

Algoritmo general de empaquetamiento de partículas para el método de elementos discretos

General particles packing algorithm for the discrete element method

Roberto L. Roselló Valera ¹, Irvin P. Pérez Morales ², Carlos A. Recarey Morfa ³

^{1,2,3}Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, Santa Clara, Cuba

Correo electrónico: rrosello@uclv.edu.cu

Este documento posee una licencia Creative Commons Reconocimiento/No Comercial 4.0 Internacional 

Recibido: 6 de septiembre de 2017 Aprobado: 19 de diciembre de 2017

Resumen

Se presenta una formulación genérica de un método de empaquetamiento de partículas basado en un método constructivo de avance frontal y para la generación de las dimensiones de las partículas se utilizan las técnicas de Monte Carlo. Este puede ser utilizado para obtener empaquetamientos virtuales de partículas de diversas formas geométricas, empleando para ello distribuciones continuas, discretas y empíricas en la obtención de las dimensiones de las partículas. Este algoritmo de empaquetamiento es tan flexible que permite disponer de varias alternativas de establecimiento del: Frente inicial de avance, técnicas de selección de frente de avance, construcción de la partícula en contacto con otras, y detección de intercesiones. Finalmente se efectúan aplicaciones básicas del algoritmo, demostrando su efectividad para la generación de altas cantidades de partículas. De modo análogo se obtienen medios altamente porosos con solo hacer una nueva inclusión de técnicas en el algoritmo, lo que demuestra su efectividad en estos casos. Se ilustra el empleo del algoritmo al caso de empaquetamientos reales de partículas empleando curvas granulométricas, aspecto que evidencia las potencialidades del algoritmo a casos reales. Como colofón se emplea el mismo en la obtención de los empaquetamientos de partículas en el mundo de la ingeniería.

Palabras claves: empaquetamiento de partículas, método de elementos discretos, método de avance frontal

Abstract

A generic formulation of a new method for packing particles is presented. It is based on a constructive advancing front method, and uses Monte Carlo techniques for the generation of particle dimensions. The method can be used to obtain virtual dense packings of particles with several geometrical shapes. It employs continuous, discrete and empirical statistical distributions in order to generate the dimensions of particles. The packing algorithm is very flexible and allows alternatives for: 1- The direction of the advancing front (inwards or outwards), 2- The selection of the local advancing front, 3- The method for placing a mobile particle in contact with others and 4- The overlap checks. The algorithm also allows obtaining highly porous media when it is slightly modified. The use of the

algorithm to generate real particle packings from grain size distribution curves, in order to carry out engineering applications, is illustrated. Finally, basic applications of the algorithm, which prove its effectiveness in the generation of a large number of particles, are carried out.

Key words: particle packing, Discrete Element Method, advancing front method

INTRODUCCIÓN

Las técnicas de modelación con métodos de partículas son alternativas que actualmente se están desarrollando en el contexto de la mecánica computacional. El Método de Elementos Discretos (MED) es una tecnología dentro de los métodos de partículas. Como mismo el Método de Elementos Finitos necesita discretizar el medio en elementos finitos, en el MED es necesario disponer de un empaquetamiento inicial de partículas. El desarrollo de técnicas de empaquetamiento es un tema esencial en la aplicación del MED. Aunque existen diferentes formulaciones para distintos tipos de partícula, la más trabajada es el caso de esferas debido principalmente a su simplicidad. La gran variedad de técnicas de generación de empaquetamientos puede dividirse en dos grandes grupos: las técnicas dinámicas [1-4] y las técnicas constructivas [5-7].

Las técnicas dinámicas se basan en los movimientos y cambio de tamaño de las partículas a través de varios pasos de tiempo. Los movimientos de las partículas pueden ser calculados a través de modelos puramente geométricos o a través de modelos dinámicos, donde cada partícula tiene una o más propiedades físicas, permitiendo encontrar una posición de equilibrio dependiendo de la interacción con las demás partículas. Dentro de las técnicas dinámicas se encuentran: compresión isotrópica, crecimiento de partículas, disposición gravitacional, disposición por capas (*multi-layer undercompaction method*), técnicas de agrupamiento colectivo (*collective rearrangement techniques*).

En las técnicas constructivas, los cálculos son puramente geométricos; la posición y a menudo el tamaño de cada partícula es mantenido durante todo el proceso. Por lo tanto, estos métodos son relativamente rápidos y tienden a respetar leyes de distribución de tamaño de partícula. En varios contextos, las técnicas constructivas son consideradas como solución ventajosa comparada con las dinámicas. Dentro de las técnicas constructivas se encuentran: arreglos regulares de partículas (*regular arrangements*), modelo de inhibición secuencial (*sequential inhibition model*), técnicas de sedimentación (*sedimentation techniques*), técnicas de frente cerrado (*closed front technique*), algoritmo de empaquetamiento hacia dentro (*inwards packing algorithm*).

La diferencia más significativa entre las técnicas dinámicas y constructivas es que las primeras presentan un alto costo computacional, mientras que en cuanto a fracción de volumen y otras técnicas de evaluación de los empaquetamientos de partículas, las constructivas son ligeramente superiores. Las tendencias de desarrollo de estas técnicas actualmente, es desarrollar alternativas que superen las desventajas señaladas en cada caso, y se vislumbra que la mejor alternativa es el uso combinado de estas técnicas, es decir, emplear primeramente técnicas constructivas con control estadístico de las geometrías de las partículas y de la fracción de volumen, entre otros aspectos, para finalmente aplicar al sistema de partículas resultante una técnica dinámica de mejoramiento [6, 7].

Las técnicas de generación y empaquetamiento de partículas están formuladas para diversos tipos de geometrías. Para el caso de partículas circulares, se presenta en [6] un algoritmo eficiente y sencillo. La extensión 2D a otras partículas de este, como polígonos y elipses, se ha desarrollado en [5], para lo que solo es necesario formular cómo detectar la intersección de dos partículas y cómo hallar el centro de la nueva que se agrega al empaquetamiento de manera que esté en contacto exterior con otras dos determinadas de antemano. Esta representación de las elipses ha sido extendida a 3D [8], aunque en este caso el algoritmo de generación es mucho menos eficiente y directo, y está basado en un esquema de cinemática de no interpenetración de cuerpos sólidos, es decir, emplea técnicas dinámicas de empaquetamiento.

El análisis de estado del arte de las técnicas de generación de partículas para el método de elementos discretos, deslumbra la necesidad de seguir desarrollando estas técnicas con la finalidad de establecer técnicas genéricas que posibiliten empaquetar con una misma formulación diversos tipos de partículas con bajo costo computacional y que se ajuste a las necesidades de las problemáticas del mundo de la ingeniería.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se presenta una nueva variante de generación de partículas mediante técnicas de avance frontal. La formulación del algoritmo se basa en dos pasos esenciales. El primero, de inicialización, consiste en crear el frente inicial de avance (grupo de partículas en los bordes de un sistema de partículas durante la generación de estas). El segundo, que se repite sucesivamente hasta el final, consiste en la construcción de una nueva partícula en contacto con las que forman el frente de avance actualizándose este constantemente. Los pasos para la implementación computacional del algoritmo de avance frontal propuesto se muestran en el Pseudocódigo 1.

Entrada: tipo de partícula, geometría contenedora G (es la región del espacio que contendrá el empaquetamiento)

Paso 1) (Inicialización)

- Construir n partículas iniciales $e_1, e_2, e_3, \dots, e_n$, tan cercanas entre sí como sea posible:
 $E := C_{ext} := \{e_1, e_2, e_3, \dots, e_n\}$

Aspectos esenciales del paso:

- Selección del tipo de partícula (o combinaciones) a generar.
- Técnica de Monte Carlo para generar la geometría de las partículas
- Selección de la forma de construir las $e_i, i = 1, n$ partículas

Paso 2)
 $C_{ext} \neq \phi$ Mientras

Paso 2.1) Generar los parámetros aleatorios de la nueva partícula que será agregada al conjunto. **Paso 2.2)** (Selección de la partícula pivote y vecinas de esta) $e_{piv} :=$ elemento de C_{ext} $vec :=$ partículas vecinas de e_{piv}

Paso 2.3)
 Intentar construir una partícula e_{new} en contacto con e_{piv} y dos elementos $e_i, e_j \in vec$, de manera que no corte ningún elemento de E y esté contenida en G .
 Si esto es posible,
 $C_{ext} := C_{ext} \cup \{e_{new}\}$ $E := E \cup \{e_{new}\}$
 Si no es posible,
 $C_{ext} := C_{ext} - \{e_{piv}\}$ En caso contrario

Aspectos esenciales del paso:

- Técnica de Monte Carlo para definir la geometría de las partículas.
- Técnicas de selección del frente de avance.
- Construcción de la partícula en contacto exterior con otras.
- Técnicas de consulta espacial o búsqueda de vecindad.
- Detección de intersecciones entre partículas.

Paso 3) (Opcional) Aplicación de una técnica dinámicas o de reacomodamiento al sistema de partículas (Este paso se realiza para eliminar inestabilidades físicas, aumentar la FV, etcétera).

Pseudocódigo 1. Algoritmo de avance frontal en 3D

El algoritmo concluye en un número finito de pasos lo cual se garantiza debido a que solo un número finito de partículas de radios acotados pueden estar contenidas en una geometría de volumen finito sin que se intersequen. Para hacer uso del algoritmo con otros tipos de partículas el cambio fundamental requerido se encuentra en el procedimiento de colocar una partícula en contacto con otras tres. Aunque este procedimiento puede no ser sencillo para el caso de formas no esféricas, el algoritmo permanece esencialmente igual.

En la figura 1 se muestra un ejemplo del paso 2 del Pseudocódigo 1 para 2D.

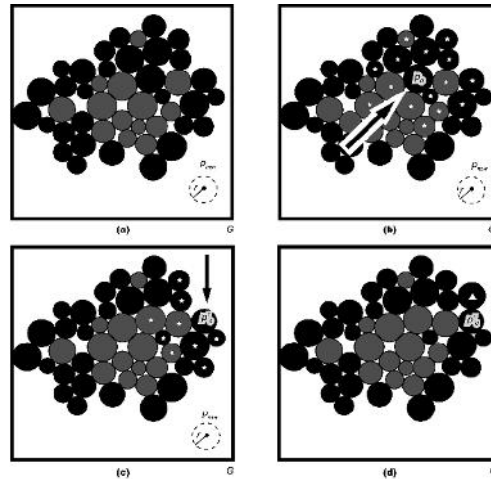


Fig. 1. Ejemplo del paso 2 del Pseudocódigo 1 para 2D

Análisis de complejidad del algoritmo

El algoritmo requiere la entrada de las cotas inferior y superior r_{\min} y r_{\max} respectivamente de los radios de las partículas. La existencia del intervalo $I = [r_{\min}, r_{\max}]$ que contiene los radios de todas las partículas implica que existe una cota superior $n_p \in \mathbb{N}$ para el número de partículas que pueden ser tangentes a cualquier partícula generada. Esto también implica que existe una cota superior $n_v \in \mathbb{N}$ para el número de elementos que puede tener el conjunto V (véase el paso 2.1 del Pseudocódigo 1). Ambos números n_p y n_v solo dependen de I .

Debido a que para encontrar las vecinas de las partículas se usa una división regular del espacio en celdas, y el tamaño de las celdas solamente depende de I , cada cálculo de V en el paso 2.1 toma un tiempo $O(1)$. Este hecho, junto a la existencia de n_v implica que cada cálculo de $f(s_0, s_t, s_j, G, V, \tau)$ en el paso 2.2 tome un tiempo $O(1)$. La existencia de n_v también implica que cada momento en el que se ejecuta el bucle del paso 2.2 su cuerpo es ejecutado $n_v(n_v + 1)/2$ veces cuanto más, porque $n_v(n_v + 1)/2$ es el número mayor de pares posibles de elementos diferentes del conjunto V . Ya que la constante $n_v(n_v + 1)/2$ depende solamente de I , y el cálculo de $f(s_0, s_t, s_j, G, V, \tau)$ toma un tiempo $O(1)$, se puede afirmar que el paso 2.2 toma un tiempo de $O(1)$ cada vez que se ejecuta. También se observa que los pasos 1 y 2.3 toman un tiempo $O(1)$ cada vez que son ejecutados. Por lo tanto, cada paso del algoritmo toma un tiempo de $O(1)$ cada vez que se ejecuta.

Se puede ver que el paso 1 toma un tiempo $O(1)$ en la ejecución completa del algoritmo. El paso 2.2 se ejecuta exactamente n veces, ya que cada partícula se añade al empaquetamiento exactamente una vez; por lo tanto toma un tiempo total de $O(n)$. El paso 2.3 también se ejecuta exactamente n veces ya que cada partícula es retirada una sola vez de F , tomando un total de tiempo de $O(n)$ también. El paso 2.1 se ejecuta exactamente $2n$ veces, ya que cada vez que es ejecutado, se ejecutan o bien 2.2 o bien 2.3, pero no ambos; de modo que toma un tiempo total de $O(n)$ también. Por todo lo dicho, el algoritmo completo presenta una complejidad de $O(n)$ en su totalidad.

Análisis de complejidad del algoritmo

Varios tipos de partículas pueden ser usados en la aplicación del MED. Para hacer uso de un tipo de partícula específico en el algoritmo de avance frontal solo se requiere conocer como determinar las intersecciones entre partículas y la forma de colocación de la nueva partícula en contacto con otras dos (caso 2D) o con otras tres (caso 3D). En el presente trabajo, los resultados han sido obtenidos con círculos y esferas, polígonos y poliedros, conglomerados de círculos y esferas y esferocilindros. Un esferocilindro es un conjunto de puntos que se encuentran a una distancia fija r de un segmento s , su definición y métodos de detección de intersecciones se puede consultar detalladamente [9]. Los conglomerados pueden ser usados para aproximar formas simples como elipses o elipsoides o figuras más complejas como las de la figura 2.

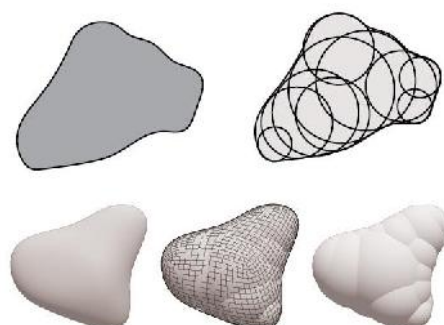


Fig. 2. Formas aproximadas usando conglomerados

Creación del frente inicial de avance

Se trata de describir en detalle el paso 1 del algoritmo, en el cual se crea el frente inicial de avance del conjunto de partículas que se está generando mediante dicho algoritmo. La forma en que se define el frente inicial de avance determina que el crecimiento del frente de avance (denotado por la variable C_e en el algoritmo) sea de adentro hacia afuera o viceversa. Sobre este tema existen varias formulaciones reportadas tanto de la variante de adentro hacia afuera [5, 6, 10, 11], como de afuera hacia adentro [12,14] y existen aportes de los autores [15, 16]. La construcción de un frente inicial de avance que determina un crecimiento de adentro hacia afuera viene dada por los siguientes pasos:

Construcción de un frente inicial de avance que determina una generación de adentro hacia afuera

Paso 1) Hallar un punto $p_0 \in G$ tal que $\exists \{d(p, p_0): p \in G^c\} \cap \{d(p, q): p \in G^c\} \forall q \in G$, donde d es la métrica usual en \mathbb{R}^n y el superíndice c denota la función complemento de conjuntos. Es decir,

p_0 es el punto más "interior" de G .

Paso 2) Construir cuatro partículas e_1, e_2, e_3 y e_4 , tales que la media aritmética de sus centros de masa sea p_0 y cada una de ellas esté en contacto con al menos otra.

Paso 3) Hacer $E := C_e := \{e_1, e_2, e_3, \dots, e_n\}$.

Por su parte, la construcción de un frente inicial de avance que determina un crecimiento de afuera hacia adentro queda formulada por el siguiente pseudocódigo:

Construcción de un frente de avance inicial que determina una generación de afuera hacia adentro

Paso 1) Hallar un punto p_0 ubicado sobre la frontera de la geometría que se desea llenar con partículas.

Paso 2) Construir cuatro partículas e_1, e_2, e_3 y e_4 , ubicadas alrededor de p_0 y lo más cercanas posible entre sí.

Paso 3) Aplicar el algoritmo. Al hacerlo, en el paso 2.3, en vez de construir e_n en contacto con otras tres partículas, se debe construir e_n en contacto con otras dos partículas y la frontera de la geometría contenedora. Guardar en la lista E las partículas obtenidas.

Paso 4) Hacer $E := C_e := E$.

Variantes de selección del frente de avance

El otro aspecto esencial de algoritmo es el paso 2.2, en el cual se selecciona la partícula pivote e_p de la lista C_e , y el paso 2.3, en el cual se seleccionan de la lista v , dos partículas vecinas de e_p , denotadas por e_i y e_j . Antes de cada ejecución del algoritmo, se fija un criterio para realizar las mencionadas selecciones en las listas C_e y v . Los posibles criterios que se han tenido en cuenta para escoger un elemento de una lista L son los siguientes: 1. Selección a lo ancho: se escoge el primer elemento de L , 3. - Selección a lo profundo: se escoge el último elemento L y 3 - Selección aleatoria: se explica por sí sola. En función del modo de selección de los elementos de la Lista L , existen 9 posibilidades de determinar el conjunto $\{e_{n_i}, e_i, e_j\}$ de partículas con las cuales e_{n_i} estará en contacto. Estas posibilidades son las siguientes: 1. Selección a lo ancho en C_e con selección a lo ancho en v , 2. Selección a lo ancho en C_e con selección a lo profundo en v , 3. Selección a lo ancho en C_{ext} con selección aleatoria en v , 4. Selección a lo profundo en C_e con selección a lo ancho en v , 5. Selección a lo profundo en C_e con selección a lo profundo en v , 6. Selección a lo profundo en C_e con selección aleatoria en v , 7. Selección aleatoria en C_e con selección a lo ancho en v , 8. Selección aleatoria en C_e con selección a lo profundo en v y 9. Selección aleatoria en C_e con selección aleatoria en v .

Construcción de la partícula en contacto

Se han formulado un grupo de técnicas para lograr la construcción de la partícula. En los métodos desarrollados se han subdividido en dos grupos: Construcción con representación exacta de la partícula y construcción con representación aproximada de la partícula. Cuando se emplean métodos exactos, la nueva partícula obtenida está en contacto con todas las que están fijas. Si en cambio, el método que se utiliza es aproximado, la nueva partícula está en contacto solo con al menos una de las fijas. Esto disminuye la fracción de volumen, el número de coordinación, entre otros aspectos del empaquetamiento obtenido, aunque aumenta la velocidad de generación debido a que disminuye el costo computacional. Dentro de los métodos exactos, se tiene la *intersección de envolventes* y la *minimización de la función de potencial*. La segunda clase de métodos (aproximados) se compone del *acercamiento directo* y el *acercamiento binario*.

Las formulaciones de los métodos exactos, en específico, la intersección de envolventes, existían para el caso de algunas partículas tales como: círculos [6, 17], esferas [17], elipses y polígonos [5]. Aparentemente no existían formulaciones para los casos de conglomerados de círculos ni de esferas, ni para poliedros. Por este motivo se formula un método de intersección de envolventes para estos casos no resueltos, además de proponer una nueva formulación para el caso de esferas [18]. El método de minimización de la función de potencial aparentemente tampoco existía. Dicho método fue formulado [18] y aplicado a diferentes tipos de partícula, tales como círculos, esferas, y otras formas menos frecuentes como los esferocilindros y las supercuádras. Este método es totalmente general con respecto al tipo de partícula y para su aplicación solo requiere conocer la correspondiente función de potencial.

Tampoco existían los métodos aproximados de acercamiento directo y acercamiento binario [18]. Estos son técnicas novedosas para la construcción de partículas en contacto, generales con respecto al tipo de partícula. El primero de ellos ha sido aplicado fundamentalmente a conglomerados de círculos y esferas, y el segundo a poliedros, supercuádras y esferocilindros. El acercamiento directo solo requiere de una función de detección de intersección entre pares de partículas, mientras que el acercamiento binario solo requiere una función de distancia direccional entre pares de partículas [18].

Método de intersección de envolventes

Sea p_{fij} una partícula fija y p_{mov} una partícula móvil de centro c . Al lugar geométrico descrito por c de manera tal que p_{mov} esté en contacto exterior con p_{fij} , se le llamará envolvente. El *método de intersección de envolventes* en \mathbb{R}^n , para trasladar una partícula móvil p_m de manera que esté en contacto exterior con otras partículas fijas p_1, \dots, p_n , sin que haya intersección, consiste en construir los lugares geométricos descritos por el centro de masas de

p_m al deslizarse alrededor de cada una de las partículas fijas, y luego hallar las intersecciones de estos lugares geométricos, para centrar p_m en ellas. Ver figura 3.

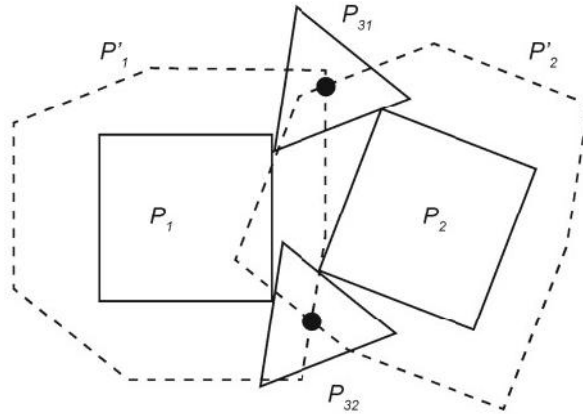


Fig. 3. Intersección de envolventes para el caso de polígonos

Minimización de potencial

Mediante este método se puede trasladar la partícula móvil para que esté en contacto con las fijas, al igual que en la *intersección de envolventes*.

Para poder ser utilizado se necesita primeramente conocer una función continua $\omega(p_1, p_2)$ aplicable a pares de partículas que cumpla la condición (1):

$$\omega(p_1, p_2) = \begin{cases} \leq 0 & \text{si } p_1 \cap p_2 \neq \emptyset \\ > 0 & \text{en caso contrario} \end{cases} \dots(1)$$

A partir de esta función, se puede demostrar que p_1 y p_2 están en contacto exterior sin intersectarse si y solo si $\omega(p_1, p_2) = 0$. A esta función se le puede llamar *función de potencial*. Ver figura 4.

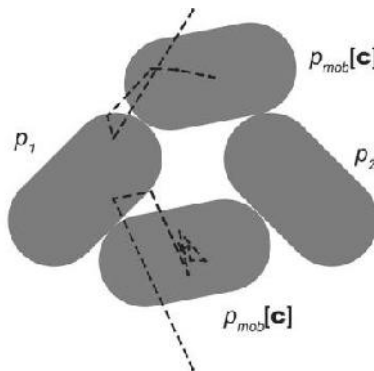


Fig. 4. Proceso de minimización para el caso de esferocilindros. Los puntos del proceso de iteración están unidos por una línea discontinua

Una vez conocida la función de potencial ω , la solución al puede ser obtenida al resolver el siguiente problema de optimización:

$$\begin{matrix} m \\ \text{s. a.} \end{matrix} \quad \begin{matrix} |\omega(p_1, p_m[x])| + \dots + |\omega(p_n, p_m^n[x])| \\ x \in [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n] \subseteq \mathbb{R} \end{matrix} \dots(2)$$

donde el rectángulo $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$ se obtiene debido a que se conocen los centros y radios circunscritos de las partículas fijas y el radio circunscrito de la partícula móvil.

Método de acercamiento binario y de acercamiento directo

Los métodos de acercamiento binario y de acercamiento directo son métodos aproximados para la construcción de la partícula en contacto exterior con otras; aspecto que implica disponer de otras alternativas para lograr contacto entre partículas. Para su formulación se debe primeramente introducir las siguientes definiciones:

c_1, \dots, c_n : centros de las partículas p_1, \dots, p_n respectivamente, definidas en el *problema 1*.

r_1, \dots, r_n : radios de esferas circunscritas a p_1, \dots, p_n respectivamente.

r_m : radio circunscrito de la partícula p_m .

$c_m = (p_1 + \dots + p_n)/n$: punto cercano a todos los centros c_1, \dots, c_n .

r : recta que pasa por c_m y en el caso $n = 2$ ($n = 3$) es perpendicular al segmento c_1c_2 (triángulo $c_1c_2c_3$).

n_0 : vector unitario paralelo a r .

$r_{m\acute{a}x} = \max \{r_m, r_1, \dots, r_n\}$: valor máximo de los radios circunscritos de p_m, p_1, \dots, p_n .

$c_0 = c_m + 2r_{m\acute{a}x} n_0$: punto ubicado sobre r , cuya definición implica que $p_{mov}[c_0] \cap p_i = \emptyset, i = 1, 2, 3$.

Se define además la función la cual es un indicador de la intersección de $p_{mov}[c_0 + (c_{med} - c_0)]$ con las partículas fijas p_1, \dots, p_n .

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

$$\lambda \mapsto \begin{cases} -1, & \text{si } p_{mov}[c_0 + \lambda(c_m - c_0)] \cap (p_1 \cup \dots \cup p_n) \neq \emptyset \\ 1, & \text{e } c_1, c_2 \end{cases} \dots(3)$$

Una vez establecidas las definiciones anteriores, se puede plantear que el método de acercamiento para construir una partícula móvil p_m en contacto con otras n partículas fijas p_1, \dots, p_n [11], consiste en hallar un valor $\lambda_0 = \text{si } \{\lambda \in [0, 1]: f(\lambda) = -1\}$, donde f viene dada por (3), y luego centrar la partícula p_m en el punto $c_4 = c_0 + \lambda_0(c_m - c_0)$. Para ilustrar la idea gráficamente, es conveniente observar el caso de dos dimensiones (figura 5). En este método de acercamiento en 2D, se logra que la partícula p_m se centra primeramente en c_0 , para luego ser desplazada a lo largo de la recta r hasta que su centro coincida con el punto c_4 . En esta posición está en contacto con p_2 y no se interseca con p_1 .

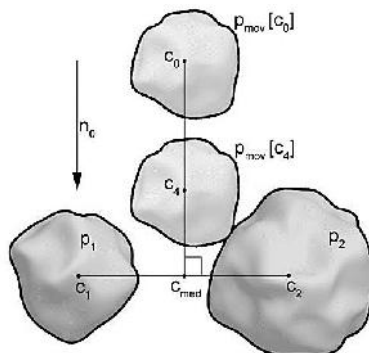


Fig. 5. Método de acercamiento directo en 2D

Una forma de calcular λ_0 es mediante un proceso de bisección (completamente análogo al caso de hallar la raíz de una función en un intervalo realizando bisecciones sucesivas [19]) y teniendo en cuenta que en la práctica se obtienen buenos resultados asumiendo que f es una función creciente (siempre es creciente en el intervalo $[0, \lambda_0]$). Cuando λ_0 es calculado de esta manera, se está en presencia del *método de acercamiento binario* [20].

Para aplicar este método es suficiente conocer una función $g(d)$ que se denominará *función de distancia direccional* entre dos partículas p_m y p_f móvil y fija respectivamente, con respecto a un vector $d \in \mathbb{R}^n$, asumiendo que $p_m \cap p_f = \emptyset$. Esta función puede definirse por la expresión

$$g(d) = s \{ \lambda \geq 0 : p_m \cap [c_0 + \lambda d] \cap p_f = \emptyset \} \quad \dots(4)$$

la cual se conoce para los casos de círculos, esferas, conglomerados de estos últimos, o poliedros [21].

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se muestran algunas aplicaciones del algoritmo de empaquetamiento descrito. Estas se dividen en básicas, empaquetamientos con alto grado de porosidad, empaquetamientos con datos de curvas granulométricas reales y aplicaciones prácticas ingenieriles.

Aplicaciones básicas

Con la finalidad de ejemplificar el tiempo de generación para grandes volúmenes de partículas y sobre todo tener la confirmación de comportamiento cuasi-lineal (partículas vs tiempo), se ejecuta el siguiente ejemplo con millones de partículas. Los datos iniciales de la generación se ilustran a continuación (tabla 1), empleándose en este caso una distribución uniforme para definir las dimensiones geométricas de las partículas.

Tabla 1. Datos de entrada para la generación

Geometría	Tamaño de partículas		Volumen
	Distribución	Intervalo radios	
Cubo	U(0,8;1,2)	[0,8;1,2]u	$12,5 \times 10^7 u^3$

Como resultado de esta generación se ha obtenido un empaquetamiento de partículas del orden del $16 \cdot 10^6$, manteniéndose el comportamiento cuasi-lineal en el proceso de colocación de partículas y en un tiempo aceptable de 2 h y medias en un ordenador convencional (figura 6).

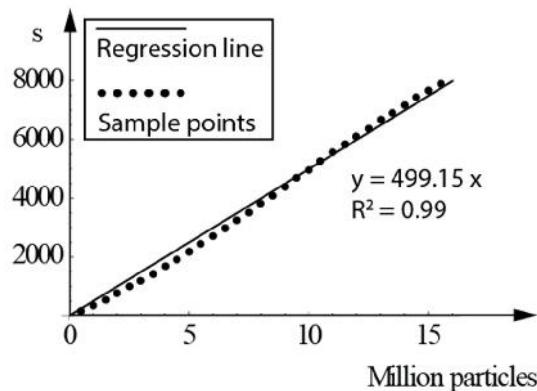


Fig. 6. Número de partículas vs. Tiempo de generación, con modelo de regresión lineal

Otro ejemplo de aplicación básica del algoritmo es el empaquetamiento de partículas no esféricas (figura 7). La geometría contenedora utilizada fue un cubo y los tamaños de las partículas siguen una distribución uniforme (tabla 2).

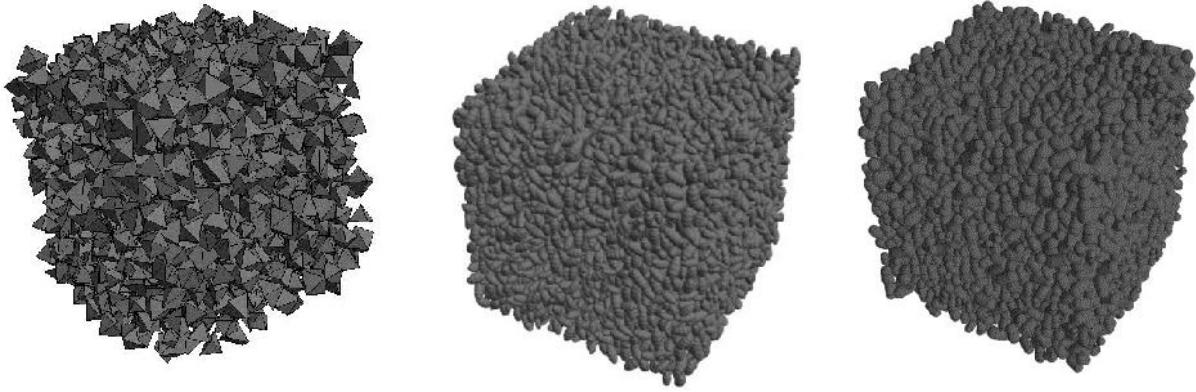


Fig. 7. Empaquetamientos de partículas irregulares: poliedros, conglomerado de esferas y esferocilindros, en ese orden

Tabla 2. Datos de entrada

Geometría contenedora	Radios de las partículas		Volumen
	Distribución	Intervalo	
Cubo	$U(1, 2)$	$[1u, 2u]$	$85184 u^3$

Empaquetamientos para el caso de porosidades altas

En la generación de empaquetamientos con porosidades altas se usa el algoritmo propuesto con la particularidad de que para lograr la porosidad deseada es necesario realizar algunas transformaciones al tamaño de las partículas antes y después de la generación. En lo adelante se utilizará el término de fracción de volumen (F_p) en la descripción del procedimiento. La porosidad queda definida por la ecuación.

$$p = 1 - F_p \quad \dots(5)$$

La fracción de volumen de un empaquetamiento (en este caso de partículas esféricas) viene dada por

$$FV_p = \frac{4\pi}{3} \frac{\sum_{p=1}^N (r_p)^3}{V_T}$$

Multiplicando los radios de las partículas por un valor λ , se obtiene la expresión $F_{\lambda} = \lambda^3 F_p$, por lo que la fracción de volumen del empaquetamiento con el valor de porosidad deseado y distribución inicial de tamaño de partícula sería:

$$FV_p = \frac{FV_{\lambda}}{\lambda^3} \quad \dots(6)$$

Aplicando estas transformaciones es posible obtener porosidades superiores al 94 %. Haciendo $\lambda = 2$ y sustituyendo en la fórmula anterior, se obtienen varios empaquetamientos con valores de porosidad que oscilan desde un 94 % hasta un 98,5 % (figura 8). Se comprobó que el error relativo máximo entre el valor de porosidad deseado y el valor de porosidad obtenido no supera el 0,7 %.

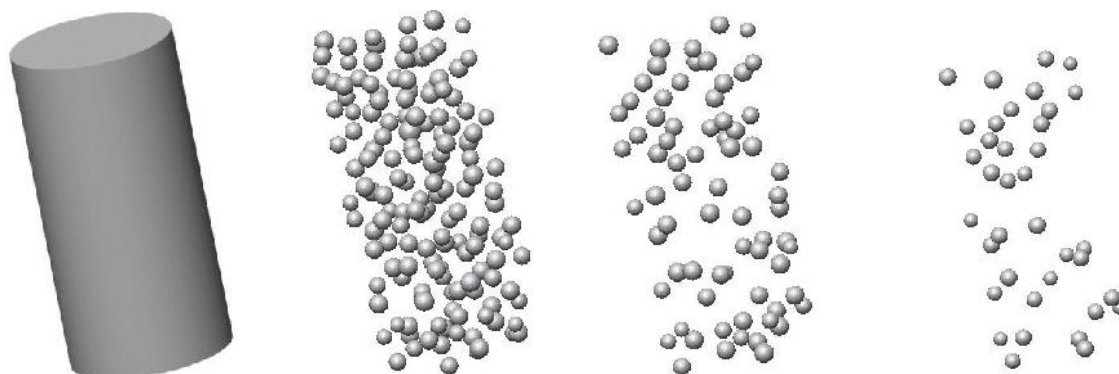


Fig. 8. Ejemplos de empaquetamientos con porosidad alta: geometría contenedora; empaquetamientos con porosidades de 95 %, 97,7 % y 98,8 % respectivamente

Empaquetamientos con datos de curvas granulométricas reales

Este ejemplo consiste en la generación de un empaquetamiento compuesto por una mezcla de partículas donde sus tamaños vienen dados por dos curvas granulométricas distintas. El empaquetamiento ha sido utilizado para modelar un adhesivo compuesto por partículas esféricas en suspensión dentro de una resina.

La geometría a modelar consiste una lámina con dimensiones $1.5 \times 1.0 \times 0.1 \text{ cm}$. La proporción de las partículas en la lámina son de 84 % para el primer tipo y de 16 % para el segundo tipo. Las proporciones obtenidas en el empaquetamiento (figura 9) se muestran en la tabla 3. Estos dos ejemplos muestran que es posible generar empaquetamientos de partículas cuyos tamaños estén descritos por curvas granulométricas.

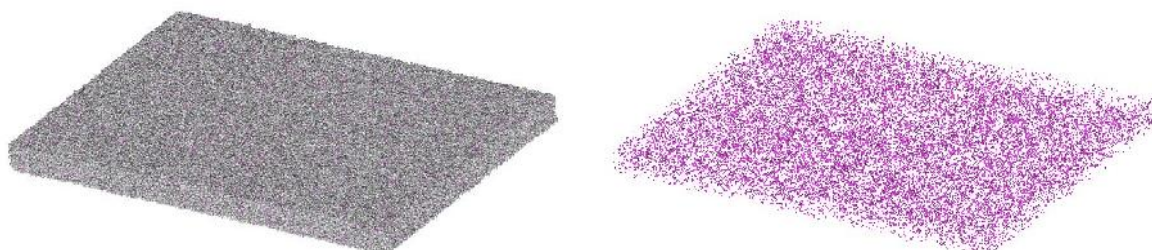


Fig. 9. Empaquetamiento de material adhesivo compuesto por dos materiales. Izquierda: mezcla de los dos tipos de partículas. Derecha: conjunto de partículas 2

Tabla 3. Proporciones de la mezcla obtenidas en el empaquetamiento

Conjunto de partículas	No. de partículas	Proporción
<i>Partículas tipo 1</i>	389 278	16,3 %
<i>Partículas tipo 2</i>	76 016	83,7 %
Total	465 295	100 %

Para comprobar si los tamaños de partícula que se obtienen mediante el mallado de la mezcla se corresponden con los datos de tamaño real, se representan gráficas donde se superponen las dos curvas (real

y “virtual”), permitiendo realizar una comparación cualitativa de las diferencias entre estas observándose una gran similitud entre ellas. Ver figura 10.

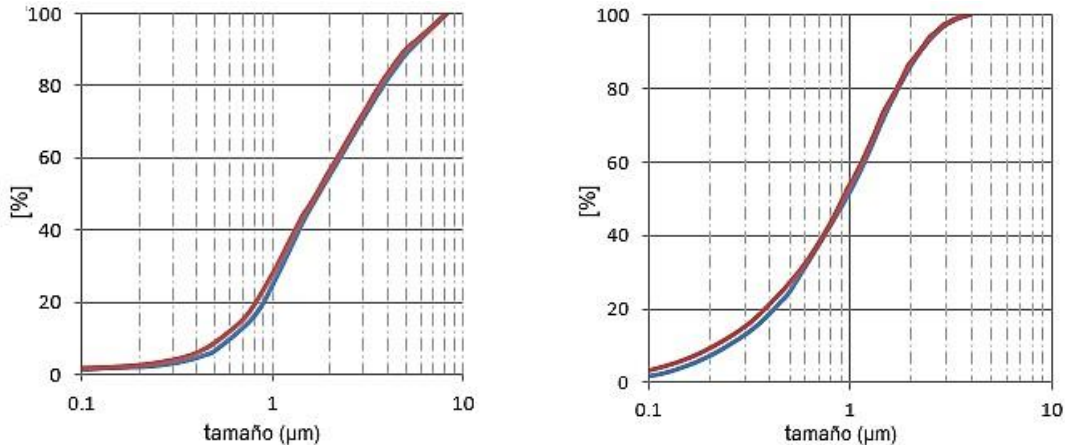


Fig. 10. Curvas granulométricas de los tamaños generados y comparación con curva real

CONCLUSIONES

Se presenta un algoritmo genérico de empaquetamiento de partículas de avance frontal. Este es independiente respecto al tipo de partícula teniendo las correspondientes formulaciones para círculos y esferas, polígonos y poliedros, conglomerados de círculos y esferas, supercuádricas y esferocilindros. También presenta flexibilidad con respecto al conjunto inicial de avance permitiendo obtener empaquetamientos desde dentro hacia fuera y viceversa.

Se describen tres métodos para el problema de la construcción de la nueva partícula en contacto. El primero de ellos (*intersección de envolventes*) ya existía para algunas partículas, en este caso fue aplicado a otros tipos de partículas nunca antes utilizadas. Los demás métodos: *minimización de la función de potencial*, *aproximación directa* y *aproximación binaria* son completamente nuevos.

Finalmente, han sido llevados a cabo un grupo de aplicaciones. Estas muestran la generación de empaquetamientos con grandes volúmenes de partículas en tiempos relativamente cortos manteniendo una linealidad en cuanto a cantidad de partículas vs tiempo de generación, empaquetamientos con porosidades altas, y también la efectividad del algoritmo de empaquetar partículas cuando el tamaño de estas viene dada por curvas de distribución granulométrica.

REFERENCIAS

1. Cundall PA, Strack ODL. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979. 29(1): 47-65.
2. Cundall PA. Computer simulation of dense sphere assemblies. *Micro-mechanics of Granular Materials*, M. Satake and J.T. Jenkins, Editors. 1988, Elsevier. p. 113-123.
3. Kuhn MR. A smooth convex three-dimensional particle for the Discrete Element Method. *J. Eng. Mech.*, 2003. 129(5):539-547.
4. Ting JM, et al. An ellipse-based discrete element model for granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 1993. 17: p. 603- 623.
5. Feng YT, Han K, Owen DRJ. An advancing front packing of polygons, ellipses and spheres. *Discrete Element Methods. Numerical Modeling of Discontinua*. 2002. Santa Fe, New Mexico, USA: American Society of Civil Engineers.
6. Feng YT, Han K, Owen DRJ. Filling domains with disks: an advancing front approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2003. 56: 699-713.
7. Bagi K. Methods to generate random dense arrangements of particles. *Thematic meeting on numerical simulations*. 2005: Paris.

8. Wang CY, Wang CF, Sheng J. A packing generation scheme for the granular assemblies with 3d ellipsoidal particles. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 1999. 23: 815-828.
9. Eberly DH. *3D Game Engine Design: A Practical Approach to Real-Time Computer Graphics*. CRC Press.
10. Morales IP, Valera RR, BritoYP. Generación o empaquetamiento de medios discretos para el Método de Elementos Distintos. *Ingeniería Civil CEDEX*, 2008. 152: 119-124.
11. Morales IP, et al. Procedimiento de empaquetamiento de partículas genéricas para el Método de Elementos Discretos. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 2009. 25(2): 95-110.
12. Benabbou A, et al. Geometrical modeling of granular structures in two and three dimensions. Application to nanostructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009. 80(4): 425-454.
13. Benabbou A, et al. *Sphere Packing and Applications to Granular Structure Modeling*, in *Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable*. 2008, Springer Berlin Heidelberg. p. 1-18.
14. Benabbou A, et al. Numerical modeling of nanostructured materials. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2009.
15. Morales IP. *Método de Elementos Distintos*. Departamento de Matemática. 2006, Universidad Central de Las Villas, Cuba: Santa Clara.
16. Brito YP. *Implementación del empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos*. Departamento de Ciencias de la Computación. 2007, Universidad Central de Las Villas, Cuba: Santa Clara.
17. Ortega JAH. *Simulación numérica de procesos de llenado mediante elementos discretos*. 2003, Universidad Politécnica de Cataluña: Cataluña.
18. Pérez Morales I. *Método de Elementos Discretos: desarrollo de técnicas novedosas para la modelación con métodos de partículas*. 2012, Universidad Central de Las Villas, Cuba: Santa Clara.
19. Zarowski CJ. *An Introduction to Numerical Analysis for Electrical and Computer Engineers*. 2004: Wiley and Sons.
20. Pérez Morales I, et al. Procedimiento de empaquetamiento de partículas genéricas para el Método de Elementos Discretos. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 2009. 25(2): 95-110.
21. Choi YK, et al. *Computing the Minimum Directional Distance Between Two Convex Polyhedra*. 2006, Hong Kong University.