubo (menor ε), mais complexa é a função f e, de forma contrária, quanto maior o tubo (maior ε), menos complexidade é necessária para f . A função de perda ε -insensível com SVR linear é mostrada na Figura 2.16.

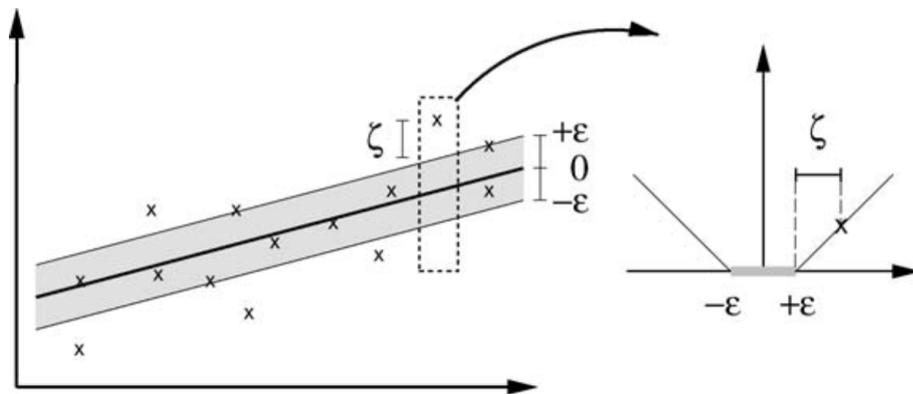


Figura 2.16: A função de perda com margem flexível com SVR linear (adaptado de [51]).

Conforme a referência [52], com a introdução de variáveis de folga ξ_i e ξ_i^* e devidas manipulações algébricas, as Equações (2.70) e (2.71) se transformam na função objetivo

(2.72) e nas restrições (2.73). Tal formulação é chamada de primal, pois a regressão é baseada no espaço original dos dados. Já as variáveis de folga têm por objetivo possibilitar a ocorrência de vetores fora do tubo, sendo os mesmos chamados vetores suporte, pois são somente eles que contribuem para a regressão. Desta forma, todos os outros vetores dentro do tubo podem ser removidos após a construção do modelo. Essa propriedade permite que o SVR modele relações em que o número de variáveis dependentes seja superior ao número de instâncias na amostra de treinamento.

No caso dos padrões de entrada x_i não possuírem relação linear com a variável dependente designada pelos valores y_i , a função f do modelo primal é reformulada para o modelo dual como mostra a Equação (2.76). Com isso, o espaço original é mapeado para um novo espaço, denominado espaço de características, por meio da função ϕ e do produto interno $K(x_i, x_j) = \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle$, sendo K chamada de função *kernel*. Esta função traduz a relação subjacente entre os dados de entrada e os dados de saída.

$$f(x) = \left[\sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle \right] + b \quad (2.76)$$

As variáveis duais α_i e α_i^* representam os multiplicadores de Lagrange que satisfazem as desigualdades e que podem ser obtidos pela Equação (2.77) e pela Equação (2.78).

$$\text{Maximizar } Q(\alpha_i, \alpha_i^*) = \left\{ -\frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*) K(x_i, x_j) \right] - \varepsilon \left[\sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) \right] + \left[\sum_{i=1}^n y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \right] \right\} \quad (2.77)$$

sujeita às restrições:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ \alpha_i, \alpha_i^* \in [0, C] \end{cases} \quad (2.78)$$

Isto é chamado de expansão de vetores suporte, isto é, w pode ser determinado por uma combinação linear dos padrões de treinamento x_i . Com essa observação, conclui-se que a representação da complexidade de uma função por vetores suporte é independente da dimensionalidade do espaço de entrada \mathcal{X} , mas depende somente do número de vetores suporte ([51]).

Uma primeira forma para tratar do SVR não linear seria realizar um pré-processamento dos dados de entrada para o espaço de características a partir da função $\phi : \mathcal{X} \mapsto F$, e, em seguida, aplicar o SVR linear padrão nos dados transformados. Com isso, a linearidade da regressão é obtida no espaço de características e não no espaço original como pode ser notado na Figura 2.17. Entretanto, esses dois passos em problemas com uma grande quantidade de dados de treinamento torna-se o SVR computacionalmente inviável. Para superar essa dificuldade, são escolhidos funções *kernel* que podem ser escritos em função dos dados de treinamento, com isso, o cálculo do produto interno entre os vetores transformados do espaço de característica não é mais necessário. Esse cômputo é feito implicitamente pela função *kernel* baseando-se nos dados de treinamento, o que é feito em um único passo.

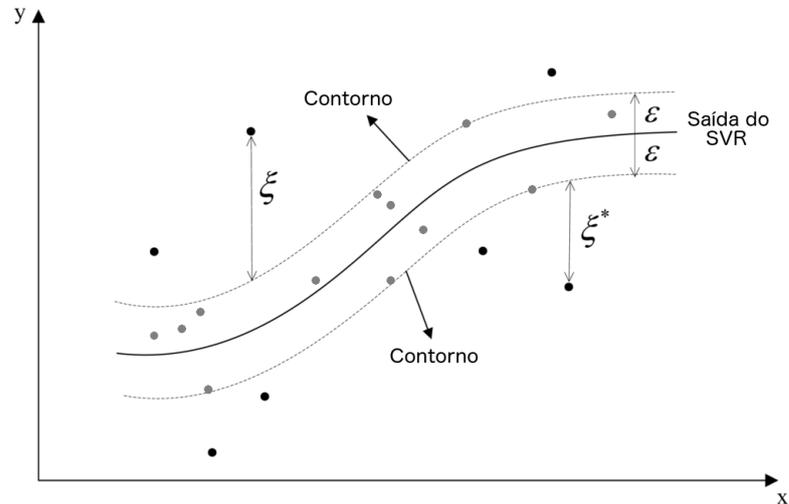


Figura 2.17: Regressão com *kernel* não linear com função de perda ε -insensível - os círculos em preto são os vetores suportes (adaptado de [53]).

A função *kernel* linear é calculada a partir da Equação 2.79, sendo C e ε os únicos parâmetros dessa função *kernel*.

$$K(x_i, x_j) = \langle x_i, x_j \rangle \quad (2.79)$$

A função *kernel* baseada na função de base radial (RBF - *Radial Base Function*) é um *kernel* de propósito geral quando não se tem conhecimento *a priori* sobre os dados ([54]). Esse *kernel* é computado pela Equação 2.80 e possui o parâmetro γ que deve ser

escolhido adequadamente.

$$K(x_i, x_j) = \exp(\gamma \|x_i - x_j\|^2) \quad (2.80)$$

Como sugere a referência [48], os passos para a execução da abordagem do SVR baseada em *kernel* são:

- (i) os dados são incorporados em um espaço vetorial chamado espaço de características;
- (ii) as relações lineares são procuradas entre as imagens dos vetores do espaço original, as quais pertencem ao espaço de características;
- (iii) os algoritmos são implementados de tal forma que as coordenadas dos pontos incorporados não são necessários, apenas o resultado do produto interno entre todos os pares;
- (iv) os produtos internos emparelhados podem ser calculados eficientemente a partir dos dados originais usando uma função *kernel*.

Caso os parâmetros do SVR/SVM sejam otimizados, tem-se uma efetividade no ajuste do modelo aos dados e na generalização das predições, como é discutido em [52].

2.7 Métricas para comparar modelos

No presente estudo, 5 diferentes parâmetros estatísticos foram empregados para avaliar o desempenho dos modelos de predição. Os parâmetros incluem: erro percentual médio absoluto (MAPE - *mean absolute percentage error*), erro médio quadrático (RMSE - *root mean square error*), coeficiente de correlação de Pearson (r), coeficiente de determinação (R^2) e coeficiente de determinação ajustado (\bar{R}^2), que são definidos matematicamente pelas Equações (2.81), (2.82), (2.83), (2.84) e (2.85), respectivamente:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2} \quad (2.81)$$

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\left| \frac{y_i - p_i}{y_i} \right| \right) \quad (2.82)$$

$$r = \left(\frac{\sum_{i=1}^n [(y_i - \bar{y})(p_i - \bar{p})]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^n (p_i - \bar{p})^2}} \right) \quad (2.83)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2.84)$$

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-(k+1)}(1 - R^2) \quad (2.85)$$

onde n é o número de amostras, y_i é o valor observado, p_i é o valor predito, \bar{y} é a média do valor observado, \bar{p} é a média do valor predito e k é o número de variáveis de entrada.

Dentre esses parâmetros estatísticos, o MAPE será o único parâmetro utilizado nas avaliações de todas as etapas deste estudo. Entretanto, os outros parâmetros serão utilizados para auxiliar na avaliação do emprego dos métodos de predição RNA e SVR. Essa avaliação é descrita mais adiante, na Seção 6.1.

A métrica estatística MAPE é adimensional e fornece um meio efetivo de comparação do erro residual para cada valor observado com o seu respectivo valor predito. Assim, valores pequenos de MAPE indicam desempenho melhores do modelo empregado.

O RMSE é uma medida que compara os valores observados com os respectivos valores preditos e calcula a média dos quadrados dos erros residuais. Desse modo, um baixo valor de RMSE indica um bom desempenho de predição do modelo. Entretanto, o RMSE confere mais peso para grandes erros.

O coeficiente de correlação de Pearson (r), o coeficiente de determinação (R^2) e o coeficiente de determinação ajustado (\bar{R}^2) medem o poder de associação entre duas variáveis, e são dependentes das relações lineares entre os valores preditos e observados, e as vezes podem gerar resultados tendenciosos quando essa relação não é linear ou quando os valores contém muitos valores discrepantes; para uma perfeita associação entre os valores observados e preditos, o valor de r e R^2 devem ser 1. O método \bar{R}^2 previne um valor alto de R^2 proveniente da inclusão de inúmeros atributos de entrada, no qual penaliza a inclusão de atributos pouco explicativos (variáveis dependentes).

2.8 Técnica de validação cruzada k-fold

A validação cruzada é uma técnica frequentemente usada para avaliar a capacidade de generalização de um modelo, a partir de um conjunto de dados ([55]). Além disso, essa técnica é largamente empregada em problemas em que o objetivo da modelagem é a predição.

Nesse sentido, com a finalidade de avaliar a capacidade de generalização de um modelo a partir de um conjunto de dados, foi aplicada a validação cruzada pela técnica *k-fold* para minimizar a tendência associada com amostragens aleatórias de dados para treinamento e teste deste estudo.

Esse esquema de validação cruzada pela técnica *k-fold* é comumente utilizado em diversos estudos de predição das propriedades mecânicas do concreto: [56, 20, 22, 57, 58]. De fato, a referência [55] descreve que a técnica *k-fold*, com $k = 10$, é ótima, ou seja, por meio desta técnica, consegue-se o tempo mínimo necessário para se realizar os testes com variação e viés aceitáveis em um processo de validação. A Figura 2.18 mostra uma representação gráfica da técnica *k-fold*, com $k = 4$.

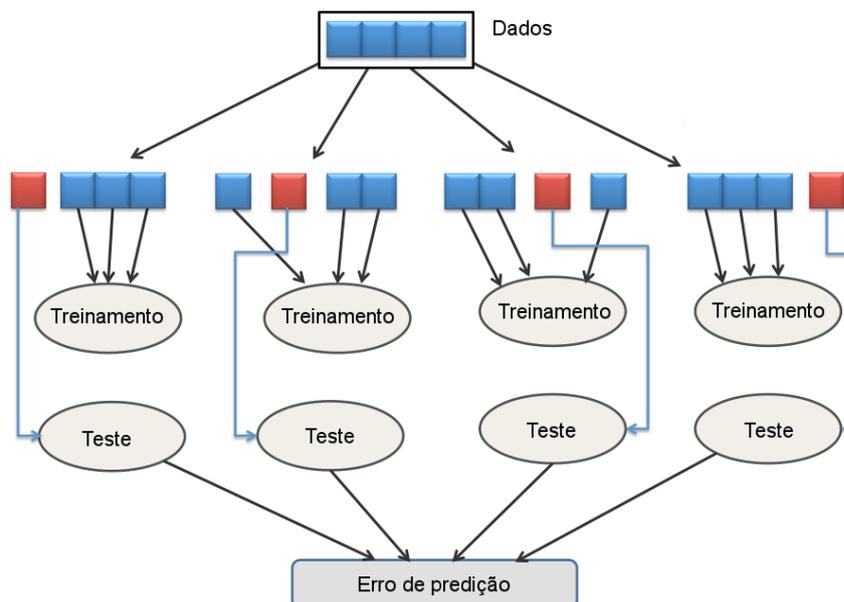


Figura 2.18: Exemplo do esquema de particionamento e execução de validação cruzada por meio da técnica *k-fold*, com $k = 4$ (adaptado de [59]).

Assim, para determinar o desempenho do modelo desenvolvido neste trabalho, foi utilizada uma abordagem estratificada de validação cruzada da técnica *k-fold*, com $k = 10$. Por conseguinte, todo o conjunto de dados foi dividido em 10 subconjuntos (*fold*), da seguinte forma:

1. reorganização do conjunto original de dados aleatoriamente;
2. seleção de um décimo ($1/10$) dos dados do conjunto aleatório de dados (1º subconjunto);
3. remoção dos dados selecionados do conjunto aleatório de dados;
4. repetição dos passos 1 ao 3 oito vezes (2º ao 9º subconjuntos); e
5. atribuição dos dados restantes em um último subconjunto (10º subconjunto).

A partir dos 10 subconjuntos distintos, obtidos pelo processo descrito anteriormente, cada subconjunto foi usado nas dez execuções de treinamento e validação. Essas execuções consistiram no uso de um subconjunto para teste e os subconjuntos restantes para treinamento do modelo, e, por fim, o conjunto de teste foi utilizado para validar a precisão do modelo. A precisão do algoritmo é então expressa como a precisão média obtida pelos 10 modelos de validação criados.

2.9 Workflow científico

Um *workflow* científico é uma descrição dos passos para executar um experimento específico, incluindo seus artefatos e processos. Um Sistema de *Workflow* Científico é uma ferramenta computacional para automatizar a execução de um *workflow*, permitindo que os pesquisadores criem e executem experimentos computacionais, dado um conjunto de serviços e informações disponíveis em um ambiente computacional ([60]).

De uma maneira geral, um *workflow* científico necessita coletar, gerar e analisar uma grande quantidade de dados heterogêneos, que é, normalmente, a essência do seu trabalho. Assim, o uso de sistemas de *workflows* científicos tem como sua principal propriedade a flexibilidade, que pode ser definida como: a facilidade de se dar manutenção nos *workflows*; de usar dados heterogêneos; de fazer o acompanhamento do processamento; e de fazer a análise dos resultados. Essas características são de grande importância para aumentar a eficiência do trabalho do pesquisador ([61]).

A concepção formal de *workflow* foi criada inicialmente sob a forma de ferramentas e tecnologias no mundo dos negócios, com objetivo de organizar e gerenciar fluxos de trabalho propostos por empresas comerciais. A principal preocupação com os *workflows*

de negócios estava relacionada com a segurança e a integridade na sequência das ações ([62]).

Entretanto, em 1996, a *Workflow Management Coalition* definiu o *workflow* como sendo “a automação de processos de negócios, no todo ou em partes, no qual documentos, informações ou tarefas são passadas de uma para outra ação, de acordo com o conjunto de regras de procedimentos” ([63]). Outra definição de *workflow* denota a execução controlada de múltiplas tarefas em um ambiente de elementos processados de forma distribuída. *Workflows* representam um conjunto de atividades que podem ser executadas com suas relações interdependentes, suas entradas e suas saídas ([64]).

Já a referência [63] define o *workflow* científico como uma automação de processos científicos no qual tarefas são estruturadas e baseadas nas suas dependências de controle e dados. Outra referência [65] define *workflow* científico como um processo automatizado que combina processos e dados em um conjunto de passos estruturados para implementar soluções computacionais para um problema científico.

No início, os *workflows* científicos eram criados através de instruções com o intuito de automatizar várias tarefas. Essas instruções eram construídas utilizando-se linguagens textuais, e, em versões mais recentes, a inclusão de sistemas gráficos facilitou muito a construção e manutenção de *workflows*. Uma ilustração de interface gráfica do sistema de *workflow* científico Taverna pode ser vista na Figura 2.19. No exemplo tem-se, à direita, um modelo de *workflow* científico em forma de diagrama, à esquerda, serviços web disponíveis para serem incorporados ao *workflow* e os componentes já adicionados ao modelo de *workflow* científico.

Outras vantagens de se usar *workflow* em trabalhos científicos, além da flexibilidade, são a divisão do trabalho e o controle avançado da execução. Por divisão do trabalho entende-se que o processamento de tarefas é realizado em máquinas remotas ou em *clusters*. E o controle avançado da execução é um conjunto de funcionalidades com o propósito de acompanhar a computação das tarefas, tais como, opções de visualização de variáveis, pausa, resumo e parada da computação.

Um modelo de *workflow* científico pode ser definido como um projeto criado pelo usuário em que os componentes são organizados e o fluxo de processamento é estabelecido entre esses componentes. A Figura 2.20 ilustra um exemplo de modelo de *workflow* científico com seus componentes e conexões. Nessa figura, os retângulos representam

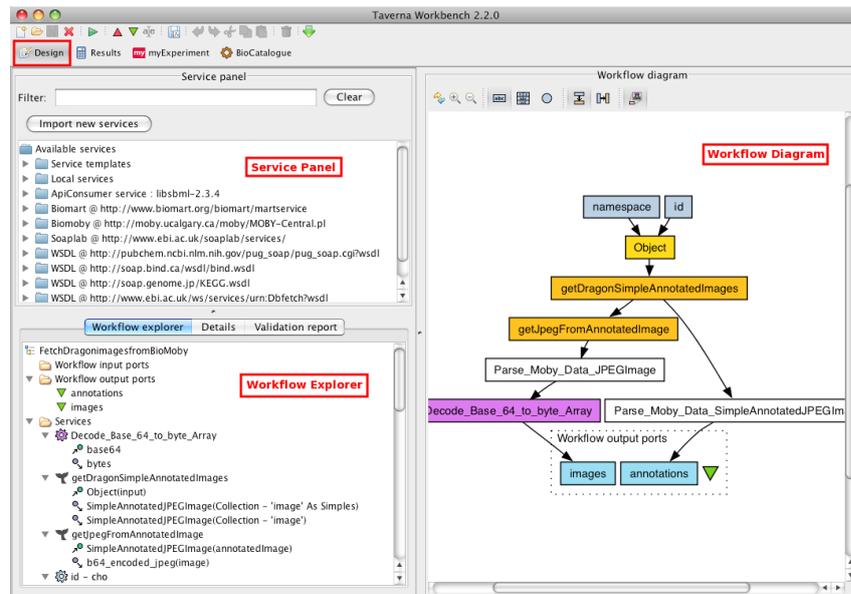


Figura 2.19: Interface gráfica do sistema de *workflow* científico Taverna (extraído de [66]).

as diversas tarefas a serem processadas, as setas definem o fluxo de processamento entre elas, e as tarefas são identificadas por nomes sugestivos de suas atividades.

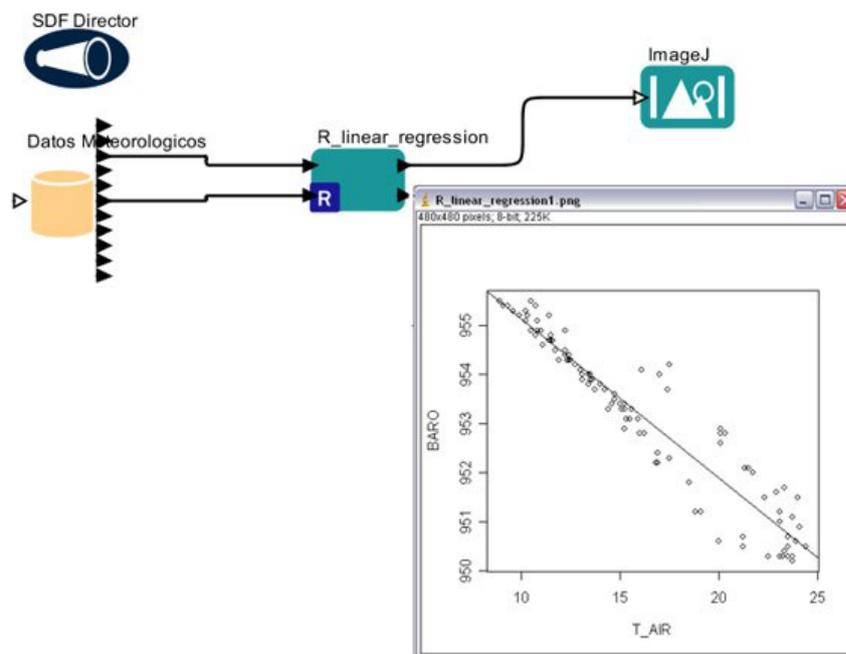


Figura 2.20: Exemplo de um modelo de *workflow* científico criado no sistema de *workflow* científico Kepler (extraído de [67]).

Por mais que um modelo de *workflow* científico possa ser representado de forma gráfica na interface do sistema, as linguagens textuais são mais indicadas para armazenar e transferir dados. Nesse sentido, os *workflows* criados em sistemas gráficos geralmente são

convertidos para um formato textual a fim de facilitar sua manipulação pelos sistemas.

2.10 Many-task computing

A computação de muitas tarefas (MTC - *many-task computing*, em inglês) é um termo em ciência da computação utilizado para descrever o uso de diversos recursos computacionais em curto período de tempo, a fim de realizar muitas tarefas computacionais. Essas tarefas podem ser intensivas em computação ou em dados, pequenas ou grandes, usar um único ou vários processadores. Além disso, o conjunto de tarefas pode ser ligeiramente ou fortemente acoplado, estático ou dinâmico, homogêneo ou heterogêneo. No entanto, a quantidade de computação, o número de tarefas agregadas e o volume de dados podem ser extremamente grandes ([68]).

Basicamente, MTC visa preencher a lacuna existente entre dois paradigmas da computação, a computação de alto rendimento (HTC - *high throughput computing*) e a computação de alto desempenho (HPC - *high performance computing*). Além disso, MTC é remanescente da computação de alto rendimento, mas difere na ênfase ao usar muitos recursos de computação em curtos períodos de tempo para processar muitas tarefas computacionais, onde as métricas primárias são medidas em segundos (tais como, operações de ponto flutuante por segundo, tarefas por segundo, taxas de entrada/saída e megabytes/s), em oposição aos trabalhos (*jobs*, em inglês) por mês. MTC remete a computação de alto desempenho no que diz respeito a múltiplas atividades distintas, mas acopladas através de operações do sistema de arquivos ou passagem de mensagens. MTC ainda inclui aplicações acopladas de forma flexível, que geralmente são de comunicação intensiva, mas são desenvolvidas sem usar a interface padrão de passagem de mensagens comumente encontrada na computação de alto desempenho, chamando a atenção para as diversas tarefas computacionais que são normalmente heterogêneas.

Raicu ([68]) sustenta que baseado no interesse por parte de pesquisadores em viabilizar o uso de sistemas distribuídos em grande escala, cresceu o emprego de aplicações que tratam tarefas paralelas, que podem ser ligadas em *workflows*, na realização de experimentos científicos. Essas ligações podem ser realizadas através de modelos de acoplamento de tarefas mais flexíveis, como por exemplo, passagem de dados por meio de arquivos entre tarefas dependentes. Esta classe de aplicações de tarefas paralelas

é impossibilitada de usufruir do poder crescente de sistemas paralelos modernos, como supercomputadores, isso devido a falta de apoio eficiente nesses sistemas para o modelo de programação *scripting*.

Entretanto, com os avanços na pesquisa e a crescente complexidade das análises científicas, cada vez mais cientistas e pesquisadores utilizam as várias formas de *scripts* para automatizar processos de aplicação, de ponta a ponta, envolvendo coordenação de tarefas, rastreamento de proveniência e monitoramento das tarefas. Nesses *scripts*, são empregadas abordagens tipicamente fundamentadas em um modelo de computação fracamente acoplado, em que os dados são trocados entre as tarefas por meio de arquivos, bancos de dados ou documentos XML, ou uma combinação destes. Por outro lado, baseado no aumento do volume de dados, combinados com a crescente complexidade dos procedimentos e algoritmos de análise de dados, tornaram o processamento e exploração manual tradicionais desfavoráveis em comparação com os modernos processos de computação de alto desempenho automatizados por sistemas de *workflows* científicos.

Nessa perspectiva, o espaço do problema em questão pode ser dividido em quatro categorias principais, como ilustrado na Figura 2.21:

1. na extremidade baixa do espectro, no círculo cinza, tem-se baixo número de tarefas e tamanho pequeno de entrada, além de um forte acoplamento por meio de aplicações que fazem uso da interface de passagem de mensagens (MPI - *Message Passing Interface*, em inglês). Nesta categoria utiliza-se geralmente a computação de alta performance;
2. a medida que o tamanho dos dados aumenta, no círculo azul, passa-se para a categoria de análise, como mineração e análise de dados. Nesta categoria usa-se a computação de muitas tarefas;
3. com tamanho dos dados médio, mas com aumento do número de tarefas, no círculo amarelo, tem-se as aplicações fracamente acopladas que envolvem muitas tarefas. Nesta categoria emprega-se a computação de alto rendimento e computação de muitas tarefas;
4. por fim, a combinação de muitas tarefas e grandes conjuntos de dados, no círculo verde, tem-se à categoria de computação de muitas tarefas e intensiva em dados.

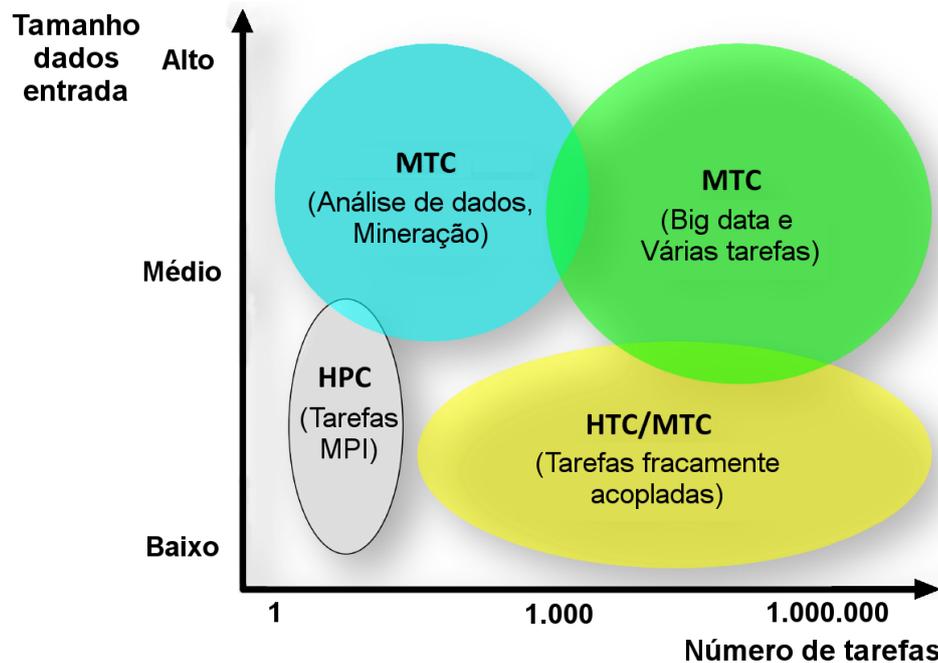


Figura 2.21: Tipos de problemas no que diz respeito ao tamanho dos dados e ao número de tarefas, onde MTC é computação de muitas tarefas (*many-task computing*), HTC é computação de alto rendimento (*high throughput computing*) e HPC é computação de alto desempenho (*high performance computing*) - (adaptado de [68]).

Além disso, várias aplicações são melhor adaptadas para computação MTC do que para HTC ou HPC. Uma característica dessas aplicações é possuir um grande número de tarefas pequenas e paralelas, que é um padrão comum observado em muitas aplicações científicas. Essas aplicações também usam arquivos ao invés de mensagens, como em MPI, para comunicação intra-processo, o que tende a tornar esses aplicativos intensivo com relação aos dados. Por outro lado, MTC pode ser empregado não somente aos ambientes HTC tradicionais, como *clusters* e *grids*, mas também aos supercomputadores.

Como afirma Raicu ([68]), os atuais sistemas HPC existentes são uma plataforma viável para hospedar aplicativos MTC. Também reitera que o MTC é uma definição mais ampla do que a HTC, permitindo tarefas mais refinadas, que sejam independentes bem como dependentes entre si, e viabilizando assim a coexistência de aplicações acopladas e fracamente acopladas no mesmo sistema. Além disso, uma funcionalidade central para MTC é disponibilizar um suporte nativo para aplicativos de dados intensivos, uma vez que há uma diferença crescente entre o desempenho de armazenamento de sistemas de arquivos paralelos e a quantidade de poder de processamento dos equipamentos. Nessa perspectiva, à medida que aumenta o tamanho dos conjuntos de dados científicos e os recursos necessários para a análise, o local de armazenamento dos dados torna-se crucial

para o uso eficiente de sistemas distribuídos em larga escala para aplicações científicas e uso intensivo de dados.

Como as aplicações de HPC, e a ciência em si, as aplicações estão se tornando cada vez mais complexas abrindo novas portas para muitas oportunidades de aplicar o HPC de maneiras distintas. Assim, a definição de *many-task computing* leva a uma avaliação mais ponderada em relação aos aplicativos que não são fortemente acoplados via MPI e não são necessariamente paralelos: alguns têm apenas muitas tarefas simples que gerenciá-los é difícil, e outros operam ou produzem grandes quantidades de dados que precisam de gerenciamento de dados sofisticado. Existem também aplicações que envolvem conjuntos de MPI, essencialmente trabalhos em que cada tarefa é composta de tarefas MPI fortemente acopladas, e existem aplicações ligeiramente acopladas que têm dependências entre tarefas, mas normalmente utilizam arquivos para comunicação entre processos. Nessa perspectiva, a MTC tem como objetivo auxiliar no suporte a este tipo de aplicações de forma eficiente, em sistemas de grande escala, que envolve desafios técnicos substanciais e tem um grande impacto na ciência.

3 SWADE - Ferramenta computacional para automação de experimentos científicos

O processo de predição, que será descrito com mais detalhes nos capítulos seguintes, é razoavelmente complexo, pois envolve o desenvolvimento e estudo de dois métodos para se fazer a avaliação das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve. O primeiro, implementa uma modelagem computacional via MEF utilizando a plataforma computacional Cast3M e o segundo elabora modelos de regressão via inteligência computacional.

Nesse sentido, o número de simulações para alcançar resultados satisfatórios pode se tornar uma barreira para os pesquisadores, uma vez que as etapas necessárias para concluir todo o processo pode consumir muito tempo. Além disso, anotações sobre o estado da execução são imprescindíveis para melhorar a organização de todo o trabalho. Assim, os pesquisadores devem usar sistemas computacionais para auxiliar na execução de simulações, que demandam alto esforço computacional e informações sobre o andamento da execução do experimento.

Considerando-se este fato, uma ferramenta computacional que torne esse experimento *in silico*¹ menos complexo e que automatize as etapas necessárias para se realizar as predições, pode facilitar o processo de experimentação e melhorar a eficiência da pesquisa como um todo.

Assim, durante a elaboração deste estudo, foi desenvolvido o sistema de automação de *workflow* científico em ambiente distribuído (SWADE - *Scientific Workflow Automation in Distributed Environment*). Este sistema foi escrito em linguagem Java e emprega conceitos do paradigma denominado *many-task computing* e de *workflow* científico a fim de auxiliar na etapa de simulação numérica e redução de possíveis erros provenientes da interação humana nesse processo *in silico*. Nessa perspectiva, uma contribuição notável do SWADE é a aplicação desses conceitos, que aumenta a eficiência do experimento.

¹In silico: é uma expressão que significa “realizado em computador ou via simulação computacional”.

Além disso, o SWADE pode servir como uma importante ferramenta para auxiliar o desenvolvimento de trabalhos futuros, também em outras áreas do conhecimento. Na referência [61] são apresentadas diversas características e funcionalidades desejáveis para um sistema de *workflow* científico, que serão consideradas em futuras versões do SWADE. Essas funcionalidades englobam o suporte à modelagem, execução e proveniência dos *workflows* científicos.

Destacam-se como motivações determinantes para a criação do sistema SWADE os seguintes requisitos:

- disponibilizar uma linguagem simples para construção do *workflow*, que pudesse ser facilmente estendida com novas ações que viessem a ser suportadas pelo sistema;
- as novas ações poderiam ser advindas de código Java dentro do sistema ou, principalmente, a partir de programas externos; e
- ter um código de implementação leve que permita uma fácil adaptação do sistema para:
 - as características da plataforma computacional distribuída existente, no caso foram máquinas em uma intranet; e
 - uma política de escalonamento apropriada ao contexto dos experimentos científicos que seriam automatizados.

Visando explicitar a versatilidade do SWADE, optou-se por apresentar nesse ponto do texto sua aplicação em um outro exemplo ([69]). Trata-se de um exemplo preliminar, onde o SWADE foi empregado em uma dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional - UFJF ([70]) para realizar um ajuste de parâmetros do modelo de Dano Mecânico de Mazars aplicado a modelagem termo-hidro-mecânica de estrutura de concretos.

Nas seções que seguem, neste capítulo, um resumo sobre o exemplo preliminar é mostrado, além da arquitetura do SWADE. Em seguida serão mostradas as estratégias empregadas para automação eficiente das simulações numéricas para ajuste de parâmetros do modelo de Dano de Mazars. Entretanto, os resultados obtidos para a predição das características mecânicas do concreto, via SWADE, são apresentados nos capítulos posteriores, juntamente com seus respectivos resultados obtidos sem o uso desse sistema.

3.1 Arquitetura do SWADE

O SWADE foi desenvolvido com base em vários conceitos de *Many-Task Computing* (MTC), como o provisionamento de recursos de computação para realizar muitas tarefas, que podem ser de uso intensivo de processador ou de dados, tarefas pequenas ou grandes, estáticas ou dinâmicas, que façam uso de um ou vários processadores, entre outros. Além disso, o sistema SWADE emprega *workflow* científico para permitir que pesquisadores automatizem a execução de simulações, em modo sequencial e/ou paralelo, auxiliando assim na criação e execução de experimentos científicos computacionais.

O conjunto de recursos de processamento do SWADE, denominado *Pool* de processamento, permite a fácil inserção de novos nós de processamento na rede do sistema, tornando a capacidade de recursos computacionais escalável. Para conseguir isso, basta o proprietário da máquina, conectado à rede local ou à Internet com IP real, instalar e executar o SWADE no sistema e adicionar o endereço IP do outro computador, com o SWADE já instalado e executando. A Figura 3.1 ilustra a estrutura da arquitetura de rede do sistema SWADE, que descreve a rede de comunicação entre os nós e entre o sistema e usuário.

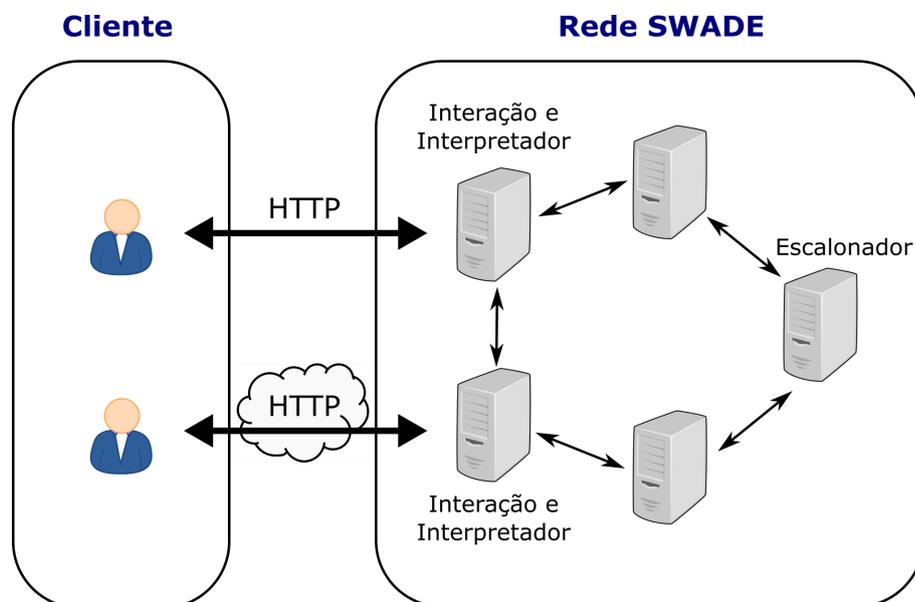


Figura 3.1: Arquitetura de rede do sistema SWADE, que ilustra a rede de comunicação dos nós de processamento e interação com o usuário. Os papéis que cada nó também são descritos: interação com o usuário, interpretador de *workflow* científico e escalador de tarefas.

Todos os nós de processamento são capazes de exercer a função de interpretar as

descrições do *workflow*, bem como realizar agendamentos e executar tarefas. Esses procedimentos são realizados por meio de protocolo próprio, tanto para comunicação entre os nós quanto para integração com programas de terceiros. Esse protocolo é simétrico, uma vez que qualquer nó na rede é capaz de assumir todas as funções necessárias para o funcionamento do sistema SWADE. Os nós também fazem a interface e interpretam as atividades de cliente que permitem a interação do usuário com o sistema, para criar *workflows* científicos e acompanhar a execução dos experimentos; para fazer a inserção e remoção de novos nós de processamento no sistema; para capturar os resultados após finalizado o experimento e para adicionar novas ações.

A responsabilidade de agendamento dos trabalhos em cada nó tem a colaboração de todos os nós, mas seu escalonador principal é centralizado. Um dos nós assume a função de planejador principal, para centralizar as informações que permitem o balanceamento durante o processamento de vários *workflows* científicos.

Atualmente, o SWADE tem implementado uma política de agendamento de execução de tarefas baseada no algoritmo de escalonamento por chaveamento circular, chamada de *Round-Robin*, que é responsável por definir em qual nó da rede determinada tarefa será executada considerando a disponibilidade das máquinas. Também armazena as tarefas a serem executadas em uma estrutura de dados do tipo fila, chamada de FIFO (*First In, First Out*), que possibilita ao sistema garantir o processamento das demandas na ordem de chegada. O algoritmo *Round-Robin* implementado pelo escalonador do SWADE mantém uma lista de endereços de todos os nós da rede, e a medida que as tarefas são criadas, elas são atribuídas para cada nó da lista, em sequência até o fim da lista, e ao chegar no final da lista, a atribuição das tarefas recomeça do início novamente. Entretanto, Silva ([71]) implementou e fez uma análise de novos escalonadores em uma versão anterior do sistema: *First Come First Serve* (FCFS) e *Greedy Randomized Adaptive Search Procedure* (GRASP).

A linguagem utilizada atualmente para descrever os *workflows* no SWADE é a LUA ([72]), que permite escrever códigos com: sequenciamento de ações, iteração, execução condicional, passagem de parâmetros, uso de variáveis e definição de funções. Na versão anterior, o próprio SWADE tinha um analisador simples que era responsável por interpretar o *workflow* descrito em linguagem textual. A grande vantagem de utilizar a linguagem LUA como interpretador é que ela já tem toda a estrutura de linguagem pronta,

além de diversas bibliotecas e funções, tais como, operações matemática, manipulação de textos, tratamento de erros, entre outras.

O SWADE também permite disponibilizar novas ações para compor os *workflows*, estendendo as funcionalidades a partir de arquivos XML e programas externos ou bibliotecas Java. Essas ações podem variar de natureza, como por exemplo: um comando do sistema operacional (Windows ou Linux); um programa executável (Java ou C); ferramentas de terceiros que podem ser executadas a partir da linha de comando (Matlab[®] ou Cast3M); serviços web; entre outros, adicionados sem necessidade de recompilar o sistema. Essas novas ações implementadas no SWADE recebem um nome mnemônico para ser usado dentro da linguagem LUA e são reconhecidas pelo SWADE em tempo de execução juntamente com os parâmetros associados. Os detalhes técnicos da ativação da ação são encapsulados em arquivos de configuração baseados em XML e carregados apenas uma vez, no momento da implantação, tornando a ação disponível para o usuário na forma de uma chamada de função, como por exemplo: `swade.castem ("script.dgibi")`.

As ações paralelas são executadas enviando-as para “processamento em segundo plano”, pela ação denominada *background*, onde o SWADE planeja e distribui todas as tarefas simultaneamente e automaticamente para todos os nós da sua rede, de acordo com a fila de execução e disponibilidade das máquinas gerenciado pelo escalonador, de maneira transparente para o usuário do sistema.

O código fonte leve do SWADE permite que os pesquisadores explorem diferentes aspectos de interesse relacionados a seus experimentos científicos com pouco esforço. As anotações simples em um arquivo XML, que definem como executar um programa externo, são suficientes para disponibilizar novos blocos de construção para usuários SWADE, como programas C, serviços web e biblioteca Java. Entretanto, para integrações mais complexas, basta criar uma biblioteca Java que faça a interface entre o sistema e o programa externo.

A interface disponível para o usuário construir, ativar e acompanhar a execução de *workflows* científicos é mostrada na Figura 3.2, que também ilustra a sintaxe da linguagem SWADE.

Um grande número de ferramentas computacionais, do tipo sistema de *workflow* científico, está disponível para uso ([73]), e essas ferramentas possuem funcionalidades semelhantes as do SWADE, entretanto, são usualmente voltadas para um ou outro aspecto do conjunto de fatores envolvidos nessa tarefa, sem atender no conjunto. A

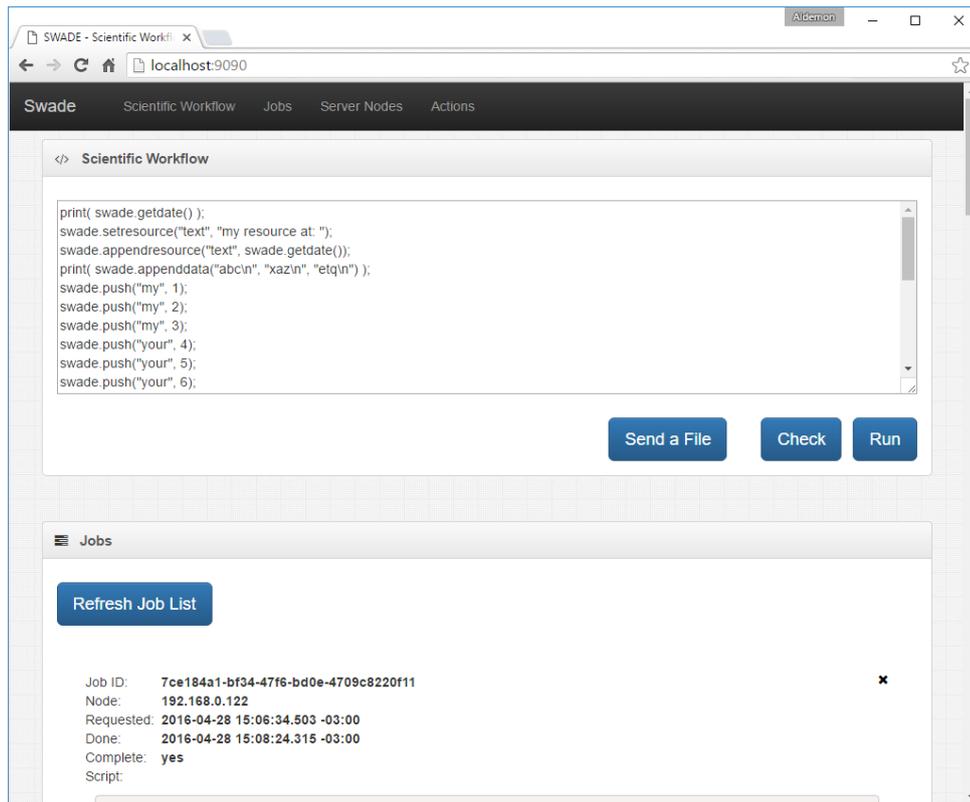


Figura 3.2: Interface do usuário para interação com o sistema SWADE contendo um código exemplo na linguagem LUA.

ferramenta Vistrails, por exemplo, é voltada para um eficiente mecanismo de rastreamento dos experimentos, área conhecida como proveniência ([74]). Já a ferramenta Kepler apresenta resultados expressivos na interface para manipulação de blocos de construção de experimentos, assim como na composição de modelos computacionais ([75]). A característica que diferencia o SWADE é seu mecanismo para estender o conjunto de ações executáveis, com uma administração distribuída em ambiente computacional heterogêneo, além de se adaptar facilmente ao ambiente do usuário.

3.2 Descrição geral do exemplo preliminar para a aplicação do SWADE

Neste exemplo preliminar, o SWADE foi utilizado para realizar um ajuste de parâmetros do modelo de Dano Mecânico de Mazars aplicado a modelagem termo-hidro-mecânica de estrutura de concretos. O resultado do ajuste de parâmetros obtido nesse trabalho foi empregado em uma dissertação de mestrado do PGMC/UFJF ([70]).

Os dados experimentais utilizados como referência foram obtidos no *Laboratoire de Mécanique et Matériaux du Génie Civil* (L2MGC), Universidade de Cergy-Pontoise, França ([76, 77]). As amostras testadas consistiram de bicamadas de concreto e rocha feitas de concreto convencional, concreto de alto desempenho e calcário (Figura 3.3), visando reproduzir uma amostra típica de uma estrutura de túnel. O objetivo foi submeter os blocos de dupla camada a temperaturas de até 600°C e 750°C, medindo a evolução da temperatura em pontos específicos ao longo da altura e observando os diferentes efeitos da temperatura nos dois tipos de concreto, rocha e região de interface.



Figura 3.3: Amostras de bicamadas feitas de concreto e rocha (extraído de [78]).

A Figura 3.4 mostra o esquema adotado para monitorar a evolução da temperatura durante os testes térmicos. Para cada amostra foram instalados cinco termopares ao longo do eixo central da amostra prismática, dispostos nas seguintes posições: a superfície superior do concreto, a metade da camada de concreto, a interface rocha-concreto, a metade da camada de rocha e a superfície inferior da rocha. Os blocos foram isolados com fibra de vidro (à exceção da superfície superior, que foi diretamente exposta ao aquecimento) de modo a assegurar um aquecimento unidirecional - para fins de simplificação quanto às simulações numéricas. As Figuras 3.5 e 3.6 mostram o aspecto típico dos blocos de concreto após aquecimento, claramente denotando os danos.

Sabe-se que a evolução da temperatura depende da integridade dos materiais testados. Assim, as informações experimentais obtidas a partir desses testes foram adotadas no presente estudo, conforme descrito na próxima seção. Mais detalhes sobre os procedimentos experimentais e o modelo THM estão disponíveis nas referências [77, 78, 79].

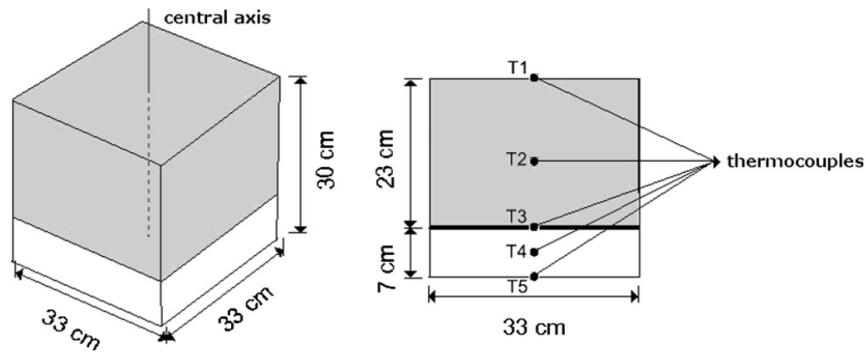
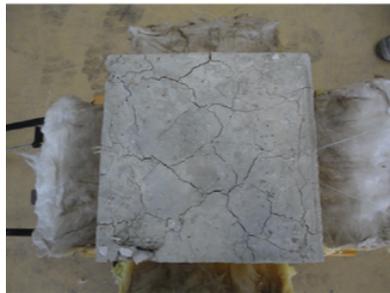


Figura 3.4: Geometria das amostras e localização dos termopares (extraído de [78]).



(a) Superfície aquecida.



(b) Superfície lateral.

Figura 3.5: CC-600 depois do aquecimento (extraído de [78]).



(a) Superfície aquecida.



(b) Superfície lateral.

Figura 3.6: CC-750 depois do aquecimento (extraído de [78]).

Ajuste de parâmetros para o modelo de Marzars

O concreto é um material que sofre degradação mecânica quando exposto a altas temperaturas. Este efeito pode ser representado por meio de modelos de dano, como o Modelo de Mazars ([80]). Em linhas gerais, o modelo assume que deformações levam a microfissuras distribuídas no material, o que causa degradação e afeta o comportamento macroestrutural do concreto.

O dano de Mazars é representado por uma grandeza escalar denominada variável de dano, D , dependente de seis parâmetros característicos obtidos a partir de testes

mecânicos destrutivos realizados em amostras de concreto: A_t , B_t , A_c , B_c , ϵ_{d0} e β .

Estes seis parâmetros são extraídos das curvas de tensão-deformação, e a variável de dano (D) é dada pela combinação linear de (D_t) e (D_c), como mostra as Equações (3.1)-(3.3).

$$D_t = \left(1 - \frac{\epsilon_{d0}(1 - A_t)}{\hat{\epsilon}} - \frac{A_t}{\exp[B_t(\hat{\epsilon} - \epsilon_{d0})]} \right) \quad (3.1)$$

$$D_c = \left(1 - \frac{\epsilon_{d0}(1 - A_c)}{\hat{\epsilon}} - \frac{A_c}{\exp[B_c(\hat{\epsilon} - \epsilon_{d0})]} \right) \quad (3.2)$$

$$D = \alpha_t^\beta D_t + \alpha_c^\beta D_c \quad (3.3)$$

onde $\hat{\epsilon}$ é a deformação equivalente, β é um valor escalar intrínseco ao material, e $\alpha_t^\beta + \alpha_c^\beta = 1$. A variável D assume valores variando de 0 a 1 e é um meio de quantificar o dano mecânico através de diminuição gradual do módulo de elasticidade. A Equação (3.4) apresenta a Lei de Hooke adaptada para tal condição.

$$\sigma = E_0(1 - D)\varepsilon \quad (3.4)$$

onde σ é a tensão, ε é a deformação e E_0 é o módulo de elasticidade do material não danificado.

Apesar da simplicidade do modelo expresso pelas Equações (3.1)-(3.4), os parâmetros experimentais A_t , B_t , A_c , B_c , ϵ_{d0} e β não são fáceis de medir. Isso devido à característica frágil dos concretos, o que torna bastante difícil obter a curva tensão-deformação adequada sob tração. Uma metodologia alternativa consiste na análise inversa - o que é possível com a ajuda de dados experimentais relativos à evolução de E sob diversas solicitações deletérias.

O presente experimento consistiu na avaliação dos seis parâmetros de Mazars a partir de dados experimentais compreendendo a evolução de E para um concreto submetido a temperaturas variadas, obtido por Xing, Z. ([76]). Em seguida, a evolução experimental da variável de dano D é dada pela Equação (3.5).

$$D(T) = 1 - \frac{E(T)}{E_0} \quad (3.5)$$

O comportamento mecânico das estruturas de concreto sob altas temperaturas foi

simulado através de um modelo termo-hidro-mecânico não-linear transiente (THM) e do Modelo Mazars. O software utilizado na análise foi o Cast3M, que é uma plataforma que aplica o Método dos Elementos Finitos na resolução de diversos problemas ([81]). Como a informação experimental não estava disponível para identificar diretamente os parâmetros de Mazars, adotou-se um procedimento de ajuste consistindo, basicamente, nas seguintes etapas:

- aplicação do modelo THM, via Cast3M, com um conjunto de parâmetros Mazars;
- avaliação numérica das curvas de evolução da temperatura; e
- comparação das curvas numéricas com as suas equivalentes experimentais.

3.3 Automação dos experimentos numéricos empregada para ajuste de parâmetros do exemplo preliminar

A estratégia que será descrita aqui busca apresentar uma abordagem para ajuste de parâmetros de um modelo na área de mecânica computacional que visa, simultaneamente, tratar o problema de forma eficiente, enquanto reduz a dificuldade de se realizar experimentos *in silico*.

A abordagem consiste em criar um *workflow* científico com objetivo de minimizar o espaço combinatorial de parâmetros ajustáveis e, para aumentar a eficiência do processo de busca, o sistema SWADE será utilizado para automatizar o processo e acelerar sua execução usando processamento distribuído.

O sistema SWADE foi aplicado para estimar os números de parâmetros característicos do modelo de Dano Mecânico de Mazars ([80]) por meio de procedimentos de análise inversa. Esses parâmetros foram obtidos a partir de curvas experimentais extraídas de amostras de concreto submetidas a altas temperaturas ([70]). Os seis parâmetros característicos do modelo de Mazars são: A_t , B_t , A_c , B_c , ε_{d0} e β .

Em um primeiro momento, a pesquisa consistiu na realização de simulações computacionais sem automação do experimento, o que levou a um longo período de experimentação. Assim, com base nestes testes, os parâmetros característicos do material

foram ajustados ao comparar a curva numérica com a curva experimental. A partir desses resultados, foi usada uma métrica estatística com o propósito de comparar o resultado numérico e o dado experimental, obtendo-se assim um valor para o erro do melhor ajuste de 0,1376, calculado pela raiz do erro médio quadrático (RMSE). Mediante o exposto, o conjunto de parâmetros encontrados foram: $A_t = 1,0$, $B_t = 5 \times 10^4$, $A_c = 1,5$, $B_c = 1500$, $\varepsilon_{d0} = 10^{-4}$ e $\beta = 1,06$.

Com o objetivo de melhorar a eficiência e eficácia desse processo, foi criada uma estratégia de ajuste de forma sistemática para executar as simulações numéricas no Cast3M variando cada parâmetro. Baseado nos dados experimentais e empíricos, a referência [80] afirma que os seis parâmetros podem variar de acordo com a Equação 3.6:

$$\begin{aligned}
 1,0 &\leq A_c \leq 1,5 \\
 0,7 &\leq A_t \leq 1,0 \\
 10^{-5} &\leq \varepsilon_{d0} \leq 10^{-4} \\
 1000 &\leq B_c \leq 2000 \\
 10^4 &\leq B_t \leq 10^5 \\
 1,0 &\leq \beta \leq 1,2
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Num primeiro momento, foi realizada uma Análise de Sensibilidade ([82]), e foi empregado o método de Morris (*One At a Time*, em inglês), para identificar o nível de dependência do modelo de Mazars em cada parâmetro de entrada, de modo a determinar qual quantidade contribui mais para a variabilidade da saída e, assim, reduzir a incerteza no resultado obtido.

A Figura 3.7 apresenta o resultado da análise de sensibilidade para os seis parâmetros de entrada (A_t , B_t , A_c , B_c , ε_{d0} e β). Nesta análise, o limite inferior de todos os parâmetros foi tomado como base para o resultado de comparação. Além disso, o espaço de busca de cada parâmetro, que compreendem os valores entre os limites superior e inferior, foi dividido em dez partes iguais para serem usados nas simulações numéricas: um parâmetro foi alterado por vez, enquanto os outros permaneceram fixos com os valores base.

Observa-se na Figura 3.7 que A_c e B_c foram os parâmetros que mais influenciaram na variabilidade da variável de saída, enquanto o parâmetro A_t o que menos influenciou. Deste modo, os valores de A_c e B_c demandam um maior grau de discretização comparados aos outros parâmetros.

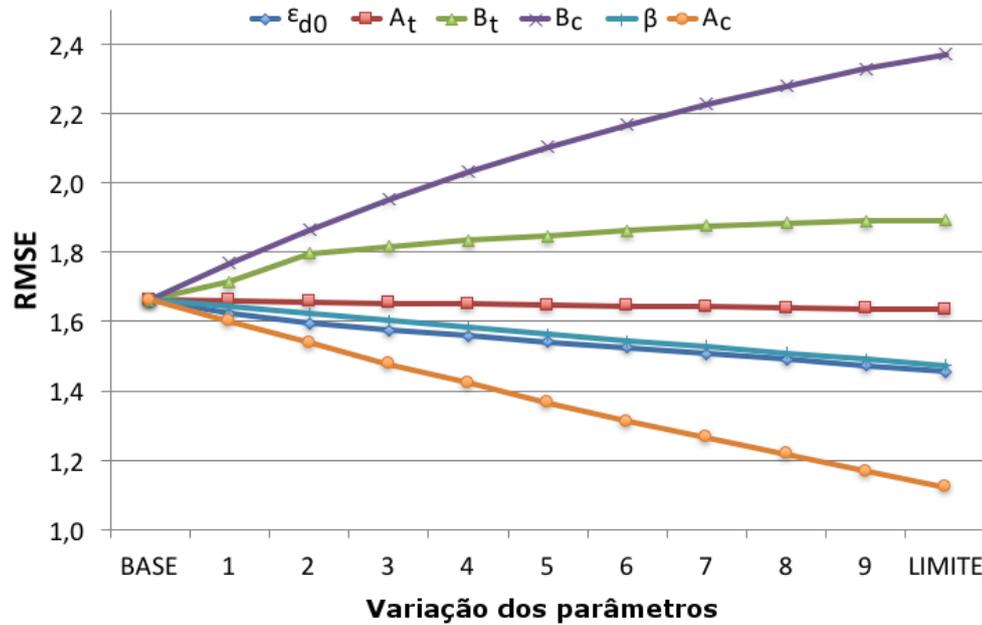


Figura 3.7: Análise de sensibilidade dos dados de entrada que mais contribuem para a variabilidade da variável de saída no modelo de dano mecânico de Marzars.

Em seguida, foram desenvolvidas duas abordagens com propósito de avaliar o ajuste desses parâmetros característicos. A primeira abordagem considerou que os parâmetros variavam numa progressão aritmética, respeitando os intervalos fornecidos pela Equação 3.6 ([80]), e essa abordagem gerou 6624 combinações diferentes de parâmetros. Após o processamento, o RMSE foi calculado para cada conjunto de parâmetros, em comparação com os dados experimentais. O algoritmo ilustrado na Figura 3.8 apresenta a lógica utilizada nesta primeira estratégia.

```

início
  inicializar_os_valores_dos_parâmetros;
  enquanto existir_combinação_de_parâmetros faça
    trocar_valor_dos_parâmetros;
    executar_o_bloco_em_paralelo[
      executar_a_simulação_numérica;
      guardar_valor_do_rmse;
    ];
    incrementar_os_valores_dos_parâmetros;
  fim enquanto
  aguardar_todos_os_blocos_em_segundo_plano_finalizarem;
  imprimir_resultado_de_todas_simulações;
fim

```

Figura 3.8: Algoritmo desenvolvido para analisar o ajuste de parâmetros na primeira abordagem via progressão aritmética.

Na segunda abordagem, assumiu-se intervalos mais amplos relativos aos seis

parâmetros, como dado na Equação 3.7.

$$\begin{aligned}
 1,0 &\leq A_c \leq 2,0 \\
 0,2 &\leq A_t \leq 1,0 \\
 10^{-5} &\leq \varepsilon_{d0} \leq 10^{-3} \\
 500 &\leq B_c \leq 2000 \\
 10^2 &\leq B_t \leq 10^5 \\
 0,9 &\leq \beta \leq 1,5
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

O objetivo deste experimento foi verificar se melhores resultados seriam alcançados fora dos limites iniciais, o que poderia indicar a necessidade de mais investigação experimental sobre os parâmetros característicos do material. Uma nova estratégia foi adotada para o ajuste, de acordo com o algoritmo ilustrado na Figura 3.9, consistindo nas seguintes etapas:

1. foram escolhidos seis valores igualmente espaçados para o primeiro parâmetro: os valores mínimo e máximo e quatro valores intermédios;
2. para cada valor escolhido acima, foi estabelecida uma combinação diferente de seis parâmetros;
3. as seis combinações foram processadas simultaneamente;
4. após o processamento, foram avaliados os resultados da simulação numérica (RMSE) e o conjunto de dados do melhor resultado de ajuste é escolhido como referência para a geração de um novo grupo de parâmetros;
5. se foi obtido um resultado com melhor ajuste, repete o procedimento a partir do passo 1;
6. se nenhuma melhoria foi observada, repita o procedimento a partir do passo 1, porém considerando o próximo parâmetro. Ou pare o procedimento após executar o experimento com todos os parâmetros.

Nesta segunda estratégia foram geradas 294 combinações de parâmetros para serem simuladas, seguindo o procedimento do algoritmo ilustrado na Figura 3.9.

```

início
  inicializar_os_valores_dos_parâmetros;
  enquanto existir_melhor_ajuste faça
    definir_seis_novos_valores_para_os_parâmetros;
    executar_o_bloco_em_paralelo[
      executar_as_seis_simulações_numérica;
      guardar_valores_do_rmse_de_cada_simulação;
    ];
    aguardar_todos_os_blocos_em_segundo_plano_finalizarem;
  fim enquanto
  imprimir_resultado_do_todas_simulações;
fim

```

Figura 3.9: Algoritmo desenvolvido para analisar o ajuste de parâmetros na segunda abordagem.

As duas estratégias adotadas foram mapeadas para a linguagem SWADE, gerando assim dois *workflows* científicos para serem executados. O SWADE foi configurado para operar com seis máquinas, que tinham a seguinte configuração: CPU i7 950 (3.07GHz), 8GB de RAM e rede com 100M bit/s.

Ao mapear a estratégia de cada experimento, uma série de características da linguagem SWADE são empregadas com o objetivo de otimizar o uso das máquinas que executam em paralelo cada simulação, que contém um subconjunto de combinações de parâmetros diferentes. Além disso, o SWADE gerencia os seus nós disponíveis na rede de processamento de forma transparente para o usuário.

Vale ressaltar que essa abordagem de automação, empregadas pelas duas estratégias, reduziu o tempo total de experimentação para 15,10% e 0,81%. Pois o tempo necessário para realizar um experimento completo passou de 27.158 minutos para 4102 e 220 minutos, respectivamente para cada estratégia.

A Figura 3.10 mostra as taxas de erro obtidas para os 6624 conjuntos de parâmetros simulados na primeira estratégia. Como pode-se notar na figura, o erro tende a diminuir à medida que a sequência de execuções avança, como resultado da estratégia aplicada.

O tempo de processamento total exigido para executar todas as simulações das 6624 combinações de parâmetros na primeira abordagem foi de 68 horas e 22 minutos. O menor RMSE conseguido após a execução do *workflow* científico foi 0,1188, que é melhor do que o resultado obtido a partir do procedimento de ajuste sem automação do experimento, de 0,1376. O conjunto de parâmetros que gerou o melhor resultado foi: $A_t = 0,7$, $B_t = 10^4$, $A_c = 1,5$, $B_c = 1000$, $\varepsilon_{d0} = 9 \times 10^{-5}$ e $\beta = 1,18$.

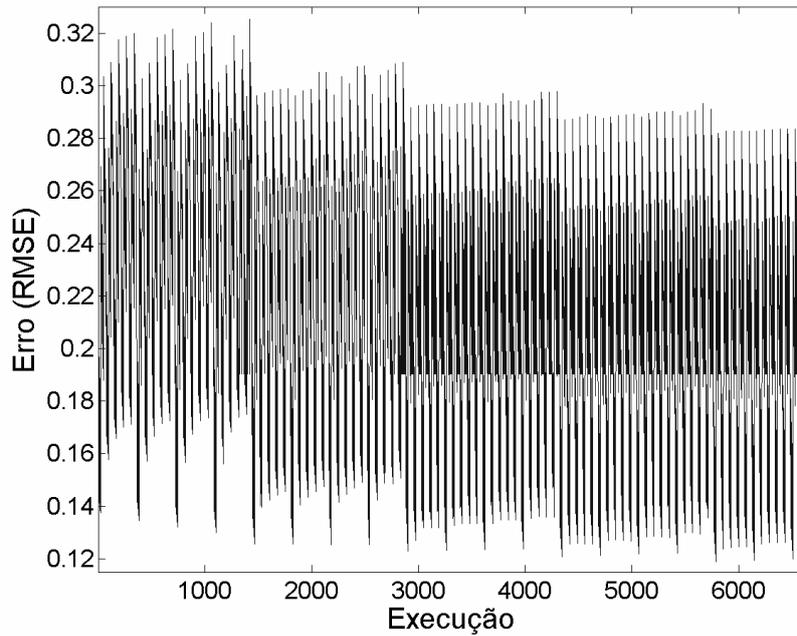


Figura 3.10: Valores do RMSE obtidos para os 6624 conjuntos de parâmetros simulados na primeira estratégia.

Os valores numéricos resultantes das simulações da segunda estratégia são mostrados na Figura 3.11. O tempo total de execução do *workflow* científico para essa abordagem foi de 2 horas e 42 minutos, 25 vezes mais rápido do que a abordagem anterior. O melhor resultado de RMSE encontrado neste experimento foi 0,0683, representando uma melhoria de 1,7 vezes em relação ao resultado anterior. O conjunto resultante de parâmetros foi: $A_t = 0,5$, $B_t = 10^3$, $A_c = 1,932$, $B_c = 1000$, $\varepsilon_{d0} = 3,3 \times 10^{-4}$ e $\beta = 1,0$. Considerando os limites definidos na Equação (3.6), este procedimento resulta em quatro parâmetros assumindo valores fora dos intervalos indicados pela referência [80]: A_t , B_t , A_c e ε_{d0} .

Para fins de comparação, a Figura 3.12 confronta a evolução dos danos experimentais no tempo com as curvas obtidas dos conjuntos de parâmetros das três estratégias aqui avaliadas. As curvas são nomeadas pelo valor RMSE correspondente. Como pode-se ver ao comparar as quatro curvas, quanto menor o valor de RMSE, melhor é o ajuste da curva.

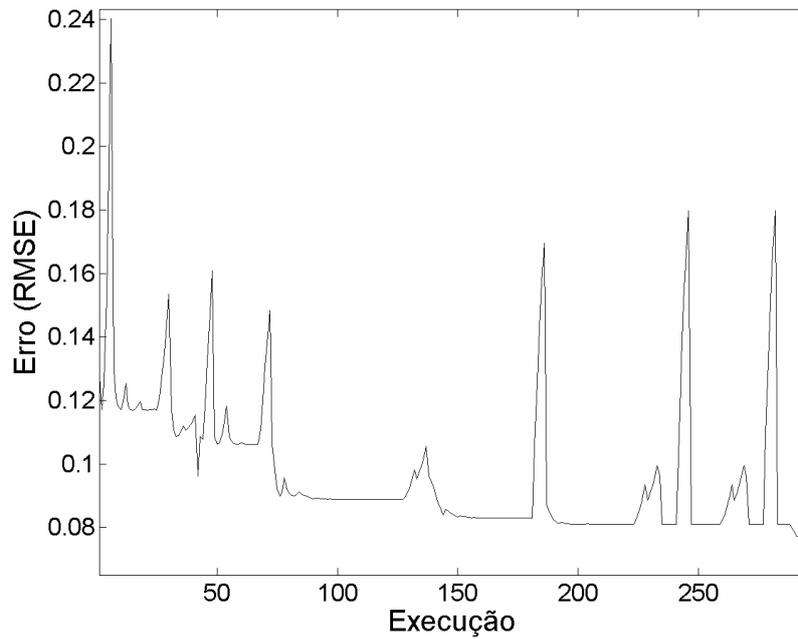


Figura 3.11: Valores do RMSE obtidos para os 294 conjuntos de parâmetros simulados na segunda estratégia.

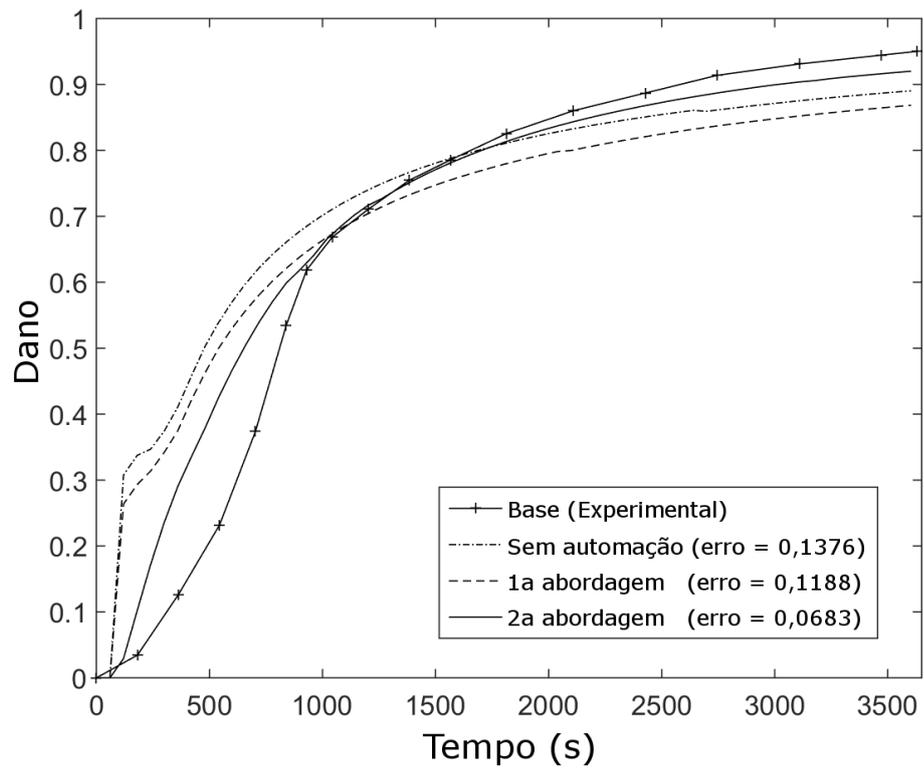


Figura 3.12: Curvas de dano comparando os modelos numéricos em cada estratégia (sem automação, primeira estratégia e segunda estratégia) a dados experimentais.

3.4 Avaliação de desempenho do SWADE

No presente estudo, o sistema SWADE foi empregado na automação de um experimento científico com o propósito de ajustar os parâmetros do modelo de Dano de Mazars. Nesse experimento, foram analisadas duas estratégias para ajustes de parâmetros característicos do modelo de Mazars. Como pode-se ver na Figura 3.12, ao comparar as quatro curvas, as estratégias computacionais empregadas foram capazes de melhorar o ajuste da curva ao realizar a busca dos parâmetros, pois quanto menor o valor de RMSE, melhor é o resultado.

Por outro lado, as estratégias de ajuste de parâmetros avaliadas também podem ser tratadas por meio de outros tipos de abordagens, como as meta-heurísticas usadas em Computação Evolutiva ([83]). No entanto, a principal contribuição aqui é avaliar a aplicabilidade do sistema SWADE, além de procurar alcançar bons resultados de experimentação e manter um compromisso com a eficiência do processo de experimentação.

Nesse sentido, o uso do SWADE consegue manter um bom equilíbrio no tratamento da eficiência da experimentação *in silico*, em cada etapa do seu ciclo de vida. Esta ferramenta também pode ser aplicada para automatizar experimentações envolvendo outras técnicas para resolver este problema de engenharia, como mencionado acima.

Algumas questões a serem investigadas neste estudo são:

- diferentes abordagens para escolher a granularidade para a variação dos parâmetros do modelo;
- aplicação de novos métodos de ajuste de parâmetros ([84, 85]) para melhorar a estratégia de busca;
- refinamento das tarefas de paralelização de execução.

Entretanto, os resultados indicam que a metodologia proposta pode evoluir para aplicações práticas na vida real como ferramenta auxiliar de ajuste de parâmetros e, inclusive, como meio de avaliar a qualidade dos dados laboratoriais.

4 Programa experimental usado como referência

O programa experimental desenvolvido na tese de doutorado de Y. Ke ([24]) foi usado para validar o presente trabalho. Os dados experimentais foram obtidos a partir de um amplo trabalho teórico-experimental com corpos de prova cilíndricos de concreto de agregado leve. A finalidade do estudo era definir a resistência à compressão e o módulo de elasticidade de amostras de concreto de agregado leve aos 28 dias, no qual buscou-se diversificar a resistência da argamassa, a relação água/cimento e o tipo e volume relativo de agregados, enquanto os outros materiais e parâmetros foram mantidos inalterados. A combinação desses materiais gerou 63 formulações diferentes e mais de 300 corpos de prova foram testados.

Com esta base de dados experimental, as influências dos parâmetros das misturas e da zona de transição da interface sobre o desempenho dos concretos foram analisadas. A modelagem foi baseada em técnicas iterativas de homogeneização, técnicas de localização e na zona de transição da interface. Além disso, os dados obtidos foram confrontados com resultados experimentais e permitiram identificar os módulos elásticos e as resistências à compressão do concreto. De acordo com Y. Ke, considerando que as fórmulas empíricas tradicionais são insuficientemente precisas, as previsões de comportamentos do concreto de agregado leve computadas com os modelos micromecânicos parecem concordar com medidas experimentais.

Assim sendo, utilizou-se três tipos de argamassas: altíssimo desempenho (M10), alto (M9) e médio (M8); e cinco tipos de agregados: 0/4 650 A, 4/10 550 A, 4/10 430 A, 4/10 520 S e 4/8 750 S, cuja denominação corresponde aos diâmetros característicos menor e maior (d/D), à massa específica aparente (kg/m^3) e ao tipo de agregado (A - argila expandida; S - xisto expandido), respectivamente. As Figuras 4.1 e 4.2 mostram a seção de dois agregados leves do tipo 4/10 430 A e 4/8 750 S, respectivamente.

Além disso, variou-se o volume relativo dos agregados em relação ao volume total do corpo de prova em 12,5%, 25,0%, 37,5% e 45,0%. Os resultados experimentais apresentados foram tomados como referência para a validação dos modelos obtidos via



Figura 4.1: Seção do agregado leve do tipo 4/10 430 A (extraído de [86]).



Figura 4.2: Seção do agregado leve do tipo 4/8 750 S (extraído de [86]).

MEF e as propriedades das argamassas são mostradas na Tabela 4.1 e dos agregados na Tabelas 4.2.

Tabela 4.1: Propriedades das argamassas (adaptado de [24]).

Argamassa	E_m (MPa)	f_m (MPa)	$p_m^{(1)}$ (MPa)
M8	28.588	40,18	3,52
M9	33.183	64,18	10,19
M10	35.397	85,96	11,46

⁽¹⁾ p_m foi assumido como: se $f_m \leq 50$ então $p_m = 0,3 * \sqrt[3]{f_m^2}$
senão $p_m = 2,12 * (2,3026 * (\ln(1 + 0,11 * f_m)))$ ([87]).

Em um primeiro estudo preliminar deste trabalho, dentre os resultados experimentais apresentados, apenas aqueles obtidos a partir de um conjunto de corpos de prova cilíndricos de concreto de agregado leve, feitos de argamassa de média resistência com 12,5% e 25% da argila expandida com densidade aparente 550 kg/m^3 (4/10 550 A) foram tomados como referência para a validação dos modelos bidimensional e tridimensional obtidos via MEF. As propriedades dos materiais adotados para fins de validação desses modelos são mostradas na Tabela 4.3.

A distribuição granulométrica de cada agregado leve considerada na modelagem computacional via MEF é mostrada na Tabela 4.4.

Já os modelos baseados em SVR e RNA utilizaram todo o conjunto de resultados que continham agregados nos corpos de prova. Os dados experimentais usados nesta etapa do estudo incluem um total de 180 amostras de concreto e 6 atributos quantitativos

Tabela 4.2: Propriedades dos agregados leves de acordo com a argamassa e o volume relativo (extraído de [24]).

Concreto	Agregado	E_a (MPa)		f_a (MPa)				p_a^{**} (MPa)					
		12,5*	25,0	37,5	45,0	12,5	25,0	37,5	45,0	12,5	25,0	37,5	45,0
M8	0/4 650 A	6470	6720	5890	6800	15,30	14,80	14,90	14,70	6,66	6,45	6,49	6,40
	4/10 550 A	8030	8680	7450	7960	19,10	18,60	17,50	18,10	7,94	7,73	7,27	7,52
	4/10 430 A	7183	8100	6610	6840	16,80	16,50	16,00	16,00	4,68	4,59	4,45	4,45
	4/10 520 S	10077	10330	9700	10200	21,70	21,90	20,60	20,60	5,91	5,97	5,61	5,61
M9	4/8 750 S	20273	20320	20570	19930	36,00	36,60	38,50	38,60	15,71	15,97	16,80	16,85
	0/4 650 A	7140	7310	7410	6700	22,80	20,50	19,80	19,20	9,93	8,93	8,62	8,36
	4/10 550 A	9620	9610	9470	9780	25,50	20,20	20,30	22,10	10,60	8,39	8,44	9,18
	4/10 430 A	8313	7430	8700	8810	20,60	18,60	17,10	19,10	5,73	5,18	4,76	5,32
M10	4/10 520 S	11363	12970	10700	10420	31,10	30,90	27,90	27,00	8,47	8,42	7,60	7,36
	4/8 750 S	25347	25200	25670	25170	52,50	51,90	51,50	46,30	22,91	22,65	22,48	20,21
	0/4 650 A	9913	10560	9590	9590	33,90	30,10	27,70	27,80	14,76	13,11	12,06	12,11
	4/10 550 A	11993	13160	11440	11380	35,20	30,20	26,20	28,10	14,63	12,55	10,89	11,68
M10	4/10 430 A	9277	9160	9410	9260	29,50	24,40	23,10	21,50	8,21	6,79	6,43	5,98
	4/10 520 S	12470	13180	12450	11780	39,00	36,70	32,20	30,60	10,63	10,00	8,77	8,34
	4/8 750 S	29697	29580	29220	30290	75,90	72,90	71,50	69,30	33,13	31,82	31,21	30,25

* foi considerado o valor médio dos outros percentuais, pois o autor não conseguiu extrair essa informação.

** $p_a = f_a * (p_{at}/p_{c,itZ})$, onde $p_{c,itZ}$ é a resistência à compressão da ITZ e p_{at} é a resistência a tração do agregado ([7, 13]);

Tabela 4.3: Propriedades dos materiais usados como referência para validação dos trinta modelos sintéticos. Os materiais foram argamassa do tipo M8 e agregado do tipo 4/10 550A (extraído de[13]).

	Descrição	Volume	Valor (MPa)
E_a	Módulo de elasticidade do agregado	-	8.030,00
E_m	Módulo de elasticidade da argamassa	-	28.600,00
f_a	Resistência a compressão do agregado	-	18,30
f_m	Resistência a compressão da argamassa	-	40,20
p_a	Resistência a tração do agregado	-	(*) 2,41
p_m	Resistência a tração da argamassa	-	(**) 8,04
$E_{c,exp}$	Módulo de elasticidade do corpo de prova	12,5%	26.157,00
		25,0%	21.680,00
$f_{c,exp}$	Resistência a compressão do corpo de prova	12,5%	39,00
		25,0%	34,00

(*) Valores obtidos da equação $P_a = 3,9(1,82\rho_{av}/1000 - 0.4)$, onde ρ_{av} é a densidade aparente. Neste caso, $\rho_{av} = 560\text{kg/m}^3$ (BS EN 13055-1:2002)[88].

(**) p_m foi assumido como 20% de f_m [89].

Tabela 4.4: Distribuição Granulométrica para cada tipo de agregado (extraído de [24]).

Tipo de agregado		0/4	4/10	4/10	4/10	4/8
		650A	550A	430A	520S	750S
% Retido Acumulado	12,50 mm	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00
	10,00 mm	0,00	4,68	1,70	1,72	0,14
	8,00 mm	0,10	67,13	31,46	29,46	3,95
	6,30 mm	0,17	85,44	77,39	67,89	31,20
	5,00 mm	1,17	94,84	77,39	67,89	70,37
	4,00 mm	18,16	97,85	98,35	98,02	89,48
	2,50 mm	81,25	99,79	100,00	99,95	97,35
	1,25 mm	94,26	99,94	100,00	99,95	98,67
	fundo	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

contínuos, no qual 4 deles são variáveis de entrada e 2 são variáveis de saída. Cada amostra de concreto de agregado leve é composta por um fator água/cimento, uma quantidade de cimento, de volume do agregado, de densidade do agregado, módulo de elasticidade e resistência à compressão. Os detalhes gerais com os valores desses seis atributos são apresentados na Tabela 4.5, e a Tabela 4.6 apresenta uma parte dos dados da composição

das 180 formulações.

Tabela 4.5: Dados de entrada e saída dos compostos de concreto de agregado leve (extraído de [24]).

Variável	Unidade	Mínimo	Máximo	Média	$\sigma^{(1)}$
Fator água/cimento	-	0,29	0,446	0,362	0,064
Cimento	kg/m ³	414,64	826,450	605,904	132,619
Volume do agregado	%	0,00	45,000	24,000	16,352
Parâmetro de densidade do agregado	kg ² /m ⁶	3,1813×10 ⁶	3,604×10 ⁷	1,110×10 ⁷	1,266×10 ⁷
Resistência à compressão	MPa	24,10	88,190	47,917	16,761
Módulo de elasticidade	GPa	15,12	35,757	26,140	5,609

⁽¹⁾ Desvio padrão;

Tabela 4.6: Dados da composição das 180 formulações diferentes do concreto (extraído de [24]).

$N^{(1)}$	$F^{(2)}$	$C^{(3)}$	$V^{(4)}$	$D^{(4)}$	$E^{(6)}$	$f_c^{(7)}$
1	0,446	659,66	12,5	3181300	23528	36,3
2	0,446	565,42	25,0	3181300	20465	29,6
3	0,446	471,19	37,5	3181300	16840	27,5
4	0,446	414,64	45,0	3181300	15615	25,2
5	0,446	659,66	12,5	4041000	26009	39,2
6	0,446	565,42	25,0	4041000	21436	34,3
7	0,446	471,19	37,5	4041000	17592	28,6
8	0,446	414,64	45,0	4041000	16502	28,1
9	0,446	659,66	12,5	3437000	24604	37,3
10	0,446	565,42	25,0	3437000	21006	31,9
11	0,446	471,19	37,5	3437000	17577	28,0
12	0,446	414,64	45,0	3437000	15123	24,1
13	0,446	659,66	12,5	8816300	25390	37,8
14	0,446	565,42	25,0	8816300	22308	35,6
15	0,446	471,19	37,5	8816300	19447	30,1
16	0,446	414,64	45,0	8816300	18470	28,3
17	0,446	659,66	12,5	36040000	27047	42,6
18	0,446	565,42	25,0	36040000	26179	42,4
19	0,446	471,19	37,5	36040000	25852	43,6
20	0,446	414,64	45,0	36040000	24323	43,0
21	0,350	709,96	12,5	3181300	29485	56,3
22	0,350	608,54	25,0	3181300	23836	44,2
23	0,350	507,11	37,5	3181300	20079	37,6
24	0,350	446,26	45,0	3181300	17374	33,3
25	0,350	709,96	12,5	4041000	29471	50,5
26	0,350	608,54	25,0	4041000	24890	37,2
27	0,350	507,11	37,5	4041000	21105	31,6
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
169	0,290	723,14	12,5	3437000	29568	62,9
170	0,290	619,83	25,0	3437000	26408	46,9
171	0,290	516,53	37,5	3437000	22368	39,4
172	0,290	454,55	45,0	3437000	20248	33,1
173	0,290	723,14	12,5	8816300	32611	72,5
174	0,290	619,83	25,0	8816300	28262	60,2
175	0,290	516,53	37,5	8816300	23646	47,1
176	0,290	454,55	45,0	8816300	21965	42,8
177	0,290	723,14	12,5	36040000	33260	80,3
178	0,290	619,83	25,0	36040000	34153	76,8
179	0,290	516,53	37,5	36040000	33461	74,9
180	0,290	454,55	45,0	36040000	33497	73,4

(¹) Número da formulação do concreto; (²) Fator água/cimento;
(³) Quantidade de cimento (kg/m³); (⁴) Volume do agregado (%);
(⁵) Densidade do agregado (kg²/m⁶); (⁶) Módulo de elasticidade (MPa);
(⁷) Resistência à compressão (MPa);

5 Predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve via Método dos Elementos Finitos

Os programas numéricos aqui desenvolvidos foram elaborados através da plataforma Cast3M. Esta plataforma aplica o Método dos Elementos Finitos na resolução de diversos problemas, tais como elasticidade, elastoviscoplasticidade, entre outros [81]. O Cast3M é desenvolvido em uma linguagem específica de alto nível, organizada em objetos, chamada Gibiane, e possui ferramentas de pré-processamento e pós-processamento.

Na presente análise, o concreto de agregado leve foi assumido como um meio bifásico, composto de argamassa (m) e agregado leve (a). Além disso, em um primeiro momento, o comportamento à compressão dos corpos de prova cilíndricos de concreto foi simulado assumindo um comportamento elastoplástico considerando simulações em 2D e 3D.

Os agregados são considerados esféricos, distribuídos aleatoriamente e imersos na argamassa, aqui assumida como um material homogêneo. Entretanto, as simplificações adotadas não afetaram de modo significativo a qualidade dos resultados, como será mostrado nas próximas seções.

5.1 Algoritmo para definição da geometria das malhas de elementos finitos

Com o propósito de melhor representar computacionalmente os corpos de prova cilíndricos empregados nos testes laboratoriais, foi desenvolvido um algoritmo em Python para fazer a distribuição aleatória dos agregados imersos na argamassa de acordo com os volumes e as curvas granulométricas adotados.

Existem na literatura alguns métodos similares que fazem a distribuição dos agregados ([90], [91], [92]), porém não foi possível encontrar o código fonte para adequação destes às particularidades envolvidas no presente estudo, por exemplo, a biblioteca LMGC90 ([93]) foi capaz de criar modelos com a proporção de agregados limitada a um valor máximo

de 25% de agregados. Além destes, também foi criado um algoritmo em Matlab[®] ([94]) que era capaz de gerar apenas modelos com as proporções 12,5% e 25,0%. Esta restrição deve-se à estratégia de posicionar as esferas aleatoriamente no cilindro, isso porque a dificuldade para posicionar uma nova esfera dentro do cilindro crescia de acordo com o aumento no número de esferas já posicionadas.

No modelo computacional desenvolvido, o algoritmo considerou as dimensões do cilindro de 160mm x 320mm, o agregado como elemento esférico e seu diâmetro foi definido de acordo com a distribuição granulométrica apresentada na Tabela 4.4, além de respeitar o volume de 12,5%, 25,0%, 37,5% e 45,0% de agregados em relação ao volume total do corpo de prova, de modo a reproduzir os experimentos realizados na referência ([24]). Apesar dos agregados leves do tipo xisto expandido (4/10 520S e 4/8 750S) não terem formato esférico, os resultados obtidos pela modelagem computacional via MEF foram bem próximos comparados aos resultados obtidos pelos ensaios experimentais, como será apresentado mais adiante, na Seção 7.1.

O algoritmo foi desenvolvido com base nos conceitos de *Packing problems* ([95]), *Maximum Mortar Thickness - MMT* ([90]) e *KDTree* ([96]). O primeiro contribuiu com a lógica de arranjar os círculos em um retângulo ou as esferas em um cilindro; já o segundo foi usado para calcular a distância máxima entre dois círculos ou duas esferas para que coubessem dentro do retângulo ou do cilindro, respectivamente; e o último foi utilizado para verificar se teria ocorrido sobreposição dos círculos ou das esferas.

Em outras palavras, em forma de procedimentos, o algoritmo executa os seguintes passos para a definição de uma geometria da malha bidimensional, com ilustrações apresentadas na Figura 5.1:

1. calcula-se aleatoriamente o número de círculos para cada diâmetro de acordo com a faixa granulométrica e o volume relativo de agregados da amostra;
2. posiciona-se os círculos dentro do retângulo. Esse posicionamento é feito iniciando-se da base e segue até o topo do retângulo (Figura 5.1a);
 - 2.1. descartam-se os círculos que porventura foram inseridos fora dos limites do retângulo, pois a distância entre o centro do agregado e as extremidades do corpo de prova deve ser maior que o raio do agregado (Figura 5.2a);

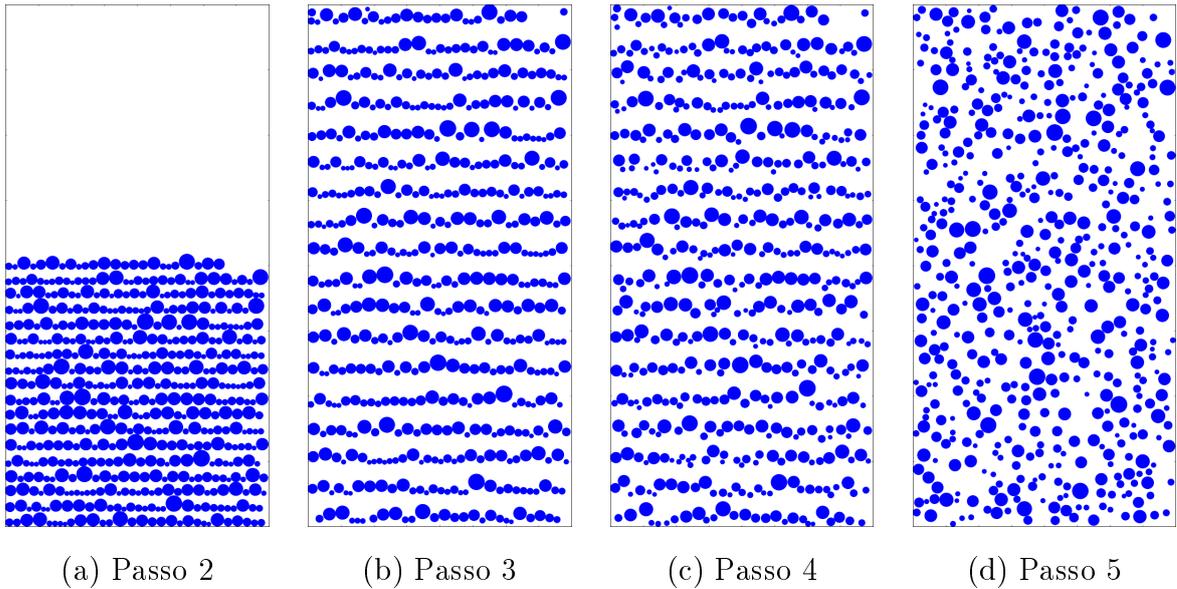
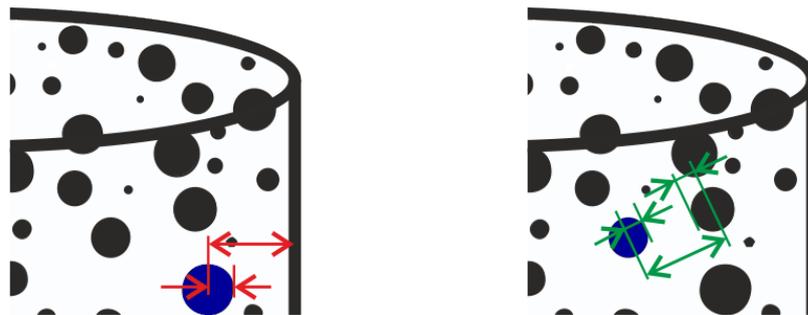


Figura 5.1: Ilustração do resultado de alguns passos na geração da geometria bidimensional; contendo 25,0% de agregado do tipo 0/4 650A e distribuição granulométrica apresentada na Tabela 4.4.

- 2.2. descartam-se os círculos que eventualmente foram posicionados sobrepostos com outros, porque a distância em linha reta de um agregado para outro deve ser maior que o raio de ambos somados (Figura 5.2b);
- apesar da remoção desses possíveis círculos, as geometrias geradas em vários testes ficaram com pelo menos 99% dos círculos;



(a) Validação para agregado dentro dos limites do cilindro. (b) Validação para sobreposição de agregados.

Figura 5.2: Ilustra a verificação do posicionamento dos agregados.

3. redistribui-se proporcionalmente o espaço livre que compreende o último círculo posicionado e a parte superior do retângulo, de forma que o espaço entre os círculos irá aumentar no sentido da altura e os círculos mais próximos do topo o tangenciem (Figura 5.1b);

4. calcula-se a distância máxima entre os círculos para garantir que todos estejam contidos no retângulo e faz-se uma movimentação aleatória de cada círculo (Figura 5.1c):
 - 4.1. adiciona-se um valor percentual aleatório da distância máxima ao centro do círculo no referencial X e Y;
 - 4.2. verifica-se a ocorrência de colisão da nova posição do círculo com outros já posicionados:
 - em caso afirmativo, mantém-se o círculo na posição original,
 - senão, faz-se a movimentação para a nova posição;
5. repete-se o passo anterior n vezes com o propósito de posicionar aleatoriamente os círculos no retângulo. Em trabalhos que fizeram uso desse algoritmo ([97, 98, 99, 100]), foi utilizado $n = 500$, com resultados satisfatórios na geração da geometria (Figura 5.1d).

A Figura 5.3 ilustra modelos geométricos de corpo de prova bidimensional contendo 12,5% de agregados para as curvas granulométricas apresentadas na Tabela 4.4. Esses modelos representam 1/4 da seção longitudinal de um corpo de prova cilíndrico de 160mm x 320mm.

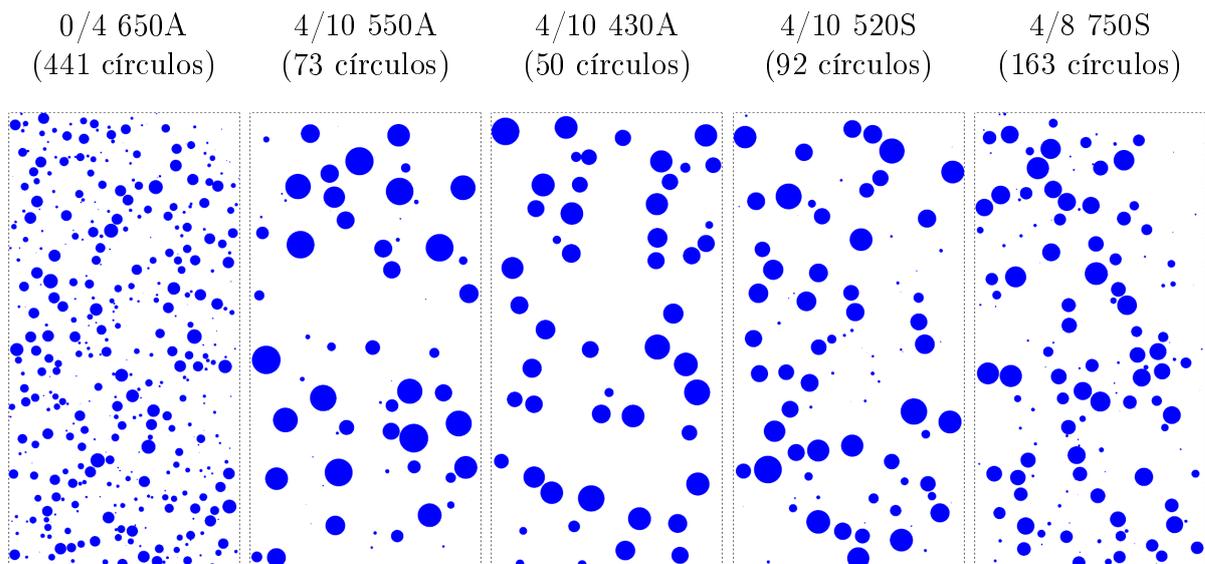


Figura 5.3: Exemplo de 1/4 da seção longitudinal de corpos de provas bidimensionais para as cinco diferentes curvas granulométricas (Tabela 4.4) contendo 12,5% de agregados.

O algoritmo para o modelo tridimensional segue o mesmo procedimento e, com poucas alterações, é adaptado para gerar geometrias tridimensionais. Para isso, basta substituir as partes que tratam dos círculos pelas esferas, da área pelo volume e do retângulo pelo cilindro. A Figura 5.4 ilustra a geometria de um corpo de prova tridimensional contendo 45,0% de agregados do tipo 4/10 550A.

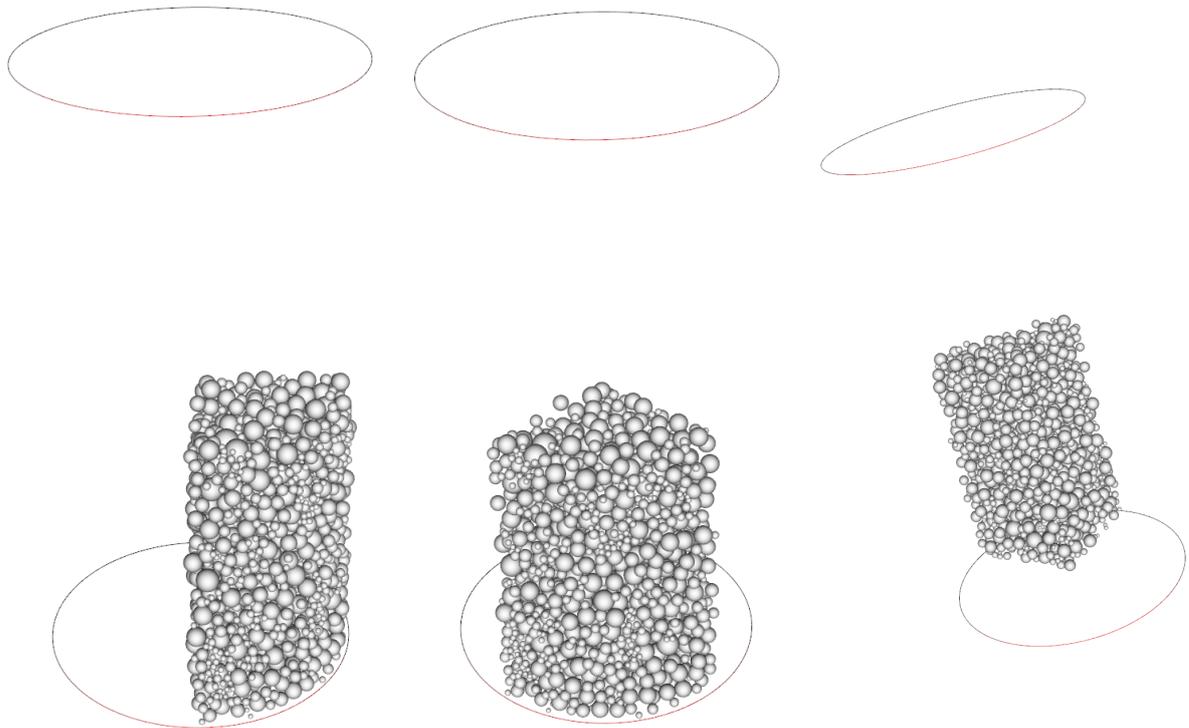


Figura 5.4: Exemplo de 1/8 da geometria de um corpo de prova tridimensional contendo 45,0% de agregados do tipo 4/10 550A. Cada figura apresenta um ângulo diferente da mesma geometria criada.

5.2 Modelo bidimensional

Depois de definida a geometria, a próxima tarefa realizada foi a escolha das malhas a serem utilizadas nas simulações computacionais. Assim, com objetivo de verificar a convergência dos resultados numéricos, foram adotadas nove malhas diferentes para o modelo bidimensional contendo 12,5% de agregados do tipo 4/10 550A e argamassa de médio desempenho, com níveis crescentes de refinamento para modelar o corpo de prova de concreto sob carregamento longitudinal de 15 MPa. A Figura 5.5 ilustra os resultados obtidos para o módulo de elasticidade (E_c) para cada malha adotada (MA_i), em relação ao módulo de elasticidade avaliado na malha MA9, a mais refinada. Como pode-se ver na

figura, os resultados são quase coincidentes para as malhas MA7, MA8 e MA9. Portanto, com base nesta consideração, a malha MA7 com 22.918 elementos finitos de três vértices em forma triangular foi adotada para a presente análise no modelo bidimensional.

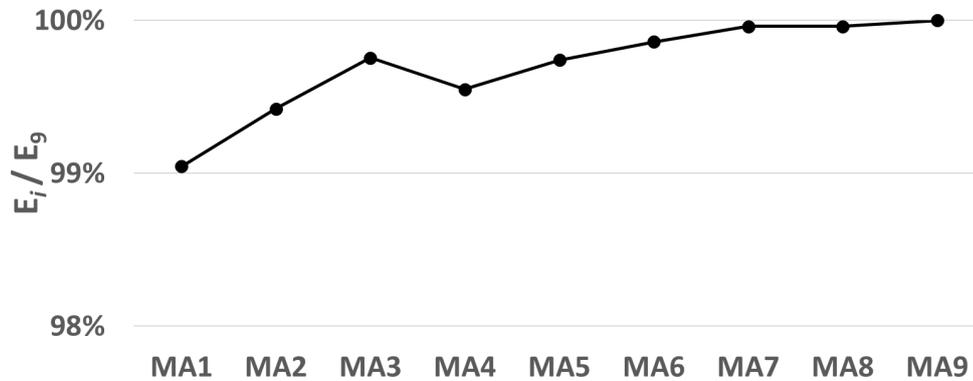


Figura 5.5: Análise de convergência do modelo bidimensional: a curva representa a variação do módulo de elasticidade final para nove malhas diferentes.

A geometria dos modelos 2D descritos nesta seção representa o corte longitudinal central de um corpo de prova padrão cilíndrico com 16cm de diâmetro e 32cm de altura ([13]), como pode ser visto na Figura 5.6a e Figura 5.6b. O corte longitudinal apresentado é obtido para uma dada distribuição aleatória de agregados, calculada conforme explicitado na Seção 5.1. Inclusive, para melhor eficiência computacional da simulação, utilizou-se 1/4 da seção considerando as condições de simetria do corpo de prova.

A Figura 5.6c representa um modelo em 2D de 1/4 do corpo de prova de concreto, o carregamento e condições de contorno adotados de modo a reproduzir um teste de compressão. A Figura 5.7 ilustra uma região aumentada de uma malha de elementos finitos típica para um estado plano de tensão com elementos triangulares lineares, onde as duas fases consideradas, argamassa e agregado leve, são claramente identificados, como se pode ver no detalhe. De forma a considerar a dispersão dos resultados, trinta modelos 2D foram gerados a partir da mesma distribuição granulométrica, cada um com uma distribuição espacial aleatória diferente de agregados.

O passo seguinte consistiu na definição do comportamento não-linear aos materiais no modelo 2D. Nessa etapa um deslocamento de 0,5mm para baixo foi imposto à linha superior, variando linearmente em função do tempo, em 100 passos (Figura 5.8 e Figura 5.9). Observa-se que a grandeza temporal se refere a um tempo associado ao passo incremental de deslocamento imposto, numa análise pseudo-estática, sem considerações

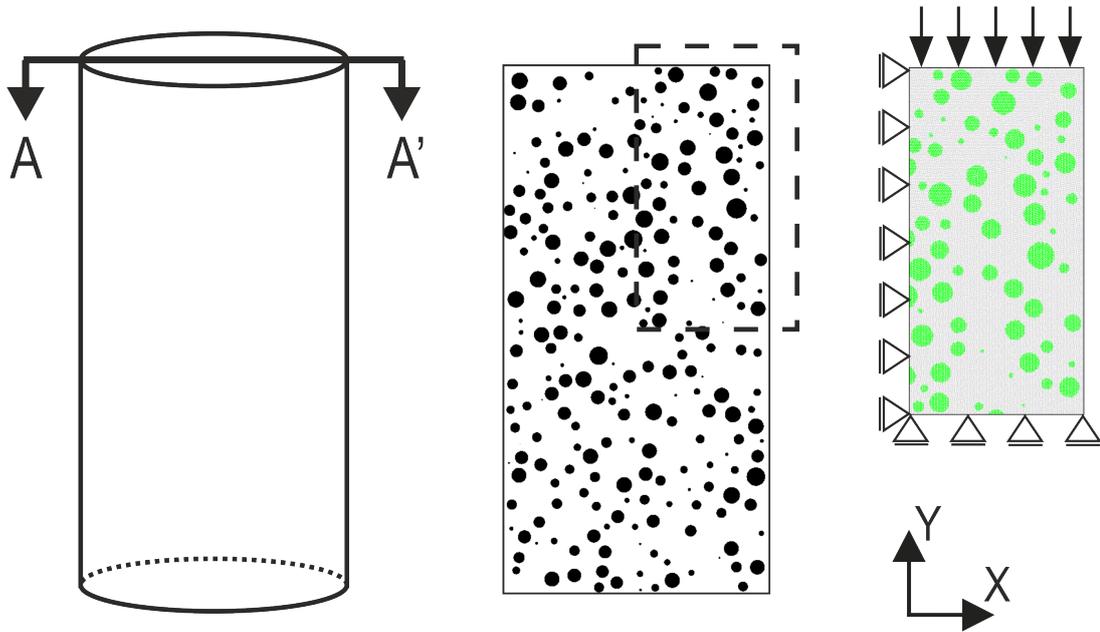


Figura 5.6: Representação numérica de uma amostra de concreto de agregado leve: (a) geometria do módulo numérico; (b) seção longitudinal AA' mostrando a matriz de concreto em branco e os agregados em preto; (c) 1/4 da seção utilizada nas simulações.

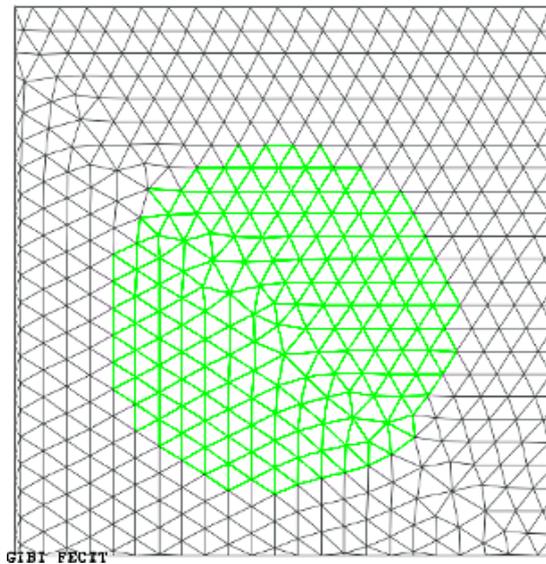


Figura 5.7: Malha de Elementos Finitos típica, com o agregado em verde e a argamassa em preto.

de efeitos dinâmicos inerciais.

Por meio desse modelo computacional, os valores das tensões de compressão do corpo de prova (CP) foram obtidos através da razão entre a resultante das reações de apoio na linha inferior do cilindro pelo comprimento da base do CP (foi considerada espessura unitária).

O comportamento do modelo utilizado nesse trabalho foi o de elastoplasticidade, com

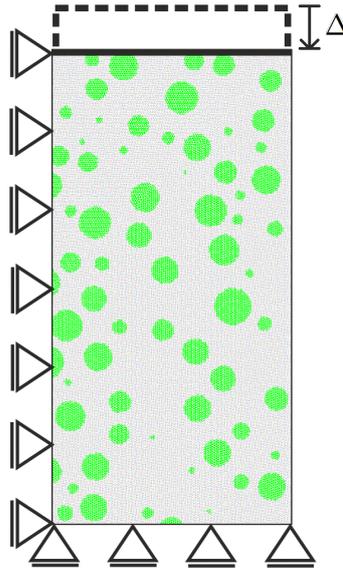


Figura 5.8: Representação da solicitação, consistindo de um deslocamento imposto, Δ , e condições de contorno do modelo Elastoplástico Drucker-Prager.

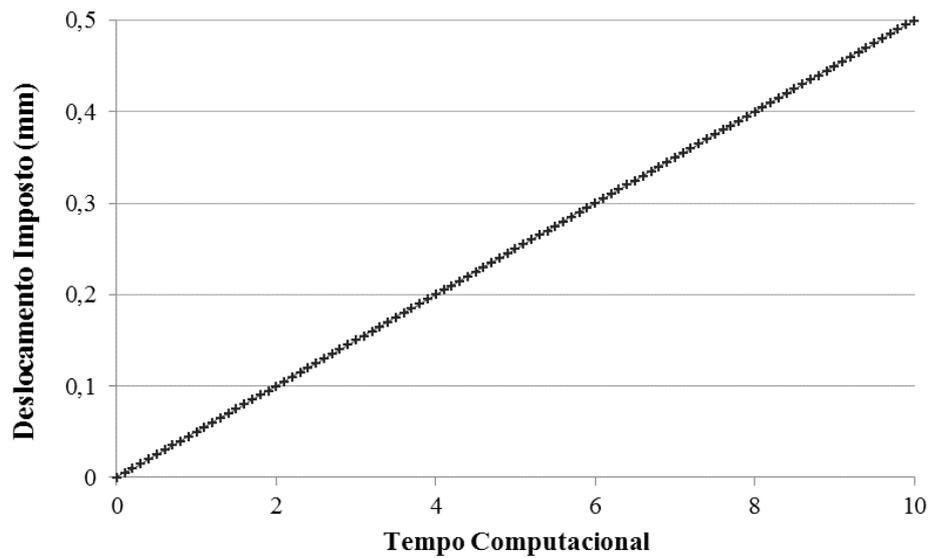


Figura 5.9: Evolução da imposição de deslocamento ao corpo de prova.

critério de escoamento Drucker-Prager Perfeito ([101]), que considera limites distintos para tensões de compressão e de tração para cada material. O critério de escoamento desenvolvido no Cast3M para esse modelo utiliza a fórmula definida pela Equação (5.1) ([101]):

$$\frac{\alpha * \text{Traço}(\underline{\sigma}) + S_{eq}}{K} \leq 1 \quad (5.1)$$

onde σ é o tensor de tensões; S_{eq} é a tensão equivalente de Von Mises; e α e K são

constantes baseadas nos limites de tração e compressão dos materiais, respectivamente, Equação (5.2) e Equação (5.3):

$$\alpha_\alpha = \frac{|f_\alpha| - p_\alpha}{|f_\alpha| + p_\alpha} \quad (5.2)$$

$$K_\alpha = \frac{2 * |f_\alpha| * p_\alpha}{|f_\alpha| + p_\alpha} \quad (5.3)$$

onde f_α é a tensão limite de compressão, p_α é a tensão limite de tração de cada material; e o índice α indica a fase do i -ésimo elemento finito: m de argamassa e a para agregado leve.

Pode-se observar nas Figuras 5.10 e 5.11 o comportamento dos modelos de CPs hipotéticos constituídos somente de argamassa ou de agregado, respectivamente, sujeitos ao carregamento mencionado anteriormente e ilustrado pela Figura 5.8.

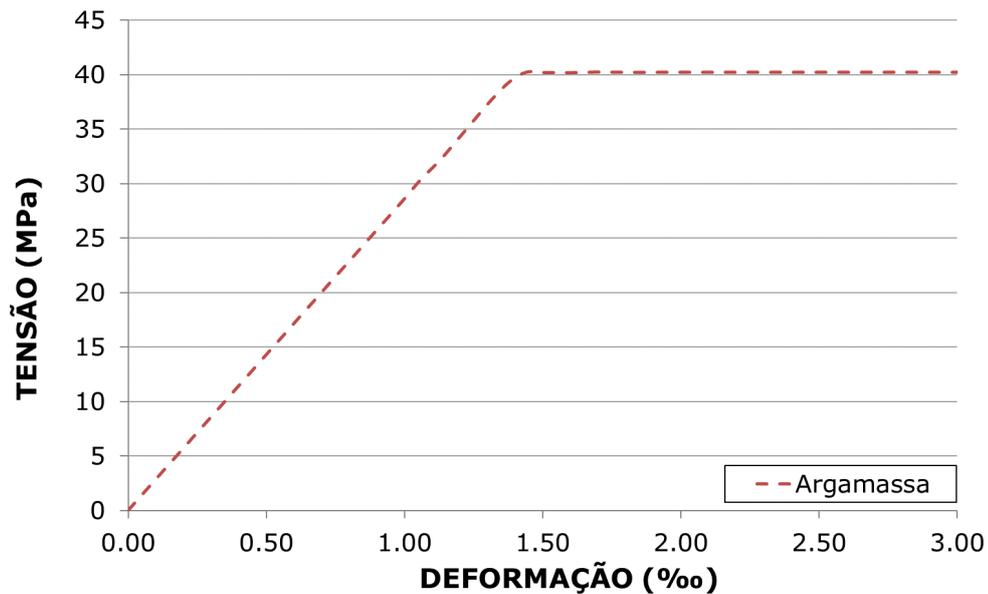


Figura 5.10: Gráfico tensão-deformação para um corpo de prova homogêneo composto somente de argamassa (M8) no modelo Drucker-Prager Perfeito. Ver Tabela 4.3

Para o modelo de cálculo elastoplástico, que incorpora deformações plásticas e redistribuição de tensões entre os elementos, foi possível obter uma tensão limite de resistência, considerada como a tensão correspondente a uma deformação de 3,0‰ ([102]).

Na simulação numérica, a cada passo de tempo computacional, o deslocamento imposto gera um aumento das tensões nos elementos componentes do corpo de prova. Dessa forma, as tensões desenvolvidas nos elementos podem ser colocadas em níveis de

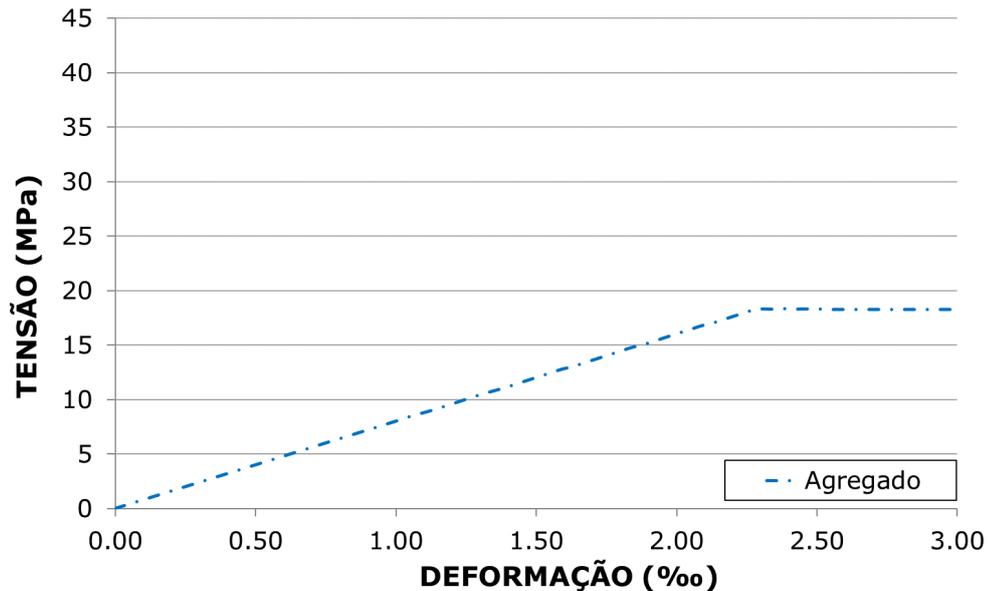


Figura 5.11: Gráfico tensão-deformação para um corpo de prova homogêneo composto somente de agregado (4/10 550A) no modelo Drucker-Prager Perfeito. Ver Tabela 4.3

0 a 1, com 1 representando a tensão limite de escoamento¹ do elemento finito. Essa evolução pode ser acompanhada na Figura 5.12 a seguir, que representa os níveis de tensões referentes às deformações 0,065‰, 0,34‰, 0,81‰, 1,1‰, 1,5‰ e 3,0‰. Não há necessidade de se diferenciar os materiais, pois cada um está normalizado de acordo com os seus respectivos limites de escoamento.

A curva tensão-deformação de um corpo de prova bidimensional com 12,5% de agregado leve é mostrada na Figura 5.13. Pode-se observar através da Figura 5.13 que até aproximadamente a deformação 1,3‰ o comportamento do corpo de prova é linear. As Figuras 5.12a, 5.12b, 5.12c e 5.12d ilustram a evolução dos níveis de tensões nesse trecho. Da deformação 1,3‰ até aproximadamente 2,5‰, há uma fase transitória (Figura 5.12e); e após 2,5‰ tem-se o patamar de escoamento que permanece constante até o fim do deslocamento imposto. Por fim, a Figura 5.12f mostra a última configuração assumida para o deslocamento imposto.

Para as 60 amostras processadas, 30 de cada percentual de agregado (12,5% e 25,0%) do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho, os valores médios e desvios padrões obtidos estão dispostos na Tabela 5.1. Lembrando-se que os valores experimentais de referência são 39 MPa e 34 MPa para a resistência à compressão ($f_{(c,exp)}$); e 26.127

¹Escoamento é um fenômeno típico de algumas ligas metálicas com baixo teor de carbono. Entretanto é comum na linguagem informal da engenharia empregar esse termo para designar o valor de tensão limite, segundo um dado critério de ruptura, que um corpo está submetido.

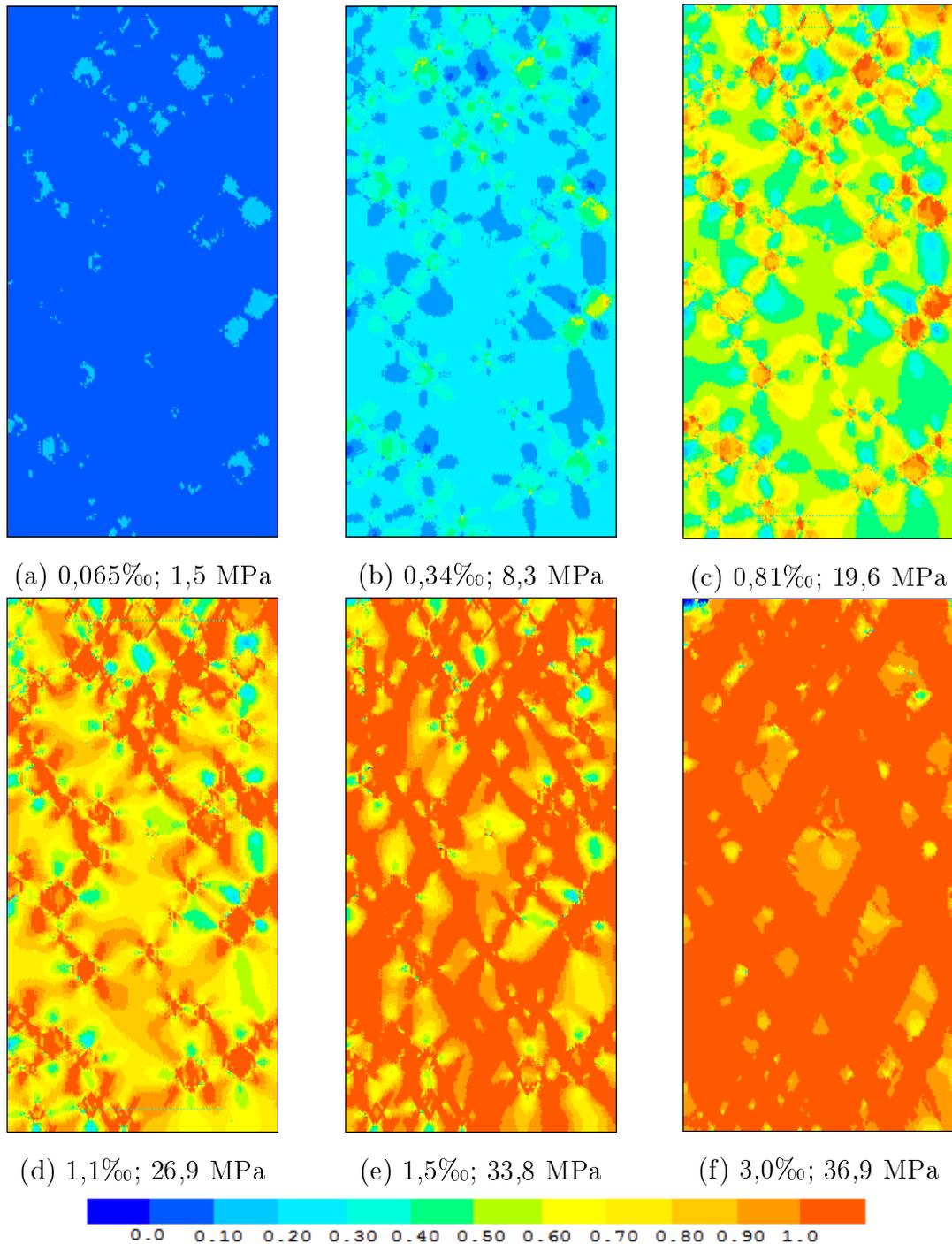


Figura 5.12: Evolução dos níveis de tensões referentes às deformações. Cada material está normalizado de acordo com seus respectivos limites de escoamento (adaptado de [103]).

MPa e 21.680 MPa para o módulo de elasticidade ($E_{(c,exp)}$) para os volumes de agregados leve de 12,5% e 25,0%, respectivamente.

As simulações numéricas avaliadas somente do agregado do tipo 4/10 550A e da argamassa de médio desempenho para as proporções 12,5% e 25,0%, foram realizadas

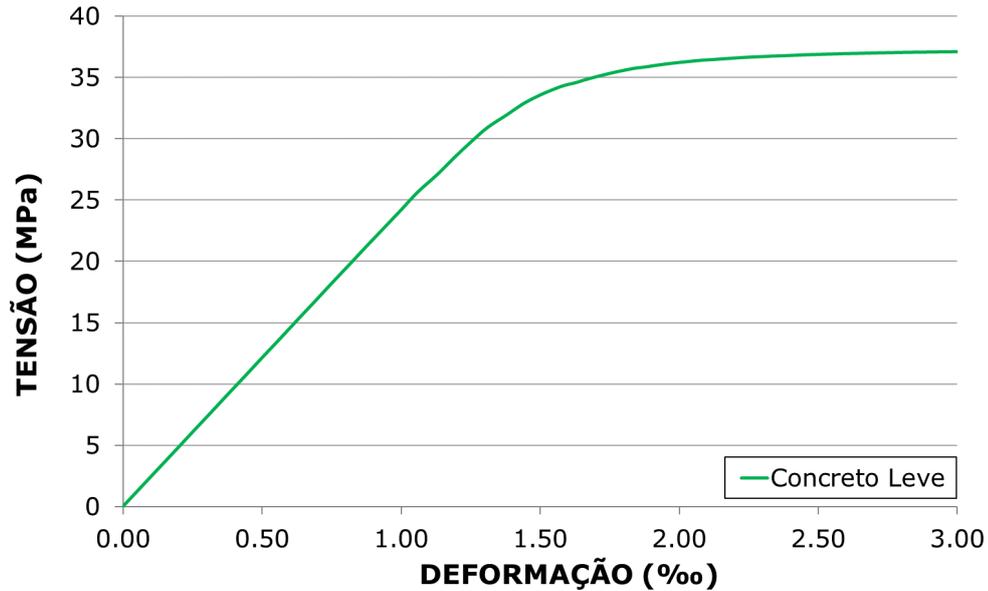


Figura 5.13: Curva tensão-deformação para o corpo de prova bidimensional contendo 12,5% de agregado leve do tipo 4/10 550A e argamassa M8 no modelo Drucker-Prager Perfeito (após a deformação 3,0‰, a tensão se mantém constante).

Tabela 5.1: Resultado numérico do modelo bidimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho.

	Volume	Unidade	Valor médio	σ^1	Referência	$\Delta_{(c,exp)}$
f_c	12,5%	MPa	36,98	0,35	39,00	5,18%
	25,0%	MPa	34,63	0,33	34,00	1,85%
E_c	12,5%	GPa	24,20	0,30	26,16	7,49%
	25,0%	GPa	21,13	0,35	21,68	2,53%

¹ Desvio padrão;

com o propósito de validar o modelo numérico e comparar os modelos bidimensionais e tridimensionais.

Posteriormente, foram usados todos os dados das 180 formulações diferentes do concreto de agregado leve, apresentadas na Tabela 4.6, com o propósito de avaliar as simulações numéricas do modelo bidimensional. O resultado dessa avaliação é apresentado na Tabela 5.2.

Observa-se a partir da Tabela 5.2 que o melhor resultado foi obtido para o módulo de elasticidade e o volume relativo de 25,0%, com MAPE de 3,16%. Enquanto o pior resultado foi alcançado pela resistência à compressão e o mesmo volume relativo, de

Tabela 5.2: Resultado dos erros de predição das propriedades mecânicas pelo modelo bidimensional agrupados pelo volume relativo dos agregados.

Propriedade	Volume	MAPE	σ^1	Máx.	Mín.
	12,5%	5,39%	3,99%	14,13%	0,99%
Resistência à compressão	25,0%	<u>8,97%</u>	3,78%	13,59%	2,46%
	37,5%	6,28%	4,23%	14,24%	0,81%
	45,0%	5,16%	3,86%	12,20%	1,04%
	12,5%	3,58%	2,30%	7,19%	0,09%
Módulo de elasticidade	25,0%	<u>3,16%</u>	2,31%	8,89%	0,04%
	37,5%	3,67%	2,03%	6,64%	0,11%
	45,0%	3,86%	2,74%	9,93%	0,42%

¹ Desvio padrão;

25,0%, com MAPE de 8,97%.

O tempo necessário para execução de um modelo bidimensional foi de 6 minutos e 48 segundos, na média, em uma máquina com processador Intel Core i7-860 (2.80GHz) e 8GB de memória RAM. Para execução de todos os modelos, foram utilizadas até 8 máquinas simultaneamente por meio do sistema SWADE, que será discutido com mais detalhes na Seção 5.5.

5.3 Modelo tridimensional

A geometria dos modelos 3D descritos aqui representa uma seção de 1/8 de um corpo de prova padrão cilíndrico com 16cm de diâmetro e 32cm de altura ([13]), como mostrado na Figura 5.14. Os agregados nesse modelo também são considerados esféricos, uma hipótese de simplificação adequada para modelagem de agregados, de argila expandida como se pode notar na Figura 1.3. Assim como no modelo 2D, os agregados são distribuídos aleatoriamente e imersos na argamassa, aqui assumida como um material homogêneo. A distribuição dos diâmetros dos agregados reproduz a gradação adotada na mistura real, dada pela referência [13] e apresentada na Tabela 4.4.

A partir das características de simetria relativas a carregamento e geometria, a Figura 5.14 representa o modelo empregado nas simulações computacionais. As condições de contorno foram adotadas na seguinte forma (Figura 5.14b): a seção ABCD é restringida

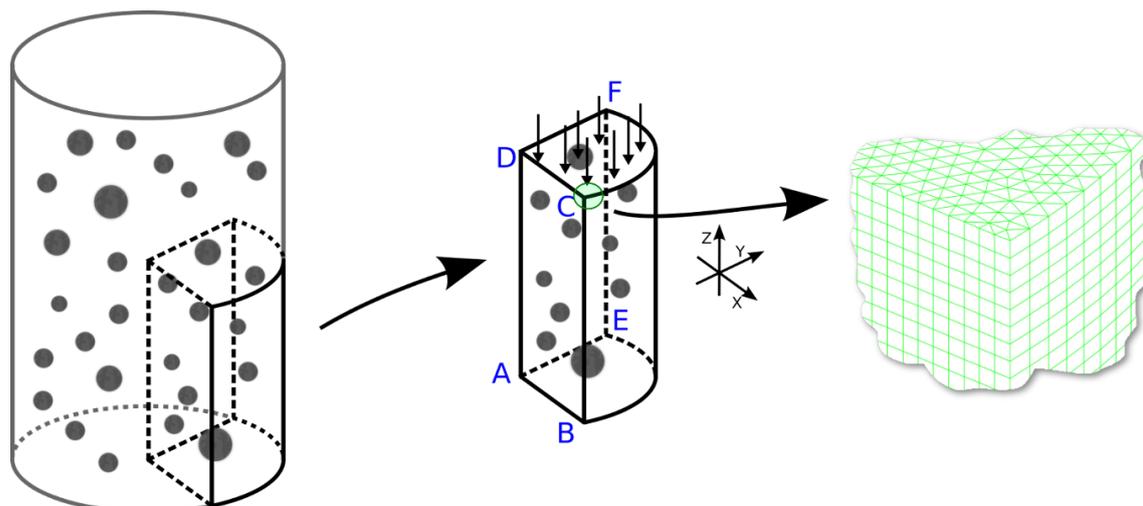


Figura 5.14: Representação numérica de uma amostra de concreto de agregado leve: (a) geometria do módulo numérico que mostra o concreto e o agregado em cinza; (b) modelo geométrico empregado nas simulações numéricas, que representa 1/8 do corpo de prova cilíndrico; (c) típica malha de Elementos Finitos gerada no Cast3M com elementos de 6 vértices em forma de cunha.

na direção Y; a seção AEFD é restringida na direção X e a seção ABE na direção Z. Essas condições de contorno foram adotadas de modo a reproduzir o teste de compressão, e o esquema de carregamento é apresentado na Figura 5.14b.

Um processo idêntico ao do modelo bidimensional foi empregado com o propósito de verificar a convergência dos resultados numéricos tridimensionais. Assim, foram adotadas sete malhas diferentes para o modelo tridimensional contendo 12,5% de agregados do tipo 4/10 550A e argamassa de médio desempenho, com níveis crescentes de refinamento para modelar o corpo de prova de concreto sob carregamento longitudinal de 15 MPa. Como pode-se ver na Figura 5.15, os resultados são quase coincidentes para as malhas MA4, MA5 e MA6, MA7. Portanto, com base nesta consideração, a malha MA4 com 71.280 elementos finitos de seis vértices em forma de cunha foi adotada para a presente análise no modelo tridimensional.

Com o objetivo de se considerar a dispersão dos resultados, foram utilizados sessenta modelos criados a partir de duas amostras sintéticas, uma contendo 12,5% de volume relativo de agregados leves e outra de 25,0%, com agregados do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho. Além disso, cada modelo apresentou uma distribuição espacial aleatória diferente de agregados.

Assim, foram realizadas simulações do comportamento à compressão dos corpos de prova em 1/8 do cilindro, e os resultados obtidos nesta etapa ratificam os resultados e

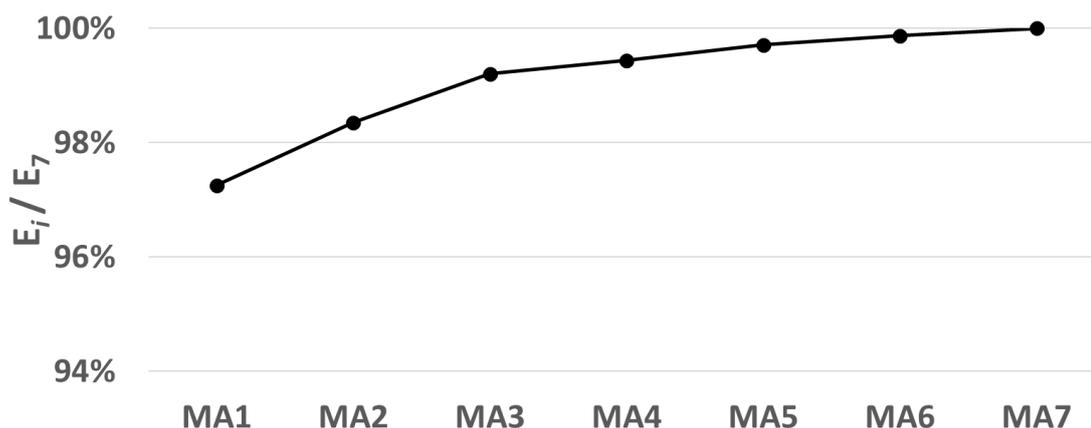


Figura 5.15: Análise de convergência do modelo tridimensional: a curva representa a variação do módulo de elasticidade final para nove malhas diferentes.

conclusões alcançados na etapa anterior em estado plano de tensão. Devido ao alto esforço computacional requeridos pelos modelos tridimensionais, apenas as proporções de 12,5% e 25,0% de agregados leves foram analisadas. Adicionalmente, o critério de escoamento Drucker-Prager Perfeito foi mantido para verificar os limites de tensões de compressão e de tração para cada material.

A tensão limite de escoamento foi obtida pelo modelo tridimensional de cálculo elastoplástico, considerada a resistência à compressão do corpo de prova ao alcançar a deformação de 3,0‰ ([102]). Já os valores médios e desvios padrões obtidos, a partir das 60 amostras simuladas, 30 para cada percentual de agregado leve (12,5% e 25,0%), são apresentados na Tabela 5.3. Vale ressaltar que os valores experimentais de referência são 39 MPa e 34 MPa para a resistência à compressão ($f_{(c,exp)}$); e 26.127 MPa e 21.680 para o módulo de elasticidade ($E_{(c,exp)}$) para os volumes de agregados leve de 12,5% e 25,0%, respectivamente.

Tabela 5.3: Resultado numérico do modelo tridimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho.

	Volume	Unidade	Valor médio	σ^1	Referência	$\Delta_{(c,exp)}$
f_c	12,5%	MPa	39,10	0,06	39,00	0,24%
	25,0%	MPa	36,58	0,05	34,00	7,59%
E_c	12,5%	GPa	25,43	0,07	26,16	2,78%
	25,0%	GPa	22,57	0,06	21,68	4,12%

¹ Desvio padrão;

Com base nos resultados apresentados na Tabela 5.3, pode-se observar a proximidade entre os resultados computacionais e os respectivos resultados experimentais ([13]), como ocorreu no estado plano de tensões: a resistência à compressão obtida foi de 39,10 MPa e o módulo de elasticidade verificado foi cerca de 25,43 GPa, apenas 0,24% e 2,78% diferente da referência, respectivamente para o corpo de prova com 12,5% de agregado leve. Por outro lado, para o corpo de prova de 25,0% de agregado leve, os valores foram 36,58 MPa para resistência à compressão e 22,57 GPa para o módulo de elasticidade, ou seja, 7,59% e 4,12% acima da referência. Nota-se, ainda, a convergência de todos os corpos de prova processados, pois o desvio padrão da resistência à compressão foi apenas 0,06 MPa e 0,05 MPa, enquanto o do módulo de elasticidade ficou em 0,07 GPa e 0,06 GPa. A curva tensão-deformação de um corpo de prova tridimensional com 12,5% de agregado leve é mostrada na Figura 5.16.

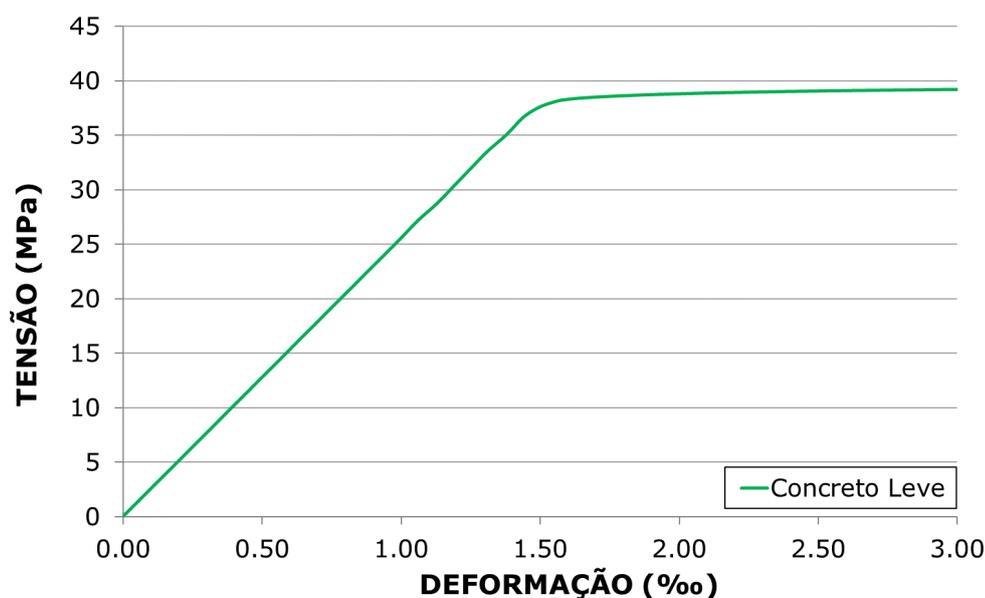


Figura 5.16: Curva tensão-deformação para o corpo de prova tridimensional contendo 12,5% de agregado leve do tipo 4/10 550A e argamassa M8 no modelo Drucker-Prager Perfeito (após a deformação 3,0‰, a tensão se mantém constante).

Para efeito de ilustração, apresenta-se a Figura 5.17, que é a distribuição de resistências à compressão e à tração, para os elementos finitos nas regiões contendo agregados e argamassa. Vale ressaltar que as situações representadas na figura se referem ao corpo de prova ainda no estado de comportamento elástico.

O tempo necessário para execução de um modelo tridimensional é de 11 horas e 24 minutos, na média, em uma máquina com processador Intel Core i7-860 (2.80GHz) e 8GB de memória RAM. Da mesma forma que no modelo bidimensional, as simulações

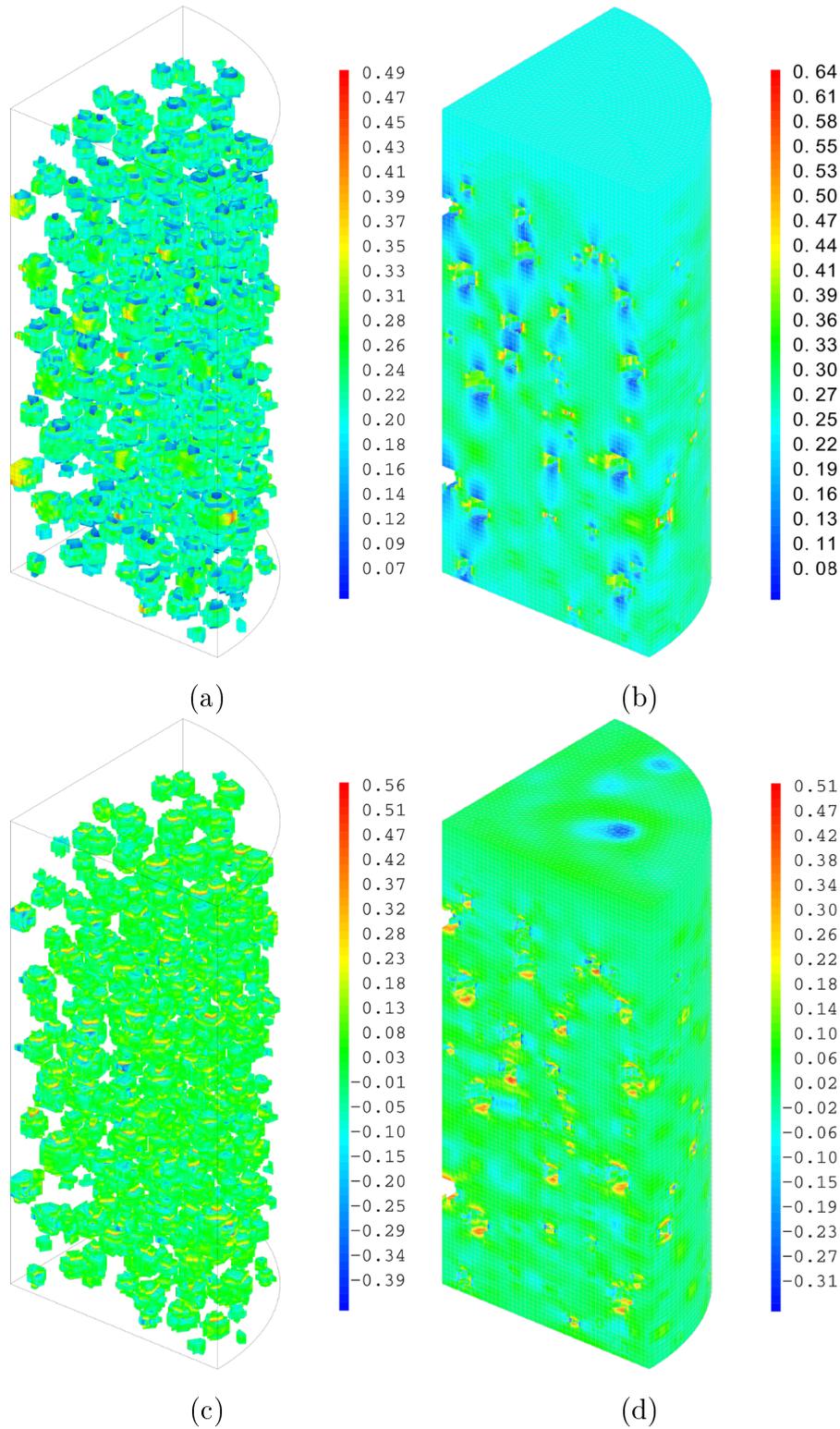


Figura 5.17: Distribuição de resistência à compressão (a e b) e de resistência à tração (c e d), para elementos finitos modelando agregados (a e c) e argamassa (b e d). A escala representa valores normalizados com os limites de resistência à compressão e tração.

dos modelos tridimensionais foram feitas em até 8 máquinas simultaneamente por meio do sistema SWADE, que será discutido na Seção 5.5.

5.4 Avaliação dos modelos bidimensional e tridimensional

A partir dos resultados exibidos anteriormente das 60 amostras sintéticas bidimensionais e tridimensionais, pode-se observar a aproximação satisfatória das propriedades do corpo de prova de concreto de agregado leve dos modelos computacionais com a sua contraparte experimental. Isso devido ao corpo de prova real, com proporções de 12,5% e 25,0% de agregados leves em relação ao volume total, ter alcançado a ruptura sob uma tensão de 39 MPa e 34 MPa; e com um módulo de elasticidade de 26,16 GPa e 21,68 GPa, respectivamente, e das amostras sintéticas terem obtido resultados com diferenças médias menores que 7,59%.

Sob o mesmo ponto de vista, com base nos resultados das 180 amostras sintéticas bidimensionais, pode-se constatar que esse modelo também obteve uma boa aproximação das propriedades mecânicas do corpo de prova real com a sua contraparte computacional. Isso em virtude das diferenças médias do modelo sintético e o corpo de prova real serem abaixo de 7,25% para a resistência à compressão e menor que 3,32% para o módulo de elasticidade.

O modelo utilizado neste estudo aplica o comportamento elastoplástico Drucker-Prager Perfeito, que impõe os limites de compressão e tração para cada material, o que gera uma tensão de compressão limite quando o critério de escoamento é alcançado para cada elemento, com a deformação plástica crescente.

Assim, em conjunto, o patamar de escoamento da seção do corpo de prova com 12,5% de agregados leves foi alcançado para 36,98 MPa, apenas 5,18% de diferença para o experimental. O módulo de elasticidade apresentou um resultado similar se comparado com os valores da referência, em média 24,20 GPa, uma redução de 7,49%. Já para o corpo de prova com 25,0% de agregados leves, o patamar de escoamento foi de 34,63 MPa, apenas 1,85% acima, e módulo de elasticidade de 21,13 GPa, uma diferença de 2,53%. Esse resultado indica uma boa correlação entre o modelo e o corpo de prova real, no que diz respeito à resistência à compressão e ao comportamento na fase elastoplástica do material. Pode-se visualizar a evolução das tensões dos materiais em conjunto na Figura 5.18. Algumas das razões para a ligeira diferença entre os valores obtidos e os experimentais são dadas mais adiante, que cobre as principais limitações do modelo.

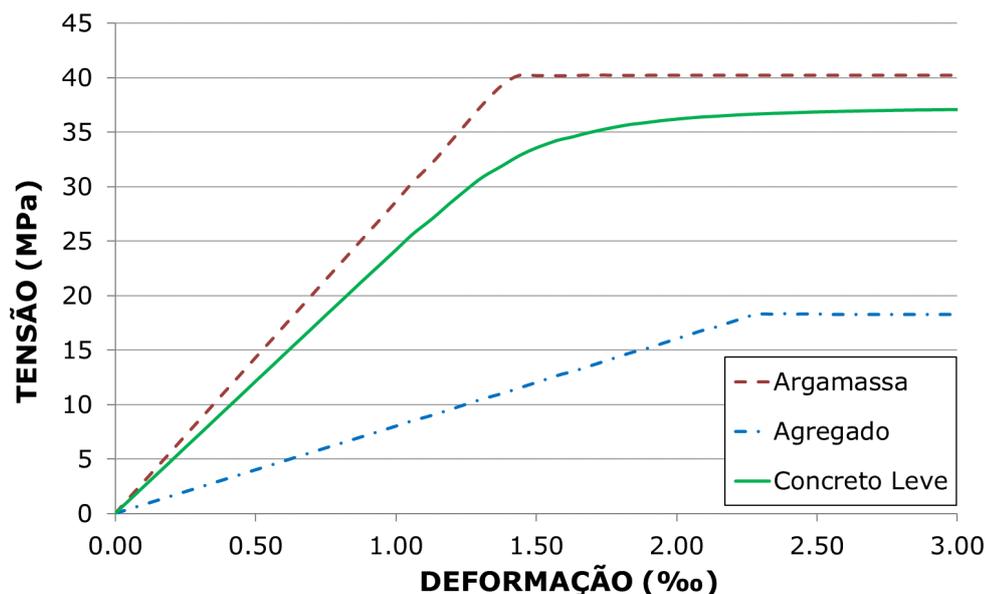


Figura 5.18: Curva tensão-deformação dos materiais envolvidos no modelo 2D: argamassa pura em vermelho (M8); agregado puro em azul (4/10 550A); e a mistura destes (com 12,5% de agregado), formando o corpo de prova, em verde.

Por outro lado, o patamar de escoamento do modelo tridimensional de 1/8 do corpo de prova com 12,5% de agregados foi alcançado para 39,10 MPa, apenas 0,24% de diferença para o experimental. Adicionalmente, o módulo de elasticidade teve como média o valor de 25,43 GPa, uma redução de apenas 2,78%. O corpo de prova com 25,0% de agregado leve, por sua vez, teve um valor de patamar de escoamento de 36,58 MPa, um acréscimo de 7,59%; e um módulo de elasticidade de 22,57 GPa, um acréscimo de 4,12%. Esses resultados do modelo tridimensional, tendo como maior valor de desvio padrão para o módulo de elasticidade de 0,07 GPa, também indicam uma boa correlação entre o modelo e o corpo de prova real, quando comparados à resistência à compressão e ao comportamento na fase elastoplástica do material. A Figura 5.19 apresenta a evolução das tensões dos materiais do agregado leve, da argamassa e do corpo de prova tridimensional composto por 12,5% de agregado leve. Serão discutidas mais adiante algumas razões para a diferença entre os valores numéricos resultantes e os experimentais, que dizem respeito às principais limitações do modelo. Observa-se ainda, a partir das Figuras 5.18 e 5.19, que o modelo 3D comparado ao modelo em 2D tem um melhor ajuste, devido ao fato que o primeiro modelo tem uma representação mais fiel do corpo de prova real.

Apesar das hipóteses simplificadoras adotadas em todos os modelos, os resultados numéricos aqui obtidos mostraram concordância razoável com a referência experimental. Este fato incentiva novas aplicações com maior complexidade relacionada com aspectos

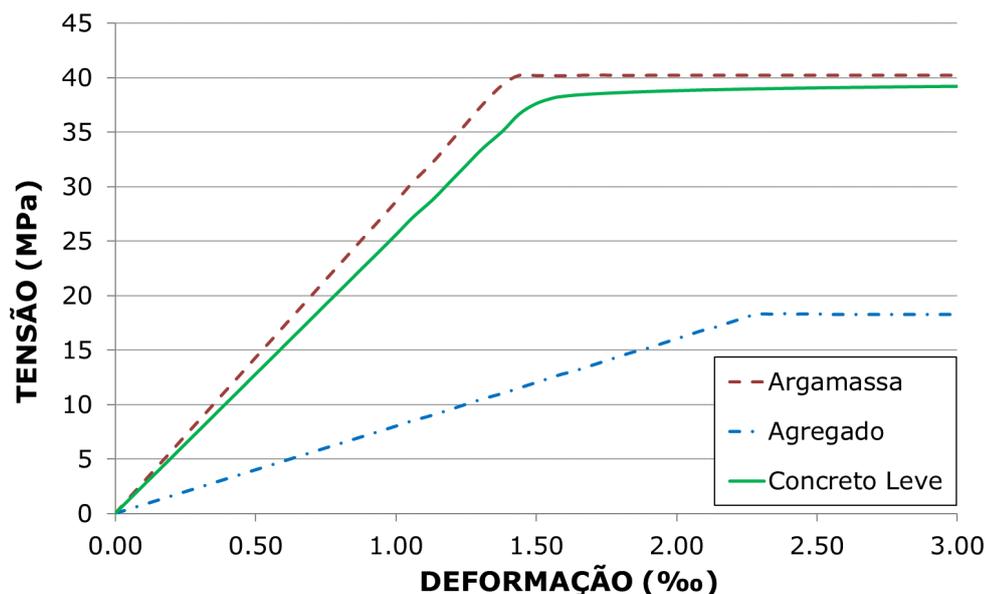


Figura 5.19: Curva tensão-deformação dos materiais envolvidos no modelo 3D: argamassa pura em vermelho (M8); agregado puro em azul (4/10 550A); e a mistura destes (com 12,5% de agregado), formando o corpo de prova, em verde.

geométricos e mecânicos, de forma a melhor reproduzir o problema tratado.

Pelo fato do modelo bidimensional conseguir reproduzir tão bem as propriedades dos corpos de prova quanto o modelo tridimensional, uma vez que o maior erro desse modelo foi de 7,59% (Tabela 5.3) e o maior erro do modelo bidimensional foi de 7,49% (Tabela 5.1), somando-se o alto esforço computacional requerido pelo modelo tridimensional, a avaliação de todas as argamassas, tipos de agregados e das outras proporções, será feita somente com o modelo bidimensional.

5.5 Automação de experimentos empregada em simulações numéricas via MEF

Conforme já destacado, pretende-se aqui desenvolver uma estratégia computacional para a avaliação das propriedades mecânicas de concreto de agregado leve. Estas propriedades mecânicas avaliadas são o módulo de elasticidade (E) e a resistência à compressão (f_c). Para tal, uma parte do estudo engloba o desenvolvimento da modelagem computacional do concreto via MEF.

Nesse sentido, com o objetivo de melhorar a eficiência e diminuir o tempo necessário para analisar a predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve na

modelagem computacional, será empregada a ferramenta computacional SWADE.

Assim, ao final dessa análise pretende-se responder à pergunta apresentada no capítulo de introdução e reescrita aqui para comodidade do leitor: uma ferramenta computacional que auxilie na modelagem e na execução desses métodos computacionais ajudaria a melhorar a eficiência desse estudo?

Para este fim, com o intuito de auxiliar na execução das simulações computacionais e de melhorar a eficiência da avaliação dos modelos numéricos, vários *workflows* científicos foram criados, um para cada etapa de simulação numérica via MEF desse trabalho. O SWADE não foi usado nas simulações via inteligência computacional, uma vez que o esforço computacional demandado pelos métodos de inteligência computacional não justifica seu emprego.

Inicialmente, foram desenvolvidos *workflows* para executar as simulações numéricas dos modelos bidimensionais e tridimensionais, com trinta amostras sintéticas para cada modelo. Além disso, o *workflow* considera a alternância da distribuição espacial aleatória diferente para todas as amostras. Posteriormente, foi criado um *workflow* científico para executar as simulações numéricas bidimensionais das 180 amostras sintéticas.

Como mencionado anteriormente, a simulação numérica é executada pelo Cast3M, portanto um código Java foi desenvolvido para fazer a interface entre o Cast3M e o SWADE, com objetivo de acionar a execução do código, capturar o resultado e torná-lo disponível no *workflow* dentro do SWADE. Assim, com o desenvolvimento dessa interface, esta ação foi definida em um arquivo XML, denominada `swade.castem`, e está disponível a qualquer pesquisador para usá-lo.

Os *workflows* científicos foram construídos para executar todas as simulações numéricas em paralelo, especificar a distribuição espacial do agregado leve para cada simulação, executar o código Cast3M e extrair os resultados. A Figura 5.20 apresenta o algoritmo que descreve de forma geral esses processos dos *workflows* usados para executar todas as simulações numéricas no SWADE. Já a Figura 5.21 mostra o diagrama com os passos necessários para execução do *workflow* científico. Acrescenta-se também que a execução paralela dessas simulações numéricas foi feita numa rede com oito máquinas com as seguintes especificações: Intel Core i7-860 (2.80GHz) e 8Gb de RAM.

O tempo médio necessário para realizar uma única simulação numérica tridimensional foi de 684 minutos e consumiu cerca de 9Gb de RAM. Assim, se todas as trinta simulações

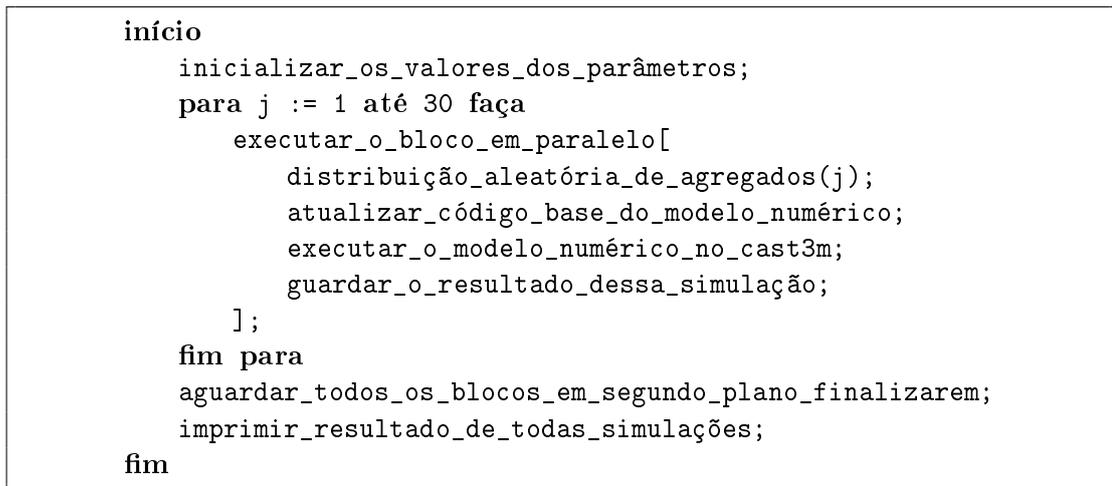


Figura 5.20: Descrição dos passos dos *workflows* científicos usados para executar todas as simulações numéricas.

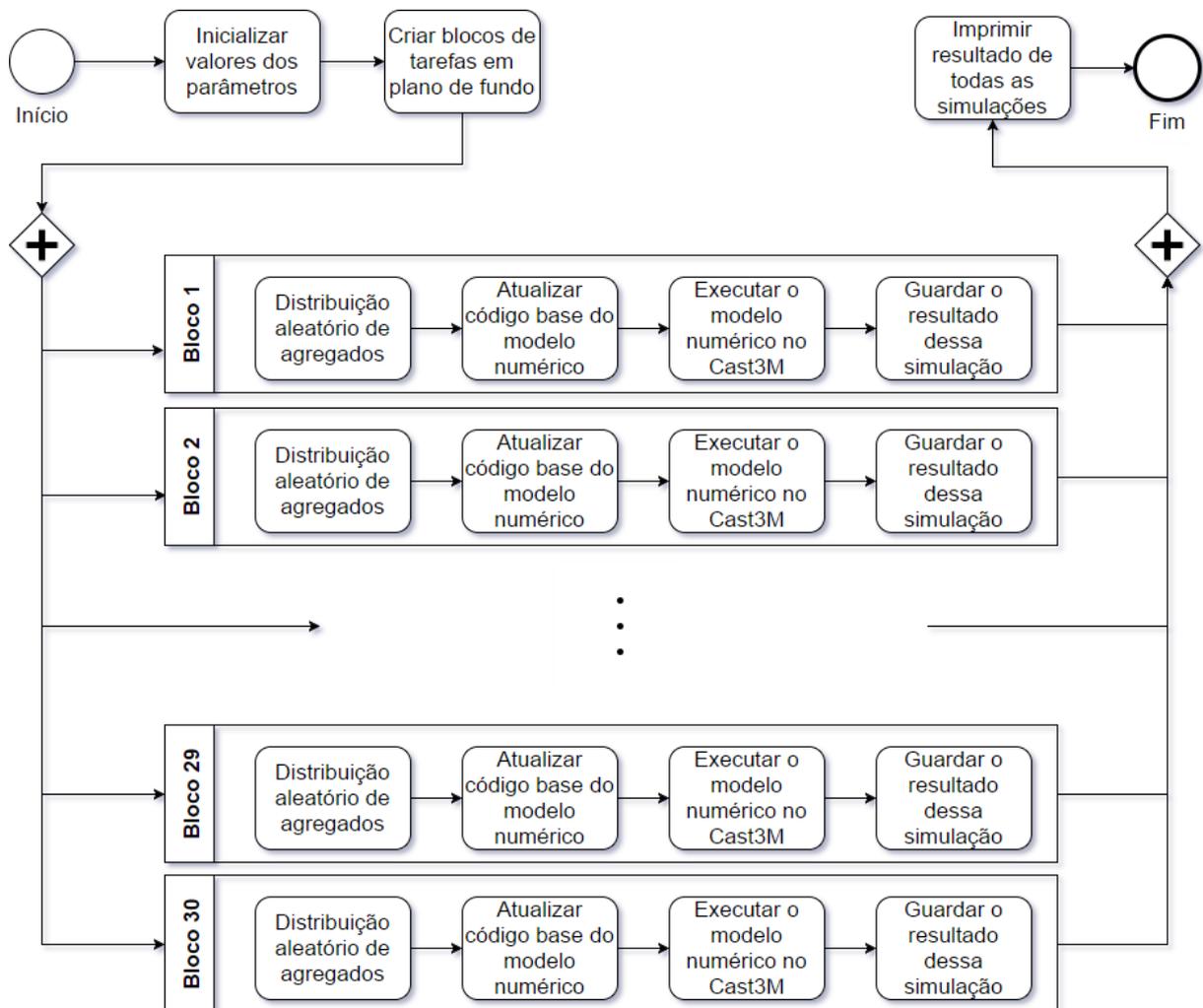


Figura 5.21: Diagrama que descreve os passos necessários para execução dos *workflows* científicos empregados nessa etapa do estudo.

forem feitas sequencialmente, seriam necessários 20.520 minutos (342h \approx 14 dias) para concluir todo o experimento científico, desconsiderando as pausas entre o início e o fim de cada simulação e, além disso, sem erros acarretados pela interação humana. No entanto, usando o sistema SWADE, em modo de execução paralelo com oito nós, foram necessários apenas 2.762 minutos (46h02m \approx 2 dias) para concluir todas as simulações numéricas. Esse tempo representa apenas 13,46% do tempo no modo de execução sequencial.

A Figura 5.22 apresenta um gráfico de Gantt que mostra a ocupação de todos os nós na rede de comunicação do SWADE, e cada mudança de cor representa uma nova ação executada pelo nó. Observa-se ainda nesse gráfico que os nós N4 e N2 ficaram ociosos porque não havia nenhuma tarefa esperando na fila para ser executada naquele momento.

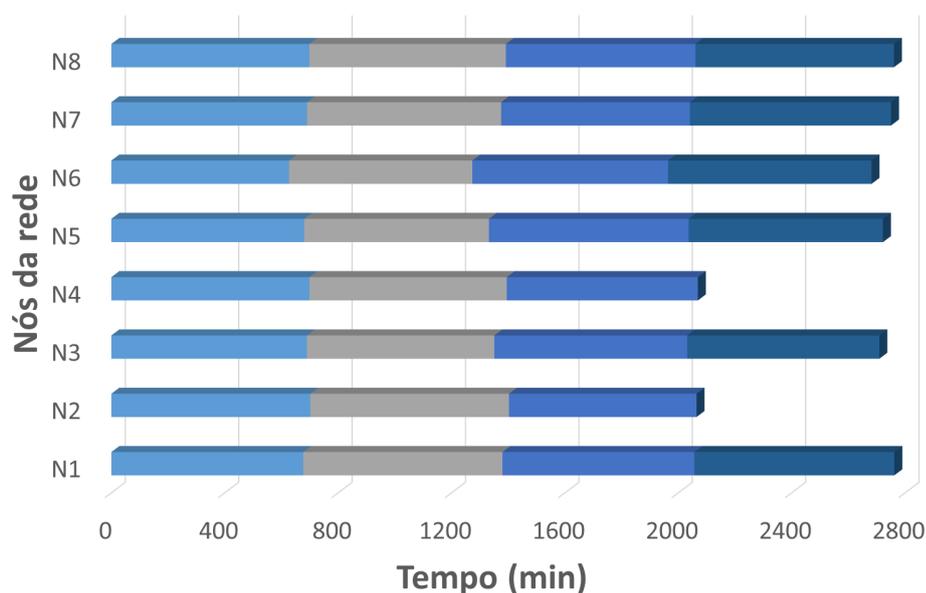


Figura 5.22: Ocupação dos nós do SWADE em cada máquina na rede para simulação numérica tridimensional do primeiro experimento com 30 amostras sintéticas. A mudança de cor representa apenas uma tarefa diferente ocupando a máquina.

Baseado na Figura 5.22 observa-se que foram atingidos os objetivos de bom aproveitamento da capacidade computacional da rede do SWADE, tendo em vista que houve praticamente nenhuma ociosidade nas máquinas. Foi considerado também a execução de apenas uma tarefa por vez em cada máquina, isso devido as limitações de recursos computacionais das máquinas e o alto consumo de memória RAM das tarefas. Além disso, foram desconsideradas eventuais cargas de trabalho advindas de programas externos nas máquinas, não relacionadas ao *workflow*, visto que a execução desse experimento científico foi processada em horário que não haviam outros usuários consumindo recursos computacionais. Assim, neste contexto, foi possível adotar uma

política de escalonamento simples e eficiente.

Do mesmo modo, o experimento do modelo bidimensional com trinta amostras sintéticas necessitou de 6 minutos e 48 segundos, em média, para executar apenas uma simulação numérica. Assim, a execução sequencial de todos esses modelos precisaria de 204 minutos (3h24m), bem superior aos 28 minutos da abordagem via SWADE. O tempo deste representa 13,73% do tempo da abordagem sequencial.

Já o terceiro experimento, com modelo bidimensional e 180 amostras sintéticas, teve o tempo médio de 6 minutos e 51 segundos para executar cada simulação numérica. Logo, a execução sequencial desse experimento completa necessitaria de 1233 minutos (20h33m), enquanto a abordagem via SWADE precisaria de 152 minutos (2h32m), apenas 12,33% do tempo da primeira abordagem. A Figura 5.23 mostra a ocupação das tarefas em todos os nós da rede de comunicação do SWADE para o terceiro experimento, com as simulações numéricas bidimensional das 180 amostras sintéticas. As mudanças de cores em cada nó indicam que uma nova ação foi executada.

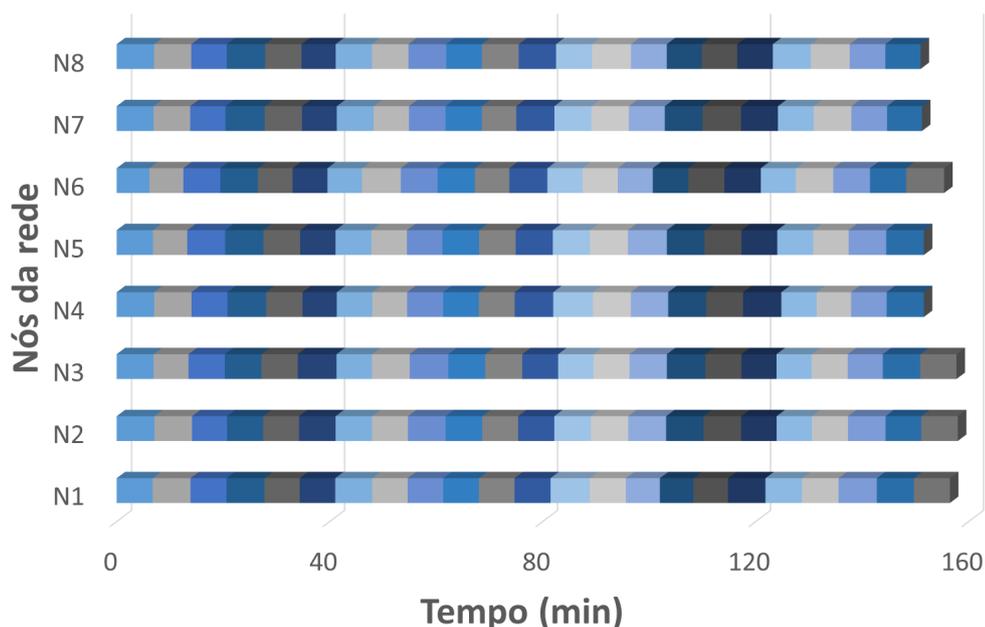


Figura 5.23: Ocupação dos nós do SWADE em cada máquina na rede para simulação numérica bidimensional do terceiro experimento com 180 amostras sintéticas. A mudança de cor representa apenas uma tarefa diferente ocupando a máquina.

Um resumo de todos os tempos para cada experimento computacional apresentado anteriormente está listado na Tabela 5.4, que inclui o modelo bidimensional e tridimensional, o número de amostras sintéticas, o tempo sequencial do experimento, o tempo da execução via SWADE e a diferença percentual entre o menor e o maior tempo.

Tabela 5.4: Resumo dos tempos necessários para execução dos experimentos numéricos sequencialmente e via SWADE.

Modelo	Número de amostras sintéticas	Tempos de processamento		
		Sequencial (min)	SWADE (min)	Redução do tempo de processamento
3D	30	20.520	2.762	-86,54%
2D	30	204	28	-86,27%
	180	1.233	152	-87,67%

Além de menor tempo para executar todas as simulações numéricas, esta nova abordagem via SWADE elimina qualquer possível erro pela interação humana ao executar simulações ou extrair os resultados, obtendo assim uma melhor eficiência. O recurso responsável pela melhoria da eficiência do *workflow* científico consiste na organização de todas as ações em filas e enviá-las para cada nó do SWADE automaticamente assim que elas concluírem seu trabalho.

Com base nos dados apresentados na Tabela 5.4, observa-se que o tempo necessário para executar as simulações numéricas foi menor em todos os experimentos ao usar o sistema SWADE em modo paralelo, ao se comparar à abordagem sequencial. Além disso, considerou-se que não houveram pausas entre o início e o fim de cada simulação na execução sequencial. Na melhor comparação, o tempo para completar um experimento diminuiu 12,33%. Acrescenta-se também que foram eliminados possíveis erros manuais que poderiam ocorrer ao iniciar cada simulação numérica e na extração de resultados.

É importante destacar aqui a vantagem de diminuir o tempo de simulação dos experimentos, pois ao considerar apenas uma execução completa pode-se até admitir que não é tão vantajoso assim. Porém, foi necessário ajustar os modelos numéricos e repetir o processamento dos experimentos várias vezes, até chegar num modelo computacional que representasse satisfatoriamente o fenômeno real. Ou seja, um experimento que demandaria muitas horas - 20h33m, por exemplo - e passou a demandar poucas horas - 2h32m - fez com que a pesquisa acelerasse bastante, pois tornou possível a realização de várias análises num único dia de trabalho.

Diferentes fatos contribuíram para alcançar tais resultados: (a) a execução paralela das simulações numéricas; (b) mudança automática da amostra com distribuição espacial aleatória dos agregados e (c) a eficiência operacional proporcionada pelo uso do sistema

SWADE.

Além disso, a SWADE contribuiu para os seguintes aspectos do ciclo de vida da experimentação *in silico*:

- a automação do controle da execução do experimento evitou a intervenção humana, que é demorada e sujeita a erros. Acrescenta-se também que a automação permitiu aplicar uma estratégia que teria sido penoso para executar sem essa automação;
- a execução paralela de tarefas melhorou significativamente a eficiência de execução, pois diminuiu o tempo total para realização de um experimento completo;
- a facilidade de integrar programas de terceiros no sistema, como foi feito no caso do Cast3M. Essa tarefa pode levar um enorme esforço em outras ferramentas como descrito em [61].

Vale ressaltar ainda que o uso da linguagem LUA embutida no SWADE torna a curva de aprendizado para criação de *workflow* científico mais rápida, pois existem diversos tutoriais e documentação disponíveis para estudo dessa linguagem ([104, 105]). E a funcionalidade transparente da execução em paralelo disponibilizada no LUA pelo SWADE evita alguns detalhes técnicos complexos inerentes a sistemas distribuídos e heterogêneos.

5.6 Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de predição via MEF

Como qualquer estudo que modela um fenômeno da vida real, o presente modelo apresenta aproximações e considerações de forma a discretizar e simplificar o comportamento de um material contínuo, heterogêneo e complexo como é o caso do concreto.

Desta forma, algumas das simplificações feitas têm efeito negativo nos resultados obtidos. Como por exemplo:

- em relação à geometria:
 - agregados perfeitamente esféricos, por mais que a argila expandida se aproxime deste formato, os agregados não são perfeitamente esféricos;

- seção retangular central de um corpo de prova cilíndrico (as seções posterior e anterior não serão idênticas);
 - representação 2D de um objeto 3D, no estado plano de tensões;
 - redução a 1/4 da seção ou 1/8 do cilindro para economia computacional, o que acarreta mais discrepâncias com o corpo de prova real;
- para os materiais:
 - a zona interfacial de transição do concreto de agregado leve real é considerada suave, pois há absorção de partículas de argamassa por parte dos poros exteriores do agregado. No presente caso, essa transição é abrupta e bem definida;
 - o modelo considera ambas as fases homogêneas, o que não ocorre na realidade. Há materiais diferentes compondo a argamassa; e o agregado é uma estrutura porosa;
 - a distribuição aleatória do agregado não contempla fenômenos como concentração de agregados ou segregação no corpo de prova, passíveis de ocorrer na realidade;
 - o valor de tensão de compressão utilizado para o agregado foi obtido através de um método analítico. A referência [13] mostra que esse método fornece resultados satisfatórios quando se compara os valores de tensão de compressão máxima obtidos via método analítico e via ensaio experimental;
 - quanto à malha:
 - não foi feito um refinamento mais preciso na zona de transição entre agregados e argamassa, o que seria aconselhável. Apesar disso, observa-se que os resultados obtidos via MEF são bem próximos dos seus respectivos ensaios experimentais;
 - em relação ao modelo:
 - o modelo Drucker-Prager é apenas uma aproximação do comportamento dos materiais componentes do concreto. Na realidade, este comportamento é extremamente complexo e dependente de inúmeros fatores externos e internos;

- os resultados são limitados pelos dados de entrada disponíveis, que são apenas a granulometria do agregado, o módulo de elasticidade e resistência à compressão e tração dos materiais;
- na curva tensão-deformação dos materiais reais, agregado, argamassa e concreto, observa-se um amolecimento (redução da tensão) após tensão de ruptura ser atingida. Nos modelos utilizados no presente trabalho, este fenômeno não é considerado.

Ao comparar os piores valores da diferença média das propriedades mecânicas dos modelos bidimensional (7,49%) e tridimensional (7,59%), pode-se concluir que o modelo bidimensional consegue reproduzir tão bem as propriedades mecânicas dos corpos de prova real quanto o modelo tridimensional. Essa afirmação é baseada na avaliação das simulações numéricas de amostras sintéticas contendo 12,5% de volume relativo de agregados leves e outra de 25,0%, com agregados do tipo 4/10 550A e a argamassa de médio desempenho, apresentadas nas Tabelas 5.1 e 5.3.

Pelo fato do modelo bidimensional necessitar de menos recursos computacionais que seu respectivo modelo tridimensional, e conseguir completar um experimento em muito menos tempo, o modelo bidimensional foi usado na criação do experimento que usou todos os dados disponíveis pela referência.

Considerando-se todas as hipóteses simplificadoras adotadas, e considerando os resultados obtidos, pode-se afirmar que essa boa aproximação com os resultados experimentais denota a validade do trabalho de Ke et al. ([13]), demonstrando que a utilização da resistência à compressão do agregado obtida através do método analítico por eles desenvolvido resulta em uma resistência final do concreto de agregado leve próxima da experimental. Entretanto, apesar dos bons resultados obtidos até o momento, é necessário continuar o trabalho de refinamento, ajuste do modelo, além da aplicação a outras dosagens de agregado.

A partir dos resultados obtidos para corpos de prova, futuramente será possível extrapolar a aplicação do presente modelo a estruturas mais complexas, como pórticos, lajes, elementos de vedação, entre outros.

Além disso, a simulação do teste de compressão de um corpo de prova de concreto de agregado leve com objetivo de se obter a resistência à compressão a partir das propriedades de seus componentes, descrita no presente trabalho, poderá ser reutilizada para outras

aplicações em engenharia.

Uma vez que os resultados do emprego do SWADE estão relacionados com a eficiência de execução de um experimento científico e não com a qualidade das predições via MEF, optou-se por não abordar esse assunto nesse ponto do texto. Ressalta-se que a seção anterior faz as análises de resultados relativos ao SWADE.

6 Predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve via Inteligência Computacional

Os modelos criados, a partir das técnicas de aprendizado supervisionado, neste estudo, foram elaborados por meio dos programas de computador R ([106]) e Matlab[®] ([107]). Pode-se dizer que o R é um aplicativo e também uma linguagem de programação, no qual são baseadas as suas rotinas. Seu objetivo é agregar ferramentas gráficas, de cálculo e de análise de dados em um ambiente de desenvolvimento de programa único. Inicialmente, o R era voltado para computação estatística, porém, atualmente, ele é um conjunto de recursos para manipulação de dados, cálculo e exibição gráfica. Por isso, o termo “ambiente” caracteriza-o como um sistema flexível e de vasta aplicabilidade. Já o Matlab[®] trata-se de um programa de computador interativo de alto desempenho voltado para o cálculo numérico. Ao contrário da programação tradicional, o Matlab[®] incorpora cálculo com matrizes, aprendizado de máquina, processamento de sinais, análise numérica e construção de gráficos em ambiente fácil de usar, onde problemas e soluções geralmente são expressos e escritos matematicamente.

Ao fazer os estudos de métodos baseados em ajustes de parâmetros, em um conjunto de resultados experimentais, as técnicas de aprendizado supervisionado Regressão Linear Múltipla, Regressão Linear Quadrática Múltipla e Regressão Linear Cúbica Múltipla ([108, 109, 110]), são usadas para criar modelos controles. Nesse sentido, as métricas MAPE, RMSE, r , R^2 e \bar{R}^2 são usadas a fim de auxiliar na avaliação de todos os métodos de aprendizado supervisionados estudados nesse tópico.

A partir da análise que compara essas técnicas, verifica-se a necessidade de usar os métodos Máquina Vetor Suporte com Regressão (SVR - *Support Vector Regression*) e a Rede Neural Artificial (RNA) pelo fato dos dados serem não-lineares, como será discutido mais adiante.

6.1 Avaliação de modelos de regressão para predição das propriedades mecânicas

Com o propósito de avaliar a predição dos modelos de regressão, foi realizada inicialmente uma análise para saber se existe uma relação entre as variáveis do problema e que tipo de relação seria: linear ou não linear. Nessa perspectiva, foram realizadas análises a partir da aplicação do método de Regressão Linear Múltipla (RLM), em seguida, de Regressão Quadrática Múltipla (R2M) e de Regressão Cúbica Múltipla (R3M) ([108]) nos dados apresentados nas Tabelas 4.5 e 4.6.

Os resultados da análise das técnicas de aprendizado supervisionado, que foram obtidos a partir de 100 execuções da técnica *k-fold*, com $k = 10$, podem ser visualizados na Tabela 6.1, para as variáveis de saída resistência à compressão e módulo de elasticidade, respectivamente.

Pode-se observar pelos valores apresentados na Tabela 6.1 que os métodos R2M e R3M foram melhores que o método RLM, uma vez que, quanto maior for o r , R^2 e \bar{R}^2 , melhor é o resultado; e quanto menor for o RMSE e MAPE, melhor é o resultado. Portanto, a partir desses resultados, pode-se concluir que existe uma não linearidade entre as variáveis de entrada com cada variável de saída.

Baseado nesses resultados, buscou-se fazer uma análise com um método que trabalhasse de forma adequada com relações não-lineares entre as variáveis independentes e a variável dependente, e depois de algumas pesquisas ([57, 20, 22, 111, 112, 113]), foram escolhidos os métodos SVR e RNA ([51]). De acordo com as referências [57], [111] e [112], os métodos de RNA e SVR são bons métodos para fazer predição de propriedades mecânicas do concreto e de rochas, porém, com leve vantagem para o método SVR, pois este pode criar predições com auto grau de precisão em um tempo de computação menor.

No entanto, antes de criar o modelo de predição para a RNA é preciso definir quantos neurônios são necessários para compor a camada escondida a fim de solucionar o problema. Diante disso, a escolha do número de neurônios foi baseada na criação de várias redes neurais com número diferente de neurônios na camada escondida, além de realizar a validação cruzada com a técnica *k-fold*, com $k = 10$, e repetir trinta vezes com reorganização aleatória dos dados.

O resumo com os valores do MAPE das predições obtidas em cada rede neural com

Tabela 6.1: Resultado das técnicas de aprendizado supervisionado para as predições da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) pelos métodos controlados.

Parâmetro	f_c				E_c						
	Método	Média	σ^1	Mínimo	Máximo	Parâmetro	Método	Média	σ^1	Mínimo	Máximo
r	RLM ²	0,9142	0,0269	0,7767	0,9778		RLM ²	0,9492	0,0220	0,8115	0,9890
	R2M ³	0,9821	0,0086	0,8947	0,9970	r	R2M ³	0,9903	0,0038	0,9688	0,9974
	R3M ⁴	0,9850	0,0072	0,9199	0,9973		R3M ⁴	0,9908	0,0038	0,9697	0,9977
R^2	RLM	0,8165	0,0594	0,4177	0,9481		RLM	0,8897	0,0443	0,6247	0,9703
	R2M	0,9614	0,0184	0,7388	0,9909	R^2	R2M	0,9789	0,0080	0,9322	0,9938
	R3M	0,9677	0,0154	0,8103	0,9923		R3M	0,9800	0,0080	0,9329	0,9949
\bar{R}^2	RLM	0,7779	0,0719	0,2951	0,9371		RLM	0,8665	0,0536	0,5457	0,9640
	R2M	0,9533	0,0223	0,6838	0,9890	\bar{R}^2	R2M	0,9745	0,0096	0,9180	0,9925
	R3M	0,9609	0,0186	0,7703	0,9907		R3M	0,9758	0,0096	0,9187	0,9939
RMSE	RLM	5,6020	4,0892	0,0010	19,2462		RLM	1,5076	1,1132	0,0026	5,8847
	R2M	2,5447	1,9575	0,0046	10,5498	RMSE	R2M	0,6736	0,0522	0,0006	2,9719
	R3M	2,3613	1,8267	0,0045	14,0224		R3M	0,6553	0,4971	0,0003	2,9751
MAPE	RLM	11,4736	1,7407	6,9306	17,6609		RLM	5,1204	0,7521	3,2081	7,4988
	R2M	5,5637	0,8458	3,0924	9,0049	MAPE	R2M	2,5225	0,3946	1,4684	3,9651
	R3M	4,8982	0,7761	2,7108	7,6125		R3M	2,4391	0,3898	1,3602	4,0558

¹ Desvio padrão; ² Regressão linear múltipla; ³ Regressão quadrática múltipla; ⁴ Regressão cúbica múltipla;

seu respectivo número de neurônios na camada escondida é apresentado na Tabela 6.2. Com base nesses dados pode-se verificar que a resistência à compressão obteve menor erro médio para 8 neurônios e o módulo de elasticidade para 6 neurônios.

Tabela 6.2: Resumo com o MAPE das predições obtidas a partir da execução de uma RNA com a técnica *10-fold*, executada trinta vezes.

Propriedade	Neurônios	Média	σ^1	Mín.	Máx.
Resistência à compressão	4	5.5675	3.9963	0.8477	35.0196
	6	5.1567	3.7081	0.7461	41.7989
	7	5.5687	7.4351	0.5061	103.8079
	8	<u>4.8719</u>	4.0577	0.6092	50.0090
	9	5.0659	3.9673	0.3195	41.9312
	15	5.6514	10.9447	0.2829	150.2680
Módulo de elasticidade	4	3.3707	7.1864	0.7672	123.0244
	5	3.0547	2.4159	0.5973	35.0084
	6	<u>2.9333</u>	1.5631	0.2677	16.1905
	7	2.9915	2.2310	0.5263	23.6161
	8	3.1173	1.9347	0.4996	20.8456
	15	3.2466	3.0716	0.3559	31.7726

¹ Desvio padrão;

A Figura 6.1 ilustra o esquema da arquitetura da RNA da resistência à compressão proposta neste trabalho. Observa-se na figura as quatro variáveis de entrada: fator água/cimento, quantidade de cimento, volume do agregado e densidade do agregado; e uma variável de saída: resistência à compressão, que é a informação que se deseja prever. Na figura é apresentado oito neurônios na camada escondida, porém para o módulo de elasticidade foram usados apenas seis neurônios.

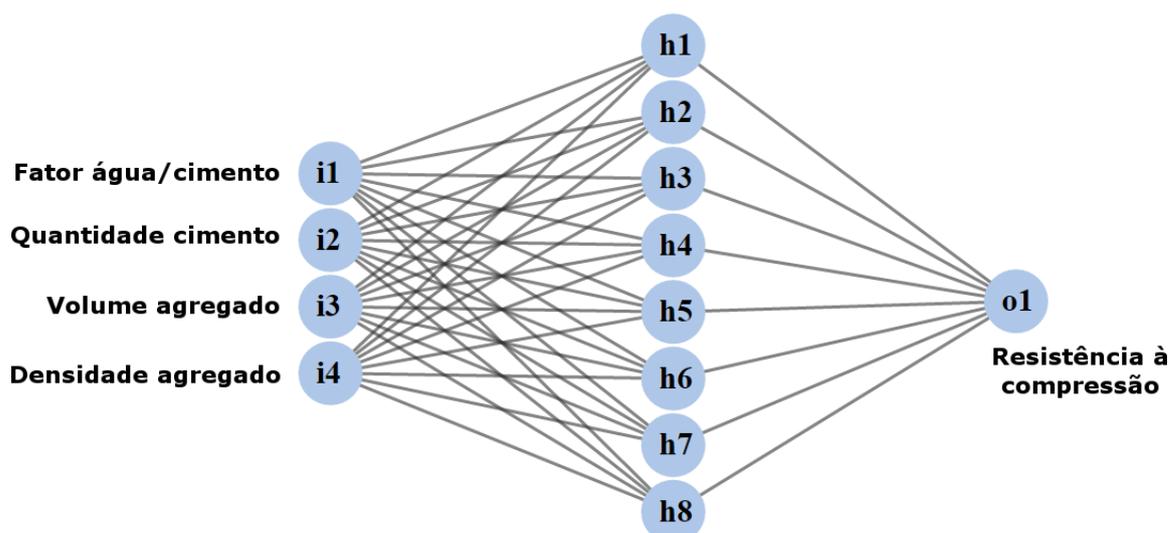


Figura 6.1: Esquema da arquitetura da RNA da resistência à compressão com oito neurônios na camada oculta. (adaptado de [114]).

6.2 Predição das propriedades mecânicas via RNA e SVR

Após definidos os métodos de aprendizado de máquina a serem usados, RNA e SVR, o próximo passo é criar os modelos de predição desses métodos.

Inicialmente foi criado o modelo de predição do SVR. Nesse sentido, foram definidos os parâmetros necessários para a criação do referido modelo para cada propriedade mecânica. Para a variável de saída resistência à compressão foram usados os seguintes dados: $kernel = RBF$, $C = 100$ e $\gamma = 0,03162278$; e para a variável módulo de elasticidade foram usados: $kernel = RBF$, $C = 10$ e $\gamma = 0,06309573$; onde C é o parâmetro de penalidade do termo de erro e γ é o coeficiente do $kernel$. Esses parâmetros foram definidos após aplicada uma otimização por meio da técnica *grid search* ([115, 116, 117]), que realiza uma busca exaustiva para encontrar o melhor ajuste ao alternar todos os valores informados.

Por outro lado, o modelo de predição da RNA é do tipo MLP (*MultiLayer Perceptron*) com uma camada oculta e foi construída utilizando a *Neural Network toolbox* disponível no Matlab[®]. Já os parâmetros adotados na criação do modelo da RNA foram: o método de otimização de Levenberg-Marquardt ([42]) como função de treinamento, a média quadrática como métrica de erro e uma sigmoide tangente hiperbólica como função de ativação.

Com o propósito de realizar uma comparação destes métodos - RNA e SVR - com

os métodos controle (Tabela 6.1), foram realizadas também 100 execuções da técnica de validação cruzada *k-fold*, com $k = 10$, nos mesmos dados de referência (Tabelas 4.5 e 4.6). O resumo com os resultados obtidos das predições da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) pelos métodos RNA e SVR é apresentado na Tabela 6.3.

Tabela 6.3: Resumo das predições da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) pelos métodos RNA e SVR após 100 execuções da técnica *k-fold*.

Propriedade	Parâmetro	Método	Média	σ^1	Mín.	Máx.	
f_c	r	SVR	<u>0,9864</u>	0,0067	0,9299	0,9976	
		RNA	0,9847	0,0128	0,7839	0,9984	
	R^2	SVR	<u>0,9708</u>	0,0143	0,8259	0,9941	
		RNA	0,9664	0,0269	0,5978	0,9948	
	\bar{R}^2	SVR	<u>0,9647</u>	0,0174	0,7893	0,9929	
		RNA	0,9585	0,0333	0,2031	0,9935	
	RMSE	SVR	<u>2,2578</u>	1,7434	0,0058	12,0961	
		RNA	2,5675	2,1097	0,0084	17,7035	
	MAPE	SVR	<u>4,5307</u>	0,7762	2,0935	6,9712	
		RNA	4,8285	1,3125	2,0740	18,2084	
	E_c	r	SVR	0,9912	0,0036	0,9731	0,9976
			RNA	<u>0,9919</u>	0,0036	0,9658	0,9979
R^2		SVR	0,9808	0,0075	0,9411	0,9945	
		RNA	<u>0,9818</u>	0,0081	0,9142	0,9957	
\bar{R}^2		SVR	0,9767	0,0091	0,9286	0,9933	
		RNA	<u>0,9776</u>	0,0101	0,8940	0,9946	
RMSE		SVR	0,6543	0,4894	0,0006	2,9151	
		RNA	<u>0,6398</u>	0,5187	0,0007	4,2924	
MAPE		SVR	2,4283	0,3797	1,4979	3,8771	
		RNA	<u>2,3524</u>	0,4696	1,1379	5,3276	

¹ Desvio padrão;

Pode-se observar, a partir dos resultados mostrados na Tabela 6.3, que o modelo de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve pelos métodos SVR e RNA tiveram uma aproximação satisfatória ao comparar os resultados preditos com os obtidos em ensaios laboratoriais. Para esse fim, basta observar na tabela os valores sublinhados, que representam os melhores resultados em cada parâmetro estatístico. Quanto maior for o r , R^2 e \bar{R}^2 , melhor é o resultado; e quanto menor for o RMSE e

MAPE, melhor é o resultado. De fato, o SVR se saiu melhor na comparação da resistência à compressão, enquanto o RNA foi melhor na comparação do módulo de elasticidade.

Ao comparar os resultados obtidos na avaliação destes métodos (Tabela 6.3) com os obtidos nos métodos controles (Tabela 6.1), observa-se que o método R3M obteve resultados bem próximos dos métodos RNA e SVR. Por exemplo, para a resistência à compressão o R3M obteve os valores 0,9850, 0,9677, 0,9609, 2,3613 e 4,8982, respectivamente para r , R^2 , \bar{R}^2 , RMSE e MAPE, enquanto o SVR obteve 0,9864, 0,9708, 0,9647, 2,2578 e 5,4307. Porém, como dito anteriormente, as referências [57], [111] e [112], indicam que os métodos RNA e SVR são bons métodos para fazer predição de propriedades mecânicas do concreto e de rochas. Por esse motivo, esses métodos foram usados neste trabalho em detrimento do R3M.

Vale ressaltar ainda que para o método RNA os nove subconjuntos utilizados para criação do modelo foi subdividido da seguinte maneira na *Neural Network toolbox*: 1/10 dos dados para teste, 1/10 para validação e o restante dos dados para treino. Enquanto que para o método SVR os nove subconjuntos foram tratados como um único bloco para criar seu respectivo modelo de predição.

Adicionalmente, apenas com o intuito de ilustrar um resultado desses 100 modelos criados, as Figuras 6.2a e 6.2b mostram as distribuições do melhor modelo SVR com os dados preditos e os dados observados, para cada variável de saída (resistência à compressão e módulo de elasticidade), além dos valores de cada parâmetro estatístico.

O tempo necessário para realizar a execução completa das 100 validações cruzadas dos modelos de predição, de todos os métodos aqui estudados (SVR, RNA, RLM, R2M e R3M), foi de apenas 6 minutos e 23 segundos em uma máquina com processador Intel Core i5-3750K (3.40GHz) e 16GB de memória RAM.

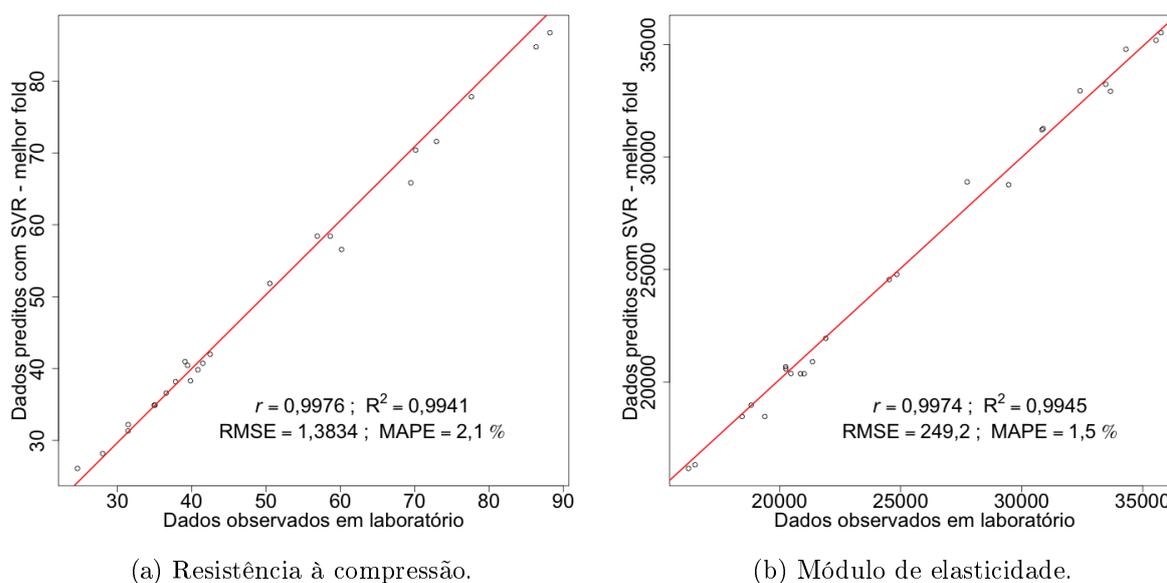


Figura 6.2: Valores preditos pelo método SVR, do melhor *fold*, comparados com os valores observados em laboratório.

6.3 Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de predição via RNA e SVR

Neste estudo, foram criados modelos de predição pelos métodos de Regressão Linear Múltipla, Regressão Quadrática Múltipla, Regressão Cúbica Múltipla, SVR e RNA para as propriedades mecânicas resistência à compressão e módulo de elasticidade. Os dados experimentais foram obtidos a partir da referência [13], que continha 6 atributos e 180 amostras de concreto de agregado leve, apresentados nas Tabelas 4.5 e 4.6. Os métodos de predição propostos aqui foram aplicadas segundo a técnica *k-fold*, com $k = 10$, onde 9 conjuntos (*fold*) foram usados para treinamento e o 10º conjunto para teste. Esse procedimento foi repetido 100 vezes, com um conjunto de teste distinto em cada experimento, visando a dispersão de resultados.

O desempenho dos métodos propostos foram comparados usando 5 parâmetros estatísticos distintos: RMSE, MAPE, r , R^2 e \bar{R}^2 , no qual obteve-se uma comparação compreensiva dos métodos de predição empregados. Assim sendo, os resultados (Tabela 6.1) confirmam que a predição de concreto de agregado leve é um problema não-linear e que não podem ser resolvidas pelas tradicionais técnicas de Regressão Linear. Com base nos resultados apresentados nas Tabelas 6.1 e 6.3, observa-se que os melhores

métodos para predição das propriedades mecânicas do concreto foram o SVR e a RNA, respectivamente para resistência à compressão e módulo de elasticidade, com MAPE médio de 4,53% e 2,35%; e RMSE médio de 2,26 MPa e 0,64 GPa.

Assim sendo, pelos resultados apresentados nesta Seção, os métodos de inteligência computacional SVR e RNA serão usados para análise da predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve, avaliados no Capítulo 7.1.

7 Predição das propriedades mecânicas com os métodos combinados

Inicialmente será abordado neste capítulo a avaliação dos resultados de predição obtidos por todos os métodos estudados anteriormente (MEF, RNA e MEF), para então fazer uma avaliação juntamente com os resultados dos métodos combinados.

7.1 Síntese dos resultados obtidos via MEF, RNA e SVR

Neste estudo, em um primeiro momento, foi analisada o método de modelagem computacional via MEF dos modelos bidimensional (2D) e tridimensional (3D). A partir dos resultados apresentados na Tabela 7.1, observa-se que para um percentual de 12,5% de agregado, em relação ao volume total do corpo de prova, o modelo 3D obteve erros menores para a resistência à compressão e módulo de elasticidade: 0,24% e 2,78%, respectivamente, de 30 amostras sintéticas. Enquanto para 25,0% de agregado, o modelo 2D computou erros menores, 1,85% e 2,53%, como espera-se um resultado do modelo 3D mais próximo daquele obtido no corpo de prova real; e o erro maior deste modelo pode ser justificado pelas limitações discutidas na Seção 5.6.

Tabela 7.1: Comparação dos erros dos modelos bidimensional e tridimensional para a resistência à compressão (f_c) e o módulo de elasticidade (E_c) das 30 amostras sintéticas com 12,5% e 25,0% de volume relativo de agregado.

Propriedade	Volume	Modelo	$\Delta_{(c,exp)}$
f_c (MPa)	12,5%	2D	5,18%
		3D	0,24%
	25,0%	2D	1,85%
		3D	7,59%
E_c (GPa)	12,5%	2D	7,49%
		3D	2,78%
	25,0%	2D	2,53%
		3D	4,12%

Ainda com base nos resultados apresentados na Tabela 7.1, pode-se inferir que o modelo bidimensional consegue reproduzir tão bem as propriedades dos corpos de prova quanto o modelo tridimensional, já que o maior erro do modelo bidimensional foi de 7,49% e do modelo tridimensional foi de 7,59%. Por outro lado, ambos os modelos tiveram resultados com boa proximidade para o referencial experimental, justamente pelos valores baixos dos erros obtidos.

Depois de realizadas análises individuais em cada método de predição, modelagem computacional e inteligência computacional, foram feitos estudos comparativos dos resultados utilizando os mesmos dados para todos os métodos. Em outras palavras, os dados foram distribuídos em dois grupos: um para criação do modelo computacional e outro para avaliar o modelo criado, para enfim serem computados os erros e assim analisar o desempenho de cada método.

Os grupos de dados foram criados a partir dos dados das 180 formulações diferentes do concreto, apresentadas na Tabela 4.6. O primeiro grupo, de criação do modelo computacional, utilizou 120 formulações de concreto, enquanto o grupo de avaliação ficou com as 60 formulações restantes.

Assim, cada método computacional - MEF, SVR e RNA - criou seu respectivo modelo de predição com os dados do primeiro grupo e obteve o MAPE da predição do segundo grupo de dados. Um resumo com o resultado desses erros calculados a partir da predição das propriedades mecânicas, e usando o segundo grupo de dados, é apresentado na Tabela 7.2. Além destes resultados, a Tabela 7.3 apresenta os resultados preditos agrupados pelo volume relativo de agregado leve.

Tabela 7.2: Resultado geral dos erros de predição das propriedades mecânicas pelos métodos MEF, SVR e RNA dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação.

Propriedade	Resultados dos métodos	MAPE	σ^1	Máx.	Mín.
f_c	MEF	4,8447	3,8230	14,1313	0,9892
	SVR	3,9611	3,3828	11,5434	0,1940
	RNA	<u>3,1411</u>	2,3082	8,4853	0,1040
E_c	MEF	2,9306	1,8326	6,0446	0,0407
	SVR	<u>2,3363</u>	1,6682	5,6175	0,1029
	RNA	3,1411	2,7776	9,4621	0,1751

¹ Desvio padrão;

Ao considerar somente os resultados da Tabela 7.2, nota-se que o melhor método dentre os três estudados - MEF, SVR e RNA - para prever a resistência à compressão é a RNA, com MAPE de 3,1411 e desvio padrão de 2,3082, enquanto o melhor método para prever o módulo de elasticidade é o SVR, com MAPE de 2,3363 e desvio padrão de 1,6682.

Tabela 7.3: Resultado dos erros de predição das propriedades mecânicas pelos métodos MEF, SVR e RNA dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação desses métodos agrupados pelo volume relativo dos agregados.

Propriedade	Método	Volume	MAPE	σ^1	Máx.	Mín.
Resistência à compressão	MEF	12,5%	5,39	3,99	14,13	0,99
		25,0%	<u>8,97</u>	3,78	13,59	2,46
		37,5%	6,28	4,23	14,24	0,81
		45,0%	5,16	3,86	12,20	1,04
	SVR	12,5%	3,49	3,84	11,54	0,19
		25,0%	6,82	5,76	18,51	0,03
		37,5%	5,90	5,15	21,48	0,05
		45,0%	6,28	3,94	13,30	1,96
	RNA	12,5%	<u>2,97</u>	2,07	8,49	0,69
		25,0%	3,52	2,74	9,28	0,10
		37,5%	3,10	2,71	8,42	0,17
		45,0%	5,43	4,28	13,72	0,39
Módulo de elasticidade	MEF	12,5%	3,58	2,30	7,19	0,09
		25,0%	3,16	2,31	8,89	0,04
		37,5%	3,67	2,03	6,64	0,11
		45,0%	3,86	2,74	9,93	0,42
	SVR	12,5%	2,40	1,76	5,79	0,19
		25,0%	3,02	2,28	8,04	0,08
		37,5%	<u>2,09</u>	1,56	5,62	0,10
		45,0%	3,57	2,91	10,40	0,27
	RNA	12,5%	3,46	2,04	6,35	0,03
		25,0%	3,06	2,53	8,17	0,18
		37,5%	2,77	2,22	9,46	0,30
		45,0%	<u>4,37</u>	4,66	13,12	0,08

¹ Desvio padrão;

Entretanto, ao se basear nos resultados apresentados na Tabela 7.3, constata-se que para a resistência à compressão o menor erro avaliado (MAPE) foi da RNA: 2,09% contendo 12,5% de agregado, e o maior erro foi do MEF: 8,97% contendo 25,0% de agregado. Enquanto para o módulo de elasticidade, o menor erro avaliado foi para o SVR: 2,09% contendo 37,7% de agregado, e o maior erro foi para a RNA: 4,37% contendo 45,0% de agregado.

Ao comparar as propriedades mecânicas de todos os métodos de predição por volume de agregado, a partir dos valores de MAPE da Tabela 7.3, observa-se que o método de modelagem computacional via MEF tem erros ligeiramente maiores comparados aos métodos de inteligência computacional via SVR e RNA. Por exemplo, o MAPE da resistência à compressão do concreto contendo 12,5% de agregado para o MEF, SVR e RNA foi 5,39%, 3,49% e 2,97%, respectivamente. Outro exemplo do MAPE para os métodos MEF, SVR e RNA, mas para o módulo de elasticidade do concreto contendo 25,0% de agregado, foi 3,16%, 3,02% e 3,06%, respectivamente.

Para facilitar a comparação dos métodos de predição aqui apresentadas, foi criado um gráfico de *boxplot* dos valores preditos e outro das distribuições normal à partir da média e desvio padrão das predições de cada método. Esses gráficos usaram os dados experimentais das 60 formulações de concreto do grupo de avaliação dos modelos criados por cada método como referência. A Figura 7.1 mostra os gráficos gerados para a resistência à compressão e a Figura 7.2 os gráficos criados para o módulo de elasticidade.

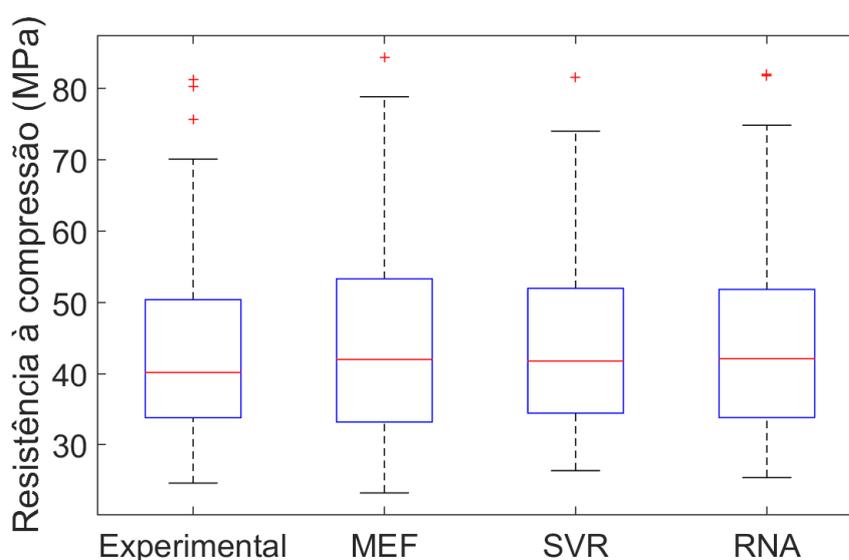


Figura 7.1: Gráfico boxplot gerado a partir dos dados experimentais das 60 amostras de concreto do grupo de avaliação e os respectivos dados preditos pelos métodos MEF, SVR e RNA da resistência à compressão.

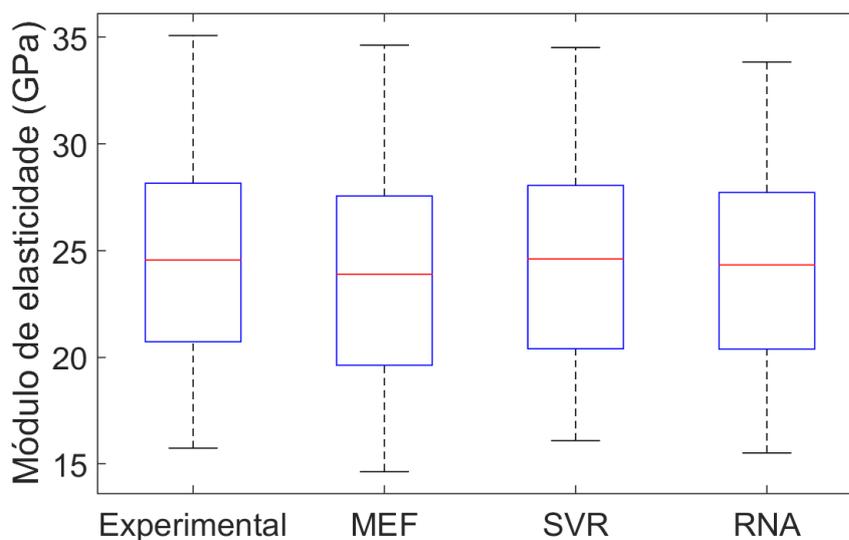


Figura 7.2: Gráfico boxplot gerado a partir dos dados experimentais das 60 amostras de concreto do grupo de avaliação e os respectivos dados preditos pelos métodos MEF, SVR e RNA do módulo de elasticidade.

Ao se analisar os resultados das predições obtidas entre os métodos de modelagem computacional via MEF e de inteligência computacional via SVR e RNA, com base nas Figuras 7.1 e 7.2, observa-se que ambos os métodos obtiveram uma boa aproximação da contraparte experimental. Essa justificativa será descrita em detalhes a seguir.

Baseado na Figura 7.1, pode-se fazer as seguintes observações sobre as predições da resistência à compressão:

- os resultados dos métodos computacionais tem uma boa aproximação comparado à contraparte experimental;
- isso devido as medianas estarem em posições próximas e o tamanho das caixas (entre o primeiro e terceiro quartil) serem idênticos, exceto para o método MEF e em todos os resultados existem valores discrepantes;
- as linhas limites variam um pouco mais, porém para o método MEF a linha superior está ligeiramente mais acima que as demais. Esse fato justifica os valores ligeiramente maiores para o MAPE, apresentados na Tabela 7.3.

Por outro lado, pode-se fazer observações também sobre as predições do módulo de elasticidade com base na Figura 7.2:

- em comparação aos dados experimentais, assim como para a resistência à compressão, os resultados dos métodos computacionais tem uma boa aproximação;

- isso justifica-se pela posição das medianas estarem próximas, e pelo tamanho das caixas (entre o primeiro e terceiro quartil) serem similares;
- as linhas limites estão ligeiramente desalinhadas, exceto a linha inferior do método MEF e a linha superior do método RNA, que estão mais distantes da contraparte experimental. Esse fato contribui para justificar os valores ligeiramente maiores para o MAPE, apresentados na Tabela 7.3.

7.2 Discussão dos resultados obtidos pelos modelos combinados

Nesta etapa do estudo foram utilizados os dados separados para avaliar os erros de predição, ou seja, parte dos dados apresentados na Tabela 4.6. Esse grupo de dados é composto por 60 amostras de concretos, que foi subdividido em dois grupos, um para treinamento e criação dos modelos de predição e outro para avaliação das predições.

Os modelos de predição criados pela modelagem computacional via MEF e pela inteligência computacional via SVR e RNA obtiveram bons resultados comparados ao dados experimentais, como já discutidos na anterior. Diante disso, estratégias que combinem os resultados obtidos serão estudadas com objetivo de avaliar se essa combinação é capaz de aproximar ainda mais os resultados preditos ao dado experimental de referência.

Nesse sentido, a referência [118] afirma que ao combinar a saída de várias técnicas de classificação (ou predição) é útil apenas se existir uma discordância entre elas. Ou seja, a combinação de vários classificadores idênticos não produz nenhum ganho. Já a referência [119] demonstrou que se a taxa de erro médio para uma amostra for menor que 50% e a combinação de vários componentes classificadores forem independentes entre si na produção de seus erros, o erro esperado para essa amostra pode ser reduzido a zero, quando o número de classificadores combinados tende para infinito. Na prática, a independência total entre os classificadores é difícil de ser garantida, e melhorias nas precisões de classificação têm sido observadas nos métodos de grupo que possuem classificadores ligeiramente correlacionados ([120]).

Mediante o exposto, a fim de avaliar a independência dos erros de predição, foi aplicado o teste não-paramétrico de Wilcoxon e Mann-Whitney ([121]) nos erros de todas as

técnicas de predição estudadas aqui, e o resultado está descrito na Tabela 7.4. O teste de Wilcoxon é indicado para comparar resultados entre duas amostras dependentes ou independentes entre si, respectivamente. Foi utilizado um nível de significância de 5% ($p\text{-valor} < 0,05$) nas análises de dependência ou independência das amostras.

Tabela 7.4: Resultado dos testes não-paramétricos de Wilcoxon e Mann-Whitney para os erros de cada técnica de predição para a resistência à compressão e módulo de elasticidade.

Propriedade	Métodos	Estatística	Valor de p	Nível de significância
f_c	MEF e SVR	1818	0,9268	não
	MEF e RNA	1899	0,6052	não
	SVR e RNA	1903	0,5906	não
E_c	MEF e SVR	1070	<0,01	sim
	MEF e RNA	1197	<0,01	sim
	SVR e RNA	1824	0.9018	não

Observa-se na Tabela 7.4 que o nível de significância dos testes de Wilcoxon e Mann-Whitney entre os erros dos métodos de predição para o módulo de elasticidade foram significativos somente para os métodos MEF e SVR, com valor de p (do inglês, *p-value*) igual a 0,0001287, e para MEF e RNA, com valor de p igual a 0,001565. Nesse sentido, como os resultados do valor de p desses pares de métodos são menores que 0,05, pode-se concluir que a hipótese nula é rejeitada ao nível de significância de 5%, e que as amostras apresentaram diferenças estatisticamente significativas. Por outro lado, para a resistência à compressão, nenhum par obteve um nível de significância.

Desta maneira, pode-se afirmar que os erros de predição dos métodos são independentes entre si para os pares MEF com SVR e MEF com RNA para o módulo de elasticidade. Por outro lado, pode existir uma dependência entre os erros de predição dos métodos de todos os outros pares: SVR com RNA para o módulo de elasticidade e MEF com SVR, MEF com RNA e SVR com RNA para a resistência à compressão.

Apesar desses resultados do teste de Wilcoxon e Mann-Whitney, todos os valores de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve de todos os métodos aqui empregados - MEF, SVR e RNA - serão combinados com o objetivo de aproximar ainda mais os resultados preditos ao dado experimental de referência.

Em vista disso, foram utilizadas as técnicas de regressão linear, SVR e uma média simples como estratégias de combinação dos resultados preditos pelos métodos MEF, SVR e RNA. O resultado da predição das propriedades mecânicas é mostrado na Tabela 7.5. Além disso, foram usadas 60 amostras dos corpos de prova - as mesmas selecionadas para avaliação dos métodos - para fazer a análise das estratégias de combinação. Esses dados foram subdivididos em dois grupos: um grupo de 40 amostras para criação dos modelos de predição e outro de 20 para avaliação das propriedades mecânicas preditas pela combinação dos métodos.

Com base nos resultados apresentados na Tabela 7.5, observa-se que a estratégia de combinar a saída dos métodos conseguiu criar predições ainda mais precisas das propriedades mecânicas. Por exemplo, o melhor resultado entre os métodos de predição para a resistência à compressão foi da RNA com MAPE de 3,1411. Entretanto, o melhor resultado entre a combinação das saídas dos métodos foi para a média simples do MEF e RNA, com MAPE de 2,7264. Já o melhor para o módulo de elasticidade entre os métodos de predição foi do SVR, com MAPE de 2,3363. Porém, o melhor resultado da combinação das saídas dos métodos foi da regressão linear do MEF e SVR com MAPE de 1,7684.

As Figuras 7.3 e 7.4 apresentam os resultados combinados e facilitam a visualização e comparação dos dados apresentados na Tabela 7.5. O melhor resultado de um método individual para cada propriedade é destacado na linha verde, que é o RNA para a resistência à compressão com MAPE de 3,14 e SVR para o módulo de elasticidade com MAPE de 2,34.

Contudo, outras combinações das saídas dos métodos também obtiveram resultados melhores ao se comparar esses métodos individuais. Como por exemplo a regressão linear do MEF e RNA (MAPE de 2,8106) para prever a resistência à compressão, e a regressão linear do MEF e RNA (MAPE de 1,8519).

Desta maneira, pode-se concluir que uma estratégia que combine os métodos de predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve consegue aproximar ainda mais os resultados preditos ao comparar com sua contraparte experimental.

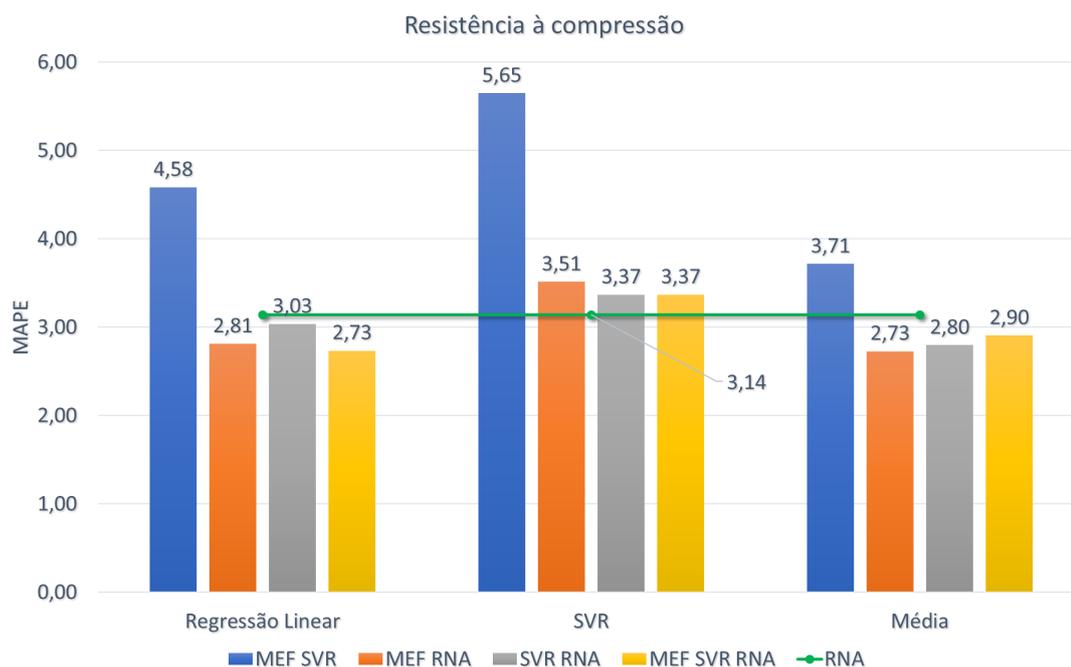


Figura 7.3: Gráfico da combinação de métodos de predição da resistência à compressão (f_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação. O melhor resultado de um método individual foi a RNA, que é destacado na linha verde.

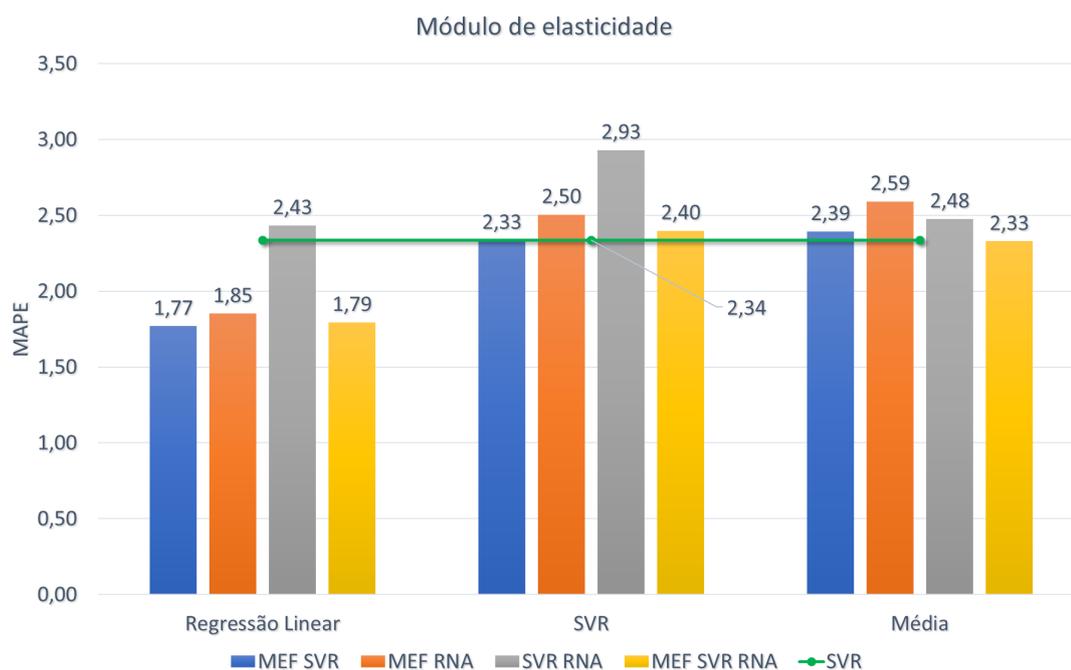


Figura 7.4: Gráfico da combinação de métodos de predição do módulo de elasticidade (E_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação. O melhor resultado de um método individual foi o SVR, que é destacado na linha verde.

Tabela 7.5: Resultado da combinação de métodos de predição da resistência à compressão (f_c) e módulo de elasticidade (E_c) a partir dos 60 corpos de prova selecionados para avaliação.

Propriedade	Técnica de combinação	Resultados dos métodos	MAPE	σ^1	Máx.	Mín.
f_c	-	MEF	4,8447	3,8230	14,1313	0,9892
		SVR	3,9611	3,3828	11,5434	0,1940
		RNA	<u>3,1411</u>	2,3082	8,4853	0,1040
	Regressão Linear	MEF SVR	4,5818	2,5451	9,7759	0,0512
		MEF RNA	2,8106	1,9242	8,8958	0,4786
		SVR RNA	3,0343	2,0076	7,7605	0,2164
		MEF SVR RNA	2,7330	2,0816	9,6501	0,2320
	SVR	MEF SVR	5,6461	2,8426	10,0291	0,7348
		MEF RNA	3,5119	2,2264	9,1812	0,1326
		SVR RNA	3,3665	2,1739	8,7125	0,3956
		MEF SVR RNA	3,5211	2,2398	9,1502	0,0170
	Média simples	MEF SVR	3,7143	3,1107	12,8373	0,0314
		MEF RNA	<u>2,7264</u>	2,7474	9,0875	0,0832
		SVR RNA	2,7955	2,1720	7,7936	0,0998
		MEF SVR RNA	2,9042	2,2892	9,9061	0,5332
	E_c	-	MEF	2,9306	1,8326	6,0446
SVR			<u>2,3363</u>	1,6682	5,6175	0,1029
RNA			3,1411	2,7776	9,4621	0,1751
Regressão Linear		MEF SVR	<u>1,7684</u>	1,7160	5,2069	0,1570
		MEF RNA	1,8519	1,6094	5,2529	0,0499
		SVR RNA	2,4325	1,5054	5,8779	0,1992
		MEF SVR RNA	1,7938	1,7541	5,1121	0,0613
SVR		MEF SVR	2,3349	1,9863	6,2645	0,0089
		MEF RNA	2,5047	1,6659	5,9224	0,3493
		SVR RNA	2,9298	1,8093	6,8278	0,6005
		MEF SVR RNA	2,3985	1,9100	6,4715	0,0031
Média simples		MEF SVR	2,3928	1,5014	5,8311	0,1204
		MEF RNA	2,5914	2,1527	7,7533	0,0787
		SVR RNA	2,4757	2,2152	7,5398	0,2131
		MEF SVR RNA	2,3279	1,9721	7,0414	0,0212

¹ Desvio padrão;

8 Conclusões

Neste trabalho, três métodos computacionais para predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve foram estudados com o objetivo de desenvolver estratégias computacionais para a avaliação dessas propriedades. Adicionalmente, uma ferramenta computacional foi desenvolvida com o propósito de melhorar a eficiência e automatizar as etapas empregadas nas simulações numéricas da primeira estratégia computacional. Além destes, foi elaborada uma técnica para distribuição dos agregados imersos no corpo de prova cilíndrico para o modelo tridimensional, e inseridos no retângulo para o modelo bidimensional.

O primeiro método de predição estudado é baseado em modelos computacionais extraídos da mecânica dos sólidos - modelagem computacional via Método dos Elementos Finitos (MEF) - que buscou reproduzir computacionalmente os ensaios laboratoriais segundo a referência [24] para obter as propriedades mecânicas do concreto de agregado leve. Já o segundo método de predição analisado é baseado em ajustes de parâmetros a um conjunto de resultados experimentais, ou seja, na aplicação de duas técnicas de aprendizado supervisionado para predição das propriedades mecânicas do concreto, denominadas Máquina de Vetores Suportes com Regressão (SVR - *Support Vector Regression*) e Redes Neurais Artificiais (RNA).

Inicialmente uma discussão com os resultados preditos será feita visando responder a primeira pergunta destacada na introdução, a respeito de qual método computacional é mais preciso na predição das propriedades mecânicas do concreto. Deste modo, os resultados obtidos a partir da modelagem computacional via MEF e da inteligência computacional via SVR e RNA tiveram uma aproximação satisfatória comparados aos resultados da referência, como descrito na Seção 7.1.

Em uma primeira análise, do método de modelagem computacional via MEF dos modelos bidimensional e tridimensional, a partir dos resultados apresentados na Tabela 7.1, verifica-se que o modelo bidimensional consegue reproduzir tão bem as propriedades dos corpos de prova quanto o modelo tridimensional, já que a diferença em pontos percentuais entre o maior erro de cada modelo foi de 0,10%. Logo, o método MEF bidimensional foi utilizado na comparação com os outros métodos de predição via

inteligência computacional.

Assim sendo, foram criados modelos de predição das propriedades mecânicas para cada método computacional - MEF, SVR e RNA - com o propósito de avaliar o resultado predito e o dado experimental. Baseado nos resultados apresentados na Tabela 7.3, o melhor método para prever a resistência à compressão é a RNA, pois seus valores de MAPE para os volumes relativos de agregado leve foram menores que os outros métodos: 2,97%, 3,52% e 3,10% para os volumes 12,5%, 25,0% e 37,5%, respectivamente, exceto para o volume de 45,0% que ficou 0,27 pontos percentuais acima do melhor resultado para esse volume. Já o melhor método para prever o módulo de elasticidade é o SVR, pois sua predição obteve menor erro comparado aos outros resultados: 2,40%, 3,02%, 2,09% e 3,57% para os volumes 12,5%, 25,0% e 37,5%, respectivamente.

Embora tenham sido destacados os melhores métodos de predição para cada propriedade mecânica, os outros métodos também podem ser considerados bons preditores, já que o maior erro de predição para a resistência à compressão foi de 8,97% e para o módulo de elasticidade foi de 4,37%.

A respeito da segunda pergunta, sobre o uso de uma estratégia que combine resultados dos métodos de predição das propriedades mecânica seria mais precisa na avaliação ao F_c e do E , foram utilizadas três estratégias com objetivo de realizar a análise de predição: regressão linear, SVR e média simples. A partir dos resultados apresentados na Tabela 7.5, observa-se que várias técnicas de combinação conseguiram resultados melhores comparadas aos métodos individuais. Por exemplo, a técnica de combinação por média simples dos resultados dos métodos MEF e RNA para prever a resistência à compressão obteve um MAPE de 2,7264, enquanto o melhor resultado dos métodos foi da RNA, com MAPE de 3,1411. Já para o módulo de elasticidade, a técnica de combinação regressão linear com os métodos MEF e SVR obteve um MAPE de 1,7684, enquanto o melhor resultado dos métodos foi do SVR, com MAPE de 2,3363.

Não só essas combinações das saídas dos métodos melhoraram o resultado, mas outras combinações também obtiveram resultados com valor de MAPE menor ao serem comparadas aos métodos individuais. Como por exemplo a regressão linear do MEF e RNA (MAPE de 2,8106) para prever a resistência à compressão, e a regressão linear do MEF e RNA (MAPE de 1,8519).

Desta maneira, pode-se concluir que uma estratégia que combine os métodos de

predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve consegue aproximar ainda mais os resultados preditos ao comparar com sua contraparte experimental.

Por outro lado, em relação à terceira pergunta sobre uma ferramenta computacional que auxilie e automatize a execução dos experimentos numéricos do método de modelagem computacional ajudaria a melhorar a eficiência desse estudo, o sistema SWADE (*Scientific Workflow Automation in Distributed Environment*), que é um sistema de automação de *workflow* científico em ambiente distribuído, se mostrou bem eficiente ao disponibilizar para o usuário uma ferramenta computacional capaz de automatizar a execução do experimento, e com isso ajudou a diminuir o tempo necessário para completar a execução de um experimento completo, a evitar possíveis erros manuais e a melhorar a produtividade da pesquisa em si.

Além disso, para ratificar a eficiência e exemplificar a expansibilidade da ferramenta, o SWADE foi empregado de forma eficaz na avaliação de outro experimento, de ajuste de parâmetro do modelo de Dano de Mazars. De fato, como descrito na Seção 3.3, o SWADE foi capaz de auxiliar nas execuções das simulações, de diminuir o tempo necessário para completar o experimento e a melhorar o ajuste da curva, comparada à curval experimental.

A principal contribuição do SWADE explorada até o presente momento foi a automação de várias tarefas, executadas simultaneamente, com objetivo de simular um experimento científico *in silico* completo. Essa funcionalidade de automação em paralelo foi usada para auxiliar na análise de dois estudos distintos: ajustar parâmetros do modelo de Dano de Mazars e simulações numéricas para predição das propriedades mecânicas do concreto de agregado leve.

Outro ponto importante a ser discutido é o tempo necessário para se obter um resultado em cada método estudado. A Tabela 8.1 apresenta um resumo do tempo de execução dos métodos, e pode-se observar que o método de inteligência computacional via SVR foi bem mais rápido comparado aos métodos de modelagem computacional via MEF ou de inteligência computacional via RNA. Já o método via MEF tridimensional necessitou de muito mais tempo comparado aos demais, devido ao número elevado de elementos finitos tridimensionais, que requerem mais recursos computacionais que os outros métodos. É importante destacar também que os tempos dos modelos de inteligência computacional englobam todo o experimento, enquanto os modelos de modelagem computacional apenas uma única execução, sendo necessárias 180 execuções para completar um experimento.

Tabela 8.1: Tempo de execução de um modelo de predição em cada método computacional estudado: MEF 2D e 3D, SVR e RNA.

Método	Tempo (s)	Elementos Finitos
MEF 2D ¹	408,00 (6min48s)	11.712
MEF 3D ¹	41040,00 (11h24min)	71.280
SVR ²	0,24 (0,24s)	-
RNA ²	333,00 (5min33s)	-

¹ tempo de uma execução; o experimento completo precisa de 180 modelos sintéticos.

² tempo de execução do experimento completo.

Intel Core i7-860 (2.80GHz) e 8GB de memória RAM

Vale destacar ainda que apesar dos agregados leves do tipo xisto expandido (4/10 520S e 4/8 750S) não terem formato esférico, os resultados das simulações da modelagem computacional via MEF que consideraram os agregados esféricos foram bem próximos comparados aos resultados obtidos pelos ensaios experimentais.

Por fim, as seguintes propostas para trabalhos futuros, com o objetivo de dar continuidade a este trabalho, são listadas a seguir:

- trabalhos relacionados ao método MEF:
 - utilizar a seção retangular central completa e o cilindro completo, ao invés de 1/4 da seção e 1/8 do cilindro, com objetivo de diminuir as discrepâncias com o corpo de prova real;
 - criar malhas contendo agregados com formatos mais próximos do utilizado nos ensaios experimentais. Principalmente o xisto dilatado que não tem o formato esférico;
 - considerar os materiais que compõem a argamassa na amostra sintética, ao invés de assumir como um meio bifásico;
 - fazer um refinamento mais preciso na zona de transição entre agregados e argamassa, pois a zona interfacial de transição do concreto de agregado leve real é considerada suave, pois há absorção de partículas de argamassa por parte dos poros exteriores do agregado. No presente caso, essa transição é abrupta e bem definida;

- trabalhos relacionados à inteligência computacional:
 - buscar um melhor ajuste dos parâmetros do método SVR por meio de técnicas como *Random Search*, *Gaussian Process* e *Tree-structured Parzen Estimator* ([122, 123]), ao invés do *grid search*;
 - utilizar outros *kernel* no método SVR, tais como polinomial e sigmoide ([124]), a fim de obter resultados de predição mais precisos.
 - outros métodos de predição também poderiam ser empregados, a fim de se verificar uma melhor precisão na predição, tais como árvores de decisão ([125, 126]), *Multiple Additive Regression Trees* (MART) ([127]), *Bagging Regression Trees* (BRT) ([128, 129]) e vários outros ([130]);
- trabalhos relacionados à combinação dos métodos:
 - aumentar o número de métodos empregados ([130]) para criação dos modelos de predição para avaliar se outros métodos além dos estudados aqui são capazes de contribuir ainda mais para uma predição mais precisa;
 - empregar métodos para fazer seleção de atributos;
- trabalhos relacionados ao sistema SWADE:
 - implementar novos escalonadores de tarefas, além do *Round-Robin*;
 - aprimorar o controle de *workflows* científicos (*jobs*) em execução e executados;
 - criar um mecanismo de distribuição de ações a partir de um ponto centralizado de instalação;
 - usar computação em *cluster* ou em *grid* para execução de tarefas;
 - integrar editores gráficos de *workflow* a fim de facilitar a criação de *workflows* científicos;
- trabalhos relacionados à distribuição de agregados:
 - utilizar alguma técnica consagrada de *packing* com propósito de otimizar e garantir que todas as esferas/círculos sejam inseridos no cilindro/retângulo ([131]);

REFERÊNCIAS

- [1] COUSINS, T., ROBERTS-WOLLMANN, C., BROWN, M. C., *High-Performance/High-Strength Lightweight Concrete for Bridge Girders and Decks. National Cooperative Highway Research Program (NCHRP) Report 733. PB2013105075*, Tech. rep., Federal Highway Administration - National Academy of Science Transportation Research Board, 2013.
- [2] FERNANDEZ, R. P., PARDO, M. L., “Offshore concrete structures”, *Ocean Engineering*, v. 58, pp. 304–316, 2013.
- [3] TAYLOR, P., HOSTENG, T., WANG, X., PHARES, B., *Evaluation and Testing of a Lightweight Fine Aggregate Concrete Bridge Deck in Buchanan County, Iowa*, Tech. rep., Federal Highway Administration - National Academy of Science Transportation Research Board, 2016.
- [4] GO, C.-G., TANG, J.-R., CHI, J.-H., CHEN, C.-T., HUANG, Y.-L., “Fire-resistance property of reinforced lightweight aggregate concrete wall”, *Construction and Building Materials*, v. 30, pp. 725–733, 2012.
- [5] MEYER, K. F., KAHN, L. F., “Lightweight concrete reduces weight and increases span length of pretensioned concrete bridge girders”, *PCI journal*, v. 47, n. 1, pp. 68–75, 2002.
- [6] CROSS, B. T., *Structural Performance of High Strength Lightweight Concrete Pretensioned Bridge Girders*, Master’s Thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University, EUA, 2012.
- [7] KE, Y., BEAUCOUR, A., ORTOLA, S., DUMONTET, H., CABRILLAC, R., “Influence of volume fraction and characteristics of lightweight aggregates on the mechanical properties of concrete”, *Construction and Building Materials*, v. 23, n. 8, pp. 2821–2828, 2009.
- [8] KHAN, Y. S., *Engineering architecture: the vision of Fazlur R. Khan*. WW Norton & Company, 2004.

- [9] LYTAG, “Project Profile - Structural - Barclays Bank, Canary Wharf”, <http://www.lytag.net/uploads/projects/files/Structural%205%20Barclays%20Bank.pdf>, 2013, Acessado em: 2014-03-12.
- [10] GDACE, “Grupo de Desenvolvimento e Análise do Concreto Estrutural”, <http://www.gdace.uem.br/linhas.htm>, 2004, Acessado em: 2014-03-12.
- [11] BONIFÁCIO, A. L., MENDES, J. C., CUNHA, F. M., FARAGE, M. C., BARBOSA, F. S., ORTOLA, S., “Three-Dimensional Numerical Evaluation of Lightweight Aggregate Compressive Strength”, *Mecánica Computacional*, v. 33, n. 12, pp. 733–744, Setembro 2014.
- [12] BONIFÁCIO, A., MOREIRA, F., MENDES, J., FARAGE, M., BARBOSA, F., ORTOLA, S., “Numerical Evaluation of Lightweight Aggregate Concrete Mechanical Properties”, *80 Analytical Models and new concepts in concrete and mansard structures*, 2014.
- [13] KE, Y., ORTOLA, S., BEAUCOUR, A., DUMONTET, H., “Micro-stress analysis and identification of lightweight aggregate’s failure strength by micromechanical modeling”, *Mechanics of Materials*, v. 68, pp. 176–192, 2014.
- [14] YEH, I.-C., “Modeling of strength of high-performance concrete using artificial neural networks”, *Cement and Concrete research*, v. 28, n. 12, pp. 1797–1808, 1998.
- [15] ATICI, U., “Prediction of the strength of mineral-addition concrete using regression analysis”, *Magazine of Concrete Research*, v. 62, n. 8, pp. 585–592, 2010.
- [16] ALSHIHRI, M. M., AZMY, A. M., EL-BISY, M. S., “Neural networks for predicting compressive strength of structural light weight concrete”, *Construction and Building Materials*, v. 23, n. 6, pp. 2214 – 2219, 2009.
- [17] SOUZA-BARBOSA, F. D., RESENDE-FARAGE, M. C., LAGE-BONIFÁCIO, A., BEAUCOUR, A.-L., ORTOLA, S., “A methodology to obtain an analytical formula for the elastic modulus of lightweight aggregate concrete”, *Dyna*, v. 82, n. 193, pp. 98–103, 2015.

- [18] EVERINGHAM, Y., SMYTH, C., INMAN-BAMBER, N., “Ensemble data mining approaches to forecast regional sugarcane crop production”, *Agricultural and forest meteorology*, v. 149, n. 3, pp. 689–696, 2009.
- [19] CHEN, S.-C., LIN, S.-W., CHOU, S.-Y., “Enhancing the classification accuracy by scatter-search-based ensemble approach”, *Applied soft computing*, v. 11, n. 1, pp. 1021–1028, 2011.
- [20] WANG, S.-J., MATHEW, A., CHEN, Y., XI, L.-F., MA, L., LEE, J., “Empirical analysis of support vector machine ensemble classifiers”, *Expert Systems with Applications*, v. 36, n. 3, pp. 6466–6476, 2009.
- [21] VAN WEZEL, M., POTTHARST, R., “Improved customer choice predictions using ensemble methods”, *European journal of operational research*, v. 181, n. 1, pp. 436–452, 2007.
- [22] CHOU, J.-S., PHAM, A.-D., “Enhanced artificial intelligence for ensemble approach to predicting high performance concrete compressive strength”, *Construction and Building Materials*, v. 49, pp. 554–563, 2013.
- [23] COMMISSARIAT A L’ENERGIE ATOMIC, “Présentation de Cast3M”, <http://www-cast3m.cea.fr/index.php?xml=presentation>, 2003, Acessado em: 2017-02-02.
- [24] KE, Y., *Caractérisation du comportement mécanique des bétons de granulats légers: expérience et modélisation*, Ph.D. Thesis, Cergy-Pontoise, 2008.
- [25] BARBOSA, F. S., *Resistência dos Materiais*, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2006.
- [26] BARBOSA, F. S., *Plasticidade Computacional*, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2007.
- [27] JORGE, R. N., DINIS, L., “Teoria da Plasticidade”, *Departamento de Engenharia Mecânica e Gestão Industrial-Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto*, v. 2005, 2004.

- [28] OWEN, D. R., WILLIAMS, W. O., “On the concept of rate-independence”, *Carnegie Mellon University*, 1967.
- [29] DE SOUZA NETO, E. A., PERIC, D., OWEN, D. R. J., *Computational methods for plasticity: theory and applications*. John Wiley & Sons, 2011.
- [30] CHAKRABARTY, J., *Theory of plasticity*. Butterworth-Heinemann, 2006.
- [31] HILL, R., *The Mathematical Theory of Plasticity, The Oxford Engineering Science Series*. Oxford, 1950.
- [32] HODGE, P. G., *Plastic analysis of structures*. McGraw-Hill, 1959.
- [33] MENDELSON, A., “Plasticity: theory and applications”, *New York*, 1968.
- [34] PRAGER, W., *An introduction to plasticity*. Addison-Wesley, 1959.
- [35] SIMO, J., HUGHES, T., *Elastoplasticity and Viscoplasticity: computational aspects*. Stanford Univ., Division of Applied Mechanics, 1988.
- [36] CHEN, W.-F., *Plasticity in reinforced concrete*. J. Ross Publishing, 1982.
- [37] BRAGA, A. D. P., CARVALHO, A., LUDERMIR, T. B., *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*. Livros Técnicos e Científicos, 2000.
- [38] TAFNER, M., DE XEREZ, M., FILHO, I., *Redes neurais artificiais: introdução e princípios de neurocomputação*. Eko, 1995.
- [39] HAYKIN, S., *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. 2nd ed. Prentice Hall PTR: Upper Saddle River, NJ, USA, 1998.
- [40] MCCULLOCH, W. S., PITTS, W., “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity”, *The bulletin of mathematical biophysics*, v. 5, n. 4, pp. 115–133, 1943.
- [41] RUMELHART, D. E., HINTON, G. E., WILLIAMS, R. J., “Learning representations by back-propagating errors”, *Cognitive modeling*, v. 5, n. 3, pp. 1, 1988.
- [42] HAGAN, M. T., MENHAJ, M. B., “Training feedforward networks with the Marquardt algorithm”, *IEEE transactions on Neural Networks*, v. 5, n. 6, pp. 989–993, 1994.

- [43] CORTES, C., VAPNIK, V., “Support-vector networks”, *Machine learning*, v. 20, n. 3, pp. 273–297, 1995.
- [44] LIU, F., FRY, C. S., MULA, J., JACKSON, J. R., LEE, J. D., PETERSON, C. A., YANG, L., “Automated Fiber Type Specific Cross-sectional Area Assessment and Myonuclei Counting in Skeletal Muscle”, *Journal of Applied Physiology*, 2013.
- [45] CHANDRASEKHAR, A., RAGHUVeer, K., “Intrusion detection technique by using k-means, fuzzy neural network and SVM classifiers”. In: *Computer Communication and Informatics (ICCCI), 2013 International Conference on*, pp. 1–7, 2013.
- [46] CRISTIANINI, N., SHAWE-TAYLOR, J., *An introduction to support vector machines*. Cambridge University Press Cambridge, 2000.
- [47] KARARGYRIS, A., BOURBAKIS, N., “Detection of small bowel polyps and ulcers in wireless capsule endoscopy videos”, *Biomedical Engineering, IEEE Transactions on*, v. 58, n. 10, pp. 2777–2786, 2011.
- [48] SHAWE-TAYLOR, J., CRISTIANINI, N., *Kernel methods for pattern analysis*. Cambridge university press, 2004.
- [49] DRUCKER, H., BURGES, C. J., KAUFMAN, L., SMOLA, A., VAPNIK, V., OTHERS, “Support vector regression machines”, *Advances in neural information processing systems*, v. 9, pp. 155–161, 1997.
- [50] VAPNIK, V. N., *The Nature of Statistical Learning Theory*. v. 1. Springer: New York, 1995.
- [51] SMOLA, A. J., SCHÖLKOPF, B., “A tutorial on support vector regression”, *Statistics and computing*, v. 14, n. 3, pp. 199–222, 2004.
- [52] ÜNSTÜ, B., MELSEN, W., BUYDENS, L., “Facilitating the application of Support Vector Regression by using a universal Pearson VII function based kernel”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 81, pp. 29–40, 2006.

- [53] MA, J., SONG, A., XIAO, J., “A robust static decoupling algorithm for 3-axis force sensors based on coupling error model and ε -SVR”, *Sensors*, v. 12, n. 11, pp. 14537–14555, 2012.
- [54] KARATZOGLOU, A., SMOLA, A., HORNIK, K., “kernlab – An S4 Package for Kernel Methods in R”, *Journal Statistical Software*, v. 11, n. 9, pp. 1–20, 2004.
- [55] KOHAVI, R., OTHERS, “A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection”. In: *International Joint Conference on Artificial Intelligence*, v. 14, pp. 1137–1145, 1995.
- [56] CHOU, J.-S., TSAI, C.-F., “Concrete compressive strength analysis using a combined classification and regression technique”, *Automation in Construction*, v. 24, pp. 52–60, 2012.
- [57] CHOU, J.-S., CHIU, C.-K., FARFOURA, M., AL-TAHARWA, I., “Optimizing the prediction accuracy of concrete compressive strength based on a comparison of data-mining techniques”, *Journal of Computing in Civil Engineering*, v. 25, n. 3, pp. 242–253, 2010.
- [58] ERDAL, H. I., “Two-level and hybrid ensembles of decision trees for high performance concrete compressive strength prediction”, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 26, n. 7, pp. 1689–1697, 2013.
- [59] CASTELLANO, P., “Validació creuada”, http://ca.wikipedia.org/wiki/Validaci%C3%B3_creuada, 2014, Acessado em: 2015-04-27.
- [60] PIGNOTTI, E., EDWARDS, P., GOTTS, N., POLHILL, G., “Enhancing Workflow with a Semantic Description of Scientific Intent”, *Web Semantics: Science, Services and Agents on the World Wide Web*, v. 9, n. 2, 2011.
- [61] BONIFÁCIO, A. L., *Análise de ferramentas computadorizadas para suporte a modelagem computacional - Estudo de caso no domínio de Dinâmica dos Corpos Deformáveis*, Master’s Thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2008.
- [62] I.J., T., E., D., D.B., G., M., S., *Workflows for e-Science: Scientific Workflows for Grids*. Springer-Verlag New York, Inc.: Secaucus, NJ, USA, 2006.

- [63] YU, J., BUYYA, R., “A taxonomy of scientific workflow systems for grid computing”, *SIGMOD Rec.*, v. 34, n. 3, pp. 44–49, 2005.
- [64] SEFFINO, L., MEDEIROS, C., ROCHA, J., YI, B., “WOODSS — a spatial decision support system based on workflows”, *Decision Support Systems*, v. 27, n. 1-2, pp. 105–123, 1999.
- [65] ALTINTAS, I., BARNEY, O., JAEGER-FRANK, E., “Provenance Collection Support in the Kepler Scientific Workflow System”. In: *IPAW*, pp. 118–132, 2006.
- [66] PROJECT, T., *Taverna 2.5 Manual*, Novembro 2014.
- [67] PROJECT, K., *Kepler User Manual*, Outubro 2015, versão 2.5.
- [68] RAICU, I., *Many-task Computing: Bridging the Gap Between High-throughput Computing and High-performance Computing*, Ph.D. Thesis, The University of Chicago, 2009.
- [69] BONIFÁCIO, A. L., AMARAL, R. D. O., FARAGE, M. C. R., BARBOSA, C. D. B., BARBOSA, F. D. S., “Thermo-Hydro-Mechanical Model Parameters Adjustment via a Distributed Scientific Workflow System”, *Dyna*, 2017.
- [70] AMARAL, R. D. O., *Análise computacional termo-mecânica de estruturas de concreto sujeitas a temperaturas elevadas*, Master’s Thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2014.
- [71] DA SILVA, F. R., “Otimização do método de escalonamento de tarefas de uma ferramenta computadorizada para workflow científico distribuído no contexto da modelagem computacional.” 2014, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Ciência da Computação) - Universidade Federal de Juiz de Fora - MG.
- [72] IERUSALIMSCHY, R., DE FIGUEIREDO, L. H., CELES FILHO, W., “Lua-an extensible extension language”, *Softw., Pract. Exper.*, v. 26, n. 6, pp. 635–652, 1996.
- [73] YU, J., BUYYA, R., “A taxonomy of workflow management systems for grid computing”, *Journal of Grid Computing*, v. 3, n. 3-4, pp. 171–200, 2005.

- [74] BAVOIL, L., CALLAHAN, S. P., CROSSNO, P. J., FREIRE, J., SCHEIDEGGER, C. E., SILVA, C. T., VO, H. T., “Vistrails: Enabling interactive multiple-view visualizations”. In: *Visualization, 2005. VIS 05. IEEE*, pp. 135–142, 2005.
- [75] LUDÄSCHER, B., ALTINTAS, I., BERKLEY, C., HIGGINS, D., JAEGER, E., JONES, M., LEE, E. A., TAO, J., ZHAO, Y., “Scientific workflow management and the Kepler system”, *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, v. 18, n. 10, pp. 1039–1065, 2006.
- [76] XING, Z., *Influence de la nature minéralogique des granulats sur leur comportement et celui du béton à haute température*, Ph.D. Thesis, Université de Cergy Pontoise, 2011.
- [77] XING, Z., BEAUCOUR, A.-L., HEBERT, R., NOUMOWE, A., LEDESERT, B., “Influence of the nature of aggregates on the behaviour of concrete subjected to elevated temperature”, *Cement and concrete research*, v. 41, n. 4, pp. 392–402, 2011.
- [78] FERREIRA, A. P. G., FARAGE, M. C., BARBOSA, F. S., NOUMOWÉ, A., RENAULT, N., “Thermo-hydric analysis of concrete–rock bilayers under fire conditions”, *Engineering Structures*, v. 59, pp. 765–775, 2014.
- [79] FERREIRA, A., *Modelagem dos Fenômenos de Transporte Termo-hídricos em Meios Porosos Submetidos a Temperaturas Elevedas: Aplicação a uma Bicamada Rocha-Concreto*, Master’s Thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2011.
- [80] MAZARS, J., *Application de la mécanique de l’endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure*, Ph.D. Thesis, These de Docteur es Sciences Presentee a L’Universite Pierre ET Marie Curie-Paris VI, 1984.
- [81] LE FICHOUX, E., *Présentation et utilisation de CASTEM*. CEA, 2011.
- [82] IOOSS, B., LEMAÎTRE, P., “A review on global sensitivity analysis methods”, In: *Uncertainty Management in Simulation-Optimization of Complex Systems*, pp. 101–122, Springer, 2015.

- [83] BÄCK, T., SCHWEFEL, H.-P., “An overview of evolutionary algorithms for parameter optimization”, *Evolutionary computation*, v. 1, n. 1, pp. 1–23, 1993.
- [84] QAFFOU, I., SADGAL, M., ELFAZZIKI, A., “A reinforcement learning method to adjust parameter of a texture segmentation”. In: *Informatics and Systems (INFOS), 2010 The 7th International Conference on*, pp. 1–5, 2010.
- [85] HUTTER, F., XU, L., HOOS, H. H., LEYTON-BROWN, K., “Algorithm runtime prediction: Methods & evaluation”, *Artificial Intelligence*, v. 206, pp. 79–111, 2014.
- [86] KE, Y., ORTOLA, S., BEAUCOUR, A., DUMONTET, H., “Identification of microstructural characteristics in lightweight aggregate concretes by micromechanical modelling including the interfacial transition zone (ITZ)”, *Cement and Concrete Research*, v. 40, n. 11, pp. 1590–1600, 2010.
- [87] CARVALHO, R. C., DE FIGUEIREDO FILHO, J. R., *Cálculo e detalhamento de estruturas usuais de concreto armado: segundo a NBR 6118: 2003*. EdUFSCar, 2010.
- [88] BRITISH STANDARDS INSTITUTE STAFF, *Lightweight Aggregates. Lightweight Aggregates for Concrete, Mortar and Grout*. B S I Standards, 2002.
- [89] RAO, G. A., “Generalization of Abrams’ law for cement mortars”, *Cement and Concrete Research*, v. 31, n. 3, pp. 495–502, 2001.
- [90] DE LARRARD, F., *Concrete mixture proportioning: a scientific approach*. CRC Press, 1999.
- [91] DE LARRARD, F., SEDRAN, T., “Mixture-proportioning of high-performance concrete”, *Cement and concrete research*, v. 32, n. 11, pp. 1699–1704, 2002.
- [92] TEHRANI, F. F., ABSI, J., ALLOU, F., PETIT, C., “Heterogeneous numerical modeling of asphalt concrete through use of a biphasic approach: porous matrix/inclusions”, *Computational Materials Science*, v. 69, pp. 186–196, 2013.
- [93] DUBOIS, F., JEAN, M., RENOUF, M., MOZUL, R., MARTIN, A., BAGNERIS, M., “Lmgc90”. In: *10e colloque national en calcul des structures*, pp. Clé–USB, 2011.

- [94] BONIFÁCIO, A., MENDES, J., BARBOSA, F., FARAGE, M., ORTOLA, S., MOREIRA, F., “Numerical evaluation of lightweight aggregate concrete mechanical properties”, *Architecture Civil Engineering Environment*, v. 8, n. 3, pp. 45–50, 2015.
- [95] DOWSLAND, K. A., DOWSLAND, W. B., “Packing problems”, *European Journal of Operational Research*, v. 56, n. 1, pp. 2–14, 1992.
- [96] ARYA, S., MOUNT, D. M., NETANYAHU, N. S., SILVERMAN, R., WU, A. Y., “An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching fixed dimensions”, *Journal of the ACM (JACM)*, v. 45, n. 6, pp. 891–923, 1998.
- [97] BONIFÁCIO, A. L., BARBOSA, C. D. B., BARBOSA, F. D. S., FARAGE, M. C. R., “Three-dimensional numerical simulation of lightweight aggregate compressive strength using many-task computing”. In: *Sodebras*, v. 12, n. 135, pp. 125–129, 2017.
- [98] GARCIA, P. H., BASTOS, F. D. S., FONSECA, L. G. D., BONIFÁCIO, A. L., FARAGE, M. R., BEAUCOUR, A. L., ORTOLA, S., “Determinação da resistência característica à compressão de agregados leves em concretos de agregados leves usando simulações de elementos finitos”, *Mecânica Computacional*, v. 34, n. 49, pp. 3309–3320, Novembro 2016.
- [99] GARCIA, P. H., DE SOUZA BASTOS, F., DA FONSECA, L. G., BONIFÁCIO, A. L., FARAGE, M. C. R., “Metodologia computacional para a obtenção do módulo de elasticidade de agregados em concretos de agregados leves”, *Revista Interdisciplinar de Pesquisa em Engenharia-RIPE*, v. 2, n. 18, pp. 342–354, 2017.
- [100] GARCIA, P. H., *Abordagem inversa para obtenção de propriedades mecânicas de agregados em concretos leves por meio de simulação computacional*, Master’s Thesis, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2017.
- [101] COMMISSARIAT A L’ENERGIE ATOMIC, “Notices | CAST3M - MODE”, <http://www-cast3m.cea.fr/index.php?page=notices¬ice=MODE>, 2003, Acessado em: 2015-01-15.

- [102] SUSSEKIND, J. C., *Curso de concreto*. 4th ed., v. 1. Ed. Globo: Porto Alegre, 1985.
- [103] MENDES, J. C., “Modelagem Computacional de concreto leve utilizando o programa Cast3M”, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Civil) - Universidade Federal de Juiz de Fora - MG, 2014.
- [104] IERUSALIMSKY, R., *Programming in lua*. Roberto Ierusalimsky, 2006.
- [105] IERUSALIMSKY, R., “Uma Introdução à Programação em Lua”. In: *Livro da Jornada de Atualização em Informática (JAI), Capítulo 3. Congresso da Sociedade Brasileira de Computação*, pp. 1–39, 2009.
- [106] R CORE TEAM, *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2015.
- [107] MATLAB, *version 7.10.0 (R2010a)*. The MathWorks Inc.: Natick, Massachusetts, 2010.
- [108] GUJARATI, D., *Basic econometrics. Economic series*, McGraw Hill, 2003.
- [109] MARÔCO, J., *Análise estatística com o SPSS Statistics*. ReportNumber, Lda, 2011.
- [110] CORREA, S., *Probabilidade e estatística*. PUC Minas Virtuais, 2003.
- [111] YUVARAJ, P., MURTHY, A. R., IYER, N. R., SEKAR, S., SAMUI, P., “Support vector regression based models to predict fracture characteristics of high strength and ultra high strength concrete beams”, *Engineering Fracture Mechanics*, v. 98, n. 0, pp. 29 – 43, 2013.
- [112] CERYAN, N., OKKAN, U., SAMUI, P., CERYAN, S., “Modeling of tensile strength of rocks materials based on support vector machines approaches”, *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, v. 37, n. 16, pp. 2655–2670, 2013.
- [113] AKANDE, K. O., OWOLABI, T. O., TWAHA, S., OLATUNJI, S. O., “Performance comparison of SVM and ANN in predicting compressive strength of concrete”, *IOSR Journal of Computer Engineering*, v. 16, n. 5, pp. 88–94, 2014.

- [114] BONIFÁCIO, A. L., MENDES, J. C., FARAGE, M. C., BARBOSA, F. S., BARBOSA, C. B., “Comparative Analysis of the Prediction of the Mechanical Properties of Lightweight Aggregate Concrete via Artificial Neural Network and Finite Elements Method”, *Mecánica Computacional*, v. 34, n. 34, pp. 2315–2327, Novembro 2016.
- [115] CHANG, C.-C., LIN, C.-J., “LIBSVM: A library for support vector machines”, *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology*, v. 2, pp. 27:1–27:27, 2011, Software available at <http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm>.
- [116] MAOKUAN, L., YUSHENG, C., HONGHAI, Z., “Unlabeled data classification via support vector machines and k-means clustering”. In: *Computer Graphics, Imaging and Visualization, 2004. CGIV 2004. Proceedings. International Conference on*, pp. 183–186, 2004.
- [117] CHEN, D., LIU, X., ZHOU, Y., YANG, X., LU, L., WANG, X., “Grid search as applied to the determination of Mark–Houwink parameters”, *Journal of applied polymer science*, v. 76, n. 4, pp. 481–487, 2000.
- [118] OPITZ, D., MACLIN, R., “Popular ensemble methods: An empirical study”, *Journal of Artificial Intelligence Research*, v. 11, pp. 169–198, 1999.
- [119] HANSEN, L. K., SALAMON, P., “Neural network ensembles”, *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, v. 12, n. 10, pp. 993–1001, 1990.
- [120] TAN, P.-N., STEINBACH, M., KUMAR, V., *Introduction to Data Mining, (First Edition)*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc.: Boston, MA, USA, 2005.
- [121] HOLLANDER, M., WOLFE, D. A., CHICKEN, E., *Nonparametric statistical methods*. John Wiley & Sons, 2013.
- [122] BERGSTRA, J., BENGIO, Y., “Random search for hyper-parameter optimization”, *The Journal of Machine Learning Research*, v. 13, n. 1, pp. 281–305, 2012.
- [123] BERGSTRA, J. S., BARDENET, R., BENGIO, Y., KÉGL, B., “Algorithms for hyper-parameter optimization”. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 2546–2554, 2011.

- [124] SATAPATHY, S. M., PANDA, A., RATH, S. K., “Story point approach based agile software effort estimation using various svr kernel methods”, 2014.
- [125] ZHANG, C.-X., ZHANG, J.-S., WANG, G.-W., “An empirical study of using Rotation Forest to improve regressors”, *Applied Mathematics and Computation*, v. 195, n. 2, pp. 618–629, 2008.
- [126] LOUZADA, F., ANACLETO-JUNIOR, O., CANDOLO, C., MAZUCHELI, J., “Poly-bagging predictors for classification modelling for credit scoring”, *Expert Systems with Applications*, v. 38, n. 10, pp. 12717–12720, 2011.
- [127] FRIEDMAN, J. H., “Greedy function approximation: a gradient boosting machine”, *Annals of statistics*, pp. 1189–1232, 2001.
- [128] BREIMAN, L., “Bagging predictors”, *Machine learning*, v. 24, n. 2, pp. 123–140, 1996.
- [129] BREIMAN, L., “Using iterated bagging to debias regressions”, *Machine Learning*, v. 45, n. 3, pp. 261–277, 2001.
- [130] REN, Y., ZHANG, L., SUGANTHAN, P. N., “Ensemble Classification and Regression-Recent Developments, Applications and Future Directions [Review Article]”, *IEEE Computational Intelligence Magazine*, v. 11, n. 1, pp. 41–53, 2016.
- [131] HIFI, M., M’HALLAH, R., “A literature review on circle and sphere packing problems: Models and methodologies”, *Advances in Operations Research*, v. 2009, 2009.