

Procedimiento de empaquetamiento de partículas genéricas para el Método de Elementos Discretos

Irvin Pérez Morales, Roberto Roselló Valera, Yordanis Pérez Brito, Harold Díaz-Guzmán Casañas y Carlos A. Recarey Morfa

Centro de Métodos Computaciones y Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI)

Aula UCLV-CIMNE, Universidad Central de Las Villas

Carretera a Camajuaní Km 5 1/2

C.P. 54830 Santa Clara, Villa Clara, Cuba

Tel./Fax: 53 42 224746

e-mail: ipm@uclv.edu.cu; hotei.mat@gmail.com

Resumen

Se establecen los fundamentos matemáticos que permiten obtener empaquetamientos de partículas genéricas, lo cual contribuirá a realizar simulaciones y modelaciones de problemas físicos, a través del método de los elementos discretos o distintos. Además, se describe en detalle el método numérico de solución del problema en 2D, para lo cual se expone de manera completamente general un procedimiento para construir una curva que está en contacto exteriormente con otras dos, siendo esta formulación extendida también a 3D. Se trata en detalle el caso de las curvas supercuádricas, debido a su utilidad y nivel de generalidad. En la formulación se toman en cuenta dos vías de solución de las problemática con un algoritmo de avance frontal: (1) logrando que cada partícula esté en contacto exterior con al menos otras dos y (2) logrando que cada partícula esté en contacto con al menos otra. Estas dos variantes pueden aplicarse por separado o de modo combinado al generar un empaquetamiento.

Palabras clave: algoritmos empaquetamiento, curvas, MED, partículas, supercuádricas.

PROCEDURE FOR PACKING GENERIC PARTICLES FOR THE DISCRETE ELEMENT METHOD

Summary

There have been stated the mathematical foundations that allow to obtain packings of any type of particles, which will contribute to make simulations and modeling of physical problems through the Discrete Element Method. There is also described in detail the numerical method for solving the problem in 2D, for which is exposed in a completely general fashion a procedure for constructing a curve in outer contact with other two, being this formulation extended to 3D. There is analyzed in detail the case of the superquadric curves, due to its usefulness and degree of generality. In the formulation there are taken into account two ways of solution of the problem with an advancing front algorithm: (1) making each particle be in contact with at least other two and (2) making each particle be in contact with at least another one. These two alternatives can be used separately or at the same time during the generation of a packing.

Keywords: curves, DEM, packing algorithms, particles, superquadrics.

INTRODUCCIÓN

El Método de Elementos Finitos (MEF) es una herramienta de muy frecuente aplicación actualmente¹⁻⁵, pero tiene limitaciones para ser aplicado a medios discontinuos, por lo que han surgido otros métodos alternativos para estos, entre los que se destaca el Método de Elementos Distintos (MED)⁶⁻¹⁰.

La generación de sistemas discretos de partículas es un tema de singular importancia para la simulación y modelación de problemas de Mecánica Computacional, y especialmente para medios discontinuos. Existen algunas investigaciones que han abordado esta temática^{11,12}, pero se han limitado al empleo de partículas esféricas, poliédricas, elipsoidales, etc. Existen investigaciones¹³ que sí han desarrollado formulaciones totalmente generales (que pueden ser aplicables a diversos tipos de partículas incluidas las supercuádricas) tomando como base el concepto de colocación respecto al objeto más cercano y de agrandar las partículas, con la desventaja de que al hacer esto último se pierde el control sobre la distribución estadística de los parámetros geométricos.

Hasta la actualidad no se han reportado muchos métodos de empaquetamiento de partículas supercuádricas. Algunos autores han abordado el tema de supercuádricas pero dirigido a detección de contactos fundamentalmente¹⁴⁻¹⁶.

Es conocido¹⁵ que las funciones de supercuádricas se pueden emplear como un tipo de partícula que tiene la ventaja de que con una única formulación se obtienen diversas formas geométricas (las comúnmente empleadas y otras completamente nuevas). Con el solo hecho de variar los parámetros de la función se definen esferas, elipsoides, curvas o superficies casi rectangulares, con partes que pueden ser cóncavas, convexas o angulosas, entre otras características.

En el proceso de formulación de un algoritmo de empaquetamiento de partículas o de generación de medios discretos, en este caso empleando funciones de supercuádricas, para ser empleados en la simulación de problemas físicos a través del MED, es necesario resolver un grupo de aspectos muy complejos desde el punto de vista matemático.

Uno de estos aspectos de gran utilidad es poder construir una curva que esté en contacto exteriormente con otras dos (caso 2D) o con otras tres (caso 3D), ya que de esta forma se puede lograr una compactación local máxima del empaquetamiento que se genera¹⁷. En el presente artículo se hacen aportes a la construcción de curvas en sentido general y se muestra la aplicación de las formulaciones al caso de supercuádricas.

En el proceso de formulación del problema de empaquetamiento o generación de partículas para el MED, se emplea la siguiente metodología, similar a como aparece en¹⁷:

1. Generación de la partícula que debe ser agregada al empaquetamiento.
2. Selección de un frente activo y determinación de la posición en la cual la nueva partícula está en contacto con otra más (caso 2D) o con otras dos (caso 3D) que forman parte del frente.
3. Chequeo de si la partícula generada intersecta otras existentes. Si no ocurre solapamiento la nueva partícula es aceptada y se continúa con el ciclo de generación hasta llenar el volumen (3D) o área (2D). En caso contrario se rechaza la posición y se regresa al paso 2, hasta que no exista un frente activo.

CONSTRUCCIÓN DE UNA CURVA EN CONTACTO CON OTRAS DOS

Una vez definidos los aspectos generales necesarios para establecer un algoritmo de empaquetamiento de partículas se deben formular los problemas a resolver.

Se desea hallar la posición de una curva continua cerrada en R^2 de manera que esté en contacto exteriormente con otras dos curvas continuas cerradas en R^2 simultáneamente. En lo sucesivo, se considerará que se tienen curvas de dimensiones e inclinación aleatorias determinadas previamente, pero después de definidos los ángulos de inclinación, estos no cambian más, y lo único que puede cambiar es la posición del centro. La formulación matemática es la siguiente:

Sean $P_i : R^2 \rightarrow R$, $i = \overline{1, 2}$, funciones continuas tales que $P_i(x) = 0$ sea una curva continua cerrada, y $P_i(x) < 0$ si y solo si x pertenece al interior de la curva. Sea $P_3 : R^2 \times R^2 \rightarrow R$, una función continua tal que $P_3(x, y_0) = 0$ sea una curva continua cerrada para y_0 constante, y además $P_3(x, y_0) > 0$ si y solo si x pertenece al interior de la curva. Se tiene además que geoméricamente, y_0 representa el centro de la curva $P_3(x, y_0) = 0$. Se necesita hallar y de manera que $P_3(x, y) = 0$ esté en contacto exterior con $P_1(x) = 0$ y $P_2(x) = 0$ simultáneamente.

El problema queda planteado en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} F_i(y) = 0 \\ P_3(q_i, y) > 0 \end{cases} \quad i = \overline{1, 2} \quad (1)$$

donde

$$F_i(y) = \min_{P_3(x, y) = 0} P_i(x) \quad (2)$$

siendo $Dom_{F_i} = R^2$.

Las desigualdades del sistema (1) son para asegurar que el contacto entre las curvas $P_3(x) = 0$ y $P_1(x) = 0$ y $P_2(x) = 0$ sea un contacto exterior, donde q_i es un punto interior a $P_i(x) = 0$. Es obvio además que $F_i(y) < 0$ si y solo si existe algún punto de $P_3(x, y) = 0$ encerrado dentro de $P_i(x) = 0$, y es positivo si $P_3(x, y) = 0$ está por fuera de $P_1(x) = 0$ y $P_2(x) = 0$ y no comparte con estas dos últimas ningún punto en común.

Posibles vías de solución del problema general

Formulado el problema, se procede a la solución del mismo. Las únicas posibilidades para el sistema (1) son:

- tener dos soluciones, en el caso general (Figura 1).
- tener solución única, en el caso degenerado (Figura 2).
- no tener soluciones reales (Figura 3).

Una variante de solución del sistema (1) es resolver el problema

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && (F_1(y))^2 + (F_2(y))^2 \\ &s.a. && P_3(q_i, y) > 0 \end{aligned} \quad (3)$$

el cual contiene las soluciones de (1). En el caso de que se conozca el radio de la circunferencia circunscrita a cada curva, es posible acotar y dentro de un rectángulo al resolver (1) ó (3), y se le puede agregar a estos sistemas la restricción lineal adicional $y \in R_0$, donde R_0 es un rectángulo de R^2 , lo cual simplifica el problema al reducir el espacio de búsqueda.

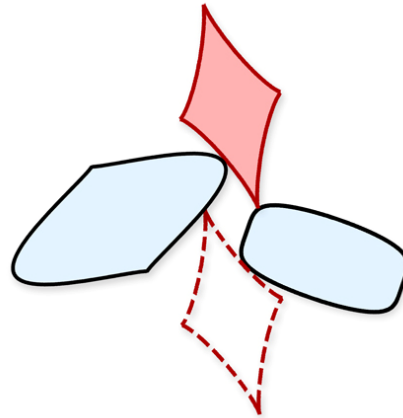


Figura 1. Caso general. La partícula roja puede estar en exactamente dos posiciones para estar en contacto con cada una de las curvas negras simultáneamente

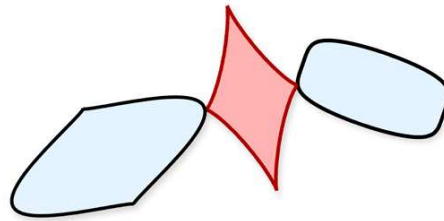


Figura 2. Caso degenerado. La partícula roja solo puede estar en exactamente una posición para estar en contacto cada una de las curvas negras simultáneamente

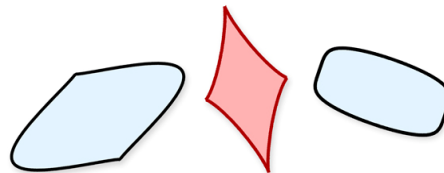


Figura 3. Caso de no solución. La partícula roja no puede estar en ninguna posición para estar en contacto simultáneamente con las dos curvas negras

Problema específico para el caso de partículas obtenidas por funciones de supercuádricas en 2D

Después de haber planteado el caso general y establecer las vías de solución se puede particularizar al caso específico de partículas obtenidas a través de funciones de supercuádricas.

Para plantear el problema, aparte de lo expuesto en el epígrafe “Posibles vías de solución del problema general”, sólo hay que especificar que:

$$P_i(x) = \left| \frac{(A_i x)_1}{a_i} \right|^{\alpha_i} + \left| \frac{(A_i x)_2}{b_i} \right|^{\beta_i} - 1 \quad (4)$$

y

$$P_3(x, y) = \left| \frac{(B_y x)_1}{a_3} \right|^{\alpha_3} + \left| \frac{(B_y x)_2}{b_3} \right|^{\beta_3} - 1 \quad (5)$$

donde $A_i : R^2 \rightarrow R^2, x \mapsto ((A_i x)_1, (A_i x)_2)$ es la composición de una rotación y una traslación en R^2 , $B_y x = ((B_y x)_1, (B_y x)_2) = Mx + z$, siendo M una matriz de rotación en R^2 , y los valores $a_i, b_i, \alpha_i, \beta_i \in R^{++}$, $i = \overline{1, 3}$, son constantes conocidas. Además, los subíndices en el término de los numeradores en (4)-(6) indican el índice de la coordenada en R^2 .

Las curvas P_i dadas por (4) son las llamadas supercuádricas, las cuales tienen la ecuación canónica siguiente:

$$P(x) = 0,$$

donde

$$P(x) = \left| \frac{x_1}{a} \right|^\alpha + \left| \frac{x_2}{b} \right|^\beta - 1 \quad (6)$$

para $a, b, \alpha, \beta \in R^{++}$ (16).

En forma paramétrica esta curva se puede representar por

$$r(t) = (a \operatorname{sg}(\cos t) |\cos t|^{\frac{2}{\alpha}}, b \operatorname{sg}(\sin t) |\sin t|^{\frac{2}{\beta}}), \quad t \in [0, 2\pi] \quad (7)$$

Aprovechando la expresión (7), es posible escribir la función $F_i(y)$ de (2) como:

$$F_i(y) = \min_{t \in [0, 2\pi]} P_i(\tilde{B}_y x(t)) \quad (8)$$

con lo cual solo hay que resolver un problema de minimización univariada para cada evaluación de $F_i(y)$, teniéndose además que la parametrización $x = x(t)$ viene dada por:

$$x(t) = (a_3 \operatorname{sg}(\cos t) |\cos t|^{\frac{2}{\alpha_3}}, b_3 \operatorname{sg}(\sin t) |\sin t|^{\frac{2}{\beta_3}}), \quad t \in [0, 2\pi] \quad (9)$$

y

$$\tilde{B}_y x = (B_y x)^{-1} = M^{-1}(x - y),$$

donde para invertir M solo hay que cambiarle el signo a los términos no diagonales de la matriz correspondiente debido a que es de rotación.

Se tiene además que en el problema específico de las supercuádricas, se puede acotar a y dentro de un rectángulo, lo cual facilita los problemas a resolver.

Construcción de superficies en 3D

Las formulaciones de los epígrafes anteriores se pueden extender al caso de n dimensiones. A continuación se expone el caso 3D, en el cual hay que construir una superficie en contacto exterior con otras tres.

Sean $P_i : R^3 \rightarrow R$, $i = \overline{1, 3}$, funciones continuas tales que $P_i(x) = 0$ sea una superficie continua cerrada, y además $P_i(x) < 0$ si y solo si x pertenece al interior de la superficie. Sea $P_4 : R^3 \times R^3 \rightarrow R$, una función continua tal que $P_4(x, y_0) = 0$ sea una superficie continua cerrada para y_0 constante, y además $P_4(x, y_0) < 0$ si y solo si x pertenece al interior de la superficie. Se tiene además que geoméricamente, y_0 representa el centro de la superficie $P_4(x, y_0) = 0$.

El problema queda planteado en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} F_i(y) = 0 \\ P_4(q_i, y) > 0 \end{cases} \quad i = \overline{1, 3} \quad (10)$$

donde

$$F_i(y) = \min_{P_4(x,y)=0} P_i(x) \quad (11)$$

siendo $Dom_{F_i} = R^3$.

El sistema (11) se puede plantear como un problema de optimización de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && (F_1(y))^2 + (F_2(y))^2 + (F_3(y))^2 \\ &\text{s.a.} && P_4(q_i, y) > 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Las desigualdades del sistema (10) son para asegurar que el contacto entre las superficies P_4 y P_1 y P_2 y P_3 sea un contacto exterior, donde q_i es un punto interior a la superficie $P_i(x) = 0$. Es obvio que $F_i(y) < 0$ si y solo si existe algún punto de la superficie $P_4(x, y) = 0$ encerrado dentro de la superficie $P_i(x) = 0$.

Al igual que en el caso 2D, a los sistemas se les puede agregar la restricción de que y pertenezca a un ortoedro en el caso de que se conozca el radio de la esfera circunscrita a cada una de las superficies.

Problema específico para el caso de partículas obtenidas por funciones de supercuádricas en 3D

Similarmente al caso bidimensional, solo es necesario especificar cuáles son las expresiones correspondientes a las P_i y la forma que toman las F_i .

Es suficiente con definir lo siguiente:

$$P_i(x) = \left(\left| \frac{(A_i x)_1}{a_i} \right|^{2/\beta_i} + \left| \frac{(A_i x)_2}{b_i} \right|^{2/\beta_i} \right)^{\beta_i/\alpha_i} + \left| \frac{(A_i x)_3}{c_i} \right|^{2/\alpha_i} - 1 \quad (13)$$

y

$$P_4(x, y) = \left(\left| \frac{(B_y x)_1}{a_4} \right|^{2/\beta_4} + \left| \frac{(B_y x)_2}{b_4} \right|^{2/\beta_4} \right)^{\beta_4/\alpha_4} + \left| \frac{(B_y x)_3}{c_4} \right|^{2/\alpha_4} - 1 \quad (14)$$

donde A_i es una transformación afín en R^3 , B_y es la composición de una rotación respecto a cada eje de coordenada y luego una traslación por el vector y en ese orden. Los valores $a_i, b_i, c_i, \alpha_i, \beta_i \in R^{++}$, $i = \overline{1, 4}$, son constantes conocidas, y los subíndices del numerador de los términos modulares indican el índice de la coordenada en R^3 .

Las superficies P_i dadas por (13) son las supercuádricas en 3D, las cuales tienen la ecuación canónica siguiente formulada en¹⁶:

$$P(x) = 0,$$

donde

$$P_i(x) = \left(\left| \frac{x_1}{a} \right|^{2/\beta} + \left| \frac{x_2}{b} \right|^{2/\beta} \right)^{\beta/\alpha} + \left| \frac{x_3}{c} \right|^{2/\alpha} - 1 \quad (15)$$

para $a, b, c, \alpha, \beta \in R^{++}$.

En forma paramétrica esta superficie se puede representar por

$$\begin{aligned} r(t, u) = & (a \operatorname{sg}(\sin t) \operatorname{sg}(\cos u) |\sin t|^\alpha |\cos u|^\beta, \\ & b \operatorname{sg}(\sin t) \operatorname{sg}(\sin u) |\sin t|^\alpha |\sin u|^\beta, c \operatorname{sg}(\cos t) |\cos t|^\alpha) \end{aligned} \quad (16)$$

con $0 \leq t \leq \pi$ y $-\pi \leq u < \pi$.

Aprovechando la expresión (16), es posible escribir la función $F_i(y)$ de (11) como:

$$F_i(y) = \min_{\substack{t \in [0, \pi] \\ u \in [-\pi, \pi]}} P_i(\tilde{B}_y x(t, u)) \quad (17)$$

con lo cual solo hay que resolver un problema de minimización en dos variables para cada evaluación de $F_i(y)$, teniéndose además que la parametrización $x = x(t, u)$ viene dada por:

$$x(t, u) = (a_4 \operatorname{sg}(\sin t) \operatorname{sg}(\cos u) |\sin t|^\alpha |\cos u|^\beta, \quad (18) \\ b_4 \operatorname{sg}(\sin t) \operatorname{sg}(\sin u) |\sin t|^\alpha |\sin u|^\beta, \quad c_4 \operatorname{sg}(\cos t) |\cos t|^\alpha)$$

con $0 \leq t \leq \pi$ y $-\pi \leq u < \pi$ $\tilde{B}_y = B_y^{-1}$.

Se tiene además que en el problema específico de las supercuádricas, se puede acotar a y dentro de un ortoedro, lo cual facilita los problemas a resolver.

Construcción aproximada de curvas y superficies en contacto exterior

En las situaciones en que se desee lograr una mayor eficiencia al resolver los problemas planteados en las secciones anteriores, se puede formular un procedimiento algo burdo pero que acelera la velocidad de los cálculos y solo requiere conocer una función que determine cuándo dos curvas (caso 2D) o dos superficies (caso 3D) se intersectan. Este procedimiento tiene la desventaja de en el caso general, habrá un solo contacto entre partículas, y no dos en el caso 2D y tres en el caso 3D como en las formulaciones exactas.

En 2D, la idea consiste en colocar la partícula que se desea esté en contacto con las otras dos, en la mediatriz del segmento que une los centros de las dos iniciales, y luego acercarla a estas mediante el Método de la Bisección, desplazándola a lo largo de la recta mencionada, hasta que la partícula esté en contacto exterior con al menos una de las dos iniciales sin cortar a la otra (Figura 4). Para poder aplicar dicho método, se necesita conocer una función que permita determinar cuándo dos curvas se cortan. En el caso general se pueden utilizar las funciones definidas en (2), pero para el caso de supercuádricas es más conveniente utilizar la aproximación con polígonos formulada en¹⁵.

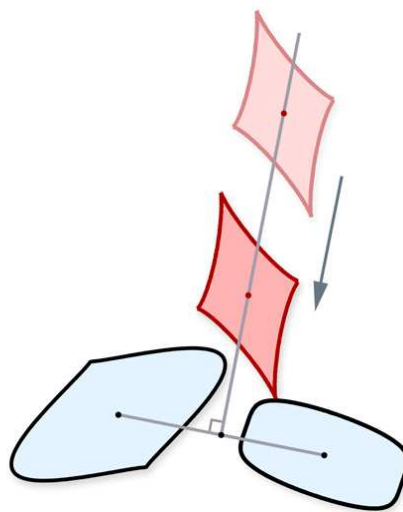


Figura 4. Construcción aproximada de una curva en contacto con otras dos

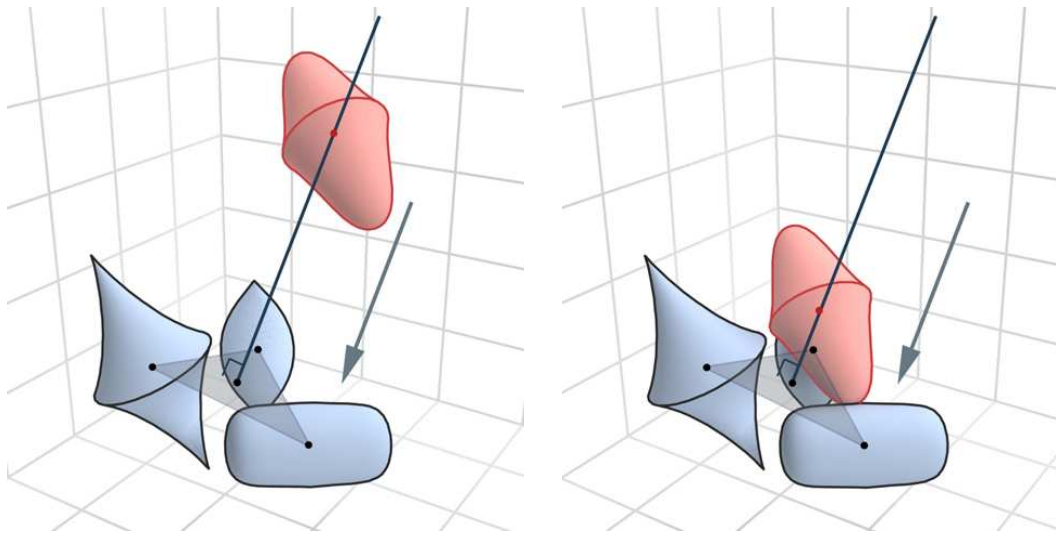


Figura 5. Construcción aproximada de una superficie en contacto con otras tres

En el caso tridimensional, lo único que cambia es que en vez de un segmento se tiene el triángulo cuyos vértices son los centros de las tres partículas iniciales, y en vez de la mediatriz de un segmento se tiene la recta perpendicular al centroide del mencionado triángulo (Figura 5).

Para formular el problema matemáticamente, sean p_i , $i = \overline{1, n}$ ($n = 2$ en el caso 2D y $n = 3$ en el caso 3D) partículas fijas de centro c_i y $p(c)$ una partícula que se desea centrar en un punto c de manera que esté en contacto con al menos una de las p_i sin solaparse con ninguna de ellas y esté lo más cerca posible de todas las p_i .

Sean $x_0 = (1/n) \sum_{i=1}^n c_i$ el centroide del lugar geométrico s (s es el segmento de extremos c_1 y c_2 en el caso 2D y el triángulo de vértices c_1 , c_2 y c_3 en el caso 3D - Figuras 4 y 5 -), d un vector tal que $d \perp s$ y $\|d\| = 1,5r_{\text{máx}}$, de manera que $p(x_0 + d) \cap p_i = \phi$ para $i = \overline{1, n}$, lo cual se garantiza si se toma $r_{\text{máx}} = \{r, r_1, \dots, r_n\}$, siendo r el radio de una esfera (o circunferencia en el caso 2D) que contiene a $p(c)$ y r_i el radio de una esfera (o circunferencia en el caso 2D) que contiene a p_i .

Teniendo en cuenta lo anterior, es posible definir la función f siguiente:

$$f : [0, 1] \rightarrow R$$

$$f(\lambda) = \begin{cases} -1, & \text{if } p(x_0 + \lambda d) \cap p_i \neq \phi \text{ for all the } p_i \\ 0, & \text{if } p(x_0 + \lambda d) \text{ is in contact with some of the } p_i \text{ without overlapping with any} \\ 1, & \text{if } p(x_0 + \lambda d) \text{ overlaps with some of the } p_i \end{cases}$$

Luego, si $f(0) \geq 0$, se debe centrar a $p(c)$ en el punto $c = x_0$. En caso contrario, se debe centrar en un punto $c = x_0 + \lambda_0 d$, donde λ_0 es una raíz de f en $[0, 1]$. Esta raíz se puede hallar aplicándole a f el Método de la Bisección¹⁸, sin importar que en este caso f no sea continua, porque la forma en que está definida asegura que habrá convergencia hacia su raíz en $[0, 1]$.

MÉTODOS NUMÉRICOS DE OPTIMIZACIÓN EMPLEADOS PRELIMINARMENTE

Una vez formulado el problema se evidencia la necesidad de emplear una variante de solución, que debe ser en este caso algún método de optimización. En esta investigación se han empleado el Método de Punto Interior y Nelder-Mead¹⁹⁻²¹.

Método de punto interior

El algoritmo de punto interior resuelve un problema de optimización restringida mediante la combinación de restricciones y la función objetivo a través del uso de la función barrera. El problema específico debe ser convertido a la forma estándar

$$\begin{aligned} \text{mín} \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & h(x) = 0, \quad x \geq 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Las constantes no negativas son entonces reemplazadas mediante la adición de un término barrera a la función objetivo

$$\begin{aligned} \text{mín} \quad & \psi_\mu(x) = f(x) - \mu \sum_i \ln(x_i) \\ \text{s.a.} \quad & h(x) = 0 \end{aligned}$$

donde: $\mu > 0$ es un parámetro barrera.

La condición necesaria de Karush-Kuhn-Tucker(KKT) (asumiendo, por ejemplo, que el gradiente de h es linealmente independiente) es

$$\nabla \psi_\mu(x) - y^T A(x) = 0, \quad h(x) = 0$$

donde $A(x) = (\nabla h_1(x), \nabla h_2(x), \dots, \nabla h_m(x))^T x$ es de dimensión $m \times n$, o

$$\begin{aligned} g(x) - \mu X^{-1}e - y^T A(x) &= 0 \\ h(x) &= 0 \end{aligned}$$

Aquí X es una matriz diagonal, con el elemento diagonal i de x_i si $i \in I$, o 0. Introduciendo variables duales $z = \mu X^{-1}e$ se obtiene

$$\begin{aligned} g(x) - z - y^T A(x) &= 0 \\ h(x) &= 0 \\ ZXe &= \mu e. \end{aligned} \quad (20)$$

Este sistema no lineal puede ser resuelto con el método de Newton²². Sea $L(x, y) = f(x) - h(x)^T y$ y $H(x, y) = \nabla^2 L(x, y) = \nabla^2 f(x) - \sum_{i=1}^m y_i \nabla^2 h_i(x)$. Entonces la matriz de Jacobi para el sistema anterior (14) es

$$\begin{pmatrix} H(x, y) & -A(x)^T & -I \\ -A(x) & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g(x) - z - y^T A(x) \\ -h(x) \\ ZXe - \mu e \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} d_\psi \\ d_h \\ d_{xz} \end{pmatrix}.$$

Sustituyendo la igualdad $\delta_z = -X^{-1}(Z\delta_x + d_{xz})$ para eliminar δ_z se tiene $(H(x, y) + X^{-1}Z)\delta_x - A(x)^T \delta_y = -d_\psi - X^{-1}d_{xz}$, quedando

$$\begin{pmatrix} H(x, y) + X^{-1}Z & -A(x)^T \\ A(x)^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_x \\ \delta_y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} d_\psi + X^{-1}d_{xz} \\ -d_h \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g(x) - A(x)^T y - \mu X^{-1}e \\ -h(x) \end{pmatrix} \quad (21)$$

Así, el problema no lineal restringido puede ser resuelto iterativamente mediante

$$x := x + \delta_x, \quad y := y + \delta_y, \quad z := z + \delta_z \quad (22)$$

con la dirección de búsqueda $(\delta_x, \delta_y, \delta_z)$ obtenida después de resolver el anterior sistema jacobiano (21).

Para asegurar la convergencia, se necesita tener alguna medida del éxito. Una forma de hacer esto es usar una función de mérito, como una *función lagrangiana aumentada de mérito*.

En este método es necesario emplear una tolerancia numérica. El criterio de convergencia para el algoritmo de punto interior es:

$$\|g(x) - z - y^T A(x)\| + \|h(x)\| + \|ZXe - \mu e\| \leq \varepsilon$$

Función lagrangiana aumentada de mérito

La siguiente igualdad define una función lagrangiana aumentada de mérito:

$$\phi(x, \beta) = f(x) - \mu \sum_i \ln(x_i) - h(x)^T \lambda + \beta \|h(x)\|^2 \quad (23)$$

Aquí $\mu > 0$ es el parámetro barrera y $\beta > 0$ un parámetro de penalización. Se puede probar que si la matriz $N(x, y) = H(x, y) + X^{-1}Z$ es definida positiva, entonces o bien la dirección de búsqueda dada por (22) es una dirección de descenso para la anterior función de mérito (23), o (x, y, z, μ) satisface las condiciones de KKT (20). Una búsqueda lineal es realizada a lo largo de la dirección de búsqueda, con la longitud inicial del paso escogida lo más cercana posible a 1, mientras se mantienen las restricciones positivas. Un procedimiento de recorrido hacia atrás es entonces usado hasta que la condición de Armijo es satisfecha en la función de mérito, $\phi(x + t\delta_x, \beta) \leq \phi(x, \beta) + \gamma t \nabla \phi(x, \beta)^T \delta_x$, con $\gamma \in (0, 1/2]$.

Método numérico de optimización de Nelder-Mead

El método de Nelder–Mead es un método de búsqueda directa. Para una función de n variables, el algoritmo mantiene un conjunto de $n + 1$ puntos formando los vértices de un polígono en un espacio n -dimensional. Este método es frecuentemente denominado el Método Simplex, el cual no debería ser confundido con el bien conocido Método Simplex para programación lineal.

En cada iteración, los $n + 1$ puntos x_1, x_1, \dots, x_{n+1} forman un polígono. Los puntos son ordenados de manera tal que $f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq f(x_{n+1})$. Un nuevo punto es entonces generado para reemplazar el peor punto x_{n+1} .

Sea c el centroide del polígono consistiendo en los mejores n puntos, $c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$. Un punto de prueba x_t es generado a través de reflejar el peor punto a través del centroide, $x_t = c + \alpha(c - x_{n+1})$, donde $\alpha > 0$ es un parámetro.

Si el nuevo punto x_t no es ni un nuevo peor punto ni un nuevo mejor punto, $(f(x_1) \leq f(x_t) \leq f(x_n))$, x_t reemplaza a x_{n+1} .

Si el nuevo punto x_t es mejor que el mejor punto ($f(x_t) < f(x_1)$), la reflexión es muy exitosa y puede ser llevada más aún hasta $x_e = c + \beta(x_t - c)$, donde $\beta > 1$ es un parámetro para expandir el polígono. Si la expansión es exitosa ($f(x_e) < f(x_t)$), x_e reemplaza a x_{n+1} .

Si el nuevo punto x_t es peor que el segundo peor punto ($f(x_t) \geq f(x_n)$), se asume que el polígono es muy grande y necesita ser contraído. Un nuevo punto de prueba es definido como

$$x_c = \begin{cases} c + \gamma(x_{n+1} - c), & \text{si } f(x_t) \geq f(x_{n+1}) \\ c + \gamma(x_t - c), & \text{si } f(x_t) < f(x_{n+1}) \end{cases}$$

donde $0 < \gamma < 1$ es un parámetro. Si $f(x_c) < \text{Min}\{f(x_{n+1}), f(x_t)\}$, la contracción es exitosa y x_c reemplaza a x_{n+1} . En caso contrario una subsiguiente contracción es llevada a cabo.

Se asume que el proceso tiene convergencia si la diferencia entre los mejores valores de la función en el nuevo y el viejo polítopo, así como la distancia entre el nuevo mejor punto y el viejo mejor punto, son menores que tolerancias prefijadas de antemano.

Estrictamente hablando, Nelder–Mead no es un verdadero algoritmo de optimización global. Sin embargo, en la práctica tiende a funcionar razonablemente bien para problemas que no tienen muchos mínimos locales.

Problemáticas detectadas en cuanto a los métodos de optimización y propuestas de solución

Durante la resolución de los problemas de optimización planteados al empaquetar supercuádras, surgieron dos dificultades principales: (1) El costo computacional (en cuanto a tiempo) del algoritmo (implementado en el *Mathematica*¹⁹ es muy grande y (2) en muchos casos no se logró encontrar el mínimo global, provocando que se obtuvieran partículas que estaban en contacto con una sola o con ninguna.

Una posible mejora de los métodos de solución para lograr que cada curva esté en contacto con al menos otras dos, es encontrar mejores vías de acotar el espacio solución que se le provee a los algoritmos de optimización, o proveerle mejores puntos iniciales. Esta cuestión no está resuelta, como tampoco la disminución del tiempo de solución de cada uno de los problemas de optimización. En caso de no encontrarse una buena solución por la primera vía formulada, se recomienda emplear la alternativa del método de acercamiento de partículas explicado en la sección “Construcción aproximada de curvas y superficie en contacto exterior”.

Pseudocódigo de empaquetamiento o generación de partículas (supercuádras)

Después de formular el problema y establecer los diversos métodos numéricos que pueden servir para la solución del mismo, es necesario establecer el procedimiento lógico para obtener los empaquetamientos de partículas. En este caso se empleará el siguiente pseudo-código:

Algoritmo para generar un empaquetamiento de supercuádras.

Paso 1) (Inicialización)

- Construir dos partículas iniciales que estén en contacto.
- $C_{ext} = \{1, 2\}$

Paso 2)

Mientras $C_{ext} \neq \phi$

Paso 2.1)

$p_{piv} \leftarrow i$ para algún $1 \leq i \leq C_{ext}$ seleccionado aleatoriamente.

Paso 2.2)

Si p_{piv} está rodeada por sus vecinas o corta el contorno de la geometría que delimita el empaquetamiento, entonces

- $C_{ext} \leftarrow C_{ext} - \{p_{piv}\}$
- ir al paso 2)

En caso contrario ir al paso 2.3)

Paso 2.3)

- Construir la partícula p en contacto con p_{piv} y una de sus vecinas, de manera que no se intersecte con ninguna otra y esté dentro del contorno que delimita el empaquetamiento.

- $C_{ext} \leftarrow C_{ext} \cup \{p\}$

- Generar los parámetros aleatorios que definen la nueva partícula a construir.
- Ir al paso 2.1.

Nota:

1) En el pseudocódigo anterior, la partícula i -ésima se identifica con el número i .

El procedimiento de generación anterior se basa en mantener en todo momento un frente activo que se actualiza cada vez que se agrega una partícula o cada vez que una partícula está totalmente rodeada por otras, por lo que puede considerarse como un esquema de avance frontal. El frente activo es denotado por la variable C_{ext} .

La variable p_{piv} se utiliza para denotar una partícula llamada pivote, que representa la parte del frente que va a crecer inmediatamente, ya que la nueva partícula a agregar estará en contacto con p_{piv} y una de sus vecinas.

APLICACIONES PRELIMINARES

Con el objetivo de demostrar la efectividad y viabilidad de la formulación realizada se realizaron tres ejemplos muy preliminares (Figuras 6-8), en los cuales se calculó la posición de la curva roja (partícula roja) para que estuviera en contacto exteriormente con las dos curvas negras (partícula negra). Nótese que en el caso general, la curva roja (partícula roja) puede permanecer en dos posiciones para estar en contacto con las otras dos curvas negras.

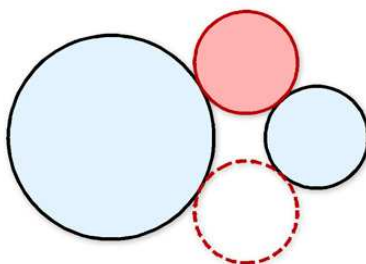


Figura 6. Circunferencia en contacto con otras dos (caso particular de supercuádricas)

Los ejemplos mencionados en el párrafo anterior y los que se explican a continuación, se han efectuado empleando métodos de solución numérica por optimización implementados en el software *Mathematica*¹⁹.

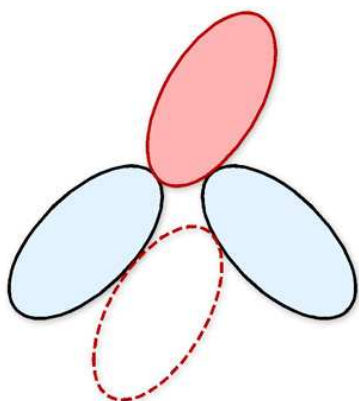


Figura 7. Elipse en contacto con otras dos. Caso particular de supercuádricas

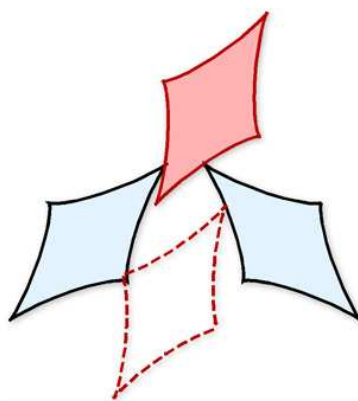


Figura 8. Supercuádrica genérica en contacto con otras dos

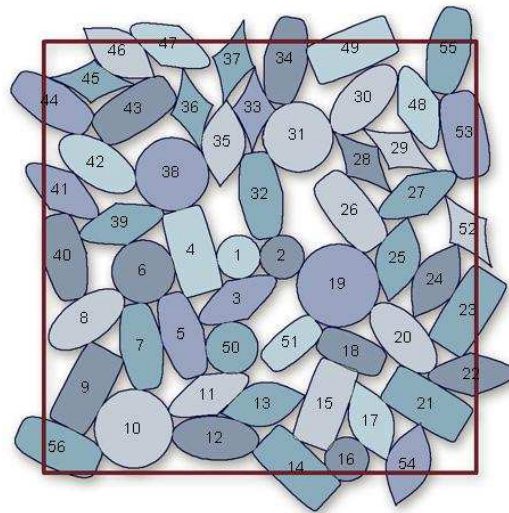


Figura 9. Generación o Empaquetamiento de partículas empleando funciones de supercuádricas y utilizando como método numérico de solución el Algoritmo de Punto Interior

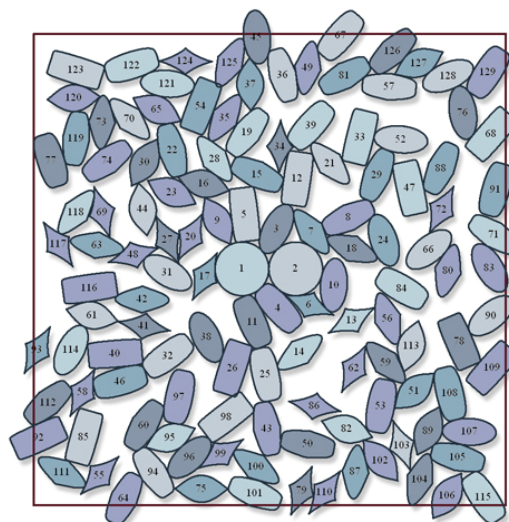


Figura 10. Generación o Empaquetamiento de partículas empleando funciones de supercuádricas y utilizando como método numérico de solución el Algoritmo de Nelder-Mead

En el ejemplo de la Figura 9 se empleó el Método de Punto Interior y se puede observar que cada supercuádrica está en contacto con al menos otras dos. Por ejemplo, la curva o partícula 3 está en contacto con las partículas 1 y 2; la partícula 52 está en contacto con la 24 y la 27, etc. Sin embargo, en varios casos fue necesario proveerle al método de optimización un espacio más acotado para obtener la solución correcta. Este ejemplo se realizó para mostrar cómo debería funcionar el algoritmo en condiciones ideales.

En la Figura 10 se empleó el Método de Nelder-Mead para obtener el empaquetamiento, y se puede observar que hubo deficiencias en algunas soluciones (no siempre se pudo encontrar el mínimo global), ya que en algunos casos hay partículas que están en contacto con una sola o incluso con ninguna.

Una alternativa a los problemas explicados en los dos párrafos anteriores puede ser utilizar el método de acercamiento de partículas explicado en la sección “Construcción aproximada de curvas y superficies en contacto exterior”, que se basa, en el caso 2D, en acercar la tercera partícula a las dos iniciales. Se recomienda también aplicar el acercamiento de partículas en 3D explicado en el mismo epígrafe “Construcción aproximada de curvas y superficies en contacto exterior” si se presentan las mismas dificultades al realizar la implementación con supercuádricas tridimensionales.

Es necesario aclarar que los resultados computacionales presentados solo tienen por objetivo demostrar la validez de las formulaciones matemáticas, aunque el trabajo futuro está encaminado a lograr la eficiencia computacional y una mejora en los diferentes métodos y técnicas aplicadas. Este último aspecto se refiere a la necesidad de encontrar los métodos de optimización que presenten un mejor desempeño y fiabilidad para los problemas presentados.

CONCLUSIONES

En esta investigación se ha llegado a formular y resolver el problema de la generación de partículas con un criterio muy general, y como caso puntual se obtienen empaquetamientos empleando funciones de supercuádricas. Esta formulación tiene la ventaja de que permite obtener diferentes tipos de partícula (círculos, elipses, y partículas con puntos angulosos que pueden ser cóncavas o convexas) con solamente variar los parámetros de una misma ecuación.

Se debe destacar que la complejidad matemática del problema y del método de solución es marcada y es un aspecto a tener en cuenta en el costo computacional. A lo anteriormente señalado hay que añadir que se hace necesario continuar estudiando la problemática con el objetivo de encontrar los métodos de optimización que presenten un desempeño y fiabilidad aceptables para los problemas presentados.

Desde el punto de vista matemático se ha formulado, de manera completamente general, un procedimiento para construir una curva en contacto con otras dos (caso 2D), y se han presentado ejemplos preliminares de la aplicación de esta formulación a curvas supercuádricas. Adicionalmente se han presentado las formulaciones correspondientes en 3D.

El problema del empaquetamiento de partículas (supercuádricas) se ha presentado y resuelto por dos vías de solución: (1) la solución exacta mediante métodos de optimización y (2) una solución aproximada abordada como un problema de acercamiento de partículas a lo largo de una recta aplicando el Método de la Bisección. Estas dos formulaciones se pueden aplicar de modo individual para lograr empaquetamientos, pero por los estudios realizados hasta el momento se evidencia la posibilidad de combinarlos indistintamente para generar un mismo empaquetamiento.

Debido a la complejidad de los problemas de optimización que se resuelven, no siempre se logra encontrar los mínimos globales, por lo cual quedan varias partículas en contacto con una sola o incluso con ninguna, en los empaquetamientos obtenidos. Una alternativa de solución a esta problemática es precisamente lo expresado en el párrafo anterior y lo señalado en el epígrafe “Construcción aproximada de curvas y superficies en contacto exterior”.

Las implementaciones realizadas en la presente investigación solo tuvieron como objetivo probar la validez de las formulaciones teóricas, y no permiten generar una gran cantidad de partículas en un tiempo razonable, ni hacerlo con la calidad requerida, por lo cual el trabajo futuro está encaminado a la búsqueda de métodos numéricos que posibiliten resolver los problemas planteados de manera eficiente, fiable y exacta; así como a la implementación de las formulaciones para 3D.

Se deja abierta una serie de líneas futuras de investigación, que permitirán obtener empaquetamientos de partículas con el empleo de métodos fiables, que posibiliten la implementación computacional de los algoritmos en un lenguaje de programación adecuado.

REFERENCIAS

- 1 E.N. Duarte, S.A.G. Oliveira, “Estudo numérico do campo de tensoes de contato em componentes revestidos”, *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **23**, N° 1, pp. 3-14, (2007).
- 2 A. Foces, J.A. Garrido, “Análisis de uniones atornilladas viga-pilar realizadas con chapa frontal a tope”, *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **23**, N° 1, pp. 35-53, (2007).
- 3 F. Martín de la Escalera, S. Santos, “Obtención de curvas de resistencia residual en probetas M(T) y C(T) mediante criterio de CTOA”, *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **23**, N° 1, pp. 117-149, (2007).
- 4 R. Gutiérrez, U. Lugrís, J. Cuadrado, L.E. Romera, “Modelización de sistemas multicuerpo flexible para análisis dinámico con no linealidad geométrica”, *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **23**, Vol. **2**, pp. 159-176, (2007).
- 5 S. Botello, H. Esqueda, A. Hernández, “Estrategias evolutivas aplicadas en la optimización de problemas con interacción fluido-sólido”, *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **23**, Vol. **4**, pp. 415-428, (2007).
- 6 J. Rojek, E. Oñate, F. Zárate, C.A. Recarey, “Discrete Element Modelling of Rock Cutting Processes Interaction with Evaluation of Tool Wear”, Monografía CIMNE N° 87, (2003).
- 7 C.A. Recarey, E. Oñate, J. M. Canet, F. Zárate, J. Rojek, S. Burrel. Estudio de estimación de parámetros constitutivos en el método de elementos discretos o de partículas, Monografía CIMNE N° 85, (2005).
- 8 Y. Pérez Brito, “Implementación del empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos”, Tesis de Grado de la Universidad Central de Las Villas, Cuba, (2007).
- 9 R. Roselló Valera, “Biblioteca de clases para su uso en la fase de empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos”, Tesis de Grado de la Universidad Central de Las Villas, Cuba, (2007).
- 10 I. Pérez, “Método de Elementos Distintos”, Tesis de grado de la Universidad Central de Las Villas, Cuba, (2006).
- 11 Y.T. Feng, K. Han, D.R.J. Owen, “An advancing front packing of Polygons, Ellipses and Spheres”, *In Discrete Element Methods*, pp. 93-98, Cook BK and Jensen RP (Eds), ASCE: New York, (2002).
- 12 H. Sakaguchi, A. Murakami, “Initial packing in discrete element modelling”, *In Discrete Element Methods*, pp. 104-106, Cook BK and Jensen RP (Eds), ASCE: New York, (2002).
- 13 R. Löhner, E. Oñate, “A general advancing front technique for filling space with arbitrary objects”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **61**, pp. 1977-1991, (2004).
- 14 S. Mohammadi, “*Discontinuum Mechanics using finite and discrete elements*, Wit Press, (2003).
- 15 Y.T. Feng, K. Han and D.R.J. Owen, “Polygon-based contact resolution for superquadrics”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **66**, N° 3, pp. 485-501, (2006).
- 16 Caroline Hogue, “Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries”, *Engineering Computations*, Vol. **15**, No° 3, pp. 374-390, (1998).
- 17 Y.T. Feng, K. Han and D.R.J. Owen, “Filling domains with disks: an advancing front approach”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **56**, pp. 699-713, (2003).
- 18 C.J. Zarowski, “*An Introduction to Numerical Analysis for Electrical and Computer Engineers*, Wiley and Sons, (2004).

19 <http://www.wolfram.com/>

20 S. Mehrotra, “On the implementation of a primal-dual interior point method”, *SIAM Journal on Optimization*, Vol. **2**, pp. 575–601, (1992).

21 J.A. Nelder and R. Mead, “A Simplex Method for Function Minimization”, *The Computer Journal*, Vol. **7**, pp. 308–313, (1965).

22 S.D. Conte, C. de Boor, “*Elementary Numerical Analysis*, McGraw-Hill Book Company, ISBN 0-07-012447-7, (1980).