Universidade de Brasília

ProIC 2012/2013

Simulação Numérica de Material Granular

Relatório Final : Dinâmica Molecular

---

5 de Agosto de 2013

Orientador: Yuri Dumaresq Sobral
Aluno: Juarez A.S.F 11/0032829

1 Resumo

Estuda-se o desenvolvimento de um simulador de material granular baseado em dinâmica molecular. O algoritmo de dinâmica molecular é descrito e detalha-se o uso de uma tabela de dispersão para a busca eficiente de colisões. Os métodos de integração temporal são discutidos e comparados. Ao final discute-se as principais dificuldades encontradas na implementação da rotina em C.

2 Introdução

Materiais granulares são constituídos de uma coleção enorme de partículas macroscópicas, por exemplo: areia, grãos e o próprio solo. A física que rege o comportamento destes materiais não é ainda muito bem entendida. Parte disso se deve ao fato de que o movimento global do conjunto resulta do movimento individual de cada partícula e as incontáveis e aleatórias interações que podem ocorrer produzem efeitos difíceis de serem analisados. Para ilustrar essa riqueza de comportamento, considere o solo que sustenta uma casa. O solo pode ser entendido como a coleção dos grãos e rochas que o compõe. Sobre certas condições de umidade e compactação ele possui propriedades de um sólido e sustenta a casa, sobre outras ele escorre semelhantemente a um fluido e a casa desmorona. Nos dois casos as rochas e grãos eram os mesmos mas as diferentes condições a que estavam submetidos eram diferentes, logo as forças de interação entra cada elemento mudaram e o comportamento global do composto mudou drasticamente.

Nesse contexto de um número monstruoso de variáveis a serem levadas em consideração, a simulação computacional entra como a principal arma para atacar o problema. Em muitas situações não temos uma fórmula que nos diga o comportamento de um dado material granular sob determinadas condições mas uma simulação computacional que represente adequadamente as forças envolvidas pode nos dar a resposta. Este artigo pretende discutir um dos principais métodos utilizados para simulação de tais materiais: a dinâmica molecular.

3 Dinâmica Molecular

O algoritmo de dinâmica molecular consiste em representar o material granular por um modelo discreto de partículas elásticas. As forças de contato durante a colisão de duas partículas são simuladas permitindo que estas sofram interpenetrações, chamadas de *overlaps*, e então a lei de Hooke é aplicada para simular as forças de restituição e de amortecimento. Colisões são sempre resolvidas entre pares e possíveis colisões múltiplas são tratadas como colisões entre os pares individualmente e independentemente.

As principais grandezas físicas utilizadas são mostradas na figura 1. Sejam $\vec{x_1}$ e $\vec{x_2}$ as posições, R_1 e R_2 os raios, $\vec{v_1}$ e $\vec{v_2}$ as velocidade das partículas 1 e 2 respectivamente e $\vec{n}$ e $\vec{t}$ as direções normais e tangentes. Temos:

$$\begin{aligned}
&(\text{overlap})\xi = max(0, R_1 + R_2 - |\vec{x_2} - \vec{x_1}|)\\
&(\text{direção normal})\vec{N} = \tfrac{\vec{x_2}-\vec{x_1}}{|\vec{x_2}-\vec{x_1}|}\\
&(\text{v de aproximação})\vec{V} = \vec{v_1} - \vec{v_2}\\
&(\text{v normal})V_n = \dot{\xi} = \vec{V}\cdot\vec{N}\\
&(\text{v tang.})\vec{V_t} = \vec{V} - \dot{\xi}\vec{N}
\end{aligned} \tag{1}$$

No algoritmo aqui descrito não nos interessa a força na direção tangente causadas por atrito. Consideramos portanto as partículas como perfeitamente lisas e nos preocupamos somente com a força normal que será dada pela lei de Hooke com constante de viscosidade k_v e de restituição elástica k_r.

$$\begin{aligned}
&\vec{F_n} = f_n\vec{N},\\
&f_n = -(k_v\xi^{\alpha}\dot{\xi} + k_r\xi^{\beta})
\end{aligned} \tag{2}$$

A força descrita pela fórmula acima é a que atua na partícula 1 devido a interação com 2. A força que atua em 2 tem o mesmo módulo e direção mas sentido contrário. No caso mais simples podemos tomar $\beta = 1$ e $\alpha = 0$. Essas constantes, junto com k_v e k_r, devem ser calibradas para ajustar a fórmula aos dados experimentais.

A dinâmica molecular nos dá as forças de contato devido a colisões. Se conhecermos todas as forças externas que atuam sobre a partícula, como peso, forças magnéticas e elétricas, estamos prontos para aplicar a segunda lei de Newton para cada partícula individualmente.

$$\sum \vec{F} = \frac{d}{dt}(m\cdot\vec{v}(t)) \tag{3}$$

Para aplicar o algoritmo discretizamos o tempo. Isto é, não lidamos mais com um tempo contínuo e não nos preocupamos com a solução analítica, o que procuramos é acompanhar a evolução do sistema em intervalos de tempo $\triangle T$ em $\triangle T$. Nossa simulação, se bem feita, será tão melhor quanto menor for o passo de tempo tomado.

Dadas condições iniciais para as posições, velocidades e acelerações e conhecendo-se as forças externas atuantes, o algoritmo consiste em para cada instante de tempo tomado:

- atualizar a posição e a velocidade baseado nas velocidades e acelerações do instante anterior
- procurar e calcular todas as colisões do sistema

- somar as forças de colisão com as forças externas
- calcular a aceleração a ser usada no próximo passo de tempo.

Uma vez dado um par de partículas em colisão o cálculo das forças é bem simples, bastam as operações vetoriais descritas em 1 e 2. O complicado é procurar por colisões de modo eficiente. Os algoritmos para a integração das velocidades e posições e para a busca eficiente de colisões serão os temas das seções seguintes.

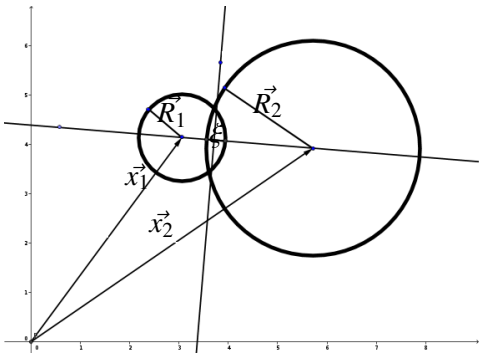


Figura 1: Principais grandezas utilizadas

4 Procurando por colisões

A busca por colisões consiste em medir a distância entre duas partículas e verificar se ela é menor do que a soma dos raios das duas partículas. Dadas duas partículas, o único modo de saber se elas estão ou não em colisão seria medindo a distância entre elas. O processo é simples mas se torna trabalhoso uma vez que a princípio todas as partículas do universo são candidatas a colidirem entre si. É preciso filtrar os pares de partículas candidatos a colisão. Isso pode ser feito segmentando o plano em quadrados como na figura 2. Se cada quadrado tiver lado de comprimento igual a duas vezes o raio da maior partícula, temos certeza de que uma partícula só pode colidir com aquelas que estiverem ou no seu próprio quadrado ou nos quadrados adjacentes. Computacionalmente isso pode ser feito por meio de uma tabela de dispersão.

A tabela de dispersão é uma estrutura de dados, isto é, uma maneira particular de armazenar e operar dados de modo a utilizá-los eficientemente. Ela mapeia um dado a uma posição de memória através de uma função de dispersão. A função de dispersão atua não sobre o dado em si, mas sobre uma chave atribuída a ele. A principal vantagem dessa estrutura é que ela permite buscas extremamente eficientes: conhecendo-se a chave do objeto a ser procurado, o custo da busca é O(1).

Um dos problemas que surgem na implementação é quando objetos diferentes com chaves diferentes ou não são mapeados para a mesma posição de memória. Isso pode ser contornado, por exemplo, utilizando-se listas para armazenar os elementos que caem na mesma posição de memória. Lista é uma outra estrutura de dados cuja principal característica é permitir o armazenamento sequencial de uma quantidade inicialmente não conhecida de dados. Em nossa aplicação os dados são as partículas e as chaves suas posições no plano. A função de dispersão não é única e depende muito do sistema que se quer simular, aqui sugerimos uma para ser usada na simulação de partículas presas em uma caixa quadrada de comprimento conhecido.

Seja L o lado da caixa e R_{max} o raio da maior partícula sendo simulada. Para facilitar vamos tomar o lado da caixa como um múltiplo inteiro m do maior diâmetro, isto é, $L = m(2R_{max})$. Vamos colocar as extremidades da caixa nos pontos (0,0), (0,L), (L,L), (L,0). Seja π o pontilhamento:

$$\pi = \{0 = x_0, x_1, \ldots, x_k, \ldots, x_m = L\}, x_k = k \cdot 2R_{max}$$

e considere os conjuntos σ_{x_i} dados por

$$\sigma_{x_i} = \{x \in R, x_i < x \leq x_{i+1}\}, i = 0, 1, \ldots, m-1$$

É claro que se uma partícula de centro (x,y) pertence à caixa, então sua abscissa x pertence a um e somente um dos conjuntos σ_{x_i} acima. De forma análoga sua ordenada y pertence a somente um dos conjuntos σ_{y_j} que segmentam o eixo y. Dessa forma temos associado ao ponto (x,y) do plano a dupla (i,j). Veja que a caixa de lado L está dividida em m linhas e m colunas e portanto temos m^2 pares (i,j) possíveis. Para mapear cada par em uma posição de um vetor estático de tamanho m^2 podemos usar a função:

$$p(i, j) = i \cdot m + j \tag{4}$$

Dessa forma a função acima mapeia todas as partículas que tiverem centro nas posições $(x_i < x \leq x_{i+1}, y_j < y \leq y_{j+1})$ para a mesma posição de memória. Cada posição de memória representa um quadrado no plano, ou seja, o processo descrito implementa a segmentação do plano discutida anteriormente. Quando quisermos buscar os candidatos à colisão devemos olhar somente as partículas que estão nos quadrados vizinhos, isso é feito jogando para a função de dispersão os centros dos quadrados vizinhos e buscando nas posições retornadas.É claro que nem todas as partículas dos quadrados adjacentes e mesmo do próprio quadrado estão em colisão, mas reduzimos drasticamente a área do plano que possui partículas candidatas a colisão. No caso médio o algoritmo é extremamente mais eficiente do que medir a distância entre todas as partículas.

Para um dado instante de tempo temos então um algoritmo que permite achar eficientemente as partículas em colisão. Certa dificuldade surge quando incrementamos o tempo e as partículas se movem. Para que a estrutura continue funcionando adequadamente precisamos atualizar também a posição da partícula na estrutura. Aqui existem duas possibilidades: podemos verificar qual partícula saiu dos limites do seu quadrado e então reinseri-la na tabela ou simplesmente destruir toda a tabela e construir outra com as novas posições. A primeira opção economiza custo computacional pois nas simulações uma partícula mantém seu centro dentro de um mesmo quadrado por muitas interações enquanto a segunda permite implementação muito mais simples.

Para tornar a execução ainda mais eficiente, podemos, em vez de ficar andando com as próprias partículas pela tabela, andarmos com apontadores para partículas. Ou seja, os dados da tabela não são todas as informações sobre a partícula e sim um ponteiro para seu endereço de memória. Dessa forma todo o processo de transferência de dados de um lugar para o outro se torna mais eficiente.

Uma outra estratégia que pode ser usada no lugar de olharmos os 9 quadrados adjacentes é simplesmente inserir as partículas em todos os 9 quadrados. Dessa forma a busca de colisões precisa olhar somente para os quadrados individualmente e não para um quadrado e seus adjacentes. Essa escolha no entanto dificulta o processo de manutenção da tabela entre uma iteração e outra, sendo muito mais adequada para ser utilizada quando entre um instante e outro destruímos toda a tabela. Para as simulações realizadas com cerca de dez mil partículas não houve diferença perceptível entre esse método e o outro.

Para finalizar, é importante que as partículas sendo simuladas mantenham-se na caixa, nosso ambiente de controle. Uma maneira de fazer isso seria definir as paredes como retas e definir um algoritmo de colisão entre partículas e retas semelhante ao descrito na dinâmica molecular. Outra abordagem interessante e muito mais simples é cobrir as paredes com partículas imóveis. Elas são partículas iguais às outras mas simplesmente não calculamos forças sobre elas e não atualizamos suas posições. É importante notar que não necessariamente as colisões irão impedir que uma partícula passe através da outra. Para que isso não aconteça é importante que as constantes estejam bem ajustadas, principalmente o incremento de tempo. Dessa forma é preciso ter cuidado com as partículas que venham a furar a caixa: quando isso ocorrer elas devem ser retiradas da simulação, ou ao menos da tabela, para que não tenhamos falhas de segmentação.

Sumarizando, para simular N partículas em uma caixa quadrada de lado L com m^2 divisões iguais temos:

- um vetor estático **P** [1] de tamanho N que guarda os dados sobre as partículas como massa, posição, velocidade , aceleração, forças ...
- uma tabela de dispersão que constitui-se de um vetor estático de tamanho m^2 de listas de ponteiro para partículas.
- A tabela é usada para reduzir o número de pares de partículas candidatos a colisão. As colisões são calculadas e os dados atualizados no vetor **P**. São os ponteiros para as partículas que andam na tabela, não as partículas em si.

Para comparar nosso algoritmo com o algoritmo trivial realizamos uma simulações com diferentes números de partículas. Deixamos um bloco denso de partículas cair e colidir com o solo como na figura 4. Dizemos que o bloco é denso pois as partículas adjacente são tangentes umas às outras. Medimos o tempo de simulação começando com 50 partículas e aumentando de 50 em 50 até uma simulação com 500 partículas para os dois algoritmos. Os dados obtidos são mostrados na figura 3 junto com regressões para as curvas. As regressões são:

$C_{hash}(n) = 0.115758n + 1.466667$ (algoritmo Hash)
$C_{trivial}(n) = 0.000774n^2 + (-0.004864)n + (1.916666)$ (algoritmo trivial)

Vemos que para poucas partículas o algoritmo trivial é mais eficiente mas esse comportamento é rapidamente invertido. Além disso o algoritmo trivial apresenta comportamento quadrático como esperado e nosso algoritmo baseado em hashsing apresenta comportamento linear e de baixo coeficiente angular.

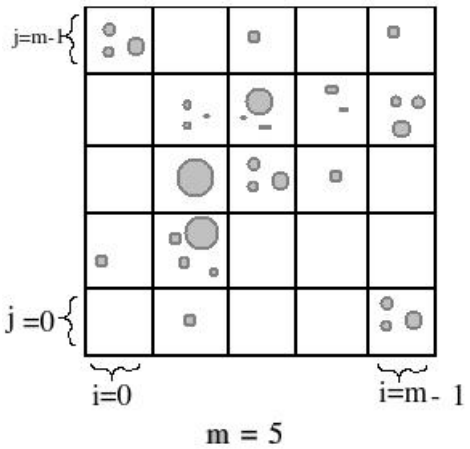


Figura 2: Segmentação do plano

[1] vetor estático: tamanho conhecido que não se altera ao longo da simulação, permite acesso direto

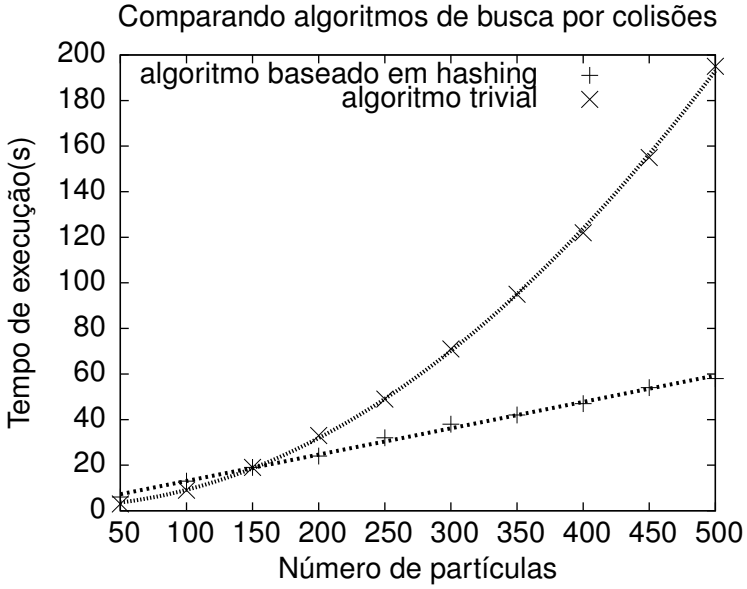


Figura 3: Comparação entre algoritmos de busca

5 Integração Temporal

Conhecendo a aceleração e a velocidade de uma partícula em um instante de tempo podemos calcular a velocidade e a posição no instante seguinte. Esse processo é dito integração temporal pois corresponde a resolver as duas integrais:

$$s(t_0 + \triangle t) = s(t_0) + \int_{t_0}^{t_0+\triangle t} v(t)dt$$
$$v(t_0 + \triangle t) = v(t_0) + \int_{t_0}^{t_0+\triangle t} a(t)dt$$

A abordagem mais direta corresponde a aproximar o integrando como constante no intervalo considerado e aproximar:

$$s(t_0 + \triangle t) \approx s(t_0) + v(t_0)\triangle t$$
$$v(t_0 + \triangle t) \approx v(t_0) + a(t_0)\triangle t$$

Isso corresponde a utilizar uma aproximação de diferenças finitas de segunda ordem para a primeira derivada e pode ser mostrado que esse método de integração é O($\triangle t$). Isto é, espera-se que a aproximação melhore linearmente à medida que diminuímos o incremento de tempo. Uma outra aproximação usando diferenças finitas de ordem mais alta nos leva a um método de integração mais eficiente de ordem ($\triangle t^2$):

$$s(t_0 + \triangle t) \approx s(t_0 - \triangle t) + 2v(t_0)\triangle t$$
$$v(t_0 + \triangle t) \approx v(t_0 - \triangle t) + 2a(t_0)\triangle t$$

Veja que esse método requer que guardemos também informações sobre o instante de tempo anterior. O ganho na convergência, no entanto, supera esse pequeno

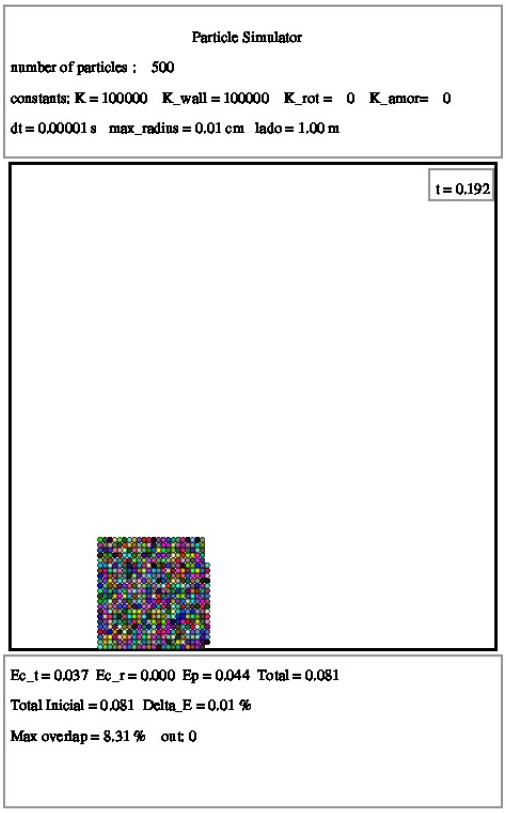
preço. Métodos de diferenças finitas de ordens mais altas podem se empregados para obter métodos de integração mais eficientes mas sempre com custo adicional de utilizar cada vez mais instantes de tempo anteriores.

6 Implementação em C

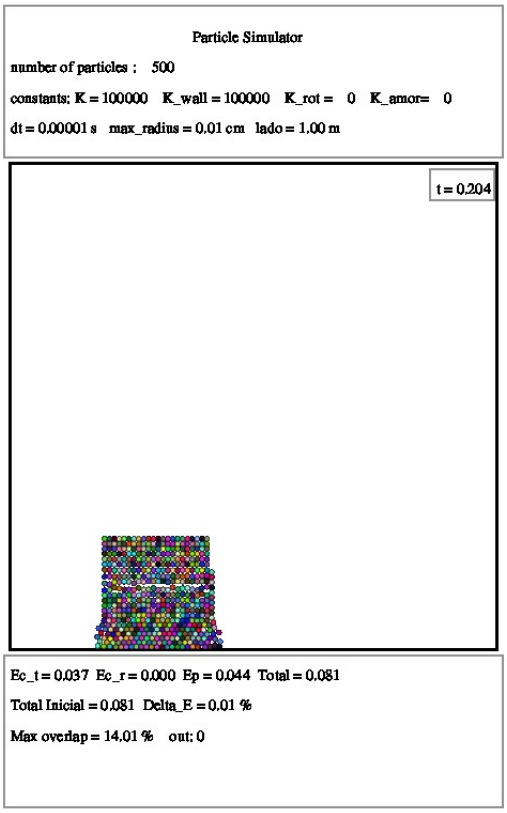
Os conceitos vistos até agora foram implementados na linguagem C utilizando-se apenas as bibliotecas padrões. Em determinados instantes de tempo, as posições e demais informações da simulação são impressos utilizando-se a linguagem para imagens postscript. Esses frames podem então ser convertidos em vídeo e a simulação observada. Na figura 4 vemos alguns instantes de uma simulação.Um bloco com 500 partículas é deixadas cair e atinge o solo com uma certa velocidade. As paredes da caixa são constituídas cada uma de 4000 mil pequenas partículas de forma que na imagem vemos um traço contínuo. Para manter controle da qualidade da simulação medimos em todos os instantes de tempo a energia mecânica total e o máximo overlap do sistema.

Como vê-se na figura, nossa simulação com incremento de tempo de $10^{-5}s$ conseguiu manter uma boa taxa de conservação de energia, mas o overlap máximo simulado chegou perto de 30%. Várias simulações foram realizadas variando-se as constantes do sistema e overlaps máximos pequenos somente foram obtidos com incrementos de tempo da ordem de $10^{-6}s$. A energia, no entanto, foi conservada com incrementos de tempo da ordem de $10^{-4}s$.

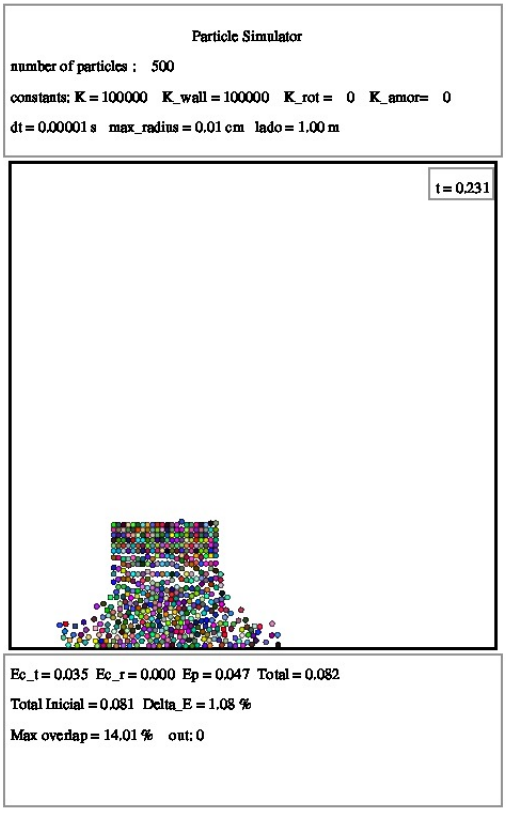
A principal dificuldade encontrada foi na correta implementação da tabela de dispersão. Partindo-se somente das bibliotecas padrões em C, toda a implementação da tabela e das listas é baseada em ponteiros. Além da dificuldade em se acertar o complicado uso de ponteiros, a simulação de sistemas com muitas partículas trouxe à tona problemas de alocação e desalocação de memória. Foi preciso manter um controle rígido da alocação para ter-se certeza de que toda a memória alocada estava sendo liberada, pois pequenas pontas soltas acabavam por comer toda a memória disponível levando a uma falha no programa.No entanto, é preciso dizer que os benefícios da utilização correta da estrutura de dados eficiente são mais do que evidentes como mostrado no gráfico 3. O trabalho é um exemplo de como uma estrutura de dados, se bem implementada, pode ser utilizada para tornar algoritmos muito mais eficientes.



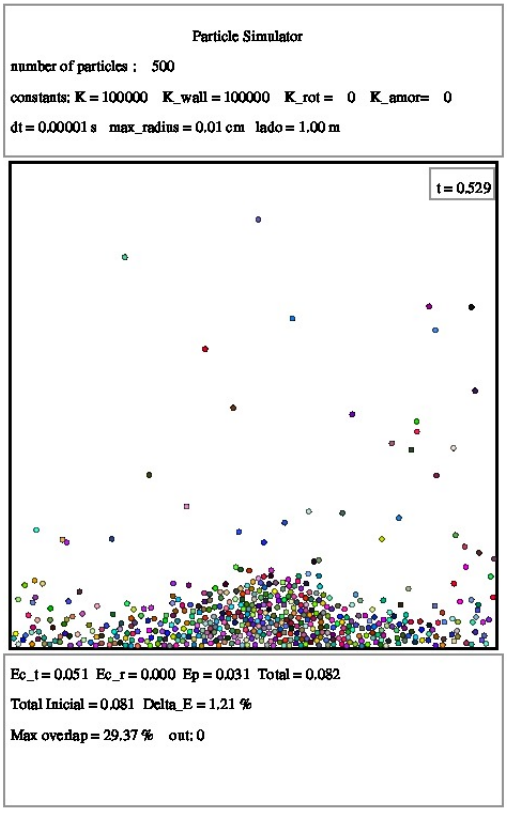
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4: Bloco de partículas atinge o solo com constante de amortecimento nula