



Laboratório Nacional de  
Computação Científica

p r o g r a m a  
i n s t i t u c i o n a l  
d e b o l s a s d e  
i n i c i a ç ã o  
c i e n t í f i c a

# pibic 2013

Jornada de Iniciação  
Científica do LNCC

LNCC/MCTI - Av. Getúlio Vargas 333, Quitandinha, Petrópolis, RJ - [www.lncc.br](http://www.lncc.br)

## Anais



Laboratório  
Nacional de  
Computação  
Científica

Ministério da  
Ciência, Tecnologia  
e Inovação



# Jornada de Iniciação Científica do LNCC

Petrópolis, 13 de setembro de 2013.

## Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC

Diretor

Pedro leite da Silva Dias

Coordenação de Administração - CAD

Anmily Paula dos Santos Martins

Coordenação de Ciência da Computação - CCC

Jauvane Cavalcante de Oliveira

Coordenação de Matemática Aplicada - CMA

Sandra Mara Cardoso Malta

Coordenação de Mecânica Computacional - CMC

Regina Célia Cerqueira de Almeida

Coordenação de Sistemas e Controle - CSC

Gilberto de Oliveira Corrêa

Coordenação de Sistemas e Redes – CSR

Wagner Vieira Léo

Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica

Renato Portugal

## Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq

Presidente

**Glaucius Oliva**

Coordenadora Geral do PIBIC

**Lucimar Batista de Almeida**

# VIII Jornada de Iniciação Científica do LNCC

## Comissão Interna do PIBIC/LNCC

Renato Portugal  
Eduardo Lucio Mendes Garcia  
Helio José Correia Barbosa  
Jack Baczynski

## Avaliador Externo

Demerson Nunes Gonçalves  
UCP

## **Apresentação**

Apresentamos neste volume a relação dos trabalhos da 8ª Jornada de Iniciação Científica do LNCC, desenvolvidos pelos bolsistas no período de agosto de 2012 a julho de 2013. Estes trabalhos foram apresentados em sessão pôster para, juntamente com as fichas de avaliação do bolsista, serem utilizados como elementos de avaliação do PIBIC/LNCC. Nesta avaliação contamos com o Prof. Dr. Demerson Nunes Gonçalves - UCP, que em função das entrevistas e exame deste volume preparou e enviou ao CNPq relatório de avaliação do Programa.

Agradecemos o empenho dos Professores Orientadores e dos Bolsistas na preparação das fichas de avaliação e dos pôsteres e da disponibilidade da presença para entrevista, para que nosso programa fosse avaliado. É preciso mencionar que temos sido bem avaliados, estando nosso PIBIC bem colocado entre os melhores do país, conforme divulgação feita pelo CNPq.

Aproveitamos a ocasião para agradecer ao CNPq pelas bolsas concedidas, a Direção do LNCC pelo apoio e a Comissão Interna deste programa no LNCC.

Renato Portugal  
Coordenador do PIBIC/LNCC

## Índice

Modelagem e Simulação de Problemas de Crescimento Tumoral .....	1
Bolsista: <b><u>Anna Claudia Mello de Resende</u></b>	
Orientador: Regina Célia Cerqueira de Almeida	
Análise Estrutural de Proteínas da Cápsula de Klebsiella Pneumoniae.....	2
Bolsista: <b><u>Arthur Duque Rossi</u></b>	
Orientador: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos	
Co- orientador: Claudia Elizabeth Thompson	
Movimentação em Ambientes Virtuais Utilizando Dispositivo de Interação e Visualização 3D.....	3
Bolsista: <b><u>Carina da Cruz Teixeira</u></b>	
Orientador: Jauvane C. de Oliveira	
Modelagem Computacional em Fenômenos de Transporte: Transferência de Calor via Método de Diferenças Finitas.....	4
Bolsista: <b><u>Daiana Soares Barreiro</u></b>	
Orientador: José Karam Filho	
Sistema Inteligente de Gestão da Educação.....	11
Bolsista: <b><u>Dejamile Rocha da Silva</u></b>	
Orientador: José Karam Filho	
Co-orientador: Fabiano Saldanha Gomes de Oliveira	
Desenvolvimento de um Portal para Programa de Predição de Estrutura de Proteínas GAPF.....	14
Bolsista: <b><u>Frederico J. R. Carlos</u></b>	
Orientador: Laurent E. Dardenne	
Co- orientadores: Gregório K. Rocha e Fábio L. Custódio	
Modelagem de Incertezas em Problemas de Condução de Calor.....	15
Bolsista: <b><u>Gabriel Caetano Amorim</u></b>	
Orientador: Regina C. Almeida	
Co-orientador: Renato S. Silva	
Variabilidade da Precipitação na Região Serrana do Rio de Janeiro Estimada pelo Canal Infravermelho em Satélites Geoestacionários.....	16
Bolsista: <b><u>Gisele Burger Vieira</u></b>	
Orientador: Pedro Leite da Silva Dias	
Co-orientador: Fabiano Gomes	
Introdução à Computação Quântica e Geração de Números Aleatórios.....	17
Bolsista: <b><u>Igor de Souza Costa</u></b>	
Orientador: Renato Portugal	
Co-orientador: Pedro Carlos da Silva Lara	
Técnicas de Sketching para Inicialização de Simulação de Fluidos via Lattice Boltzmann.....	19
Bolsista: <b><u>José Guilherme Mayworm</u></b>	
Orientador: Gilson A. Giraldi	

Co-orientador: Sicilia F. Judice

Análise Estrutural e de Diversificação Funcional da Álcool Desidrogenase em Peixes.....29

Bolsista: **Juliana Borges Maciel**

Orientador: Ana Tereza Ribeiro Vasconcelos

Co-orientador: Claudia Elizabeth Thompson

Desenvolvimento de um Atlas Anatômico do Corpo Humano Utilizando WebGL.....30

Bolsista: **Leonardo Cardia da Cruz**

Orientador: Jauvane C. de Oliveira

Estudos de modelagem Molecular de inibidores da Enzima MAPKp38a através da Estratégia de Ensemble Docking..... 31

Bolsista: **Lucas de A. Vizani**

Orientador: Laurent E. Dardenne

Co-orientador: Isabella A. Guedes

Derivada Topológica na Mecânica da Fratura..... 33

Bolsista: **Luiz Felipe N. Soares**

Orientador: Antônio André Novotny

Avaliação de Parâmetros da Otimização por Enxame de Partículas..... 34

Bolsista: **Luis Henrique Carvalho do Nascimento**

Orientador: Hélio J. C. Barbosa

Co-orientador: Eduardo Krempser

Estudo da interação entre peixes no reservatório da usina Hidrelétrica de Santa Clara ..... 35

Bolsista: Marcelo Alves Moreira

Orientador: Maurício Kritz

Co-orientadora: Jaqueline Maria da Silva

Análise de grandes volumes de dados ..... 37

Bolsista: **Mirian dos Santos Portela**

Orientador: Fabio Porto

Rendering Realista Via Software Paraview .....38

Bolsista: **Pedro Henrique Vieira de Oliveira Azevedo**

Orientador: Gilson A. Giraldi

Co-orientador: Gastão Miranda

Avaliação de Desempenho dos Algoritmos para Manipulação de Grafos em ambientes Paralelos Híbridos CPU/GPU..... 42

Bolsista: **Rafael Nardes Moreira**

Orientador: Carla Osthoff Ferreira de Bastos

Co-orientador: Frederico Luis Cabral

Implementação de Módulo de Controle de Dispositivo Kinect de Interação do Usuário.....44

Bolsista: **Raquel Ellem Marcelino de Oliveira**

Orientador: Jauvane Cavalcante de Oliveira

Modelagem e Monitoramento de Sistemas Ecológicos.....	47
Bolsista: <b><u>Tainara Mendes de Andrade Soares</u></b>	
Orientador: Maurício Vieira Kritz	
Implementação de uma Abordagem de Ompilação e Implantação de Aplicações Científicas para o SINAPAD.....	48
Bolsista: <b><u>Victor Madeira Teixeira</u></b>	
Orientador: Antonio Tadeu Azevedo Gomes	
Co- orientador: Artur Ziviani	
Análise Comparativa dos Tratamentos de Limites das Variáveis e da Adaptação de Parâmetros na Evolução Diferencial.....	50
Bolsista: <b><u>Vinicius Kreischer de Almeida</u></b>	
Orientador: Helio J. C. Barbosa	
Otimização Estrutural de Placas de Reissner-Mindlin.....	51
Bolsista: <b><u>Vitor Luis G. da S. David</u></b>	
Orientador: André Antonio Novotny	
Co-orientador: Vitor Sales	
Modelagem Computacional Aplicada a Questões Sócio-Educacionais.....	52
Bolsista: <b><u>Weslei Peter de Oliveira</u></b>	
Orientador: José Karam Filho	
Co-orientadores: Fabiano Saldanha Gomes de Oliveira	

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROBLEMAS DE CRESCIMENTO TUMORAL**Anna Claudia Mello de Resende<sup>1</sup> Regina Célia Cerqueira de Almeida<sup>2</sup>

Palavras Chave: Crescimento Tumoral, Quimioterapia, Modelagem Físico-Matemática, Equações Diferenciais, Métodos Numéricos.

O câncer é hoje considerado um sério problema de saúde pública mundial e apesar do bem sucedido combate à doença, ainda permanecem em aberto questões relativas ao bom desempenho de suas modalidades de tratamento.

A metodologia empregada na execução deste trabalho consistiu em estudar, numa primeira etapa, a modelagem físico-matemática associada a modelos de crescimento tumoral espacialmente homogêneos e administração de agentes quimioterápicos descritos por equações diferenciais ordinárias e métodos matemático-numéricos associados à resolução desta classe de equações. Numa segunda etapa foram considerados modelos espacialmente heterogêneos descritos por equações diferenciais parciais onde foi estudado e implementado o método dos elementos finitos.

A modelagem físico-matemática dos modelos de crescimento tumoral utilizados segue a abordagem do contínuo - visão macroscópica da problemática em questão - e é baseada na investigação quantitativa do modelo matemático de quimioterapia anti-neoplásica sob dinâmica angiogênica, onde foi definida uma escala espaço-temporal para a resolução do problema. As soluções numéricas visavam buscar soluções consistentes e estáveis e foram obtidas com base no método dos elementos finitos para a discretização do domínio espacial e no método das diferenças finitas para a discretização do domínio temporal.

**Bibliografia**

1. RODRIGUES, D. S. Modelagem matemática em câncer: dinâmica angiogênica e quimioterapia anti-neoplásica. Dissertação (Mestrado em Biometria) – Instituto de Biociências, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Botucatu, 2011.
2. HINOW, P. et al. *A Spatial Model of Tumor-Host Interaction: Application of Chemotherapy*, Mathematical Biosciences and Engineering, 2009.
3. BILLY, F. et al. *A pharmacologically-based multiscale mathematical model of angiogenesis and its use in investigating the efficacy of a new cancer treatment strategy*, Elsevier, 2009.
4. REDDY, J. N. *An Introduction to the Finite Element Method*, McGraw-Hill, 2006.



## **Análise estrutural de proteínas da cápsula de *Klebsiella pneumoniae***

AD Rossi<sup>1</sup>, ATR Vasconcelos<sup>1</sup>, CE Thompson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Bioinformática, Laboratório Nacional de Computação Científica, Rio de Janeiro

O impacto de bactérias patogênicas no sistema público de saúde é enorme, causando milhares de mortes. Cepas e espécies diferentes são responsáveis por surtos hospitalares, dentre elas, *Klebsiella pneumoniae*, uma bactéria gram-negativa, que pertence à família Enterobacteriaceae. Este microrganismo é multirresistente à antibióticos e é especialmente prejudicial a pacientes imunodebilitados. A *K. pneumoniae* possui uma matriz polissacarídica que confere aderência às células do hospedeiro, prevenindo a dessecação. A composição da cápsula parece ser importante para o fator de virulência, permitindo a classificação e identificação de novos sorotipos. Dessa maneira, os estudos da evolução das proteínas estruturais de cápsula fornecem informações fundamentais sobre os fenótipos multirresistentes às drogas.

Inicialmente, uma análise extensa de todas *orfs* resultantes do pirosequenciamento de uma cepa de *K. pneumoniae* isolada em um hospital universitário em Londrina, Brasil, foi conduzida através da comparação de cada sequência com bancos de dados biológicos. Todas as sequências de proteínas utilizadas no processo de modelagem, incluindo os possíveis moldes e proteínas obtidas do pirosequenciamento foram obtidas do Centro Nacional de Informação Biológica (NCBI). Os alinhamentos das sequências de aminoácidos foram obtidos com o programa ClustalW utilizando a matriz BLOSUM para pontuação e ajustados manualmente com GeneDoc para otimização do alinhamento. A partir do melhor alinhamento obtido, o programa MODELLER foi utilizado para gerar modelos de proteínas de acordo com a metodologia de modelagem de proteínas através de comparação por homologia. Finalmente, o melhor modelo para cada proteína foi selecionado com base nos resultados obtidos pelos programas PROCHECK e VERIFY-3D, os quais executam análises estruturais e estereoquímicas, avaliando o ambiente encontrado nas estruturas obtidas por cristalografia que serviram de molde, respectivamente. O ciclo de realinhamento, modelagem e validação da estrutura foi repetido até não ser possível perceber melhora nos resultados. O RMSD (“Root-Mean-Square Deviation”) entre o molde e cada modelo foi calculado, todas as figuras foram desenhadas e suas superfícies moleculares foram obtidas utilizando o programa Swiss PDB Viewer.

No total, 12 proteínas foram modeladas através de modelagem comparativa por homologia. Os modelos resultantes possuem uma boa qualidade estereoquímica, com exceção da KP03136. Todas as proteínas da cápsula da *K. pneumoniae* foram analisadas completamente. Certas proteínas de cápsula, quando inibidas em outras cepas, causam a perda de virulência, sugerindo que possivelmente isto possa ocorrer na cepa estudada. Adicionalmente, análises filogenéticas estão sendo conduzidas a fim de auxiliar no entendimento da evolução molecular e seu impacto na estrutura das proteínas da cápsula. O próximo passo do projeto será o estudo de docking das proteínas envolvidas com a virulência.

Instituições de fomento: CNPq, FAPERJ.

---

## Movimentação em Ambientes Virtuais Utilizando Dispositivo de Interação e Visualização 3D

Carina da Cruz Teixeira<sup>1</sup>, Jauvane C. De Oliveira<sup>2</sup>

### Resumo

Trabalhar em ambientes de risco, sem o conhecimento prévio do local, pode acarretar em acidentes aos trabalhadores. Com isso a realização de treinamentos para que o usuário se familiarize com o ambiente e aprenda a se prevenir torna-se necessário, porém é inviável expor o funcionário aos riscos de um ambiente real. Como alternativa, os treinamentos em mundos virtuais vêm se tornando uma ferramenta muito utilizada, que permite que o usuário navegue pelo ambiente e conheça seus possíveis riscos.

O presente trabalho descreve a implementação de um simulador virtual de treinamento em plataformas de petróleo representada em um modelo 3D, que permite que o usuário possa navegar e explorar o ambiente. A navegação é realizada através da simulação de passos sobre a balança com sensores de pressão da Nintendo, a Wii Balance Board. Este dispositivo possui a característica de identificar a movimentação que o usuário realiza quando se posiciona sobre ela, através dos dados que seus sensores fornecem. Desta forma, utilizar os próprios pés para navegar, além de ser uma forma mais natural, permite que o usuário mantenha suas mãos livres para a execução de outras tarefas como a manipulação de objetos presentes no ambiente.

Para a visualização 3D é utilizado um ambiente CAVE, estrutura composta por quatro paredes onde as imagens são exibidas em três dimensões, permitindo a total imersão do usuário no ambiente. O sistema também possui dois modos de visualização: em primeira pessoa onde o usuário visualiza somente a plataforma, e em terceira pessoa onde o usuário visualiza a cena e um avatar que reproduz seus movimentos.

### Bibliografia

- 1 - D. Brutzman and L. Daly., X3D 3D Graphics for Web Authors. Morgan Kaufmann Publishers, 2007.
- 2 - M. Cohen and I. H. Manssour., OpenGL - Uma abordagem prática e objetiva. Novatec, 2008.

---

<sup>1</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCTI (carina@lncc.br)

<sup>2</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCTI (jauvane@lncc.br)

## Modelagem Computacional em Fenômenos de Transporte: Transferência de Calor via Método de Diferenças Finitas

Aluna: Daiana Soares Barreiro  
(UCP- Universidade Católica de Petrópolis)

Orientador: José Karam Filho  
(LNCC- Laboratório Nacional de Computação Científica)

### Resumo

Este trabalho tem por objetivo a compreensão e a manipulação de métodos numéricos em fenômenos de transporte, particularmente em Transferência de Calor, dentro da sistemática de modelagem computacional. Após estudo dos princípios de conservação de massa, momento e energia, neste trabalho apresentam-se estudos de diferenças finitas em transferência de calor. Foram realizadas implementações computacionais para os casos uni e bi-dimensionais e exemplos foram realizados para condução linear e não linear uni e bi-dimensional, estacionários e transientes.

### 1. Introdução

Problemas de fenômenos de transporte (dos quais fazem parte a mecânica dos fluidos e a transferência de calor) são governados por equações de balanço/conservação e por relações constitutivas, que caracterizam processos termodinamicamente admissíveis. Abrangem uma larga gama de problemas práticos com aplicações em diversas áreas da engenharia e ciências; dentre elas: escoamentos compressíveis e incompressíveis, newtonianos e não newtonianos, transferência de calor e dispersão de espécies. Nos últimos anos vem ocorrendo um crescente interesse na simulação numérica de problemas de circulação e transporte, motivado tanto pelo desenvolvimento tecnológico, que proporcionou a popularização e o barateamento dos computadores, quanto pela necessidade de redução de custos de projetos industriais e crescente preocupação com fenômenos ambientais.

Como o custo dos experimentos físicos é muito alto e, muitas vezes, de difícil realização, a tendência atual é executá-los após uma série de experimentos numéricos, de custo sensivelmente inferior. Comumente os problemas de interesse prático, das engenharias e de ciências em geral, têm sua modelagem via Equações Diferenciais Parciais, frequentemente não lineares e/ou com geometrias complexas. Estas equações são em geral extremamente complexas, com propriedades muitas vezes surpreendentes, e não intuitivas, para as quais não se conseguem soluções analíticas; assim como também não se conseguem soluções analíticas para condições de contorno e geometrias complexas. Com a disponibilidade recente de recursos computacionais de grande capacidade (hardware e software) tem sido possível tratar, de forma mais precisa, sistemas não lineares e complexos. Teorias e técnicas matemáticas foram desenvolvidas que, juntas com a tecnologia da informação, permitem analisar e prever o comportamento do sistema sob estudo através de simulações computacionais. Com esses recursos, sejam teóricos, sejam de equipamentos, sistemas complexos são possíveis de serem abordados, e exemplos proliferam nas ciências físicas, engenharias, na biologia, na economia, nas ciências sociais, ciências da terra, etc. Esta metodologia, conhecida como

modelagem computacional, impacta as ciências, e muitos a consideram estar ao mesmo nível das tradicionais: observação, experimentação e teoria. Na verdade ela vai além das ciências, sendo diretamente aplicável na resolução de problemas tecnológicos e em processos industriais e organizacionais. Modelar e simular um sistema ou um processo real consiste em caracterizá-lo por um conjunto de entidades abstratas, definindo suas inter-relações e um mapeamento único, que associe as entidades abstratas às observáveis do mundo real. Neste sentido, a modelagem é um processo de produção de conhecimento, e a simulação uma técnica de solução que permite previsão, comparação dos resultados e a consequente validação dos limites do modelo. Este trabalho tem por objetivo a compreensão e a manipulação de métodos numéricos em engenharia, particularmente em Transferência de Calor, dentro da sistemática de modelagem computacional.

Neste projeto de pesquisa foram estudados fundamentos de modelagem [1], mecânica dos fluidos [2], transferência de calor [3-4] uma introdução ao cálculo tensorial e princípios de conservação em mecânica [5] e diferenças finitas [6].

## 2. Princípios de Conservação

Problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor são governados por princípios de balanço/conservação de massa, momentum e energia, subsidiadas por relações constitutivas e de estado. As equações resultantes para esses princípios podem deduzidas tanto a partir de sistemas de referência euleriano como lagrangeano. Considerando, incompressibilidade, materiais newtonianos e lei de Fourier válida, as equações podem ser escritas, respectivamente, na forma diferencial como:

$$\text{div} \mathbf{u} = 0 \quad (\text{incompress.}) \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \mu \text{div} \nabla \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \quad (2)$$

$$\rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \text{div} \nabla \theta + \rho c (\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = \Phi \quad (3)$$

para qualquer domínio de definição, e completadas com condições iniciais e de contorno adequadas. Nas equações acima  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade,  $p$  é a pressão hidrostática,  $\mu$  é a viscosidade,  $\rho$  é a massa específica,  $\theta$  é a temperatura e  $\Phi$  é uma dissipação ou uma geração.

Para a resolução desses problemas podem se utilizados os seguintes métodos numéricos como: Diferenças Finitas, Volumes Finitos, Elementos Finitos e Elementos de Contorno.

Neste trabalho, foi estudado e implementado o método de Diferenças Finitas para problemas de condução de calor, considerando convecção exterior e radiação.

## 3. Método de diferenças finitas para problemas de transferência de calor por condução e processos combinados

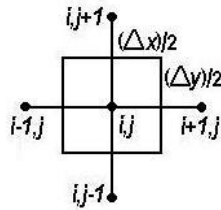
Neste trabalho, foi implementado o método de diferenças finitas (DF) para resolver problemas de transferência de calor por condução, com as combinações citadas anteriormente e se desprezou o termo de convecção forçada. Esses problemas são regidos pela seguinte equação que advém da equação (3):

$$\rho c_p \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \operatorname{div} \nabla \theta = \Phi \quad (4)$$

que além da condição inicial, pode ser completada com condições de contorno em temperatura (Dirichlet), fluxo (Neumann) ou mista (Robin ou Newton).

O método DF é um método numérico de resolução de equações diferenciais baseado na aproximação de derivadas por diferenças finitas.

O esquema a seguir mostra as derivadas sendo aproximadas por diferenças finitas em cada ponto.



$$\left( \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{i,j} \cong \frac{\theta_{i+1/2,j} - \theta_{i-1/2,j}}{\Delta x} \quad (5)$$

$$\left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right)_{i,j} \cong \frac{1}{\Delta x^2} \theta_{i+1,j} - 2\theta_{i,j} + \theta_{i-1,j} \quad (6)$$

$$\left( \frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_{i,j} \cong \frac{\theta_{i,j+1/2} - \theta_{i,j-1/2}}{\Delta y} \quad (7)$$

$$\left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right)_{i,j} \cong \frac{1}{\Delta y^2} \theta_{i,j+1} - 2\theta_{i,j} + \theta_{i,j-1} \quad (8)$$

#### 4. Implementação Computacional

O método DF foi aqui implementado para os casos uni e bidimensionais, lineares e não lineares, estacionários e transientes. A resolução do sistema de equações foi feita pelo método de Gauss e um esquema do tipo Picard foi usado nos problemas não lineares. Foi combinado o método de diferenças centradas no espaço com o método de Euler no tempo. Estes programas computacionais foram desenvolvidos utilizando o MATLAB.

#### 5. Exemplos e Resultados Numéricos

##### 5.1 Condução estacionária com convecção e radiação (não linear 1-D)

Este exemplo trata de uma aleta de comprimento finito ( $L=0,1\text{m}$ ) como na Fig 1, que troca calor por convecção e radiação com o ambiente que está a uma temperatura  $\theta_{amb}=293\text{ K}$ .  $h_c=40\text{ W/m}^2\text{K}$  é o coeficiente de convecção superficial,  $k=240\text{ W/mK}$  é o coeficiente de condução do material da aleta,  $A_c=1,6\times 10^{-5}\text{ m}^2$  é a área transversal,  $P=0,016\text{ m}$  é o perímetro  $\varepsilon=0,4$  é a emissividade e  $\sigma=5,67\times 10^{-8}\text{ W/m}^2\text{K}^4$  é a constante de Stefan-Boltzmann. A equação que rege o problema e as condições de contorno estão dadas abaixo.

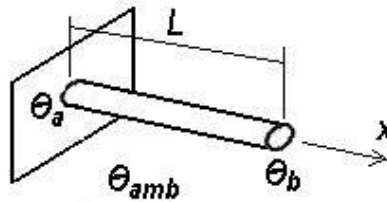
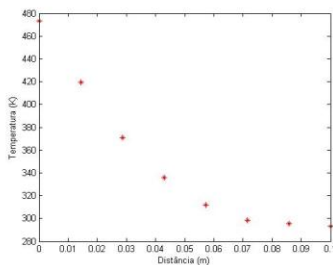


Fig. 1. Aleta unidimensional

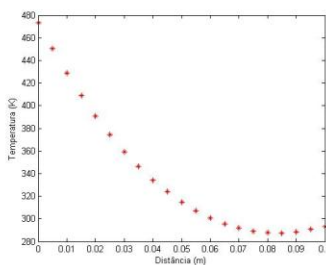
$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{h_c P}{k A_c} (\theta - \theta_{amb}) - \frac{\varepsilon \sigma P}{k A_c} (\theta^4 - \theta_{amb}^4) = 0, \quad 0 < x < L \quad (9)$$

$$\theta(0) = \theta_a = 473\text{ K}, \quad \theta(L) = \theta_b = 293\text{ K}$$

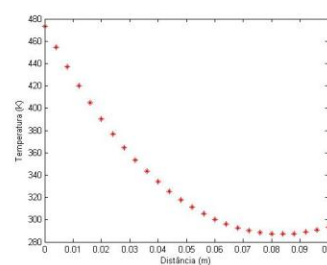
A Fig. 2 mostra os resultados obtidos com o método DF



(a) N=7



(b) N=20



(c) N=25

Fig. 2. Aleta: campo de temperaturas para as iterações N=7, 20 e 25

A tolerância para convergência foi  $10^{-5}$ .

## 5.2 Condução em placa plana (transiente, linear 2-D)

Trata-se de uma placa quadrada com diferentes condições de contorno como definido abaixo, junto com sua equação de governo. Neste exemplo a difusividade,  $\alpha = k / (\rho c)$  foi considerada unitária e a condição inicial como nula nos pontos do domínio.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \alpha \operatorname{div} \nabla \theta = 0, \quad (10)$$

$$\theta(0, y) = 0 \quad \theta(2, y) = y(2 - y), \quad 0 < y < 2$$

$$\theta(x, 0) = 0 \quad \theta(x, 2) = x, \quad 0 < x < 1$$

$$\theta(x, 2) = 2 - x, \quad 1 \leq x < 2$$

As figuras abaixo mostram os resultados para alguns instantes de tempo até o regime estacionário para dois casos, com passo de tempo=0,01. A Fig. 3 ilustra o campo de temperatura para o caso de condição inicial unitária no domínio, e a condição estacionária foi obtida para um tempo adimensional de 1,8. A Fig. 4 mostra a evolução do campo de temperatura para o caso de condição inicial nula, com o estado estacionário obtido com tempo adimensional de 1,6

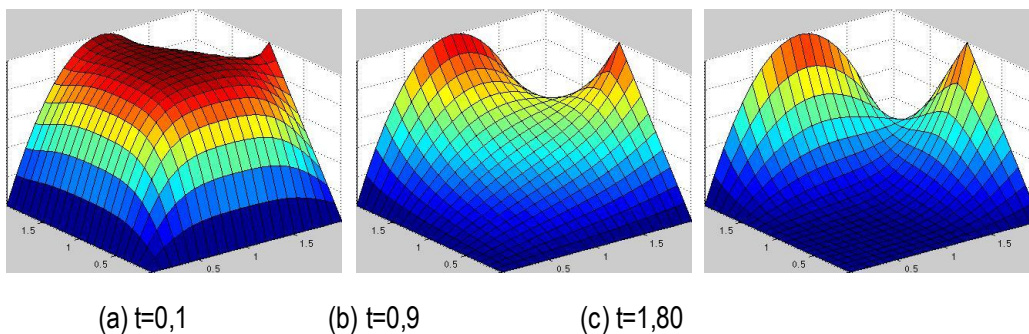


Fig. 3. Placa quadrada (condição inicial unitária): campo de temperaturas para 3 instantes de tempo

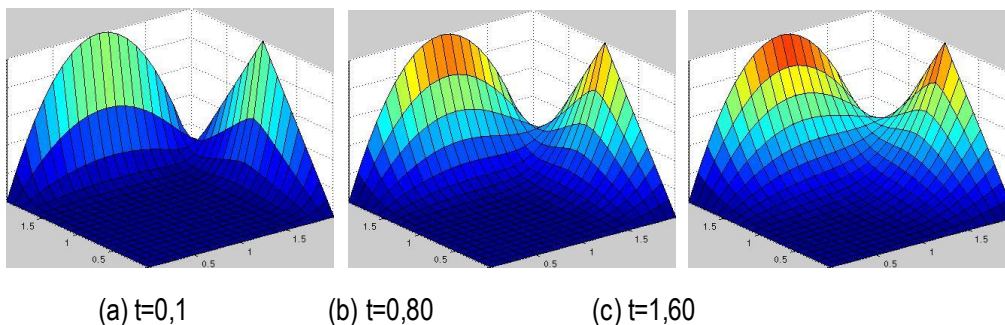


Fig. 4. Placa quadrada (condição inicial nula): campo de temperaturas para 3 instantes de tempo

## 6. Conclusões:

Neste trabalho, além de estudos de mecânica dos fluidos, transferência de calor e os princípios de conservação em mecânica, foi implementado o método de diferenças finitas para problemas de transferência de calor por condução e processos combinados, estacionários e transientes, lineares e não lineares, uni e bi-dimensionais. Os programas computacionais foram desenvolvidos em MATLAB, foram usadas diferenças finitas centrais e soluções via eliminação de Gauss e algoritmo de Picard para tratar as não linearidades. No problema estacionário uni-dimensional aqui apresentado (aleta com condução, convecção e radiação externa), pode-se perceber a convergência para um problema não linear independente da malha. No problema transiente bi-dimensional da placa plana, além da dependência da malha pode-se verificar a diferença do comportamento de convergência dependente da condição inicial.

## 7. Sugestões para trabalhos futuros

Exploração de diferentes tipos de condições de contorno, como condições de contorno variáveis no tempo.

Consideração do termo de convecção forçada, no domínio, que exigirá um tratamento diferenciado e métodos do tipo *upwind* para convecção dominante.

Implementação do método para as equações de momentum, com interesse na não linearidade do termo hiperbólico e, mesmo, de viscosidade variável com a velocidade (fluidos não newtonianos).

Estudo de outros métodos como volumes finitos que têm sua base no método de diferenças.

## 6 Referências:

- [1] Karam F., J. e Almeida, R. C., Introdução à Modelagem Matemática, Publicações da Pós-Graduação do LNCC, LNCC, 2003.
- [2] Fox R. W. e McDonald, A. T., Introdução à Mecânica dos Fluidos, 10ª. edição, Guanabara Dois, 2010.
- [3] Kreith, F., Princípios da Transmissão de Calor, Edgard Blucher, 1977.



[4] Sissom, L. E. and Pitts, D. R., Fenômenos de Transporte, Guanabara Dois, 1979.

[5] Lai, W. M., Rubin, D. and Krepl, E., Introduction to Continuum Mechanics, Pergamon Press Inc., 1974.

[6] Fletcher, C.A.J., Computational Techniques for Fluid Dynamics, Springer Verlag, 1988.

## Sistema Inteligente de Gestão da Educação

Aluno: Dejamile Rocha da Silva

Orientador: Dr. José Karam Filho

Co-orientador: Dr. Fabiano Saldanha Gomes de Oliveira

### Introdução

A evasão escolar é um grande desafio para as escolas e para o sistema educacional. O número de crianças e adolescentes fora das salas de aula ainda é grande no Brasil, especialmente no ensino médio.

São muitos os motivos que levam à evasão escolar, condições socioeconômicas, culturais e geográficas. E dois fatores muito importantes também: a queda da progressiva qualidade do ensino nas últimas décadas, cujo sintoma mais atual é o desinteresse que os alunos demonstram pela escola, e a necessidade de ajudar na subsistência de famílias de baixa renda que pressiona crianças e adolescentes a abandonarem a escola em busca de trabalho. E como passam a buscar trabalho e renda, muitos adolescentes se afastam da escola.

O presente relatório tem como objetivo o desenvolvimento de metodologias quantitativas que permitam compreender de uma maneira inovadora a fenomenologia social que atua nos processos educacionais através da estatística.

O campo da estatística lida com a coleta, a apresentação, a análise e o uso dos dados para tomar decisões, resolver problemas e planejar processos. Técnicas estatísticas são uma ajuda poderosa no planejamento de sistemas, melhorando os projetos existentes e planejando, desenvolvendo e melhorando os processos.

### Análise de Dados

É o processo pelo qual se dá ordem, estrutura e significado aos dados. A partir dos tópicos estabelecidos processam-se os dados, procurando tendências, diferenças e variações na informação obtida.

Propósito da análise de dados:

- Descrever e resumir dados
- Identificar relações e diferenças entre variáveis
- Comparar variáveis

- Fazer previsões

### Estatística Descritiva

É a etapa inicial da análise utilizada para visualizar e resumir os dados. É um ramo da estatística que aplica várias técnicas para descrever e sumarizar um conjunto de dados.

Técnicas:

As técnicas usadas costumam classificar-se como:

Gráficos descritivos: São usados vários tipos de gráficos para sumarizar os dados. Por exemplo: Histogramas.

Descrição Tabular: Na qual se usam tabelas para sumarizar os dados. Por exemplo: tabelas de Freqüências.

Descrição Paramétrica: Na qual estimamos os valores de certos parâmetros, os quais assumimos que completam a descrição do conjunto dos dados. Por exemplo: Média.

Etapas da estatística:

- Coletar dados
- Organizar
- Descrever
- Interpretar
- Analisar os resultados

O que fazer com as observações que coletamos? Primeiro organizamos. Depois calculamos medidas de posição (média, variância, desvio, mediana, moda, etc), e visualizamos os dados.

Descrição dos dados=Estatística descritiva

Variável

Qualquer característica associada a uma população. As variáveis são classificadas em:

- Qualitativa (Nominal e Ordinal)
- Quantitativa (Contínua e Discreta)

Variáveis Quantitativas

Medidas de posição: Moda, Média, Mediana, Percentís e Quartis.

Medidas de Dispersão: Amplitude, Intervalo-Interquartil, Variância, Desvio Padrão, Coeficiente de Variação.

### Organização e representação dos dados

Uma das formas de organizar e resumir a informação contida em dados observados é por meio de tabela de frequências e gráficos. Podemos construir tabela de frequência de variáveis qualitativas que as quantificam por categoria de classificação, e sua representação gráfica é mediante ao gráfico de barras, gráfico setorial ou em forma de pizza.

Para facilitar a eficiência dos processos citados é preciso:

ENTENDER o contexto

APLICAR as ferramentas adequadas

ANALISAR resultados obtidos

PREVER com o modelo construído como resultado da análise.

## Desenvolvimento de um Portal para o Programa de Predição de Estruturas de Proteínas GAPF

Frederico J. R. Carlos, Gregório K. Rocha, Fábio L. Custódio, Laurent E. Dardenne

Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos – LNCC

A predição de estruturas de proteínas representa uma área de pesquisa de grande destaque nos dias atuais por seu potencial para aplicações em áreas estratégicas de grande impacto na biotecnologia como, por exemplo, na criação de novas proteínas (engenharia de proteínas), no desenho racional de fármacos, no refinamento de modelos teóricos, na obtenção de estruturas a partir de dados experimentais incompletos e na obtenção e otimização de novas informações dos bancos de dados genômicos. Vem sendo desenvolvido no Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos (GMMSB/LNCC) um programa para a predição *ab initio* de estrutura de proteínas chamado GAPF (*Genetic Algorithm for Protein Folding*) (Custódio, 2008). O GAPF é um software de alta complexidade e, até este trabalho, não disponibilizava uma interface gráfica de fácil utilização para o usuário final, o que acaba limitando sua utilização por parte da comunidade científica. Além disso, a predição da estrutura de uma proteína exige processamento de alto desempenho e muitos possíveis usuários não tem acesso à estrutura computacional necessária. Desta maneira, torna-se importante o desenvolvimento de uma ferramenta que facilite o acesso e a utilização do programa GAPF, bem como disponibilize os recursos computacionais necessários para sua execução. Neste trabalho, utilizando ferramentas de *web design* e linguagens de programação para *web*, tais como PHP e *java script*, foi desenvolvido um portal para mediar a interação do usuário final com o GAPF, simplificando o método de utilização do programa e a obtenção dos dados gerados. Através deste portal, também é permitido ao usuário rodar suas análises em núcleos computacionais de alto desempenho. Neste momento, o portal desenvolvido encontra-se em fase de teste, estando disponível para utilização dentro das dependências do LNCC, sendo disponibilizado em breve para toda a comunidade científica.

## Modelagem de incertezas em problemas de condução de calor

Gabriel C. Amorim Regina C. Almeida  
Renato S. Silva

### Resumo

A energia solar térmica vem ganhando espaço no mercado, pois é uma energia limpa e, dependendo da região, de fácil acesso. Normalmente é utilizada para aquecer água para uso doméstico. A diferença entre a energia residencial e a geração de eletricidade é a dificuldade de manter o fornecimento constante de energia durante períodos com a ausência do sol. Para contornar essas dificuldades é necessário armazenar energia para estes períodos. A solução adotada é a bateria de energia solar, onde o calor é armazenado e é utilizado para a geração de energia elétrica quando necessário.

O concreto é utilizado como bateria solar, por razões econômicas, porém suas propriedades físicas, como calor específico e condutividade térmica, variam de acordo com a composição usada na sua elaboração, o que gera incertezas na elaboração do projeto de uma bateria solar.

As incertezas envolvidas em projetos são principalmente de dois tipos: aleatória e epistêmica. A incerteza aleatória ocorre devido às variações naturais como, por exemplo, a variação da condutividade térmica dos materiais devido à variação da composição química dos mesmos. Já a incerteza epistêmica ocorre devido à falta parcial ou total de conhecimento sobre o comportamento de determinado parâmetro.

Este trabalho visa a modelagem numérica do processo de armazenamento de energia solar, via o método de diferenças finitas, em uma seção de um bloco feito de concreto, onde as incertezas nos parâmetros calor específico e condutividade térmica serão consideradas.

## **Variabilidade da Precipitação na Região Serrana do Rio de Janeiro Estimada pelo Canal Infravermelho em Satélites Geoestacionários**

GB Veira, P L S Dias, F Gomes

A região serrana do Rio de Janeiro foi particularmente afetada por chuvas intensas no dia 12 de janeiro de 2011. As cidades mais afetadas foram Teresópolis, Nova Friburgo, Petrópolis, Sumidouro e São José do Vale do Rio Preto. Foram contabilizadas cerca de 900 mortes e mais de 300 desaparecidos e cerca de 35 mil desalojados em consequência dos desastres naturais. As tragédias foram consideradas como o maior desastre climático da história do país, superando os 463 mortos do temporal que atingiu Caraguatatuba em 1997. Portanto faz-se necessário explorar com maior profundidade as fontes de informação que permitem a estimativa da precipitação, principalmente em regiões onde a variabilidade espacial é muito grande como, por exemplo, a região serrana do Rio de Janeiro.

No presente estudo houve a necessidade de explorar a variabilidade temporal e espacial da precipitação da região serrana do Rio de Janeiro com base nas estimativas baseadas no satélite geoestacionário (GOES), denominada “auto-estimador”.

Ao todo, está sendo avaliada a variabilidade espacial desses limiares em uma amostra de cerca de 10 anos de dados, afim de obter estimativas da probabilidade de ocorrência de precipitação em diferentes percentis. Numa região com topografia tão variável como na região serrana do Rio de Janeiro espera-se que a variabilidade dos limiares associado ao percentil seja muito significativa.

Tais resultados estão sendo comparados com outras estimativas de precipitação (satélite TRMM, com radar ativo à bordo).

Instituições de fomento: CNPq, FAPERJ.

---

***Introdução à Computação Quântica e Geração de Números Aleatórios***

Aluno: Igor de Souza Costa

Instituto Superior de Tecnologia em Ciências da Computação de Petrópolis

Orientadores: Renato Portugal e Pedro Carlos da Silva Lara

Laboratório Nacional de Computação Científica / MCT

Vigência: 15/04/2013 – 31/07/2013

Introdução

A Computação Quântica é uma área de pesquisa nova, que está em ascensão, e que utiliza elementos de várias outras áreas do conhecimento, como Matemática, Física e Ciência da Computação. Um computador quântico é um dispositivo de computação que faz uso direto dos fenômenos da Mecânica Quântica, tais como sobreposição (ou superposição) de estados e emaranhamento, para realizar operações sobre dados.

Objetivo

Objetivando utilizar princípios da incerteza quântica, este trabalho de iniciação científica busca estudar aspectos relacionados a geração de números aleatórios através de processos quânticos. Inicialmente os objetivos serão o domínio dos conceitos básicos de álgebra linear, o entendimento e interpretação dos postulados e princípios na natureza quântica e o estudo e análise estatística da geração de números aleatórios quânticos, também faremos o uso da placa quântica, *IDQ Quantis*, presente no parque computacional do LNCC para a realização de testes. Números aleatórios são atualmente utilizados em geração de chaves criptográficas, dinâmica de partículas e em diversas aplicações estocásticas.

Trabalho já realizado



Inicialmente foram realizados os estudos dos princípios básicos de álgebra linear, tais como, espaços vetoriais, operações vetoriais básicas, subespaços vetoriais, parte essencial para o entendimento dos postulados e princípios na natureza quântica, para dar prosseguimento ao cronograma de metas previsto para a vigência da bolsa.

## Técnicas de Sketching para inicialização de Simulação de Fluidos via Lattice Boltzmann

José Guilherme Mayworm, Sicília F. Judice e Gilson A. Giraldi  
Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/MCT)  
Petrópolis, RJ, Brasil  
*{jmayworm, sicilia, gilson}@lncc.br*

*Resumo. Este trabalho propõe uma metodologia intuitiva para inicialização de simulação de fluidos para aplicações em computação gráfica. Técnicas baseadas em sketching são utilizadas no processo de inicialização do método LBM (Lattice Boltzmann Method), o qual é baseado na ideia fundamental de se construir modelos cinéticos simplificados, os quais incorporam a física essencial do processo microscópico de maneira que as propriedades macroscópicas de interesse satisfaçam as equações macroscópicas. O uso de técnicas baseada em sketching é proposto com o intuito de permitir ao usuário desenhar livremente o estado inicial desejado para a simulação de fluido.*

### 1. Introdução

Nas últimas décadas, técnicas baseadas em modelos físicos para animação de elementos naturais, como fluidos (gás ou líquido), têm chamado a atenção dos pesquisadores em computação gráfica. A motivação reside no potencial existente nas aplicações dessas técnicas bem como na complexidade e beleza dos fenômenos naturais envolvidos. Em particular, técnicas no campo da Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) têm sido implementadas para animação de fluidos em aplicações que envolvem interações fluido-fluido e fluido-superfície [1], simuladores de cirurgia virtuais [2], efeitos visuais para a indústria cinematográfica [3] e jogos digitais [4].

Os métodos tradicionais de animação de fluidos em computação gráfica utilizam abordagens baseadas em malhas 2D/3D, motivadas pelos métodos eulerianos de Elementos Finitos (EF) e Diferenças Finitas (DF) em conjunto com as equações de Navier-Stokes para fluidos [5]. Ao final do pipeline de animação, técnicas de rendering precisam ser aplicadas para garantir o nível de realismo desejado nas imagens geradas.

Alternativamente, o método de *Lattice Boltzmann* (LBM) pode ser usado. A ideia básica por trás deste método consiste em obter a dinâmica macroscópica de um fluido através do comportamento microscópico de diversas partículas. Com esta filosofia, o LBM constrói um modelo cinético, uma simplificação da equação de *Boltzmann*, a qual incorpora a física microscópica essencial de modo que as quantidades macroscópicas estimadas obedecem as equações de interesse [6]. O método LBM pode ser usado para simular modelos 2D ou 3D.

Para prover uma modelagem intuitiva da configuração inicial do fluido, técnicas de sketching podem ser aplicadas. O primeiro sistema baseado em sketching, no contexto de modelagem geométrica, foi SKETCHPAD, lançado em 1963 pelo Ivan Sutherland [13]. Metodologias mais recentes abordam o uso de ícones para representar instruções específicas [14], bem como interpretações de desenhos realizados diretamente pelo usuário [15]. Os sistemas baseados em sketching intitulados por SKETCH [14] e TEDDY [16] são exemplos inspiradores de como rascunhos ou gestos fornecem uma interface poderosa para uma modelagem geométrica eficiente.

O presente trabalho é baseado em trabalhos recentes desenvolvidos no grupo do LNCC, os quais propõem uma inicialização intuitiva para simulações computacionais de fluidos. Para realizar esta tarefa, a técnica LBM é combinada com métodos de modelagem baseada em sketching [18]. Desta forma, o usuário será capaz de definir um estado inicial para a simulação de fluidos através de desenhos livres. O trabalho apresenta um software, o qual incorpora um simulador de LBM com capacidade de visualização dos campos gerados, através de técnicas simples como mapas de cor e setas orientadas, disponíveis na biblioteca OpenGL, além da implementação de interfaces gráficas usando a biblioteca GLUI, que permitem a configuração e controle das simulações.

O texto a seguir é organizado da seguinte forma. A seção 2 descreve o método Lattice Boltzmann. A seção 3 apresenta o *software* desenvolvido. Na seção 4 são apresentados os resultados e finalmente na seção 5 a conclusão.

## 2. O Método Lattice Boltzmann

Nos últimos anos, o método *Lattice Boltzmann* tem chamado a atenção da comunidade científica devido à sua facilidade de implementação e eficiência computacional. Especificamente na área de dinâmica de fluidos, o LBM tem sido utilizado pela facilidade de implementação de condições de fronteira e pela estabilidade numérica [7]. Este originou-se do *Lattice Gas Cellular Automata* (LGCA) o qual, apesar de suas vantagens, apresenta certas limitações pela sua natureza discreta. O LBM foi introduzido por [8], onde os autores mostram a vantagem de se estender a dinâmica booleana dos autômatos celulares para se trabalhar diretamente com valores numéricos reais representando probabilidades de presença de partículas.

No LBM, o domínio de interesse é discretizado em uma malha e o fluido é considerado uma coleção de partículas. Tais partículas se movem em intervalos discretos de tempo, com uma velocidade apontando ao longo de uma das direções da malha. Além disso, partículas colidem uma com as outras e quantidades físicas de interesse associadas com os nós da malha são atualizadas em cada instante de tempo. O cálculo em cada nó é dependente das propriedades inerentes ao próprio nó bem como aos nós vizinhos no instante de tempo anterior [7, 6].

A dinâmica deste método é governada pela equação de *Boltzmann*:

$$f_i(\vec{x} + \Delta x \vec{c}_i, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(f), i = 1, \dots, z, \quad (1)$$

onde  $f_i$  é a função de distribuição,  $\vec{x}$  é o nó da malha,  $\vec{c}_i$  é uma das direções,  $\Delta x$  é o espaçamento da malha,  $\Delta t$  é o passo de tempo,  $\Omega_i(f)$  é o termo de colisão, e  $z$  é o número de direções da malha.

A equação (1) se divide em dois passos principais: espalhamento e colisão. Estes dois passos podem ser computados separadamente, através das equações:

$$f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x} - \Delta x \vec{c}_i, t), \quad (2)$$

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = (1 - \tau)f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) + \tau f_i^{eq}(\rho, \vec{u}). \quad (3)$$

No trabalho [9], os autores propuseram linearizar o termo de colisão em torno de sua solução local de equilíbrio:

$$\Omega_i(f) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\rho, \vec{u})), \quad (4)$$

onde  $\tau$  é o termo de relaxamento temporal e  $f_i^{eq}$  é a distribuição de equilíbrio de partículas que é dependente da densidade macroscópica ( $\rho$ ) e velocidade ( $\vec{u}$ ). O parâmetro  $\tau$  está relacionado com fenômenos difusivos inerentes ao problema, no caso em questão com a viscosidade do fluido [6].

A equação geral da função de equilíbrio é dada por [7]:

$$f_i^{eq} = \rho \omega_i \left[ 1 + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{2c_s^4} - \frac{(\vec{u})^2}{2c_s^2} \right], \quad (5)$$

onde  $\omega_i$  são fatores de peso e  $c_s^2$  é a velocidade do som, a qual depende da malha.

Existem diferentes modelos LBM para soluções numéricas de diversos cenários envolvendo fluidos. Cada modelo tem uma discretização de malha específica. Os modelos LBM são usualmente denotados por  $D_x Q_y$ , onde  $x$  e  $y$  correspondem ao número da dimensão e número de direções de velocidades microscópicas ( $\vec{c}_i$ ) respectivamente. Neste trabalho, a proposta é implementar um modelo do LBM tridimensional, conhecido como D3Q19. Este modelo tem 18 possibilidades de velocidades não nulas, como ilustra a Figura 1. Aqui a velocidade  $\vec{c}_0$  está relacionada à partícula de repouso.

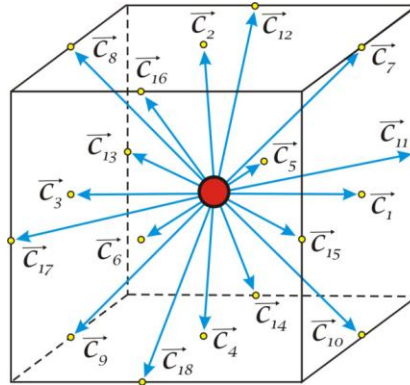


Figura 1. O modelo D3Q19.

Os fatores de peso e a velocidade do som para o modelo D3Q19 são dados por:

$$c_s^2 = \frac{1}{3}, \quad \omega_0 = \frac{1}{3}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{18}, \quad \omega_{7-18} = \frac{1}{36}.$$

Substituindo a equação 6 em 5, nos dá a função de equilíbrio para o modelo D3Q19:

$$f_i^{eq} = \omega_i \left[ \rho + \frac{3(\vec{c}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \cdot \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{v^4} - \frac{3(\vec{u})^2}{2v^2} \right], \quad (7)$$

onde  $i = 0, \dots, 18$ . Nosso interesse reside na escala macroscópica, onde as quantidades físicas de interesse demonstram um comportamento contínuo. Desta forma, a densidade ( $\rho$ ) e velocidade ( $\vec{u}$ ) macroscópicas são dadas por:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=0}^{18} f_i(\vec{x}, t), \quad (8)$$

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \sum_{i=0}^{18} f_i(\vec{x}, t) \vec{c}_i. \quad (9)$$

Os passos principais da simulação podem ser resumidos a seguir:

**Algoritmo I: Modelo D3Q19**

**1. Inicialização ( $t = 0$ ):**

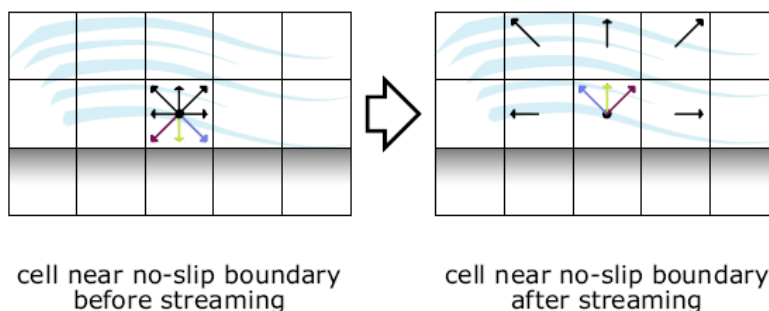
- (a)  $\rho(\vec{x}, 0) = 1.0$
- (b)  $\vec{u}(\vec{x}, 0) = (0, 0, 0)$
- (c)  $f_i(\vec{x}, 0) = f_i^{eq}(\rho, \vec{u})$

**2. Laço Principal ( $t = 1$  até  $t = max$ ):**

- (a) Espalhamento (2)
- (b) Atualização macroscópica da densidade (8) e velocidade (9)
- (c) Colisão (3)

Condições de fronteira são fundamentais para simulações de fluidos. A condição de fronteira padrão do LBM é a *No-Slip* [10], ou seja, perto da fronteira o fluido não se move. As células de fluido perto da fronteira recebem valores das funções de distribuição das direções opostas.

O processo de reflexão é ilustrado na Figura 2. Para a implementação, as células de fluido e de fronteira precisam ser identificadas. Assim, no passo de espalhamento, o algoritmo deve verificar o tipo da célula: caso a célula vizinha seja uma fronteira, a célula atual recebe a função de distribuição oposta, no lugar do espalhamento padrão dado pela equação (2).



**Figura 2. Células de fronteira refletem as funções de distribuição advindas das células de fluido.**  
(Fonte: [10])

### 3. O Sistema Computacional

O software desenvolvido incorpora o LBM D3Q19, segundo os passos do Algoritmo I, com técnicas de visualização científica. Este foi desenvolvido na linguagem C/C++, utilizando o paradigma da orientação a objetos. A visualização dos campos gerados foi implementada utilizando a biblioteca gráfica OpenGL. A GLUT foi utilizada para criar a interface gráfica e permitir a comunicação entre OpenGL e a janela da aplicação, como mostrado na Figura 3.

A modelagem baseada em sketching é uma área de pesquisa que estuda técnicas de modelagem intuitivas. Basicamente, sistemas baseado em sketching devem fornecer um ambiente intuitivo e confortável onde o usuário pode desenhar livremente a informação desejada. Desta forma, usando o desenho como dado de entrada, o sistema deve interpretar esses dados e encontrar uma representação aproximada ou decidir por uma ação correspondente [12].

O processo de sketching começa com o desenho feito pelo usuário através de algum dispositivo de entrada, como mouse, por exemplo. Este desenho é então amostrado e, a partir dele é são computadas informações como posição e velocidade. O tipo de informação que pode ser derivado a partir dos dados e entrada depende do dispositivo de entrada e dos modelos utilizados [17].

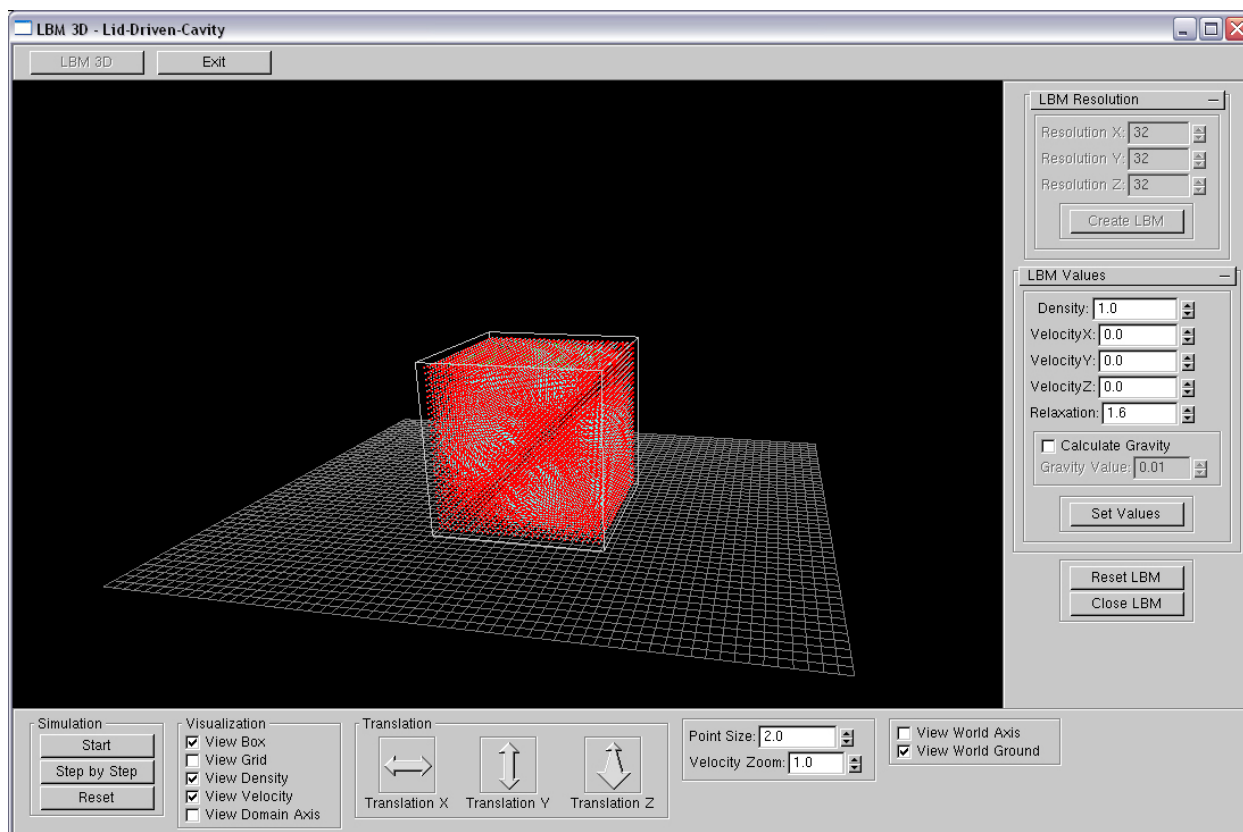


Figura 3. Janela principal do software.

O objetivo deste trabalho é definir uma metodologia de aquisição de desenhos realizados pelo usuário como dados de entrada, representando o fluxo que o fluido deverá seguir. Essas informações deverão ser usadas como configuração inicial para o modelo de simulação computacional de fluido. Para o presente trabalho, o usuário irá desenhar trajetórias indicando o caminho que o fluido deve fazer. O dado de entrada será armazenado como uma sequência de pontos.

As trajetórias desenhadas pelo usuário serão interpretadas como linhas de corrente do fluido e seu campo vetorial tangente correspondente é computado e mapeado na malha do LBM. Uma maneira simples e rápida de se computar o campo tangente é relacionar para cada posição de cada ponto da sequência o vetor que liga esse ponto com o ponto seguinte. Desta forma, projeta-se esses pontos sobre a malha do LBM e em cada nó da malha correspondente a uma amostra da sequência define-se como sua velocidade inicial o vetor tangente correspondente. Para os demais nós da malha define-se sua velocidade inicial como sendo nula. O campo obtido é utilizado como entrada para uma técnica iterativa, denominada GVF [19], a qual é baseada em uma equação de reação-difusão. O campo obtido tem suporte estendido para regiões distantes das linhas de corrente iniciais traçadas pelo usuário. Em seguida, utiliza-se o campo obtido para inicializar o LBM.

#### 4. Resultados

Nesta seção serão mostrados alguns experimentos realizados com o modelo bidimensional do LBM. A proposta é estender essa metodologia para o modelo tridimensional descrito na seção 2. Os experimentos foram realizados em um domínio  $100 \times 100$ . A Figura 4(a) mostra um rascunho realizado pelo usuário sobre o domínio de simulação, e a Figura 4(b) o campo tangente computado sobre os dados amostrados. A região circular representa uma região de obstáculo dentro do domínio de simulação. A Figura 5 mostra resultados obtidos nas simulações subsequentes.

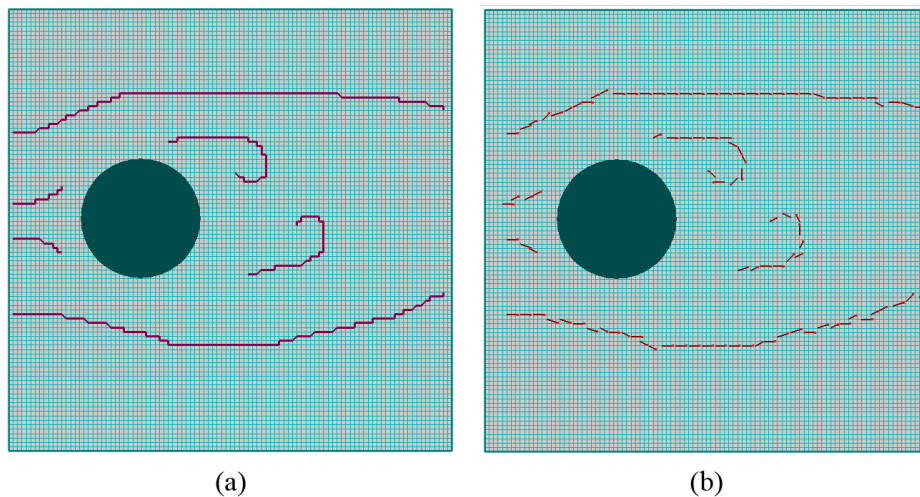
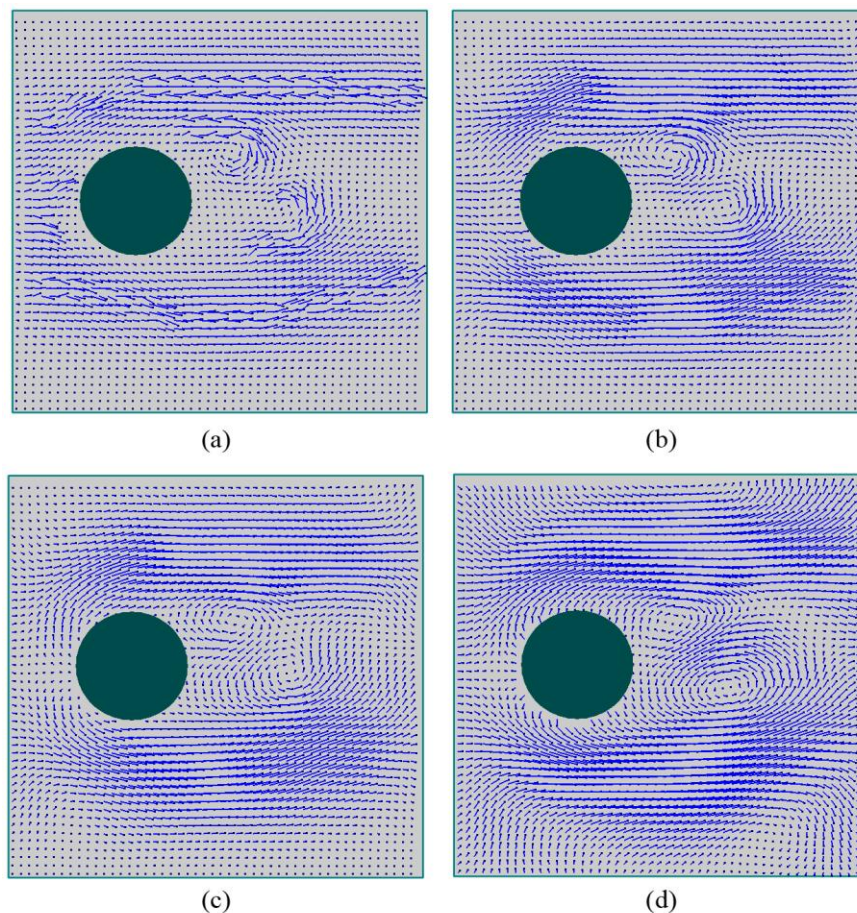


Figura 4. (a) Rascunho realizado pelo usuário, (b) campo tangente usado como configuração inicial do LBM.





**Figura 5. Resultados da simulação em 4 instantes distintos na evolução temporal.**

## 5. Conclusão

Neste trabalho apresentamos um simulador de fluidos tridimensional baseado no modelo LBM D3Q19. O simulador está integrado a um sistema que foi desenvolvido utilizando as interfaces gráficas da GLUI em conjunto com técnicas de visualização simples implementadas através do OpenGL. Apresentamos também uma metodologia de aquisição de dados através de desenhos livres feitos pelo usuário. Esses dados são interpretados como configuração inicial para um modelo de simulação de fluidos. Apresentamos um resultado através do modelo 2D do LBM para teste da metodologia. O trabalho se propõe a aplicar esta metodologia ao modelo 3D.

## Referências

- [1] Matthias Müller, David Charypar, and Markus Gross.  
Particle based fluid simulation for interactive applications.  
In SCA 03: Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/ Eurographics symposium on Computer animation, Aire-la-Ville, Switzerland, 2003. Eurographics Association.
- [2] Matthias Müller, Simon Schim, and Matthias Teschner.  
Interactive blood simulation for virtual surgery based on smoothed particle hydrodynamics.  
Technol. Health Care, 12(1):25–31, 2004.
- [3] Patrick Witting.  
Computational fluid dynamics in a traditional animation environment.  
In SIGGRAPH 99: Proceedings of the 26th annual conference on Computer graphics and interactive techniques, pages 129–136, New York, NY, USA, 1999.  
ACM Press/Addison-Wesley Publishing Co.
- [4] Andreas Monitzer.  
Fluid simulation on the GPU with complex obstacles using the Lattice Boltzmann Method.  
Master's thesis, Institute of Computer Graphics and Algorithms,  
Vienna University of Technology, July 2008.
- [5] Jos Stam.  
Flows on surfaces of arbitrary topology.  
In SIGGRAPH, pages 724–731. ACM, 2003.
- [6] Shiyi Chen and Gary D. Doolen.  
Lattice Boltzmann method for fluid flows.  
Annual Review of Fluid Mechanics, 30:329–364, 1998.
- [7] Bastien Chopard, Pascal Luthi, and Alexandre Masselot.  
Cellular automata and Lattice Boltzmann techniques:  
An approach to model and simulate complex systems.  
In Advances in Physics, 1998.
- [8] Guy R. McNamara and Gianluigi Zanetti.  
Use of the Boltzmann Equation to simulate Lattice Gas Automata.  
Phys. Rev. Lett., 61(20):2332–2335, November 1988.
- [9] F. J. Higuera, J. Jimenez, and S. Succi.  
Boltzmann approach to Lattice Gas Simulations.  
Europhys. Lett. 9, 1989.
- [10] Nils Thürey.  
A Lattice Boltzmann Method for single-phase free surface flows in 3D.  
Master's thesis, Dept. of Computer Science 10, University of Erlangen-Nuremberg, 2003.
- [11] The Visualization Toolkit, Third Edition. Kitware Inc.
- [12] Cook, M. T. and Agah, A.  
A survey of sketch-based 3-d modeling techniques.  
Interact. Comput. 21:201-211, 2009
- [13] Sutherland, I. E.  
Sketchpad – a man machine graphical communication system.

- In Proceedings of the SHARE design automation workshop, 1964
- [14] Zeleznik, R. C., Herndon, K. P., and Hughes, J. F.  
Sketch: an interface for sketching 3d scenes.  
In ACM SIGGRAPH 2006 Courses
- [15] Varley, P. A. C., Martin, R. R., and Suzuki, H.  
Can machines interpret line drawings?  
In EUROGRAPHICS Workshop on Sketch-Based Interfaces and Modeling, 2004
- [16] Igarashi, T., Matsuoka, S., and Tanaka, H.  
Teddy: a sketching interface for 3d freeform desing.  
In ACM SIGGRAPH 2007
- [17] Cruz, L., and Velho, L.  
Asketch on sketch-based interfaces and modeling.  
In SIBGRAPI Tutorials, 2010
- [18] Judice, Sicilia and Maywom, José Guilherme and Azevedo, Pedro and Giraldi, Gilson.  
Perspectives for Sketching Fluids Using Sketch-Based Techniques and Gradient Vector Flow for 3D LBM Initialization.  
In Computer Vision, Imaging and Computer Graphics. Theory and Application, Communications in Computer and Information Science, Springer Berlin Heidelberg, Vol 359, pages 127-141, 2013
- [19] C. Xu and J. Prince.  
Snakes, Shapes, and Gradient Vector Flow .  
IEEE Trans. on Image Processing, 359-369, March, 1998.

## **Análise estrutural e de diversificação funcional da álcool desidrogenase em peixes**

JB Maciel<sup>1</sup>, ATR Vasconcelos<sup>1</sup>, CE Thompson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Bioinformática, Laboratório Nacional de Computação Científica, RJ

A enzima álcool desidrogenase pertence à superfamília de desidrogenases e redutases de cadeia média, caracterizadas em animais, plantas, fungos, protozoários e bactérias. Estão relacionadas, em diferentes organismos, a etanol, noradrenalina, dopamina, serotonina, metabolismo de ácidos biliares e outras vias metabólicas importantes. No entanto, o processo de diversificação funcional que ocorreu nestas enzimas no decurso da evolução não é bem conhecido.

No presente estudo, foi estabelecida a estrutura tridimensional de várias álcool desidrogenases de peixes que não possuem estrutura determinada por cristalografia disponível em bancos de dados.

Ao todo, 24 proteínas foram modeladas pelo método de modelagem molecular comparativa por homologia. No geral, todos os modelos finais apresentam excelentes resultados quando avaliamos sua qualidade estereoquímica e seu ambiente químico. Tais resultados revelam um alto grau de confiabilidade dos modelos. Trabalhos futuros envolvendo técnicas, como por exemplo de dinâmica molecular, podem ser úteis para entender o impacto de mutações na função dessa proteína.

Instituições de fomento: CNPq, FAPERJ.

---

## Desenvolvimento de um Atlas Anatômico do Corpo Humano Utilizando WebGL

Leonardo Cardia da Cruz<sup>1</sup> Jauvane C. De Oliveira<sup>2</sup>

Palavras Chave: WebGL, XTK, visualização, atlas.

Neste trabalho é apresentado um projeto em desenvolvimento de um atlas do corpo humano voltado para a web oferecendo facilidades de acesso, informações e uma visualização interativa da anatomia do corpo. A construção desse atlas foi feito utilizando uma nova tecnologia web chamada WebGL. Os browsers mais conhecidos e utilizados hoje em dia, adotaram por possuir o WebGL já embutido fornecendo assim com que o seu uso seja feito amplamente por todos. O trabalho com WebGL se torna mais fácil pois com ele não precisa fazer nenhuma instalação de pluguins ou atualizações.

O projeto se baseia em uma visualização científica com informações futuramente reais, e para isso foi utilizado a ferramenta XTK que é uma biblioteca em JavaScript que engloba função do WebGL de alto nível tornando o código de baixo nível oculto e permite uma agradável interação com imagens médicas através do WebGL. A XTK está voltada para visualização científica trazendo consigo a vários formatos de arquivos científicos facilitando assim na hora de trabalhar com esses tipos de formatos, pois não há necessidade de convertê-los a um formato mais padronizado.

O usuário poderá visualizar e interagir com o objeto através de menus que aparecerá na tela do seu computador. Outro objetivo interessante é que o MACC vem fazendo suas pesquisas e testes voltadas para medicina, a partir disto mesma, o MACC vem obtendo os seus resultados e à um interesse de disponibilizar essas informações para um usuário comum.

### Bibliografia

1. T. Parisi. *WebGL Up and Running*. O'Reilly, Aug 2012.
2. Google body: 3d human anatomy in the browser. SIGGRAPH, August 7, 2011.
3. Haehn;N.Rannou;B.Ahtam;E.Grant;R.Pienaar. *Neuroimaging in the browser using the x toolkit*. In *Neuroinformatics*, September 2012.

## Estudos de Modelagem Molecular de Inibidores da Enzima MAPKp38 $\alpha$ através da Estratégia de *Ensemble Docking*

Lucas de A. Vizani<sup>1</sup>, Isabella A. Guedes<sup>1</sup>, Laurent E. Dardenne<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica

Palavras-chave: anti-inflamatórios, MAPKp38 $\alpha$ , modelagem molecular, atracamento molecular, *ensemble docking*.

### Resumo

As proteínas cinases são responsáveis pela regulação de diversos mecanismos biológicos, fosforilando substratos e diversas proteínas do organismo, desempenhando um importante papel na regulação das funções biológicas. O descontrole no processo de fosforilação dessa família de proteínas está associado com diversas doenças, como câncer, diabetes e artrite reumatoide. Diversos estudos avaliam o uso de proteínas cinases como alvos moleculares para o tratamento de doenças inflamatórias crônicas. A proteína MAPKp38 $\alpha$  tem sido apontada como um dos potenciais alvos para o desenvolvimento de fármacos anti-inflamatórios, uma vez que sua inibição está diretamente relacionada com o bloqueio da síntese dos mediadores inflamatórios TNF- $\alpha$  e IL-1, reduzindo efetivamente a inflamação em testes *in vivo*<sup>1-3</sup>.

Atualmente, existem diversas estruturas experimentais da enzima MAPKp38 $\alpha$  determinadas experimentalmente no banco de dados *Protein Data Bank*. Entretanto, como característica marcante da família de proteínas cinases, observa-se uma grande variação conformacional no sítio de ligação do cofator ATP (sítio de interesse para o desenvolvimento de inibidores da MAPKp38 $\alpha$ ). Deste modo, a inclusão do tratamento da flexibilidade da proteína é essencial para se obter sucesso em estudos de atracamento molecular<sup>4</sup>. Neste trabalho foi utilizada a técnica de *ensemble docking*, *i.e.* atracamento molecular realizado em um conjunto de conformações da enzima alvo simulando implicitamente a flexibilidade da molécula receptora. O conjunto com cinco estruturas representativas da MAPKp38 $\alpha$  (PDB IDs 1A9U, 1M7Q, 3DT1, 1YQJ e 1WBS) foi selecionado a partir de estudo prévio<sup>5</sup> de *ensemble docking*.

Este trabalho tem como principal objetivo prever o modo de ligação de compostos previamente sintetizados pelo grupo experimental LASSBio/UFRJ, de forma a guiar futuras otimizações moleculares visando o aumento de potência e seletividade dos compostos estudados. Estudos de *ensemble docking* de inibidores descritos na literatura foram realizados para obter um melhor entendimento das interações entre proteína e ligante que possam ser importantes para a atividade inibitória. Posteriormente, compostos idealizados e outros já sintetizados foram submetidos a estudos de *ensemble docking* para prever seu modo de ligação e guiar as etapas de desenho racional de inibidores da enzima MAPKp38 $\alpha$ .

A análise dos resultados do atracamento molecular de inibidores potentes descritos na literatura e dos modos de ligação encontrados para os compostos desenvolvidos pelo grupo LASSBio indica que importantes regiões do sítio de ligação da MAPKp38 $\alpha$  podem ser melhor exploradas de forma a aumentar a potência e seletividade dos compostos estudados . **Bibliografia**

1. Saklatvala, J. The p38 MAP kinase pathway as a therapeutic target in inflammatory disease. *Curr. Opin. Pharmacol.* **4**, 372–377 (2004).
2. Gill, A. L. *et al.* Identification of novel p38alpha MAP kinase inhibitors using fragment-based lead generation. *J. Med. Chem.* **48**, 414–426 (2005).
3. Alten, R. E. *et al.* Efficacy and safety of pamapimod in patients with active rheumatoid arthritis receiving stable methotrexate therapy. *Ann. Rheum. Dis.* **69**, 364–367 (2010).
4. Flick, J., Tristram, F. & Wenzel, W. Modeling loop backbone flexibility in receptor-ligand docking simulations. *J. Comput. Chem.* **33**, 2504–2515 (2012).
5. Isabella Alvim Guedes. Estudo Estrutural e de Propriedades de Reconhecimento Receptor-Ligante dos Alvos IKK1, IKK2 e MAPKp38 Utilizando Técnicas de Modelagem Molecular. (2011).

## DERIVADA TOPOLÓGICA NA MECÂNICA DA FRATURA

Bolsista: Luiz Felipe N. Soares<sup>1</sup>   Orientador: Antônio André Novotny<sup>2</sup>

Palavras Chave: *Derivada topológica, mecânica da fratura, nucleação.*

### RESUMO

A análise de sensibilidade topológica fornece um desenvolvimento assintótico para um funcional de forma adotado, cujo termo principal é um campo escalar, denominado derivada topológica, que mede a sensibilidade do referido funcional quando uma perturbação singular (furo, inclusão, termo-fonte, etc) infinitesimal é introduzida em um ponto arbitrário do domínio. A derivada topológica tem sido aplicada com sucesso, portanto, no contexto de otimização topológica, problemas inversos e processamento de imagens. Assim, a análise de sensibilidade topológica é reconhecida como uma importante área de pesquisa que vem se desenvolvendo rapidamente nos últimos anos. Atualmente trabalha-se no desenvolvimento teórico e aplicações da análise de sensibilidade topológica de primeira e segunda ordem nas três grandes áreas ora mencionadas. No entanto, cabe mencionar que de acordo com a literatura acerca da derivada topológica, existem poucos trabalhos orientados sobre modelagem mecânica de fenômenos dissipativos. Sendo assim, mediante o projeto de pesquisa objetiva-se dar continuidade aos estudos da análise de sensibilidade topológica através do desenvolvimento teórico e aplicações da derivada topológica na mecânica da fratura. Em particular, utilizando o modelo de Griffith juntamente com a derivada topológica associada, foi proposto um algoritmo de nucleação de fratura frágil em elasticidade linear bidimensional. Através de um simples cálculo, a derivada topológica fornece o ponto crítico onde a fratura ocorrerá, bem como a sua direção de propagação. Basta agora introduzir uma relação constitutiva para obter a carga crítica de nucleação da fissura. Como resultado final, objetiva-se propor um método simples capaz de prever todo o processo de nucleação de fratura frágil, a saber: ponto de nucleação, carga crítica e direção de propagação.

### **Bibliografia**

- [1] A.A. Novotny & J. Sokolowski. *Topological Derivatives in Shape Optimization*. Interaction of Mechanics and Mathematics Series. Springer, 2013. 434p.
- [2] M.E. Gurtin, E. Fried & L. Anand. *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*. Cambridge University Press, 2010.
- [3] N. Van Goethem and A.A. Novotny. Crack Nucleation Sensitivity Analysis. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 33(16):1978–1994, 2010.

---

<sup>1</sup> Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ (luizfnsoares@gmail.com)

<sup>2</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica/Coordenação de Matemática Aplicada – LNCC/CMA – MCTI (novotny@lncc.br)



## Avaliação e Parâmetros da Otimização por Enxame de Partículas

Luis Henrique Carvalho do Nascimento<sup>1</sup> <sup>2</sup>, Eduardo Krempser<sup>1</sup> <sup>2</sup> e Hélio J. C. Barbosa<sup>1</sup> <sup>3</sup>  
[lhcascimento@gmail.com](mailto:lhcascimento@gmail.com), {Krempser, [hcbm](mailto:hcbm@lncc.br)}@lncc.br

<sup>1</sup>Laboratório Nacional de Computação Científica

<sup>2</sup>Faculdade de Educação Tecnológica do Estado do Rio de Janeiro

<sup>3</sup>Universidade Federal de Juiz de Fora

Atualmente o uso de meta-heurísticas sendo utilizada por sua simplicidade de implementação e por abranger uma vasta gama de problemas com os mais diversos níveis de complexidade. Neste trabalho estudamos a técnica de otimização denominada Otimização por Enxame de Partículas, *Particle Swarm Optimization*, (PSO). A qual, assim como ocorre em grande parte das meta-heurísticas, a qualidade de aplicação dessa técnica deve definir alguns parâmetros que influenciam diretamente no desempenho do algoritmo, como a inércia que impede que uma partícula mude de direção instantaneamente, e a capacidade de aprendizado coletivo e individual da partícula. Esses parâmetros foram avaliados por um conjunto de testes amplamente utilizado na literatura e com o objetivo de observar como o algoritmo se comporta com cada grupo de parâmetro em diferentes situações a ele apresentado.

Além disso, um estudo mais amplo a respeito da técnica foi feito avaliando algoritmos que adaptam seus parâmetros no decorrer da execução, buscando assim uma ferramenta mais eficaz na aplicada em diferentes classes de problemas. Algoritmos que adaptam a inércia por exemplo, geralmente permitem que a partícula permaneça mais livre no início da execução do programa e tornam-se mais restritivas com o decorrer da busca.

As partículas por sua vez, não dependem apenas da inércia para evoluírem. Seu aprendizado se dá por dois parâmetros conhecidos como aceleração cognitiva e aceleração social, que dizem o quanto uma partícula é influenciada para seguir o aprendizado do enxame e o quanto ela deve buscar por si própria o ponto ótimo. (Sendo assim, se uma execução mais social, ou seja, que dê mais importância para o aprendizado do enxame, pode levar ao fracasso de todo o grupo caso ele se perca.) Com isso, fica claro que a definição desses parâmetros compromete o resultado final da técnica.

Além desses tipos de adaptação, existem algoritmos que atualizam a velocidade das partículas de maneiras diferentes de acordo com o que as partículas aprenderam, bem como a inclusão de novos parâmetros necessários ao controle da adaptação. Portanto, este trabalho visa avaliar diversas propostas em torno da definição dos parâmetros do PSO em um conjunto de problemas de otimização sem restrições, visando identificar as propostas mais adequadas para diferentes classes de problemas.

**ESTUDO DA INTERAÇÃO ENTRE PEIXES NO RESERVATÓRIO DA USINA HIDRELÉTRICA DE SANTA CLARA****Marcelo Alves Moreira****Jaqueline Maria da Silva****Maurício Kritz****Instituto de Ciência, Engenharia e Tecnologia – UFJVM**

Palavras chaves: peixes, água, interação.

A Bacia Hidrográfica do Rio Mucuri apresenta uma área de drenagem de 15.100 km<sup>2</sup>. É caracterizada por um regime hidrológico de clima semi-úmido com duas estações, seca e chuvosa bem definidas. O período de seca chega a durar de quatro a cinco meses por ano [3]. A Usina Hidrelétrica de Santa Clara (U.H.S.C.) foi construída em 1999 na Bacia Hidrográfica do Rio Mucuri no município de Nanuque-MG. Após a finalização da construção do lago da U.H.S.C, verificou-se uma alteração do regime hidrológico do rio Mucuri [3].

A alteração verificada pode ser prejudicial a toda biodiversidade dos peixes existentes nesta bacia hidrográfica, visto que afeta a reprodução dos peixes. O barramento efetuado pela construção do lago da U.H.S.C torna-se um obstáculo para as espécies de peixes que necessitam subir o rio a procura de águas mais calmas para a sua reprodução. Para atenuar os impactos, a U.H.S.C. implantou um mecanismo de transposição de peixes, que entrou em funcionamento em novembro de 2003.

Pesquisadores da UFLA elaboraram um estudo sobre a transposição de peixes e ocorreram durante quatro meses seis ciclos diários de transposição de peixes (atração, captura, contagem e liberação), através dos resultados obtidos, realizamos um estudo sobre a interação entre as espécies de peixes presente na a U.H.S.C.

Este estudo visa uma melhor compreensão da dinâmica de interação das espécies estudadas, visto que a Bacia Hidrográfica do Rio Mucuri possui uma das maiores densidades de espécies de peixes por espelho d'água (número de peixes/área) já pesquisado.

Para compreendermos melhor a dinâmica da interação entre as espécies estudadas analisamos o modelo de equações diferenciais de predação de Lotka-Volterra. O modelo de Lotka-Volterra é criticado por ser um sistema conservativo, mas marcou fortemente os estudos em populações em Ecologia Teórica, uma vez que tenta abordar comunidades e não apenas uma população ou uma espécie. Apesar disso, quando tratamos de peixes presa-predadores a utilização do modelo não contempla os efeitos da variação da água na dinâmica de interação entre os peixes. Apresentamos um estudo que visa analisar tais efeitos [1, 2].

O aumento do volume de água dificulta a captura da presa pelo predador. Quando ocorre a diminuição do volume de água, favorece a captura de presas pelo predador. Assim, é possível propor uma alteração no modelo Lotka-Volterra visando a inclusão da variação do nível de água no sistema de equações diferenciais.

O tradicional modelo Lotka-Volterra foi implementado em código computacional usando a linguagem de programação C e foram inseridas as densidades populacionais das espécies Curimatá, e Piau-branco que foram consideradas como presas e o Lambari, considerado como predador. Através dos resultados observa-se que ocorre equilíbrio na coexistência entre o Lambari e a Curimatá, visto que este modelo não considera a influência da água na interação entre as espécies. No modelo proposto, a inserção foi efetuada nos mesmos moldes do modelo Lotka-Volterra, com a ressalva que foi acrescida a influência da variação da água na interação entre as espécies de peixes. Os resultados obtidos através da simulação do modelo considerando a influência da água corroboram a perspectiva de que a variação da água exerce grande influência na quantidade de indivíduos no lago da U.H.S.C., onde verifica-se que o Lambari é um forte predador do Piau-branco.

Os resultados confirmam a premissa de que a água exerce forte influência na interação entre os peixes. É possível constatar que a variação do nível de água está diretamente associada com a diminuição das espécies de peixes presentes no lago da U.H.S.C.. É observado que as populações de peixes presas e predadores tendem a apresentar picos nas quantidades de indivíduos das populações, o que ocorre de forma periódica. A diminuição/aumento do volume de água produz um forte impacto na dinâmica do sistema, pois modifica o equilíbrio ecológico das populações de peixes presas e predadores. Essa perturbação provocada pela variação do nível de água é observada através de uma diminuição nas amplitudes dos picos nas quantidades de indivíduos das populações.

### Referências

- [1] Silva J.M., Modelos para a Dinâmica de Vegetação em Áreas Alagáveis Amazônica. Tese de Doutorado, LNCC. Petrópolis - RJ, 2011.
- [2] Boyce W.E.; DiPrima R.C., Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno, LTC, 2006.
- [3] Pompeu P.S.; Martinez C.B., Variações temporais na passagem de peixes pelo elevador da Usina Hidrelétrica de Santa Clara, rio Mucuri, leste brasileiro. Rev. Bras. Zool. vol.23 no.2 Curitiba Junho 2006.

**Período:** 01/05/2013 – 16/08/2013

**Bolsista:** Mirian dos Santos Portela

**Sala:** 1A35

**Ramal:** 6183

Análise de grandes volumes de dados

### **Introdução**

As atividades se concentraram na instalação e experimento de estratégias para o armazenamento e processamento de dados da astronomia.

Nesta primeira fase, exploramos os coeficientes de banco de dados Qserv e Postgresql com base de dados do catálogo da astronomia, e iniciamos alguns testes com o sistema hadoop para processamento de processos de análise de grandes volumes de dados em paralelo.

Nosso primeiro resultado está sendo revisado e avalia o impacto da distribuição do catálogo e a adoção da estrutura de índice Q3C.

### **Descrição das Atividades**

- Instalação do banco de dados Qserv de uso da colaboração com o grupo de astronomia do projeto LSST
- Instalação e experimento com o framework hadoop
- Avaliação do projeto de particionamento da tabela catálogo do banco de dados da astronomia

## Rendering Realista via Software Paraview

Pedro Henrique Vieira de Oliveira Azevedo, Gastão Florêncio Miranda Junior, Gilson Antonio Giraldi  
{pedrovoa,gastao,gilson}@lncc.br

### Introdução

O problema mais básico da computação gráfica é transformar dados em imagens. O processo utilizado para a produção de imagens se chama rendering, o que envolve tanto conceitos físicos como de percepção visual.

Um elemento fundamental nas técnicas de rendering é o modelo de iluminação. Segundo [1], os modelos de iluminação podem ser agrupados como mostra a Figura 1.

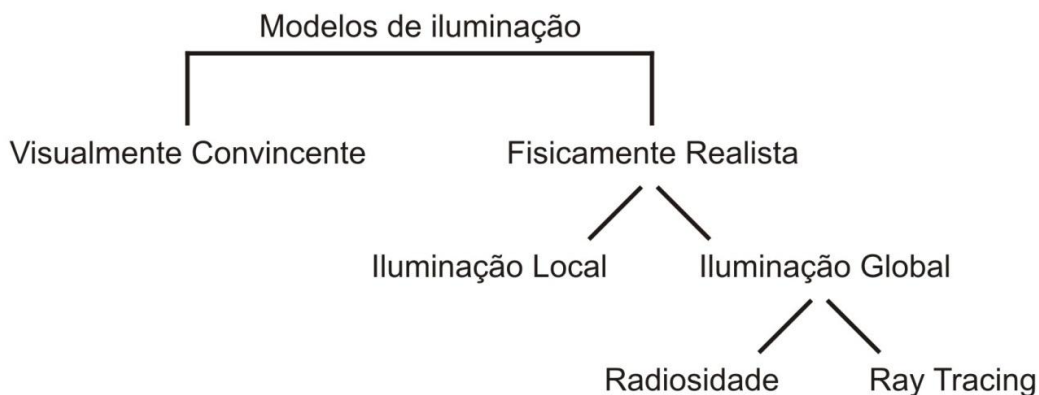


Figura 6 - Classificação dos modelos de iluminação. (Fonte: [1] p. 72)

As técnicas visualmente convincentes utilizam métodos heurísticos para a geração de imagens aparentemente realistas, não sendo necessário se basear nas leis da física. Em contrapartida, as técnicas fisicamente realistas buscam simular a interação da luz com os objetos da cena através das leis da física. Os modelos de iluminação local utilizam apenas a luz emitida pelas fontes primárias e as propriedades da superfície iluminada para calcular a intensidade de luz refletida. Estes são os modelos usualmente empregados nas técnicas de visualização científica.

No caso dos modelos de iluminação global são consideradas também fontes de luz secundárias [6], permitindo, portanto a geração de cenas com efeitos visuais foto-realistas. Os modelos de iluminação global citados na Figura 1 levam em conta todo o tipo de interação luminosa que ocorre em uma cena do mundo real. Proposto por [5], o algoritmo de **Radiosidade** tem origem nos métodos fundamentais de transferência de calor. A radiosidade é definida como sendo a energia por unidade de tempo e área em cada ponto dos objetos em cena, onde a energia luminosa incidente em uma superfície é refletida com igual intensidade em todas as direções.

O *Ray Tracing* foi desenvolvido em 1968 como um algoritmo para simulação de trajetórias de projéteis balísticos e partículas nucleares [3]. A primeira implementação para computação gráfica foi desenvolvida por [2], como uma ferramenta para o cálculo de sombras. A referência [7] propôs um algoritmo *ray tracing* para o cálculo de sombras, reflexões e refrações. Por sua simplicidade, muitos softwares de *rendering* atualmente são baseados em ray-tracing.

### Software ParaView

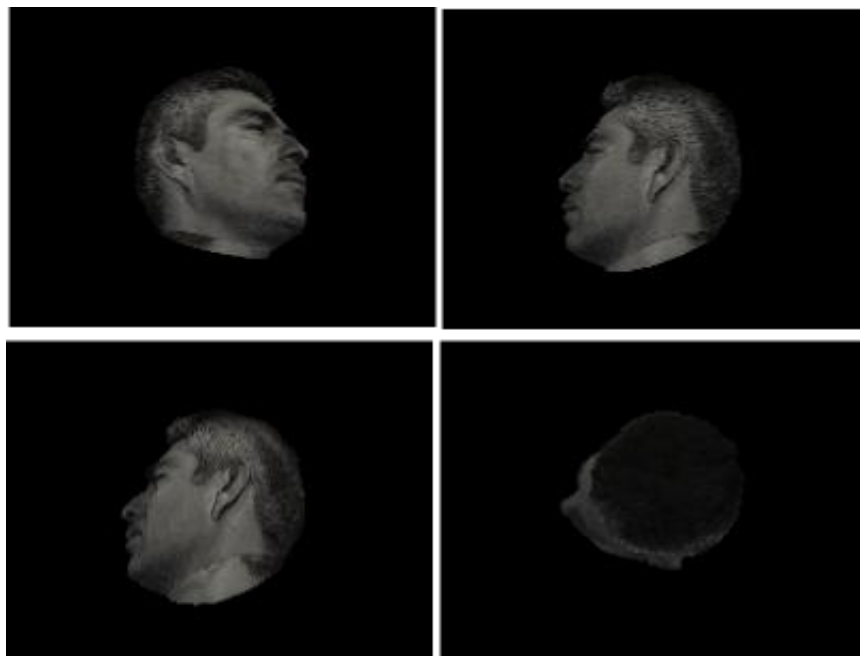
ParaView é uma aplicação para a visualização e análise de conjuntos de dados científicos. Este sistema tem implementado algumas das técnicas descritas acima, sendo portanto muito útil para o estudo e análise dos parâmetros envolvidos (<http://www.paraview.org>).

A interface gráfica do usuário (GUI) tem uma interface aberta, flexível e intuitiva que nos permite total controle, manipulação e processamento de dados de exibição. O processamento de dados e componentes de renderização do ParaView são construídos sobre uma arquitetura paralela modular e escalável de memória distribuída em que muitos processadores operam sincronicamente em diferentes partes dos dados.

### Visualização Científica Via ParaView

Com o objetivo de exercitar a utilização de algumas das técnicas de interesse, foi utilizado o software ParaView com uma aplicação de interesse voltada para a criação de um banco de imagens de face utilizando como base as imagens de um scanner 3D disponibilizado pela empresa Cyberware (<http://www.cyberware.com>).

Para a criação e edição deste banco de imagens, foram criados scripts em Python [4] para a captura das imagens em diferentes ângulos como podemos observar nas imagens da Figura 2.



**Figura 7 - Exemplos de imagens geradas utilizando o Paraview e scripts em Python.**

#### Considerações Finais

Neste trabalho foi montado um banco de imagens sintéticas a partir de um modelo 3D de uma cabeça. A ideia deste trabalho foi explorar a experiência do bolsista no sistema Paraview e paralelamente melhorar seu conhecimento na área de rendering com o intuito de evoluir na direção de técnicas avançadas de rendering de fluidos.

## Referências

- [1] Adabala, N. and Manohar, S. (2002). Techniques for realistic visualization of fluids: A survey. *Comput. Graph. Forum*, 21(1):65–81.
- [2] Appel, A. (1968). Some techniques for shading machine renderings of solids. In *Proceedings of the Spring Joint Computer Conference*, pages 37–45, New York, NY, USA. ACM.
- [3] Azevedo, E. and Conci, A. (2003). *Computação Gráfica: Teoria e Prática*. Elsevier Editora.
- [4] Hetland, M. L. (2008). *Beginning Python: From Novice to Professional*. Apress, Berkeley, USA, 2nd edition.
- [5] Goral, C. M., Torrance, K. E., Greenberg, D. P., and Battaile, B. (1984). Modeling the interaction of light between diffuse surfaces. *SIGGRAPH Comput. Graph.*, 18(3):213–222.
- [6] Rogers, D. F. (1998). *Procedural Elements for Computer Graphics*. Tom Casson, 2nd edition.
- [7] Whitted, T. (1980). An improved illumination model for shaded display. *Commun. ACM*, 23(6):343–349.



## ***Avaliação de Desempenho dos Algoritmos para Manipulação de Grafos em Ambientes Paralelos Híbridos CPU/GPU***

Rafael Nardes Moreira<sup>1</sup> Carla Osthoff Ferreira de Bastos<sup>2</sup> Frederico Luís Cabral<sup>3</sup>

Palavras Chave: Computação paralela, Algoritmos de Grafos, Computação em GPU, GPUGPU, CUDA.

As GPU's (*Graphics Processing Units*), inicialmente dispositivos de hardware com função restrita ao processamento de aplicações gráficas como, por exemplo, jogos e simuladores, representam atualmente um importante recurso para a computação paralela. A popularidade da computação em GPU's cresce mais rápido que nunca. Cerca de 600 Universidades em todo o mundo ensinam computação paralela com GPU's. Alguns dois mais poderosos supercomputadores do planeta dependem de GPU's para o avanço da ciência, incluindo o mais rápido deles (2013), o TITAN, situado no laboratório nacional de Oak Ridge, Tennessee, EUA, que conta com 18.688 placas gráficas Nvidia Tesla K20X.

A utilização de GPU's para fins de computação de propósito geral é conhecida como GPGPU (*General Purpose GPU*). Dotadas de centenas ou milhares de núcleos de processamento (ou *cores*), as GPU's atuais seguem o padrão *many-core* (muitos núcleos), o que já lhes confere uma característica que claramente as distingue das CPU's *multi-core* (múltiplos núcleos).

Existem muitas variações quanto à arquitetura dos sistemas de hardware destinados à computação paralela. Clusters de alto desempenho (já usados há muitos anos em computação científica), grades heterogêneas de computação paralela ou mesmo a simples presença de mais de uma CPU física em uma única máquina configuram diferentes ambientes adequados ao paralelismo. Entretanto, o foco central deste projeto é um estudo de desempenho utilizando GPGPU com a tecnologia Nvidia CUDA aplicada a algoritmos paralelos para manipulação de grafos.

Um grafo  $G = (V; E)$  é um conjunto  $V$  de vértices e um conjunto  $E$  de arestas entre eles. As operações fundamentais sobre grafos são a base para diversas aplicações em Ciência da Computação, e muitas delas apresentam alto custo computacional, tanto de tempo de execução, como de espaço de armazenamento, o que motiva busca por soluções paralelas eficientes.

O desenvolvimento deste trabalho é baseado na resolução computacional de diversos problemas clássicos envolvendo manipulação de grafos com a abordagem paralela GPGPU e na análise de desempenho das soluções apresentadas. O objetivo principal é evidenciar as potencialidades da computação paralela com GPU's para esse tipo de aplicação através de análises comparativas entre os algoritmos paralelos aqui propostos e os algoritmos seriais já amplamente abordados na literatura.

O grande desafio para a implementação de tais algoritmos em GPU é a forma de armazenamento da estrutura em memória, de forma a obter o ganho de desempenho desejado.

Dentre as formas de se representar grafos em memória, tem-se: (1) matrizes de adjacência; (2) listas de adjacência; (3) listas de adjacência compactas. A tecnologia CUDA oferece, ainda, a biblioteca CUSPARSE, para armazenamento de matrizes esparsas, que pode ser útil para a representação das matrizes de adjacência com economia de espaço em memória. A avaliação acerca da adequação dessas estratégias de representação a cada ambiente computacional é parte importante do trabalho.

Os problemas envolvendo grafos tratados no trabalho são: árvores geradoras de amplitude mínima; caminhos mais curtos de única origem; caminhos mais curtos de todos os pares; fluxo máximo; busca em largura; ST-connectivity; além do cálculo de centralidade de redes complexas com estratégias locais baseadas em volumes de nós.

Com respeito ao estado atual do projeto, além da pesquisa bibliográfica inicial acerca da tecnologia CUDA, foram implementadas: (1) uma solução em GPU para a busca em largura (*Breadth First Search*); (2) uma solução em GPU para o cálculo de centralidades de redes complexas via volume de nós.

Embora ainda não tenham sido feitas análises criteriosas de desempenho, já foi possível observar que, ao menos para o caso (1), a versão paralela em GPU conseguiu desempenho largamente superior à versão serial do mesmo algoritmo.

Para o caso (2), a implementação concluída ainda enfrenta problemas com o alto custo espacial das estruturas de representação devido a estratégia de paralelismo adotada. Mesmo com a utilização da representação dos grafos por listas de adjacência compactas, as quais são adequadas a implementações em GPU's como sugerido por (HARISH, P.; VINEET, V.; NARAYANAN, P. 2009), o uso de memória do device (GPU) é bastante alto nesse algoritmo em específico, o que torna a solução inviável para grafos densos.

Além do prosseguimento das implementações em GPU dos demais algoritmos clássicos de manipulação de grafos citados anteriormente, o próximos passos do projeto envolvem a busca por alternativas para as estruturas de dados utilizadas no problema do cálculo de centralidades em redes complexas e, possivelmente, alterações na estratégia de paralelismo adotada, de forma a obter uma utilização de memória mais comedida e que permita a aplicação desta solução em grafos/redes mais genéricas.

○

#### Bibliografia

1. CORMEN, Thomas H. et al.. Algoritmos: Teoria e Prática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2002.
2. GOLDBARG, Marco; GOLDBARG Elizabeth. Grafos: conceitos, algoritmos e aplicações. Rio de Janeiro: Elsevier, 2012.
3. HARISH, Pawan; VINEET, Vibhav; NARAYANAN, P.J. Large Graph Algorithms for Massively Multithreaded Architectures. International Institute of Information Technology, Hyderabad, INDIA, 2009.
4. KIRK, David; HWU, Wen-Mei. Programming Massively Parallel Processors: A Hands-on Approach. Waltham, MA, EUA: Morgan-Kaufmann, 2013.
5. SANDERS, Jason; KANDROT, Edward. CUDA by Example: An introduction to general-purpose GPU programming. Boston: Pearson, 2011.
6. NVIDIA Corporation, NVIDIA CUDAC Programming Guide, version 4.2, 2012, Disponível em: <[http://docs.nvidia.com/cuda/pdf/CUDA\\_C\\_Programming\\_Guide.pdf](http://docs.nvidia.com/cuda/pdf/CUDA_C_Programming_Guide.pdf)>

---

<sup>1</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCTI ([rafaelnm@lncc.br](mailto:rafaelnm@lncc.br))

<sup>2</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCTI ([osthoff@lncc.br](mailto:osthoff@lncc.br))

<sup>3</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MCTI ([fcabral@lncc.br](mailto:fcabral@lncc.br))

**IMPLEMENTAÇÃO DE MÓDULO DE CONTROLE DE DISPOSITIVO KINECT DE INTERAÇÃO DO USUÁRIO**Raquel Ellem Marcelino de Oliveira<sup>1</sup> Jauvane Cavalcante de Oliveira<sup>2</sup>

Palavras Chave: Kinect, Fisioterapia, Autorreabilitação.

A ocorrência de lesões sofridas em algumas das articulações do corpo não é incomum, seja por acidente, esforço repetitivo ou falta de condicionamento físico. Entretanto, o processo de reabilitação muitas vezes é lento e cansativo, tornando inviável a finalização do tratamento para alguns pacientes que perdem o interesse ou tem dificuldade de locomoção.

O presente estudo tem como objetivo simplificar parte destes tratamentos, possibilitando ao paciente a autorreabilitação, utilizando o dispositivo Kinect [1]. Isto permite ao paciente realizar exercícios de reabilitação em casa, dependendo do tipo do tratamento, tornando este processo mais agradável e acessível.

O Kinect foi o sensor adotado devido ao seu grau de precisão. Além disso, ele possibilita o desenvolvimento de aplicações que reagem aos movimentos do corpo, através de APIs de rastreamento 3D da postura do usuário. Seu funcionamento se dá através do mapeamento do corpo por uma de suas câmeras. A representação do usuário é feita através de vinte pontos de articulações pré-definidas (Figura 1). O processo de calibração é feito pelo próprio aparelho, que possui algoritmos de aprendizagem, reconhecendo diversos tipos e estereótipos [2]. Com isso, é possível elaborar as posturas exigidas nos exercícios no sistema, bem como verificar se a atividade está sendo executada corretamente (Figura 2).

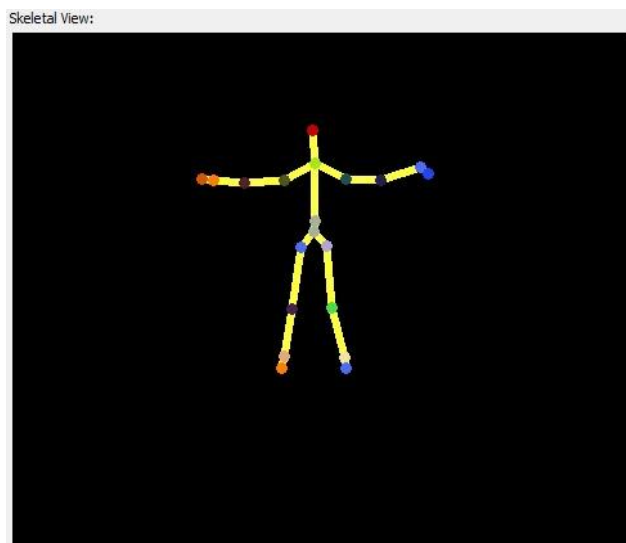


Figura 1 – Avatar rudimentar do Kinect, com representação de articulações pré-definidas para o corpo.



Figura 2 – Modelo representando o uso do sistema pelo usuário.

## Bibliografia

1. **Kinect for Windows**. <http://www.microsoft.com/en-us/kinectforwindows/> - acessado em 08/08/2013.

2. **SILVA, L. J. S., FLORES, L. R. V., D'ORNELLAS, M. C., POZZER, C. T.** *Sistemas de Reabilitação Fisioterapêutica baseado em Jogos com Interfaces Naturais*, SBC - Proceedings of SBGames, Brasília – DF, 2012.

---

<sup>1</sup> Faculdade de Educação Tecnológica do Estado do Rio de Janeiro – FAETERJ (raquel.ellem@gmail.com)

<sup>2</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC/MACC (jauvane@acm.org)

## Modelagem e monitoramento de sistemas ecológicos

Aluna: Tainara Mendes de Andrade Soares

Orientador: Maurício Vieira Kritz

### Objetivo

Discutir como a modelagem matemática e computacional pode contribuir para o monitoramento continuado e automatizado de ecossistemas intocados.

### Resumo

Sistemas ecológicos são ambientes dinâmicos e complexos que possuem diferentes níveis em sua organização, os quais envolvem várias escalas no tempo e espaço. A caracterização desses sistemas requer uma enorme variedade de medidas diretas, tais como energia, tamanho e quantidade de populações, número de indivíduos, entrada de nutrientes, etc. Entretanto, para o seu entendimento, ou mesmo para sua observação, é necessário observar outros aspectos, alguns dos quais não são quantificáveis.

Todavia, os métodos de observação existentes hoje em dia são ineficientes para o monitoramento continuado de ecossistemas a longo prazo, não registrando alterações na rede trófica. A falta de tecnologias de observação capazes de registrar mudanças e inovações nas interações tróficas é o principal entrave para o monitoramento de ecossistemas críticos, bem como para seu estudo e gerenciamento sustentável. Este trabalho se estrutura em torno dos seguintes tópicos:

- 1) Estudo do processo de organização dos ecossistemas e como as interações entre suas espécies ocorrem e se encadeiam;
- 2) Identificação dos aspectos e propriedades importantes a serem observados;
- 3) Discussão sobre metodologias de observação e aparelhagens para o monitoramento continuado e automatizado em sistemas ecológicos de difícil acesso;
- 4) Uso da modelagem matemática e computacional e sua utilidade para a resolução deste problema.

## Implementação de uma abordagem de compilação e implantação de aplicações científicas para o SINAPAD

Bolsista : Victor Madeira Teixeira

Orientador : Antonio Tadeu Azevedo Gomes (LNCC/MCTI)

Co-orientador : Artur Ziviani (LNCC/MCTI)

O trabalho desenvolvido nos dois primeiros meses (junho-julho de 2013) de atuação como bolsista de iniciação científica (IC) consistiu na implementação de uma abordagem que facilite o fluxo de trabalho de desenvolvedores de aplicações científicas na compilação e implantação dessas aplicações para o SINAPAD, um sistema baseado em uma grade de supercomputadores instituído pelo MCTI e gerido pelo LNCC.

O desenvolvimento de sistemas intensivos de software compreende as fases de análise, projeto, implementação, testes, execução e manutenção de sistemas. No âmbito de sistemas distribuídos, as fases de implementação – que (sinteticamente falando) compreende as atividades de codificação, compilação e implantação –, execução e manutenção são particularmente problemáticas devido à dispersão física do ambiente de execução. Tecnologias de *middleware* facilitam sobremaneira a execução de software nesse tipo de ambiente distribuído, porém no que se refere à fase de implementação, enquanto a atividade de codificação pode ser feita de forma centralizada no equipamento usado pelo desenvolvedor do software, as atividades de compilação e implantação demandam adaptações às idiossincrasias de cada sistema computacional que compreende o ambiente de execução distribuído.

As questões acima são vivenciadas cotidianamente pela equipe do SINAPAD. Essa grade emprega a tecnologia *middleware* CSGrid, que facilita a execução distribuída das aplicações científicas disponibilizadas aos usuários do SINAPAD. Porém, essa tecnologia oferece suporte apenas parcial à atividade de implantação e nenhum suporte à atividade de compilação no ambiente de execução distribuído que ela gerencia.

Nesse contexto, se enquadra o trabalho realizado nestes primeiros dois meses de atividades como bolsista de IC e se dá a implementação de uma abordagem que facilite o fluxo de trabalho dos desenvolvedores de aplicações científicas na compilação e implantação dessas aplicações no *middleware* CSGrid. O êxito no desenvolvimento do projeto traria enormes benefícios operacionais ao grupo do SINAPAD. O desenvolvimento desse sistema visa a princípio uma análise abrangente das soluções existentes e usadas no fluxo principal de desenvolvimento de software em geral para geração de scripts que automatizem as atividades de compilação e implantação, como no caso o CMake. A nossa primeira aplicação candidata é a ferramenta DANCE, que foi desenvolvida por Wehmuth e Ziviani (2012) onde foi feito um estudo sobre as necessidades desta aplicação e foi desenvolvido em cima da aplicação o seu script com todas as suas dependências, tais como, suas bibliotecas necessárias, automatizando a compilação desta aplicação científica. O uso da ferramenta CMake foi essencial para a conclusão da primeira parte deste desenvolvimento.

CMake é um sistema de automatização de compilação de sistemas, voltado principalmente para aplicações em linguagem C e C++, mas não restrito a elas. Outras linguagens são suportadas, mas necessitam de configurações adicionais. C e C++ funcionam *“out of the box”*. A principal razão para usar uma ferramenta independente para este processo é diminuir a dependência que um projeto tem de uma IDE.

Durante esse período foi realizado o estudo acerca da ferramenta CMake. Após esse estudo, um script da aplicação científica DANCE foi criado com todas as suas dependências encontradas e resolvidas. Usando as ferramentas que o programa CMake fornece, o script final foi testado e concluído com êxito, tendo sido gerado um arquivo executável da aplicação. Com este executável podemos observar o programa executando perfeitamente. Concluiu-se assim uma primeira etapa do projeto. Agora um novo objetivo foi traçado para os próximos meses, que é o desenvolvimento de uma aplicação de configuração e implantação automática de pacotes baseados no CMake. Esta será uma aplicação Web e fará com que o processo de implantação dentro dos clusters do SINAPAD seja consideravelmente facilitado.



---

## **Análise Comparativa dos Tratamentos de Limites das Variáveis e da Adaptação de Parâmetros na Evolução Diferencial**

Bolsista: Vinicius Kreischer de Almeida

Orientador: Helio J. C. Barbosa

Evolução Diferencial (DE) é uma meta-heurística estocástica simples e eficiente para otimização global com variáveis contínuas. Pertencente à classe dos Algoritmos Evolucionistas, ela emprega uma população de soluções candidatas submetidas aos operadores de seleção e de movimentos no espaço de busca e beneficia-se do fato de não requerer o cálculo de gradientes e nem o conhecimento em forma explícita da função objetivo. Entre suas principais características está o número relativamente pequeno de parâmetros de controle. Apesar de sua simplicidade, alguns fatores são determinantes para a qualidade da solução final obtida. Dentre eles estão a configuração dos parâmetros de controle e a escolha da variante a ser empregada na geração de novas soluções. A escolha adequada destes fatores será responsável para originar um processo de convergência satisfatório.

É comum na prática a existência de limites superior e inferior para cada variável de decisão. Nestes casos é necessário o emprego de técnicas para que tais limites sejam sempre satisfeitos, o que, apesar de sua importância, conta com um número relativamente pequeno de estudos publicados. Este trabalho apresenta os resultados obtidos em experimentos computacionais utilizando-se um conjunto de 25 funções-teste da literatura onde são analisados diferentes modelos da DE, incluindo aqueles que empregam técnicas adaptativas, além daqueles onde a configuração dos parâmetros de controle deve ser previamente estabelecida pelo usuário. Ademais, diferentes técnicas de tratamentos dos limites para as variáveis de decisão são abordadas, bem como a relação entre a dimensionalidade do problema e a eficácia do algoritmo, sendo apresentadas avaliações comparativas que consideram a combinação desses diversos aspectos da DE.

## Otimização Estrutural de Placas de Reissner-Mindlin

Aluno: Vítor Luis G. da S. David,  
Orientador: A.A. Novotny,  
Coorientador: Vítor Sales

A teoria de placas de Reissner-Mindlin considera que as fibras inicialmente perpendiculares ao plano médio da placa permanecem retas após deformação do elemento estrutural, mas não continuam necessariamente a ser ortogonais àquele mesmo plano, permitindo considerar o efeito cisalhante na direção transversal. Também é considerada a hipótese de pequenos deslocamentos e rotações. Através deste Projeto de Pesquisa objetiva-se realizar a otimização de componentes estruturais do tipo placas semi-espessas utilizando o conceito de derivadas topológicas. No presente trabalho, portanto, é apresentado o modelo de placas de Reissner-Mindlin, o que resulta em um sistema de equações diferenciais parciais acoplado. Em seguida é discutida a discretização do referido modelo via Método dos Elementos Finitos, bem como as dificuldades resultantes, tal como o efeito de travamento do modelo discreto. Uma vez contornado os problemas oriundos da discretização do modelo de placas de Reissner-Mindlin, objetiva-se realizar sua implementação computacional utilizando o pdeTool do MatLab. Esse resultado, juntamente com a derivada topológica, será então utilizado no desenvolvimento de um algoritmo de otimização topológica de placas de Reissner-Mindlin.

### Referências

- [1] T.J.R. Hughes. Finite element method: linear static and dynamic finite element analysis. Prentice Hall, 1987.
- [2] Partial Differential Equation Toolbox, MatLab User's Guide. The MathWorks, 2009.
- [3] A.J. Boness dos Santos. Projeto de Conclusão da Disciplina Análise de Sensibilidade do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC, 2003.
- [4] A.A. Novotny e E.A. Fancello. Um Refinamento  $h$ ,  $p$  e  $hp$  adaptativa na análise de Flexão de Placas Semi-Espessas.
- [5] L.M.S. Castro. Elementos Finitos para a Análise Elástica de Lajes. 27 de Novembro de 2007.

## Modelagem Computacional Aplicada a Questões Sócio-Educacionais

Aluno: Weslei Peter de Oliveira

Orientador: Dr. José Karam Filho

Co-orientador: Dr. Fabiano Saldanha Gomes de Oliveira

### Resumo

Dentre as preocupações suscitadas com a mudança de patamar de desenvolvimento alcançado no país estão questões sociais que, acredita-se, possam estar relacionadas à questão da educação. Assim, este projeto de pesquisa tem por finalidade o estudo e o desenvolvimento de ferramental computacional para análise em educação para prever consequências sociais.

O plano de trabalho se encontra em execução. As atividades A3: estudo de elementos de estatística preditiva, modelos hierárquicos, MRL e A5: métodos numéricos de solução de sistemas algébricos, ainda estão em andamento. As atividades restantes foram realizadas. Um sistema para visualização de dados foi desenvolvido em ambiente WEB. Este sistema já permite visualizações de dados do tipo: histograma, scatter plot, box plot e gráficos de séries temporais. Calcula medidas de posição dos dados como média, mediana, variância, desvio padrão, moda, máximos, mínimos e percentis. Técnicas de análise de dados como correlação e componente principal já foram implementadas. Os dados disponibilizados pertencem a duas unidades de ensino, uma de nível médio e outra de nível superior. Estes dados consistem de notas dos alunos, formação dos professores e alunos evadidos ao longo do tempo. Os dados foram organizados como planilhas, que podem ser lidas pelo sistema desenvolvido. O usuário pode selecionar uma ou mais funcionalidades acima descritas. No momento o trabalho encontra-se na fase de programação de modelos de regressão linear múltipla e cálculo de causalidade para séries temporais. Em seguida serão realizadas análises fenomenológicas e relações propostas no plano de trabalho.