

Redução do número de simulações para identificação de parâmetros de modelos DEM usando redes neurais e planejamento de experimentos

Reduction of number of simulations for parameters identification of DEM models using neural network and design of experiments

Mauro Sérgio Vieira Matos¹, Jéssica Caroline Bezerra Vale¹,
Alexandre Luiz Amarante Mesquita¹

¹Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Pará, Rua Augusto Corrêa 01, CEP: 66075-110, Belém, PA, Brasil
e-mail: msvmatos@hotmail.com, jcbvale@gmail.com, alexmesq@ufpa.br

RESUMO

O Método de Elementos Discretos (*Discrete Element Method* - DEM) vem sendo uma ferramenta amplamente usada para simulação de fluxo de material granulado, que abrange diversas aplicações industriais. Para que os resultados da modelagem DEM sejam representativos, é necessário que os valores dos parâmetros de entrada (parâmetros da lei de contato ou microscópicos) do material sejam identificados. Neste procedimento, uma grande dificuldade é o alto custo computacional quando há muitas partículas pequenas e de formas irregulares. Assim, em simulações DEM, é prática comum usar partículas esféricas e em maior escala com a inclusão do parâmetro atrito de rolamento para aumentar a resistência ao cisalhamento. Para usual identificação de parâmetros DEM usando partículas esféricas aumentadas, realizam-se experimentos de laboratório e mede-se uma ou mais propriedades macroscópicas do material particulado. Então, ajustam-se os parâmetros microscópicos até que a predição da propriedade macroscópica do material seja alcançada (geralmente o ângulo de repouso). Em geral, este processo de identificação de parâmetros pode levar muito tempo, pois muitas simulações numéricas serão necessárias devido à multidimensionalidade de parâmetros. A fim de reduzir o número de simulações DEM para se determinar um adequado conjunto de parâmetros de entrada, este trabalho apresenta um método utilizando Planejamento de Experimentos para o planejamento de simulações DEM usando apenas 1/16 de um Fatorial Completo. Esse conjunto de simulações DEM possibilita a geração de uma Rede Neural Artificial que reproduz as simulações DEM, fazendo com que as demais simulações do fatorial completo seja realizada pela rede neural, reduzindo bastante o tempo das demais simulações para atingir o fatorial completo. Desta forma, com o modelo de regressão pela rede neural determina-se um adequado conjunto de parâmetros de entrada do modelo DEM que fornece o comportamento macroscópico almejado do material particulado. O método proposto foi aplicado em um estudo de caso da literatura. Como resultado, o número de simulações DEM foi reduzido em 66,7% para identificar um conjunto de parâmetros de entrada para predição do ângulo de repouso de um minério de ferro coesivo.

Palavras-chave: Modelo DEM, identificação de parâmetros, redes neurais, planejamento de experimentos.

ABSTRACT

Discrete Element Method (DEM) has been a tool used to simulate the flow of granular material, covering a wide range of industries. For DEM modeling results to be representative, it is necessary to identify the values of the contact law parameters of the material. In this procedure, a major difficulty is the computational cost when handling small particles of irregular shapes. Thus, in DEM simulations, it is common practice to use upscaled spheres particles with the inclusion of contact rolling friction parameter to increase the shear strength. For typical calibration of DEM parameters using upscaled particles, laboratory experiments are performed, and one or more material's bulk properties (macroscopic properties) are measured. Then, the contact law parameters are adjusted until the prediction behavior of the bulk be met (generally the angle of repose). In general, this parameter identification process can take a long time, as many numerical simulations will be

required due to the multi-dimensionality of the parameter space. In order to reduce the number of DEM simulations to determine an adequate set of input parameters, this work presents a method using Design of Experiments (DOE) for the DEM simulations using only 1/16 of a Full Factorial. This set of DEM simulations allows the creation of an Artificial Neural Network (ANN) that simulates the DEM simulations, making the remained simulations of the full factorial to be performed by the neural network created. Thus, with the neural network regression model, an appropriate set of input parameters for the DEM model is determined, which provides the desired macroscopic behavior of the particulate material. The proposed method was applied in a case study from literature. As a result, the number of DEM simulations was reduced by 66.7% to identify a set of contact parameters for predicting the angle of repose of a cohesive iron ore.

Keywords: DEM model, parameter identification, neural networks, design of experiments.

1. INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos Discretos (*Discrete Element Method*, DEM) foi inicialmente proposto por CUNDALL e STRACK [1] como um método numérico capaz de simular interações e movimentos de partículas individuais em um determinado domínio. O método fornece uma descrição detalhada das quantidades cinemáticas das partículas devido à ação de forças de atrito, eletrostáticas, magnéticas e ação da gravidade [2]. Desta forma, DEM tem sido usado extensivamente por engenheiros e pesquisadores em diversas aplicações industriais, principalmente na mineração e agricultura [3].

No método DEM o comportamento das partículas é governado pelas leis de contato da física. Portanto, parâmetros das leis constitutivas de contato (parâmetros microscópicos) são os parâmetros de entrada inferidos pelo usuário. Para que a simulação represente adequadamente o comportamento real das partículas, é necessário que esses parâmetros sejam calibrados por meio de ensaios experimentais. Logo, este processo de calibração é crucial para uma modelagem eficiente do movimento das partículas [2, 4].

Uma das principais dificuldades encontradas no processo de calibração é a limitação computacional ao se modelar um grande número de partículas, e essa dificuldade aumenta ainda mais se as partículas possuem formas bem irregulares. Em relação à modelagem de partículas de formas complexas, há duas classes de métodos que podem ser realizadas: a primeira classe corresponde à geração de partículas não esféricas a partir de um aglomerado (*cluster*) de esferas, superquádricas ou partículas poliédricas. Os aglomerados de esferas são formados por esferas sobrepostas para formar uma partícula não esférica [5]. Superquádricas (ou superlipsóides) [6] são uma família de formas geométricas definidas por parâmetros de forma em uma formulação matemática; portanto, elipsóides e outras formas quádricas podem ser obtidas [7]. Modelos de partículas poliédricas permitem o uso de cantos e arestas vivas [8]. Contudo, todas essas abordagens da primeira classe de métodos, apesar de fornecerem uma modelagem mais realística da forma da partícula, têm a desvantagem do alto custo computacional. Muitas vezes o tempo computacional requerido para processar o contato de muitas partículas não esféricas pode fazer que a análise seja impraticável. Na segunda classe de métodos, as partículas reais são modeladas como partículas esféricas, mas um torque adicional é incluído no modelo constitutivo, o torque de resistência ao rolamento. Portanto, o atrito de rolamento é usado como um esforço para modelar o efeito da forma irregular das partículas reais. Existem diferentes fórmulas para modelar a resistência ao rolamento. AI *et al.* [9] e IRAZÁBAL *et al.* [8] discutiram quatro tipos de modelos de resistência ao rolamento. A simplicidade e baixos requisitos computacionais [10] dessa classe de métodos os tornam preferíveis para implementação em pacotes comerciais DEM e em aplicações práticas na indústria.

Em relação à modelagem de muitas pequenas partículas, é comum o uso de partículas esféricas aumentadas (escalonadas), assim reduz-se o tempo computacional das simulações. Portanto, é comum, em aplicações práticas, modelagens de partículas reais usando partículas esféricas e aumentadas [11, 12]. Contudo, a calibração desse tipo de modelagem com base em ensaios experimentais é imprescindível. A prática habitual de calibração de modelos DEM em simulação de fluxo de partículas é a seleção de parâmetros microscópicos por alguma metodologia de tentativa e erro a partir de faixas de valores dos parâmetros encontradas na literatura. Porém, há dois problemas principais nessa abordagem de calibração [2]: o primeiro é o grande número de simulações que deve ser realizado para encontrar os parâmetros microscópicos para que o fluxo de partículas simuladas forneça um ou mais parâmetros macroscópicos determinado experimentalmente (como por exemplo, o ângulo de repouso do material granulado). O segundo problema é que mais de um conjunto de parâmetros microscópicos pode fornecer o mesmo parâmetro macroscópico. Nesse contexto, no presente estudo, apresenta-se uma metodologia para a solução do primeiro problema. Com o intuito de reduzir o número de simulações DEM para se determinar um adequado conjunto de parâmetros microscópicos de entrada, este trabalho apresenta um método utilizando Planejamento de Experimentos (*Design of Experiments*, DOE) para o planejamento de simulações DEM com apenas 1/16 de um Fatorial Completo para o aprendizado de uma Rede Neural Artificial (RNA) do tipo *Perceptron* Multicamadas *Feedforward* (*Feedforward Multilayer Per-*

ceptron Neural Network, MLPNN), fazendo com que as demais simulações do fatorial completo seja realizada pela rede neural, e não mais pelo *software* DEM. Isto reduz bastante o tempo para se chegar a um modelo de regressão, que a partir do parâmetro macroscópico desejado (ângulo de repouso) seja encontrado um conjunto adequado de parâmetros de entrada do modelo DEM. Aplicou-se o método na modelagem de um fluxo de minério de ferro *sinter feed* no interior de uma caixa de fluxo em laboratório, previamente apresentada em CARVALHO [13] e CARVALHO *et al.* [14].

Dividiu-se o restante do trabalho da seguinte maneira: a Seção 2 descreve sucintamente o método dos elementos discretos e as técnicas DOE e RNA. Na seção 3 são descritos o material utilizado e o método proposto para a redução do número de simulações DEM durante o processo de calibração. A Seção 4 apresenta os resultados e discussões da aplicação do método e a comparação com os resultados de calibração obtidos em CARVALHO [13] e em CARVALHO *et al.* [14]. Finalmente, a Seção 5 apresenta as considerações finais do trabalho.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Método dos Elementos Discretos

O DEM foi proposto por CUNDALL e STRACK [1] como um método numérico capaz de simular interações e movimentos de partículas individuais em um ambiente mecânico, pois fornece descrições das posições, velocidades e forças que agem em cada corpo ou partícula. Desta forma, de acordo com ZHU *et al.* [15], usa-se uma solução numérica explícita para descrever o movimento individual das partículas de acordo com a interação entre elas.

A segunda Lei do movimento de Newton, Equação (1) e Equação (2), fornece a relação fundamental para o movimento de translação e rotação das partículas. Para uma partícula i seu movimento de translação e rotação são, respectivamente:

$$m_i \frac{dV_i}{dt} = \sum_j F_{ij}^c + \sum_k F_{ij}^{nc} + F_i^f + F_i^g \quad (1)$$

$$I \frac{dw_i}{dt} = \sum_{j=1}^k M_{ij}, \quad (2)$$

sendo V_i e w_i velocidade de translação e rotação, respectivamente. F_{ij} é a força de contato entre as partículas i e j . F_{ij}^{nc} é a força de não contato entre as partículas i e j ou outras fontes. F_i^f é a força de interação entre a partícula i e o fluido. F_i^g é a força gravitacional aplicada sobre a partícula i .

2.2 Planejamento de Experimentos

Planejamento de Experimentos é definido como o ato de planejar/projetar a execução de um experimento com mudanças deliberadas (ou estímulos) nas variáveis de entrada que possibilitem estabelecer as condições, quantidades e quais fatores iriam/irão impactar nas variáveis de resposta do sistema (saídas). Portanto, pode-se determinar quais variáveis de entrada são responsáveis pelas mudanças observadas na resposta, desenvolver um modelo relacionando a resposta às variáveis de entrada importantes e usar esse modelo para melhoria de processo ou sistema ou outra tomada de decisão. Desta forma, o DOE busca satisfazer dois grandes objetivos: menor custo e maior precisão estatística na resposta [16, 17]

Para tanto, um modelo funcional multilinear pode ser estimado, expressando todas as relações entre os fatores controláveis, e as respostas. A Equação (3) mostra a composição desse modelo, onde β_j são os regressores em que se calcula a significância associada com as variáveis de entrada x_{ij} .

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_j x_{ij} + \epsilon_i$$
$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} + \epsilon_i, i = 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

Para executar os testes propostos neste trabalho, usou-se o planejamento de experimentos de superfície de resposta (*Response Surface Methodology*, RSM). Pode-se definir a superfície de resposta como sendo a representação geométrica obtida quando uma variável resposta é plotada como uma função de dois ou mais fatores quantitativos [17]. A função pode ser definida como mostra a Equação (4):

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n) + \epsilon, \quad (4)$$

sendo Y a variável dependente caracterizada pela resposta de interesse buscada. Os termos X_1 , X_2 e X_n são os fatores ou parâmetros de entrada que influenciam na resposta e ϵ o erro aleatório.

O RSM é utilizado quando se busca máximos e mínimos de funções para otimização de processos. Para se fazer uma análise exploratória das inter-relações das variáveis independentes em relação a resposta um planejamento fatorial é suficiente [17].

Neste trabalho, o Planejamento de Experimentos foi aplicado para definir o conjunto necessário de simulações DEM a serem realizadas. Em um planejamento fatorial completo, a quantidade de simulações necessárias para criação do modelo de regressão do fenômeno estudado é dada pela Equação (5), sendo n a quantidade de experimentos a serem realizados e k a quantidade de parâmetros de entrada do experimento.

$$n = 2^k \quad (5)$$

Usou-se a Análise de Variância das Médias, ou simplesmente ANOVA, para verificar se os parâmetros de entrada, ou variáveis independentes, exercem influência na variável dependente. Cada parâmetro de entrada é um fator, e foram testados os extremos máximos e mínimos de cada fator.

2.3 Redes Neurais Artificiais

Redes neurais artificiais são modelos computacionais inspirados no sistema nervoso de seres vivos [18]. Possuem a capacidade de aquisição e manutenção do conhecimento, baseado em informações, e podem ser definidas como um conjunto de unidades de processamento, caracterizadas por neurônios artificiais que são interligados por um grande número de interconexões, chamadas sinapses artificiais, sendo as mesmas representadas por vetores/matrizes de pesos sinápticos [19], como mostra na Figura 1.

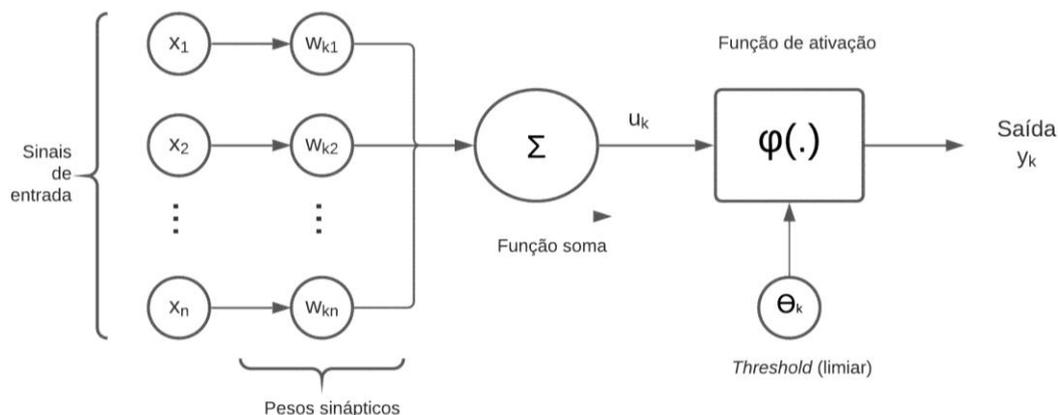


Figura 1: Estrutura de um neurônio artificial.

Dentre as diversas aplicações das RNAs, um dos objetivos da rede consiste em mapear o relacionamento funcional entre as variáveis de um sistema a partir de um conjunto conhecido de seus valores representativos [18]. Neste trabalho, abordou-se o uso de redes neurais como generalizador de funções não lineares, que foram treinadas a partir de resultados obtidos por simulações na metodologia DEM. Com a RNA, construída a partir dessas simulações, é possível ampliar significativamente o número de testes no processo em análise [20], flexibilizando a quantidade de testes a serem feitos, sempre buscando um número adequado a partir da definição do poder de teste e tamanho amostral.

Como demonstrado na literatura e corroborado por BENVENUTI *et al.* [20], a Rede Neural de *Perceptron* Multicamadas *Feedforward* (*Feedforward Multilayer Perceptron Neural Network*, MLPNN) é usualmente empregada com um algoritmo de treinamento de aprendizagem por reforço de retropropagação (gradiente conjugado escalonado) para modelar as propriedades mecânicas dos materiais. Seguindo essa prática, usou-se a MLPNN neste trabalho com os dados de entrada, uma camada escondida e uma camada de saída, conforme apresenta na Figura 2.

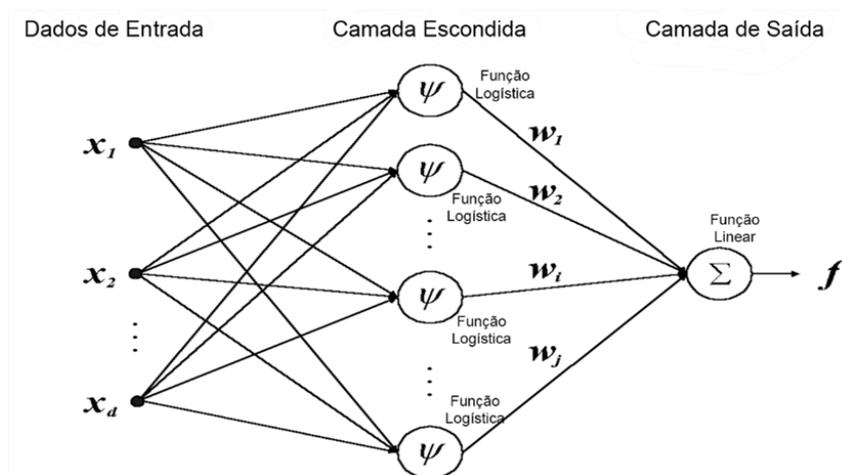


Figura 2: Representação da estrutura da rede MLPNN utilizada.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Material Utilizado

O material usado nas simulações numéricas neste estudo foi o *sinter feed*, amplamente estudado por CARVALHO [13] e CARVALHO *et al.* [14], os quais desenvolveram um modelo de escoamento DEM do minério de ferro com diferentes umidades. A Figura 3 ilustra o resultado de um experimento com o minério de ferro com 3,7% de umidade. Nos experimentos, para a visualização do escoamento, os autores fizeram uso de uma caixa de fluxo transparente contendo uma placa interna que funcionava como uma válvula tipo guilhotina. A Figura 3 mostra dois momentos do experimento. No lado esquerdo da figura, vê-se a caixa de fluxo com sua parte superior preenchida com o material a ser modelado e a válvula guilhotina fechada (posicionada entre a parte superior e inferior da caixa de fluxo). No lado direito, vê-se o resultado do material acomodado nas partes superior e inferior da caixa de fluxo, após a abertura da válvula guilhotina. Filmou-se cada experimento com uma câmera *Sony SteadyShot DSCW310* que tem a capacidade de capturar 30 frames por segundo. A metodologia de *scale up* foi utilizada empregando 4,7mm de diâmetro único de tamanho de partícula e 5 valores diferentes de umidade para o *sinter feed* foram analisados.

Para a etapa de calibração do modelo, foi realizada uma análise de sensibilidade dos parâmetros de entrada a fim de identificar a lei de influência desses parâmetros, onde apenas uma propriedade era alterada por vez em cada tipo de modelo numérico testado. Ajustes de curva foram usados para compreender o efeito dos coeficientes alterados com a pretensão de realizar previsões para o ângulo de repouso. As propriedades fixas do material foram a massa específica [kg/m^3], o coeficiente de Poisson e o Módulo de cisalhamento [Pa] enquanto as variáveis foram os coeficientes de atrito estático e de rolamento, de restituição (todos entre partículas e partícula-parede) e a energia de superfície também entre partículas e partícula-parede.

Depois de realizadas todas as simulações e encontrada a lei de influência de cada parâmetro no ângulo de repouso, os autores realizaram um ajuste que não apenas envolvesse uma propriedade, mas que pudesse incluir o atrito estático, o atrito de rolamento e o coeficiente de restituição nas suas interações entre partículas, e, entre partículas e parede. Para tanto, utilizou-se o *software LabFit* desenvolvido por SILVA *et al.* [21] onde os ajustes de funções são feitos através de regressão não-linear aplicada de forma iterativa, até que um critério de convergência seja atingido. Para encontrar uma equação preditiva para o ângulo de repouso utilizando o modelo de coesão JKR (Johnson-Kendall-Roberts) [22] para as partículas de *sinter feed*, foram necessárias 48 simulações DEM, um número grande, aumentando bastante o tempo computacional de todo o processo de calibração da modelagem do escoamento

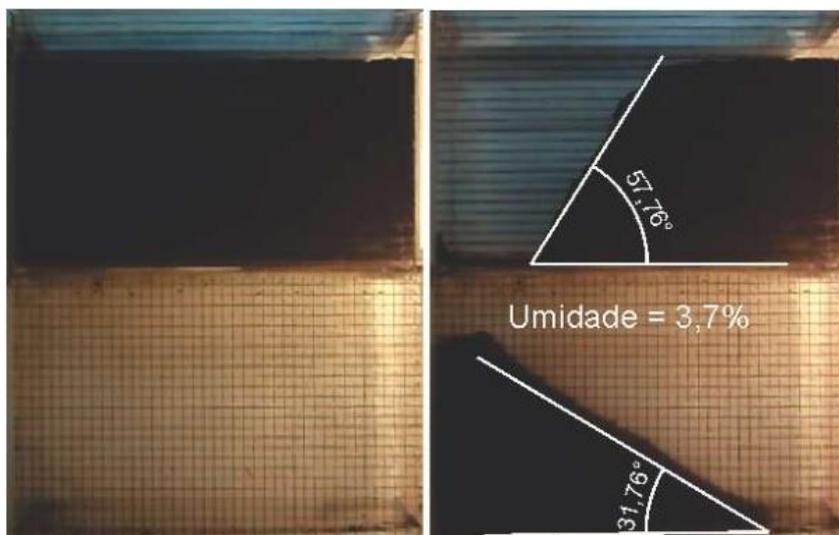


Figura 3: Experimento em caixa de fluxo com *sinter feed* para determinação de ângulo de repouso no compartimento inferior. No lado esquerdo, início do experimento com o material apenas na parte superior da caixa de fluxo. No lado direito, o resultado do experimento com material nas partes superior e inferior da caixa de fluxo, após abertura da válvula guilhotina.

3.2 Metodologia

A caracterização de processos através do DEM tem o inconveniente do alto custo computacional em função do tempo de simulação. Para superar esse inconveniente e dar mais poder à utilização do DEM, a combinação do uso de DOE e RNA concede à análise DEM a redução do número de simulações necessárias para encontrar um resultado significativo, além de garantir uma sequência lógica de simulações a serem realizadas. Caso seja necessário aumentar significativamente a quantidade de simulações, a combinação das metodologias possibilita que isso seja feito sem aumento do custo / tempo computacional. Portanto, é possível usar menos hipóteses simplificadoras na solução numérica utilizada no DEM, uma vez que o fator tempo de simulação passa a ser menos relevante. Com isso, uma maior precisão nas simulações numéricas pode ser alcançada, e em menor tempo de simulação.

De acordo com a Equação (5), para o cálculo da quantidade inicial de simulações a serem realizadas na metodologia DEM é necessário determinar qual o modelo de coesão será considerado. Neste trabalho, utilizou-se o modelo de coesão JKR [22], o mesmo modelo utilizado por CARVALHO [13]. O modelo JKR utilizado possui oito parâmetros de entrada, portanto, para construir o modelo fatorial completo são necessárias 256 simulações DEM. Buscando-se reduzir o número de simulações DEM, escolheu-se por iniciar o treinamento da RNA com um planejamento de 1/16 de fatorial. Portanto, a RNA foi treinada inicialmente a partir de 16 simulações DEM.

Percebeu-se que as 16 simulações foram suficientes para treinar uma RNA de forma coerente, além de permitir as primeiras conclusões sobre os parâmetros de entrada que influenciam a resposta. Essas primeiras simulações também deram informações sobre a variabilidade do parâmetro de resposta, cujo resultado foi utilizado para calcular, com as técnicas de superfície de resposta, a quantidade de testes necessários para se modelar o processo de interesse.

Para a criação da RNA, de acordo com YE *et al.* [23], uma rede neural treinada, associada a um processo de otimização matemática, fornece conjuntos de parâmetros DEM que simulam com precisão testes de calibração de laboratório. Assim, treinou-se uma RNA com os dados do primeiro conjunto de 16 simulações DEM, para que a mesma realizasse os testes necessários estipulados anteriormente para criar um modelo de regressão múltipla que pudesse relacionar os parâmetros microscópicos do material com o ângulo de repouso. Depois dos testes executados com pontos, réplicas e blocos pela RNA, o modelo criado deve ser avaliado quanto ao grau de ajuste/coeficiente de determinação (R^2) e caso não seja satisfatório, a RNA deve ser novamente treinada ou deve-se aumentar a quantidade de amostras para treinamento da RNA, partindo para o planejamento 1/8 de fatorial, que neste caso teriam 32 simulações DEM, e assim por diante.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O presente método foi aplicado para determinação dos valores dos mesmos parâmetros de entrada usados por CARVALHO [13]. Esses parâmetros e as faixas de valores utilizadas na aplicação da metodologia proposta, estão mostradas na Tabela 1.

Tabela 1: Variação dos parâmetros de entrada do material estudado, definição do parâmetro de saída e constantes definidas na simulação DEM para aplicação do método.

CARACTERÍSTICA DO PARÂMETRO	PARÂMETRO	VARIAÇÃO
ENTRADAS	Coeficiente de atrito estático partícula - partícula (μ_e, pp)	0,2 - 1,0
	Coeficiente de atrito estático partícula - parede (μ_e, pw)	0,2 - 1,0
	Coeficiente de restituição partícula - partícula (e_{pp})	0,02 - 1,0
	Coeficiente de restituição partícula - parede (e_{pw})	0,02 - 1,0
	Coeficiente de atrito de rolamento partícula - partícula (μ_r, pp)	0,2 - 1,0
	Coeficiente de atrito de rolamento partícula - parede (μ_r, pw)	0,2 - 1,0
	Energia de superfície da partícula (γ_p) [J/m^2]	5 - 25
	Energia de superfície da parede (γ_w) [J/m^2]	5 - 25
SAÍDA	Ângulo de repouso ($^\circ$)	-
CONSTANTES	Massa específica do minério de Ferro [kg/m^3]	5.050
	Coeficiente de Poisson do minério de Ferro	0,4
	Módulo de cisalhamento do minério de Ferro G [Pa]	1,0 E+08

As 16 simulações definidas para o primeiro conjunto de simulações DEM foram feitas no *software* EDEM© e os resultados estão expostos na Tabela 2.

Tabela 2: Dados de entrada e saída das simulações feitas no EDEM©.

Nº SIMULAÇÃO	EPP	EPW	μ_e, PP	μ_e, PW	μ_r, PP	μ_r, PW	γ_p	γ_w	ANG. DE REPOUSO
1	0,2	0,2	0,2	0,2	0,02	0,02	5	5	19,17
2	0,2	0,2	1,0	1,0	0,1	0,1	5	5	22,07
3	0,2	1,0	0,2	0,2	0,1	0,1	5	25	25,67
4	1,0	0,2	1,0	1,0	0,02	0,02	25	5	44,75
5	1,0	1,0	1,0	1,0	0,1	0,1	25	25	25,03
6	0,2	1,0	0,2	1,0	0,02	0,1	25	5	24,86
7	1,0	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	25	5	14,04
8	1,0	0,2	1,0	0,2	0,1	0,02	5	25	44,20
9	1,0	1,0	1,0	0,2	0,02	0,1	5	5	38,87
10	0,2	1,0	1,0	0,2	0,1	0,02	25	5	51,73
11	0,2	0,2	0,2	1,0	0,1	0,02	25	25	31,02
12	0,2	1,0	1,0	1,0	0,02	0,02	5	25	13,93
13	1,0	1,0	0,2	1,0	0,1	0,02	5	5	34,08
14	1,0	1,0	0,2	0,2	0,02	0,02	25	25	1,67
15	0,2	0,2	1,0	0,2	0,02	0,1	25	25	18,58
16	1,0	0,2	0,2	1,0	0,02	0,1	5	25	14,39

Usando o método de superfície de resposta, o cálculo do tamanho amostral para gerar o modelo de calibração do material foi feito a partir dos resultados obtidos nas 16 simulações. Esses resultados foram usados de duas formas: a primeira finalidade foi para treinar a RNA usada para completar as simulações necessárias do planejamento fatorial completo. A outra foi para o cálculo do desvio padrão para análise de variabilidade do ângulo de repouso, que foi a variável de resposta. Usou-se a variabilidade da resposta para efetivamente calcular a quantidade de simulações necessárias para se atingir um determinado nível de confiança no modelo

criado a partir do planejamento fatorial.

Calculou-se o desvio padrão no valor de 13,49; definiu-se $\alpha = 0,05$ como nível de aceitação do teste de hipótese para rejeição dos fatores que influenciam o ângulo de repouso. Definido o poder do teste em 95%, calculou-se o tamanho amostral a partir do Teste *t de Student*, que foi de 3.154 testes (Figura 4). A combinação dos 3.154 testes foi definida usando o método de superfície de resposta com 08 fatores, 01 bloco, 20 réplicas, 2.560 pontos do cubo, 200 pontos centrais, 320 pontos axiais, resultando em 3.080 pontos.

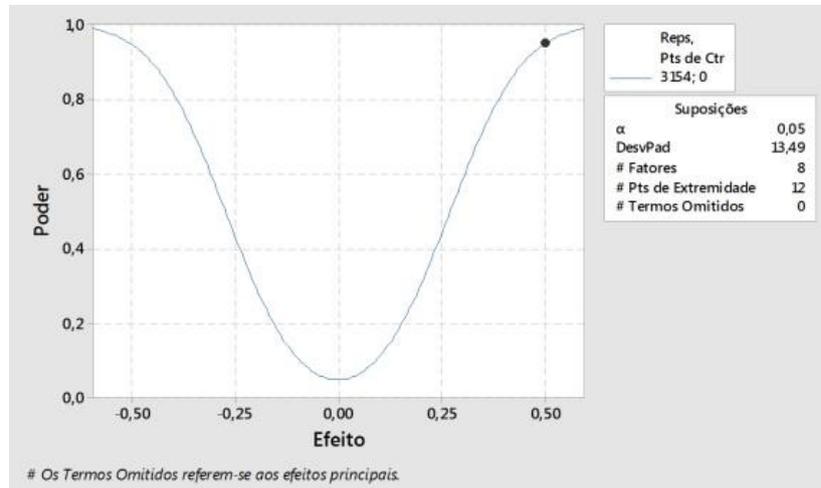


Figura 4: Curva do poder amostral.

O aplicativo disponível na caixa de ferramentas do software MATLAB® foi utilizado para criação da RNA, cujo treinamento foi do tipo *Feed Forward* com algoritmo *Backpropagation* de treinamento e tem topologia do tipo *Perceptron* de Multicamadas, composta por 23 neurônios na camada escondida e um neurônio na camada de saída, como exibido na Figura 5. A função de ativação na camada escondida foi do tipo tangente hiperbólica e linear na camada de saída.

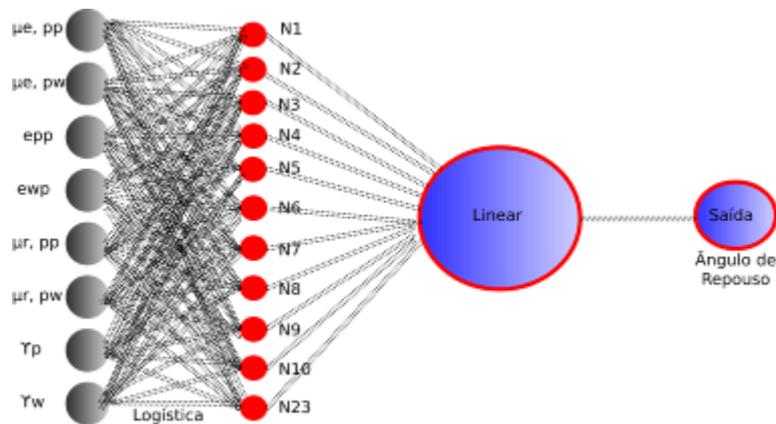


Figura 5: Topologia da rede neural artificial criada para fazer as simulações do método de superfície de resposta.

Utilizando os 16 testes feitos via simulação DEM para treinar a RNA, o grupo de treinamento foi composto por 10 (dez) resultados para treinar a rede, o grupo de validação continha 03 (três) amostras e outras 03 (três) amostras no grupo de teste. O grupo de treinamento alcançou ajuste de $R^2=95,37\%$, o grupo de validação $R^2 = 100\%$ e o grupo de teste $R^2 = 100\%$. O ajuste total da soma das amostras atingiu $R^2 = 97,08\%$ (Figura 6).

Resultados da Generalização da Rede Neural

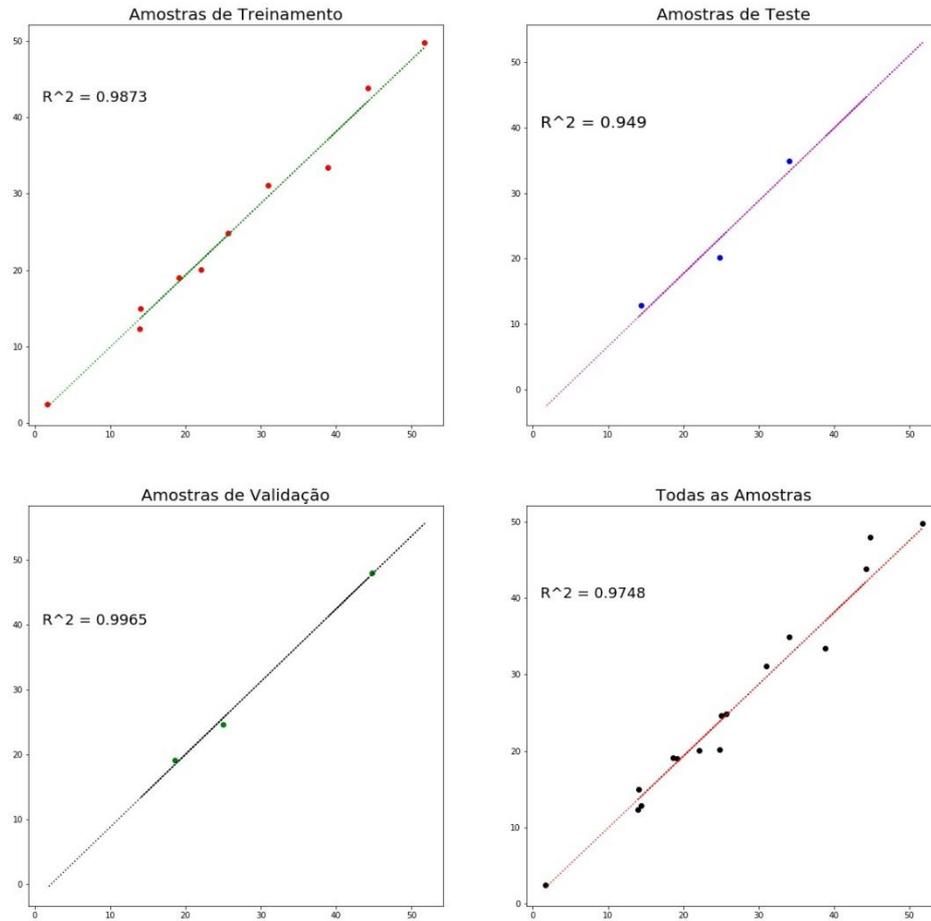


Figura 6: Resultados e análise de regressão das amostras de treinamento da rede neural.

Desta forma, analisaram-se os resultados obtidos por meio da ANOVA (com o *software Minitab 7*) nos 3.154 testes feitos pela RNA. Concluiu-se que coeficiente de atrito de rolamento partícula-partícula (μ_r , pp) é o que mais influencia no ângulo de repouso (Teste F = 3.307,50). O segundo parâmetro mais influente é o coeficiente de restituição partícula – parede (epw) (Teste F = 1.798,53). A Figura 7 mostra os efeitos da interação dos parâmetros analisados com o ângulo de repouso.

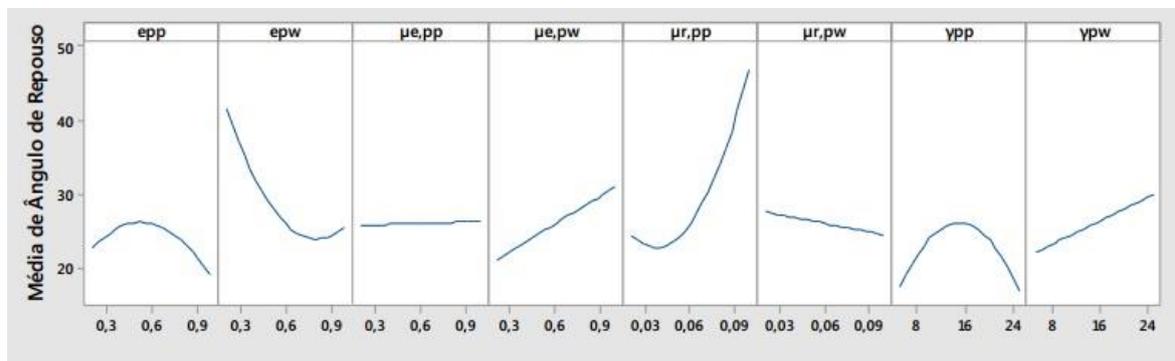


Figura 7: Gráfico de interação dos fatores com o ângulo de repouso verificado com resultados a partir das simulações com RNA.

Para construção do modelo, foram mantidos todos os parâmetros de entrada, mesmo os com pouca influência matemática pois na calibração do modelo DEM, esses valores precisam ser considerados. De tal modo, o ajuste obtido foi de $R^2 = 82,66\%$. Em posse disso, pôde-se gerar um gráfico de contorno com os dois principais fatores de influência (mantendo os demais constantes) para explorar as possíveis configurações desses dois parâmetros de entrada com a resposta do ângulo de repouso, conforme Figura 8.

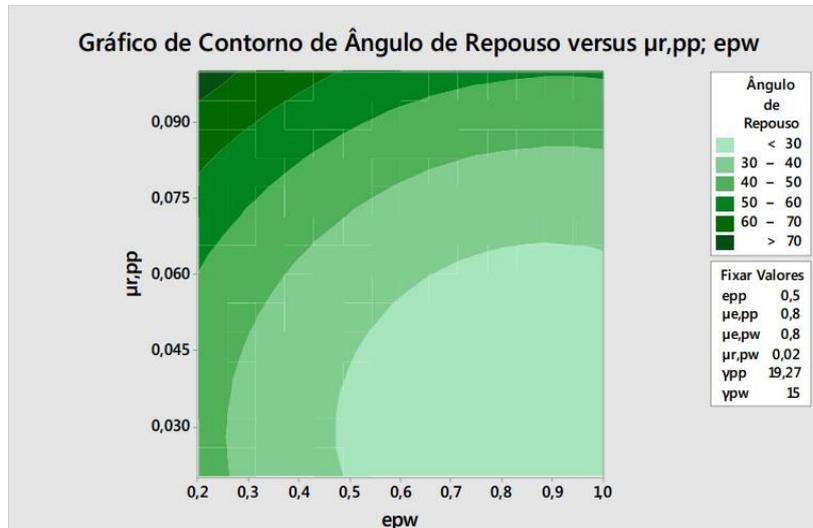


Figura 8: Gráfico de contorno para ângulos de repouso.

Para confirmar a eficácia do modelo gerado com auxílio da RNA, foram comparados os resultados obtidos com o de CARVALHO [13]. A Tabela 3 confronta os resultados, onde percebe-se que apenas o coeficiente de rolamento partícula - parede teve alteração. A média do erro quadrático calculado entre os resultados do modelo gerado e os resultados obtidos em CARVALHO [13] foram de $\mu = 0,85$ e o desvio padrão foi de $\sigma = 1,3$. Portanto, o modelo obtido apresentou-se muito bem ajustado pois exibe $R^2 = 94,64\%$, demonstrando a eficiência de usar apenas 1/16 simulações do fatorial completo para treinar uma RNA e produzir bons resultados de determinação dos parâmetros de entrada a partir da rede desenvolvida.

Tabela 3: Comparação das propriedades do material calibrado por Carvalho (2013) e método proposto.

PROPRIEDADE	CARVALHO [13]		MÉTODO PROPOSTO	
	PARTÍCULA - PARTÍCULA	PARTÍCULA - PAREDE	PARTÍCULA - PARTÍCULA	PARTÍCULA - PAREDE
Coefficiente de restituição [-]	0,5	0,5	0,5	0,5
Coefficiente de atrito estático [-]	0,8	0,8	0,8	0,8
Coefficiente de atrito de rolamento [-]	0,02	0,02	0,02	0,05
Energia de superfície [J/m ²]	19,27	15	19,27	15

5. CONCLUSÕES

A etapa de calibração em uma modelagem DEM é fundamental para a acurácia da simulação. Vários métodos de calibração foram propostos na literatura e ainda é um tema em aberto para pesquisa. Contudo, a prática mais comum de calibração de modelos DEM em simulação de fluxo de partículas é a seleção de parâmetros microscópicos por alguma metodologia de tentativa e erro a partir de faixas de valores dos parâmetros encontradas na literatura. Porém, há dois problemas principais nessa abordagem: o primeiro é o grande número de simulações que deve ser realizado para encontrar os parâmetros microscópicos; o segundo problema é que mais de um conjunto de parâmetros microscópicos pode fornecer o mesmo parâmetro macroscópico. Nesse contexto, no presente estudo, apresentou-se uma metodologia para a solução do primeiro problema. O método proposto foi aplicado na determinação dos parâmetros de entrada da modelagem do minério de ferro sinter feed com 3,7% de umidade e os resultados comparados com resultados de CARVALHO [13].

Os resultados mostraram que o uso de apenas 16 ao invés de 48 simulações de configuração DEM usadas em CARVALHO [13] foram suficientes para treinar a RNA satisfatoriamente. Tal rede também realizou 3.154 simulações de teste, e com os retornos, criou-se um modelo de ajuste entre as simulações DEM, que foi capaz de identificar os dois parâmetros de entrada mais influentes nas saídas e também o modelo de predição do ângulo de repouso com $R^2 = 94,64\%$. Portanto, chegou-se a um bom modelo para calibração do material utilizando somente 30% da quantidade de simulações DEM realizadas em CARVALHO [13].

Deste modo, pode-se verificar a eficiência do Método dos Elementos Discretos aliado ao treinamento de Redes Neurais Artificiais, como boa ferramenta para análise do comportamento granular. A identificação de um adequado conjunto de parâmetros de entrada do modelo por essa metodologia, permite chegar a conclusões importantes sobre o processo - a exemplo da identificação dos fatores microscópicos que possuem maior poder de influência sobre a saída - bem como a obtenção de resultados coerentes com custo computacional mais baixo. Contudo, ressalta-se que a análise foi feita para apenas um material particulado, portanto mais testes em outros materiais granulados devem ser realizados para verificação da efetividade do método. Adicionalmente, ainda persiste o caso de se chegar a mais de um resultado de conjuntos de parâmetros microscópicos. Essas questões serão tratadas em trabalhos futuros.

6. BIBLIOGRAFIA

- [1] CUNDALL, P., STRACK, O. A discrete numerical model for granular assemblies, [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(79\)91211-7](https://doi.org/10.1016/0148-9062(79)91211-7). *Geotechnique*, n. 29, pp. 47 – 65, 1979.
- [2] COETZEE, C.J. Review: Calibration of the discrete element method, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.01.015>. *Powder Technology*, n. 310, pp. 104–142, 2017.
- [3] ROESSLER, T., RITCHER, C., KATTERFELD, A., *et al.* Development of a standard calibration procedure for the DEM parameters of cohesionless bulk materials – part I: Solving the problem of ambiguous parameter combinations, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.034>. *Powder Technology*, n. 343, pp. 803–812, 2019.
- [4] MARIGO, M., STITT, E.H. Discrete Element Method (DEM) for Industrial Applications: Comments on Calibration and Validation for the Modelling of Cylindrical Pellets. <https://doi.org/10.14356/kona.2015016>. *KONA Powder and Particle Journal*, v. 32, pp. 236–252, 2015.
- [5] SHI, C., LI, D., XU, W., *et al.* Discrete element cluster modeling of complex mesoscopic particles for use with the particle flow code method. <https://doi-org.ez3.periodicos.capes.gov.br/10.1007/s10035-015-0557-1>. *Granular Matter*, v. 17, n. 3, pp. 377–387, 2015.
- [6] CLEARY, P.W., SINNOTT, M.D., MORRISSON, R.D. Separation Performance of Double Deck Banana Screens - Part 1: Flow and Separation for Different Accelerations, <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2009.07.002>. *Minerals Engineering*, pp. 1218 – 1229, 2009.
- [7] PODLOZHNYUK, A., PIRKER, S., KLOSS, C. Efficient implementation of superquadric particles in Discrete Element Method within an open-source framework. DOI: 10.1007/s40571-016-0131-6. *Computational Particle Mechanics*, v. 4, n. 1, pp. 101–118, 2017.
- [8] IRAZÁBAL, J., SALAZAR, F., OÑATE, E. Numerical modelling of granular materials with spherical discrete particles and the bounded rolling friction model. Application to railway ballast. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.12.034>. *Computers and Geotechnics*, v. 85, pp. 220–229, 2017.
- [9] AI, J., CHEN, J., ROTTER, J., *et al.* Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.09.030>. *Powder Technology*, v. 206, n. 3, pp. 269–282, 2011.
- [10] SANTOS, E.G., CARVALHO, L.C.S., AMARANTE MESQUITA, A.L., *et al.* Discrete element modeling of non-spherical particles using a spherical shape. <https://doi.org/10.1590/0370-44672019730101>. *International Engineering Journal*, n. 73, pp. 361–369, 2020.
- [11] ROESSLER, T., KATTERFELD, A. Scaling of the angle of repose test its influence on the calibration of DEM parameters using upscaled particles, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.044>, *Powder Technology*, ed. 330, pp. 58 – 66, 2018.
- [12] COETZEE, C.J., Particle upscaling: Calibration and validation of the discrete element method, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.12.022>. *Powder Technology*, ed. 344, pp. 487 – 503, 2019.
- [13] CARVALHO, L.C.S. “Análise de modelos de coesão capilar para simulação de fluxo de materiais granulares aplicada ao manuseio do minério de ferro”, Dissertação de M.Sc., UFPA, Belém, PA, Brasil, 2013.
- [14] CARVALHO, L.C.S., SANTOS, E.G., AMARANTE MESQUITA, A.L., *et al.* Analysis of capillary cohesion models for granular flow simulation – application for iron ore handling. In: *Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, 15th., 2014, Belém, Pará, Brazil.
- [15] ZHU, H.P., ZHOU, Z.Y., YANG, R.Y., *et al.* Discrete Particle Simulation of Particulate System: A review of Major Applications and Findings, <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.08.006>, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 23, pp. 5728 – 5770, 2008.

- [16] MONTGOMERY, D.C. *Design and analysis of experiments*, 8 ed, Arizona, John Wiley & Sons, 2013.
- [17] MYERS, R.H., MONTGOMERY, D.C., ANDERSON-COOK, C.M. *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, 4 ed, New York, John Wiley & Sons, 1995.
- [18] SILVA, I., SPATTI, D., FLAUZINO, R. *Redes Neurais Artificiais para Engenharia e Ciências Aplicadas – fundamentos teóricos e aspectos práticos*, 2. ed, São Paulo, Artliber Editora Ltda, 2016.
- [19] HAYKIN, S. *Redes Neurais - Princípios e Prática*, 2 ed., Porto Alegre, Bookman, 2001.
- [20] BENVENUTI, L., KLOSS, C., PIRKER, S. Identification of DEM simulation parameters by Artificial Neural Network and Bulk experiments, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.01.003>, *Powder Technology*, n. 291, pp. 456 – 465, 2016.
- [21] SILVA, W.P., SILVA, C.M.D.P.S., CAVALCANTI, C.G.B., *et al.* Fit Ajuste de Curvas: Um software em português para tratamento de dados experimentais. DOI: 10.1590/S1806-11172004000400018, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 26, n. 4, pp. 419- 427, 2004.
- [22] JOHNSON, K.L., KENDALL, K., ROBERTS, A.D. *Surface energy and the contact of elastic solids*. <https://www.jstor.org/stable/78058>. Proceedings of the Royal Society of London A, v. 324, n.1558, pp. 301-313, 1971.
- [23] YE, F., WHEELER, C., CHEN, B., *et al.* Calibration and verification of DEM parameters for dynamic particle flow conditions using a backpropagation neural network, <https://doi.org/10.1016/j.appt.2018.11.005>, *Advanced Powder Technology*, n. 30, pp. 292 – 301, 2019.

ORCID

Mauro Sérgio Vieira Matos	https://orcid.org/0000-0002-8867-7600
Jéssica Caroline Bezerra Vale	https://orcid.org/0000-0001-5699-9448
Alexandre Luiz Amarante Mesquita	https://orcid.org/0000-0001-5605-8381