

2

Algoritmos de geração de arranjos

O primeiro passo em uma simulação do MED é a geração inicial de arranjos de partículas. Embora uma variedade de algoritmos tenham sido desenvolvidos, não há um consenso sobre uma metodologia ótima a ser empregada na geração dos arranjos.

Os algoritmos desenvolvidos até o presente podem ser classificados em grupos segundo o tipo de geração como: dinâmicos, quasi-estáticos e geométricos. A seguir, serão apresentados os prós e contras de cada grupo e alguns desses algoritmos.

2.1

Algoritmos dinâmicos

Como primeiro algoritmo de geração de arranjos, é natural utilizar o próprio MED para obtenção do arranjo inicial. Tais algoritmos — ditos dinâmicos — têm como vantagem a simplicidade, pois além de já estarem implementados pelos programas de MED, podem ser facilmente aplicados tanto a duas quanto a três dimensões.

Uma abordagem típica é, em primeira instância, a utilização do método *random loose packing* (RLP), que consiste na geração aleatória de um tamanho e uma posição para uma partícula dentro do domínio. Se a partícula não puder ser colocada naquela posição — porque estaria sobreposta a pelo menos uma outra partícula — o tamanho é mantido e é gerada uma nova posição. Este processo é repetido inúmeras vezes até que seja encontrada uma posição aceitável. Entretanto, como pode ser presumido, à medida que são colocadas partículas, torna-se cada vez mais provável que haja uma sobreposição, e portanto uma rejeição, resultando em um domínio com relativamente baixa densidade de partículas ao final da geração. A obtenção de um arranjo mais denso é alcançada através de um processo dinâmico, com a utilização do MED. A aplicação de forças no sistema através da translação das paredes comprimindo o domínio [45] ou da expansão gradual do diâmetro de todas as partículas através do algoritmo Lubachevsky-Stillinger [28] ou de uma versão modificada deste [27]. Esta é a abordagem utilizada no programa PFC2D [1].

Embora estes algoritmos tenham a capacidade de controlar a densidade de partículas do arranjo, tem como desvantagens o elevado tempo computacional necessário para a detecção da sobreposição das partículas e para a simulação do MED.

Outros algoritmos compõem o arranjo através da simulação de uma deposição gravitacional. Como exemplo, temos o método *random ballistic deposition* (RBD) [26, 8], no qual as partículas caem sequencialmente sobre o domínio a partir de posições aleatórias, assentando-se sobre o próprio domínio ou sobre partículas anteriormente assentadas, como na figura 2.1, retirada de Bratberg et al. [8]. Outro exemplo é o algoritmo *hopper to mix* proposto por Feng et al. [18], onde um arranjo regular é colocado sobre um tipo de funil (em inglês *hopper*) disposto acima do domínio. As partículas são liberadas para passar pelo bico do funil — utilizando o MED sob uma força gravitacional — e neste processo, o arranjo é misturado e assentado densamente no domínio, como visto na figura 2.2, retirada de Feng et al. [18]. Os métodos gravitacionais, além de também sofrerem com o alto esforço computacional inerente ao MED, têm dificuldades em obter arranjos homogêneos, além de não possuírem meios de controlar a densidade do arranjo [37].

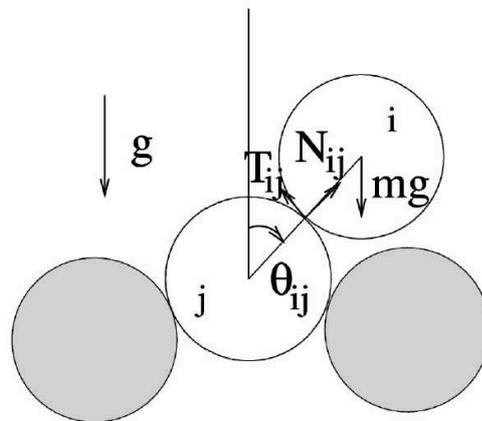


Figura 2.1: Contato durante assentamento segundo o método RBD.

2.2

Algoritmos quasi-estáticos

Os algoritmos quasi-estáticos utilizam simulações de Monte-Carlo para a geração da posição das partículas, ao invés de simulações de MED. Como exemplo temos o algoritmo desenvolvido por Jodrey e Tory [25], como visto na figura 2.3, retirada do mesmo trabalho. Neste algoritmo, inicialmente são gerados aleatoriamente pontos correspondentes aos centros de esferas no domínio. Cada centro tem associada uma esfera interna — que define a

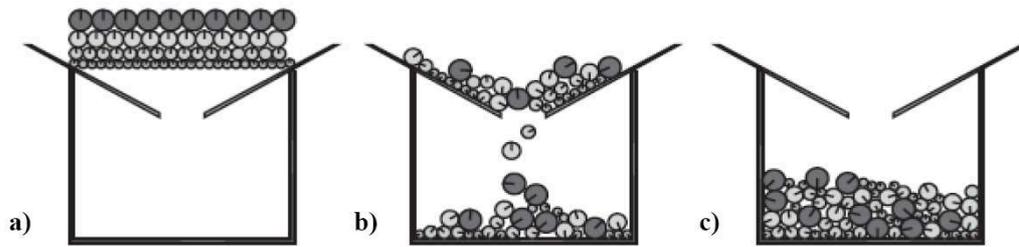


Figura 2.2: Método *hopper to mix*. a) Arranjo regular inicial; b) Simulação do MED; c) Arranjo denso misturado.

densidade verdadeira — e uma externa — que define uma nominal. O algoritmo então passa para um processo de eliminação das sobreposições, enquanto gradativamente reduz o diâmetro externo. O processo termina quando os dois diâmetros se aproximam, e portanto as densidades verdadeira e nominal se igualam. Estes algoritmos podem controlar a densidade de partículas do arranjo e podem gerar arranjos em duas ou três dimensões, contudo a eliminação das sobreposições demanda um grande trabalho computacional.

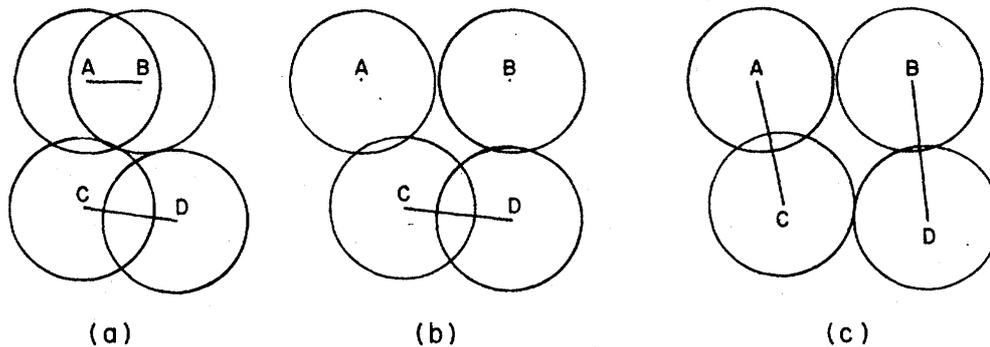


Figura 2.3: Algoritmo de Jodrey e Tory aplicado a um sistema de 4 discos. O processo se dá por eliminação sequencial das maiores sobreposições. a) Eliminação da sobreposição AB; b) Eliminação da sobreposição CD; c) Ao ser eliminada a sobreposição CD, são alistadas as sobreposições AC e BD.

2.3

Algoritmos geométricos

Uma alternativa que pode ser vantajosa aos algoritmos dinâmicos e quasi-estáticos são os algoritmos geométricos. Como o próprio nome diz, utilizam somente cálculos geométricos para a geração de arranjos e, dado que não simulam movimentos das partículas, permitem uma redução substancial do tempo de processamento. Em Feng et al. [18] é proposta uma abordagem chamada *advancing front*. Para esta abordagem, dependendo se o limite do

domínio é incluído no front inicial e como este é formado, duas implementações foram propostas. No algoritmo *open form advancing front* [18], o arranjo é construído camada por camada, como visto na figura 2.4, retirada do mesmo trabalho. Já no *closed form advancing front* [18], o arranjo é inicialmente composto de três partículas dispostas em formato triangular, no meio do domínio. As partículas são, em seguida, adicionadas de modo a tangenciar duas partículas pré-existentes — tomando forma espiral para fora —, como na figura 2.5, retirada de Bagi [7].

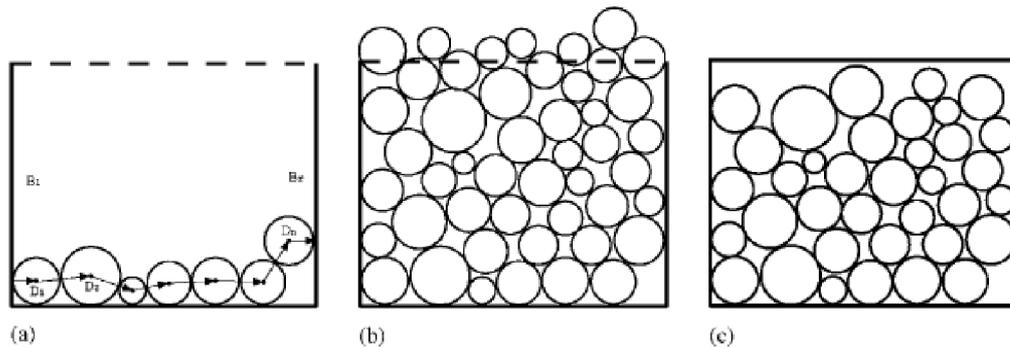


Figura 2.4: Algoritmo *open form advancing front*.

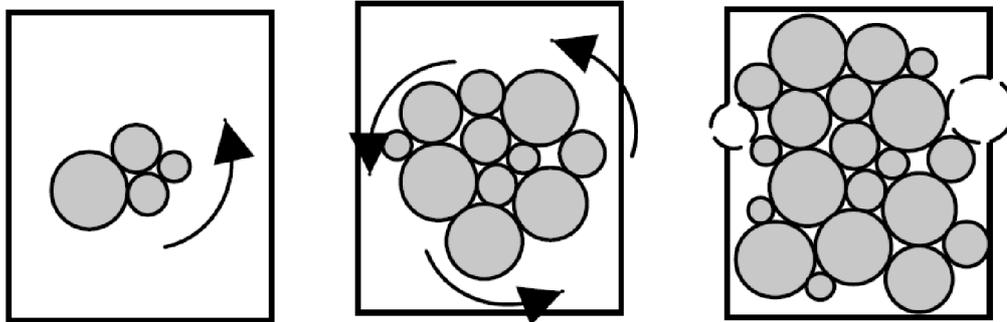


Figura 2.5: Algoritmo *closed form advancing front*.

Uma abordagem similar é proposta por Bagi [7]. Denominada *inwards spiral method*, difere da *closed form advancing front* no que as partículas são colocadas no domínio na forma de uma espiral para dentro, como mostrado na figura 2.6, retirada do mesmo trabalho.

Esses algoritmos, além de precisarem de pouco tempo computacional, permitem que seja obedecida uma dada granulometria. Contudo, eles apresentam algumas desvantagens como: a densidade do arranjo não poder ser prescrita e sua difícil implementação no caso tridimensional. Nesse caso, a densidade do arranjo gerado é baixa em relação aos algoritmos dinâmicos.

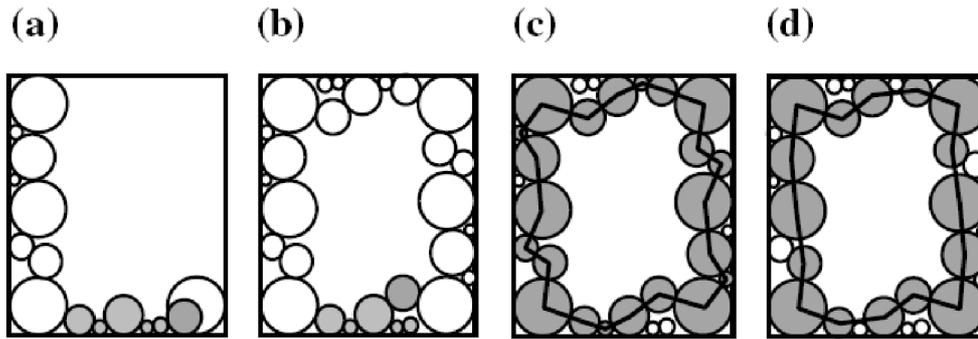


Figura 2.6: Algoritmo *inwards spiral method*.

Nurkanov et al. [36] desenvolveram um algoritmo em três dimensões que tem capacidade de gerar arranjos com densidades compatíveis àquelas encontradas empregando-se algoritmos dinâmicos. Este algoritmo, utilizado no programa S3D SpheroPack [24], opera como se as esferas estivessem sendo despejadas em um recipiente: o tamanho da esfera é escolhido segundo uma dada distribuição e a esfera é “jogada” no recipiente, que é formado pela interseção de N semi-espacos. Tão logo a esfera encontra um obstáculo — parede do recipiente ou outra esfera — ela se adere a ele e desliza na direção da menor energia potencial até encontrar o próximo obstáculo. A esfera pára quando estiver sendo suportada por três superfícies ou por um plano perpendicular à direção de sua queda livre.

Algoritmos capazes de gerar arranjos tanto em duas quanto em três dimensões facilmente são aqueles baseados em triangulação, como os propostos por Cui e O’Sullivan em [11] ou por Jerier et al. em [24]. No algoritmo proposto por Cui e O’Sullivan, primeiramente, é gerada uma quantidade de pontos aleatórios uniformemente distribuídos no domínio. Estes pontos são triangulados, criando uma malha de triângulos em duas dimensões, ou tetraedros em três dimensões. A partir da malha obtida pela triangulação, são gerados círculos inscritos em cada triângulo ou, em três dimensões, esferas inscritas nos tetraedros. De modo a densificar mais o arranjo, o próximo passo é a geração, para cada vértice do triângulo/tetraedro, do maior círculo/esfera que puder ser colocada de modo a tangenciar pelo menos um círculo/esfera anteriormente criados, como visto na figura 2.7 (retirada de Cui e O’Sullivan [11]) para o caso em duas dimensões. Como outros algoritmos geométricos, este algoritmo também tem um custo computacional baixo, embora não possa gerar arranjos com uma dada granulometria. Mais ainda, tais arranjos costumam ter uma densidade baixa. Contudo, deve ser mencionado que a densidade do arranjo é intimamente ligada à malha gerada na triangulação

— principalmente no caso de duas dimensões — e, por conseguinte, visando uma maior densidade, é possível tirar vantagem da melhoria na geração de malhas triangulares/tetraédricas que é utilizada no MEF.

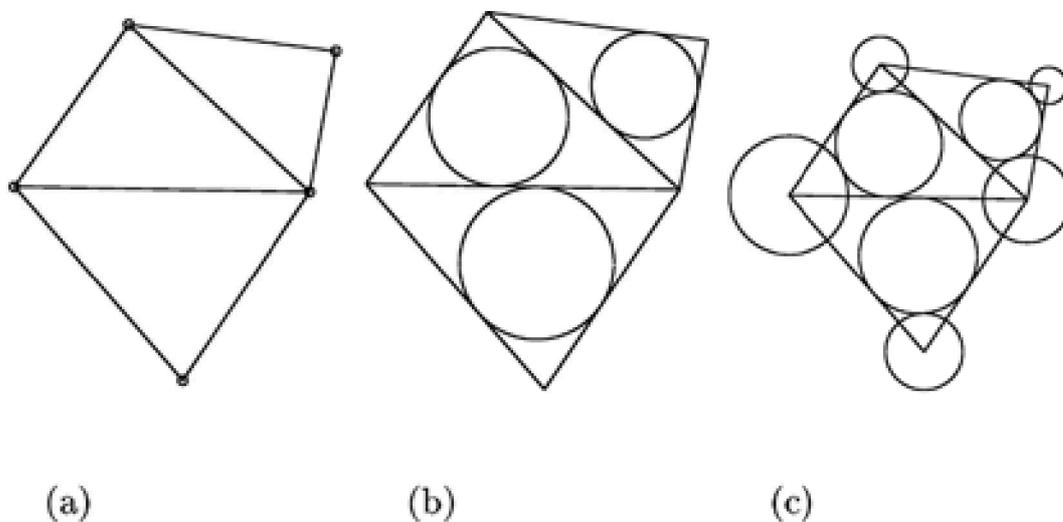


Figura 2.7: Geração por triangulação, como proposto por Cui e O’Sullivan. a) Triangulação dos pontos; b) Geração dos círculos inscritos; c) Geração dos círculos nos vértices.