

Obtención de conjuntos iniciales de polígonos convexos como fase previa a la aplicación del Método de Elementos Discretos

ROBERTO L. ROSELLÓ VALERA (*), IRVIN P. PÉREZ MORALES (**),
YORDANIS PÉREZ BRITO (***) y CARLOS A. RECAREY MORFA (****)

RESUMEN El Método de Elementos Discretos es un área de intensa investigación hoy en día debido a sus ventajas para resolver problemas de Mecánica Computacional. En la aplicación eficaz de este método se debe poseer una idealización del medio que se obtiene a través de la generación o empaquetamiento de un sistema de partículas, las cuales en un inicio deben encontrarse lo más cercanamente posible entre sí. Este conjunto de partículas se puede obtener mediante la aplicación de los llamados algoritmos de empaquetamiento. Los elementos discretos más usados son los círculos y esferas, debido principalmente a su poca complejidad geométrica. En este trabajo se presenta un algoritmo para la obtención de empaquetamientos de partículas poligonales convexas. Se hace un estudio del desempeño computacional para varias distribuciones de probabilidad de los parámetros que definen las partículas, así como la caracterización estadística de los conjuntos de partículas obtenidas. Se explora la validez de las hipótesis de que los empaquetamientos obtenidos son aleatorios, homogéneos e isotropos a nivel micro y nivel macro.

INITIAL SET OF CONVEX POLYGONS FOR THE DISCRETE ELEMENT METHOD

ABSTRACT *Discrete Elements Method is a field of intense research nowadays due to its advantages for solving problems of Computational Mechanics. Obtaining an initial set of particles or packing, with the particles as close as possible, is essential to apply the method. This set of particles can be obtained by applying the so-called packing algorithms. The most commonly discrete elements used are circles and spheres, mainly due to their low geometric complexity. An algorithm for obtaining convex polygonal particle packings is shown in this paper. The computational performance for various probability distributions of the parameters that define the particles and the statistical characterization of obtained packings has been studied. The validity of the assumption that the packings are random, homogeneous and isotropic at micro-level and macro-level was explored.*

Palabras clave: Método de Elementos Discretos, Partículas poligonales convexas, Distribución estadística, Empaquetamiento.

Keywords: Discrete Element Method, Convex polygonal particles, Statistical distribution, Packing.

1. INTRODUCCIÓN

El Método de Elementos Discretos (MED) fue introducido por Cundall [1] y estaba enfocado a la resolución de problemas de geomecánica y discontinuidades en medios rocosos abordados

con los conceptos de bloques y juntas y con posterioridad fue aplicado a los sólidos por Cundall y Strack [2]. Este método se aplica al análisis de medios discontinuos simulando el comportamiento de un sistema conformado por una colección de partículas dispuestas arbitrariamente. Este modelo considera las

(*) Lic. Centro de Investigación de Métodos Computacionales y Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI) Aula UCLV-CIMNE, Universidad Central "Martha Abreu" de las Villas, Cuba, Carretera a Camajuaní km 5¹/₂. Email: rrosello@uclv.edu.cu

(**) Lic. Centro de Investigación de Métodos Computacionales y Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI) Aula UCLV-CIMNE, Universidad Central "Martha Abreu" de las Villas, Cuba, Carretera a Camajuaní km 5¹/₂. Email: ipm@uclv.edu.cu

(***) Lic. Centro de Investigación de Métodos Computacionales y Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI) Aula UCLV-CIMNE, Universidad Central "Martha Abreu" de las Villas, Cuba, Carretera a Camajuaní km 5¹/₂. Email: yordanisp@uclv.edu.cu

(****) Dr. Ing. Centro de Investigación de Métodos Computacionales y Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI) Aula UCLV-CIMNE, Universidad Central "Martha Abreu" de las Villas, Cuba, Carretera a Camajuaní km 5¹/₂. Email: recarey@uclv.edu.cu

partículas como elementos discretos que en su conjunto conforman el sistema complejo de partículas. Los elementos distintos, como también se les conoce a las partículas, se desplazan independientemente unos de otros e interactúan entre sí en las zonas de contacto. La disposición de las partículas dentro del conjunto global del sistema es aleatoria, por lo que se pueden formar medios con diferentes tamaños de partículas distribuidos a lo largo del conjunto, idealizando de este modo la naturaleza granular de los medios que usualmente se analizan y se simulan mediante esta técnica numérica.

Para obtener una colección inicial de partículas se pueden aplicar las técnicas del MED en detrimento del tiempo general de la simulación. Por este motivo se han venido desarrollando en los últimos tiempos los llamados algoritmos de empaquetamiento para la generación del medio como una fase previa a la aplicación del MED, teniendo como ventaja una disminución considerable del tiempo de simulación. Las partículas circulares o esféricas son las más usadas en las simulaciones principalmente por ser geoméricamente sencillas, sin embargo, estas carecen de vértices por lo que esto las hace carentes de fricción. De acuerdo con [3], una partícula formada por círculos colisionados, puede permanecer inmóvil, rodar hacia abajo o deslizarse por un plano inclinado dependiendo del coeficiente de rozamiento, ángulo de la pendiente o de su forma geométrica; mientras que un círculo siempre rodará. La característica antes mencionada también es válida para polígonos regulares, deduciéndose que ciertos medios físicos pueden ser modelados y simulados con polígonos.

La tendencia actual de estas técnicas (MED) está enfocada a posibilitar el estudio del micro-mundo y la esencia micro-estructural de los problemas de la mecánica computacional empleando modelos de partículas. También puede ser combinado con otros métodos numéricos como el Método de Elementos Finitos (MEF) [4, 5, 6, 7] y el PFEM [8, 9, 10] como una forma de mejorar el resultado de las simulaciones obtenidas solo con la aplicación del MEF. En la combinación de estos métodos, el MED es utilizado para la modelación de las discontinuidades presentes en partes del sistema a simular.

2. ANTECEDENTES Y ESTADO DEL ARTE

El Método de Elementos Discretos simula el comportamiento mecánico de un medio formado por un conjunto de partículas, las cuales interactúan entre sí a través de las leyes de Newton y de leyes constitutivas en los contactos entre partículas. La posición de estas dentro del sistema es aleatoria pudiendo obtener partículas de geometría, forma y tamaño diversos, disponiendo de control del tipo de distribución estadística que siguen y de la fracción de volumen que debe tener el medio, lo cual permite modelar y simular la naturaleza granular de los medios que usualmente se analizan con esta técnica. En este método a nivel de cada partícula se hace uso de la mecánica del cuerpo rígido y los elementos discretos se consideran elementos rígidos en sí. El modelo constitutivo o de comportamiento del material es establecido en las zonas de contactos entre partículas y queda caracterizado por varios elementos mecánicos tales como: muelles, pistones y elementos de fricción, etc.

En la aplicación del MED es necesario tener un empaquetamiento o generación inicial de partículas (elementos discretos o distintos) antes de comenzar la simulación. Este empaquetamiento inicial puede lograrse a través de las propias técnicas de simulación del MED, aunque de esta manera el tiempo requerido para realizar esta tarea puede ser considerable. De ahí surge la necesidad de crear los llamados algoritmos de empaquetamiento o de generación del medio, los cua-

les no hacen más que colocar un conjunto de partículas aleatorias en el interior de un dominio de manera que no se solapen y estén lo más cercanamente posible entre sí. Generalmente, los algoritmos de empaquetamiento se pueden clasificar en dos categorías: técnicas dinámicas o de reordenamiento colectivo y técnicas constructivas. En el enfoque dinámico [11, 12, 13], las partículas a menudo cambian su posición o tamaño durante el proceso de empaquetado, lo cual lo hace usualmente muy costoso computacionalmente debido a la actualización de los parámetros de cada partícula en cada paso del proceso. En cuanto a las técnicas constructivas, la posición final de cada partícula no cambia durante todo el proceso de empaquetado. Dentro de los algoritmos constructivos se encuentran los de avance frontal [14, 15], los cuales construyen dinámicamente un frente, al cual se le van agregando nuevas partículas a medida que se generan. Dicho frente se actualiza de forma dinámica, permitiendo en todo momento tener que considerar solamente una pequeña parte del total de partículas. El propósito principal de Owen [16] es extender la misma metodología del avance frontal propuesta en [14], para otros tipos de objetos discretos incluyendo partículas elípticas y polígonos convexos, así como esferas con diferentes tamaños. En [17] se desarrolla una técnica de avance frontal para el llenado del espacio con objetos arbitrarios. La entrada necesaria consiste en la especificación de la distancia media puntual en el espacio y una triangulación inicial de la superficie. En esta formulación cada objeto es quitado del frente activo uno a uno y, si es posible, rodeado por nuevos objetos admisibles. Esta operación es repetida hasta que no queden objetos activos. En [18] se revisan las representaciones actuales de partículas tales como polígonos, poliedros y supercuádras; así como sus algoritmos asociados de detección de contactos en dos y tres dimensiones.

El empaquetamiento de partículas circulares o esféricas resulta relativamente sencillo debido a la simplicidad geométrica de estas. Otra ventaja de este tipo de partícula es la detección de contactos, la cual se reduce al contacto círculo-círculo o esfera/esfera. Sin embargo, los círculos y esferas carecen completamente de ángulos, por lo cual no pueden proporcionar resistencia al movimiento rotatorio. Aunque los polígonos son una de las entidades geométricas más simples, su aplicación a simulaciones con elementos discretos en problemas de ingeniería es muy limitado [19, 20, 21]. Esto es debido, al menos parcialmente, a la falta de un algoritmo simple y robusto que modele el contacto vértice/vértice entre dos objetos poligonales. Los polígonos convexos son usados en [22] para la aproximación de supercuádras, donde se presenta un algoritmo para la determinación de contactos entre estas últimas en 2D. En la literatura prácticamente no existen resultados reportados sobre la generación de polígonos convexos, por lo que se carece de datos para realizar comparaciones en cuanto a velocidad y fracción de volumen de un algoritmo de empaquetamiento; así como de resultados estadísticos en el análisis de la estructura de los empaquetamientos.

3. DESCRIPCIÓN DEL ALGORITMO

El algoritmo propuesto en este trabajo tiene la particularidad de que con él se pueden generar empaquetamientos para partículas de diversas formas geométricas [23, 24]. Si se escribe el algoritmo de forma resumida, este quedaría de la siguiente manera:

1. Generar la partícula a ser empaquetada.
2. Seleccionar un frente activo y determinar la posición en la cual la partícula está en contacto justamente con dos en el frente.

Algoritmo 1 Algoritmo general de empaquetamiento de partículas.

```

Entrada: ListaParticulas  $L = \emptyset$ , ListaParticulas  $C_{ext} = \emptyset$ 

 $L = \text{inicializar}()$  /* generación partículas iniciales */;
 $C_{ext} = L$ ;
while  $C_{ext} \neq \emptyset$ ; do
    parametros param = parametros-nueva-particula();
    particula pivote = seleccion-particula-pivote( $C_{ext}$ );
    ListaParticulas vecinas = seleccion-particulas-vecinas();
    particula p = generar-nueva-particula(param, pivote, vecinas);
    if posicion-final(p) then
         $C_{ext} \leftarrow C_{ext} \cup \{p\}$ ;
         $L \leftarrow L \cup \{p\}$ ;
    else
         $C_{ext} \leftarrow C_{ext} - \{p\}$ ;
    end
end

Salida : L
    
```

3. Verificar si la nueva partícula en esta posición se intercepta con alguna de sus vecinas. Si no ocurre intersección, aceptar esta partícula y regresar al paso 1 para la próxima; en caso contrario rechazar la posición y repetir el paso 2 para otro frente activo.

De manera más detallada, este queda descrito mediante el pseudocódigo presentado en el Algoritmo 1. La salida es el conjunto L , donde se almacena el conjunto de todas las partículas obtenidas. En C_{ext} se van almacenando las partículas que todavía tienen un espacio vacío adyacente, donde aún es posible colocar otra partícula más. Para realizar búsqueda de vecinos, es utilizado en la presente investigación solamente la división en celdas para el algoritmo NBS formulado en [25].

Este algoritmo utiliza varios criterios para seleccionar la partícula pivote y las partículas vecinas a la pivote tales como selec-

ción a lo ancho, selección en profundidad, selección aleatoria así como el uso de un procedimiento heurístico para determinar la factibilidad de generar una partícula o no. Todos estos criterios serán analizados más adelante en la sección 4.1. La formulación propuesta en esta sección es similar a la presentada en [16], con algunas adiciones que consisten principalmente en la forma de seleccionar las partículas pivotes y las vecinas a esta.

3.1. EMPAQUETAMIENTO DE PARTÍCULAS POLIGONALES CONVEXAS

El problema consiste en colocar, dentro de un dominio dado, partículas poligonales convexas de forma y posición aleatoria de manera que estas no se solapen y estén lo más cercanamente posible entre sí (Figura 1).

3.2. INTERSECCIÓN ENTRE POLÍGONOS CONVEXOS

La intersección entre polígonos se resume a intersectar dos segmentos en el plano, en este caso, cada uno de los lados de un polígono con cada uno de los lados del otro polígono.

Sean (p_1, p_2) y (p_3, p_4) lados de los polígonos P_1 y P_2 respectivamente y $B = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ una matriz de rotación de 90° . Se calculan las normales para cada lado $n_1 = B(p_2 - p_1)$ y $n_2 = B(p_4 - p_3)$. Si:

$$sg(n_1 \cdot (p_3 - p_1)) \cdot sg(n_1 \cdot (p_4 - p_1)) \leq 0 \tag{1}$$

y:

$$sg(n_2 \cdot (p_1 - p_3)) \cdot sg(n_2 \cdot (p_2 - p_3)) \leq 0 \tag{2}$$

entonces los lados se interceptan, donde $sg(x)$ es la función signo y se define de la manera siguiente:

$$sg(x) = \begin{cases} -1 & x < 0 \\ 0 & x = 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \tag{3}$$

Este método tiene la desventaja de que se puede dar el caso de que un polígono esté contenido completamente dentro de otro, no detectándose el contacto entre ellos, por lo que además se verifica de ningún vértice de un polígono esté contenido dentro del otro polígono.

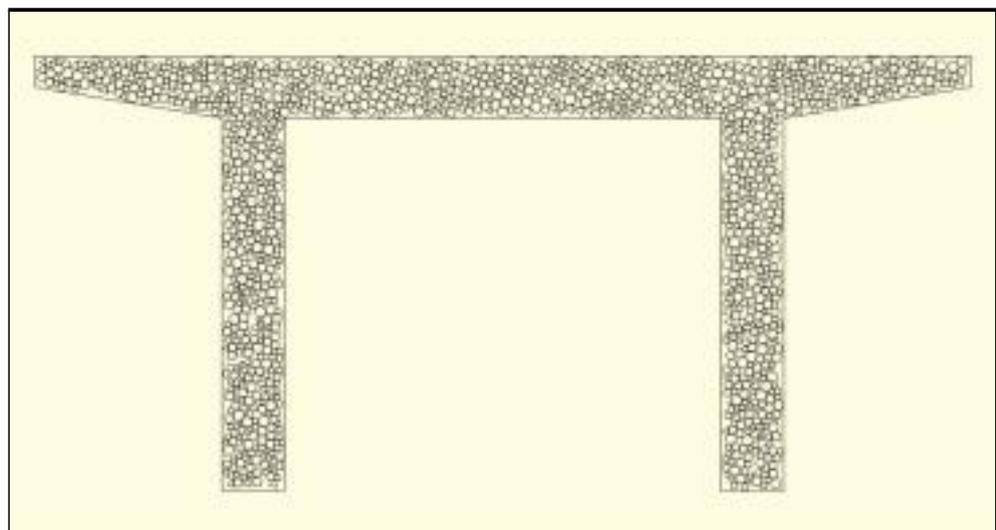


FIGURA 1. Empaquetamiento de polígonos convexas.

Algoritmo 2 Generación de una nueva partícula poligonal

Entrada: polígono $P_1; P_2$
polígono $P_3 = \text{generar-nuevo-poligono}()$;
vertice $v_1 = \text{posicion-factible}(P_1; P_3)$;
vertice $v_2 = \text{posicion-factible}(P_2; P_3)$;
polígono $P_{1\text{ext}} = \text{deslizar}(P_3, P_1, v_1)$;
polígono $P_{2\text{ext}} = \text{deslizar}(P_3, P_2, v_2)$;
punto $p = \text{posicion-final}(P_{1\text{ext}}, P_{2\text{ext}})$;
colocar-nuevo-poligono}(P_3; p)

3.3. CONSTRUCCIÓN DE UN POLÍGONO CONVEXO EN CONTACTO CON OTROS DOS

Sean $P_i; i = \overline{1; 3}$, tres polígonos convexos con centros $C_i; i = \overline{1; 3}$ respectivamente (se puede suponer, sin que esta formulación pierda validez, que C_3 es el origen de coordenadas). Considérese el problema de trasladar P_3 de manera que esté en contacto con P_1 y P_2 sin cortarlos. El Algoritmo 2 presenta un pseudocódigo de la implementación computacional dada a este problema.

Para la generación del nuevo polígono es necesario obtener varios parámetros como la cantidad de lados, el ángulo de rotación con respecto a los ejes coordenados y el valor de la distancia entre el centro y los vértices del polígono; todos estos son obtenidos utilizando el Método de Monte Carlo [26] asegurando la aleatoriedad de las configuraciones obtenidas. Otra de las ventajas de utilizar este método es la posibilidad de emplear varias distribuciones estadísticas en la generación de los parámetros. En el presente trabajo fueron utilizadas las distribuciones Uniforme, Normal y Exponencial.

La idea de la solución es hallar los polígonos descritos por C_3 al “deslizar” P_3 alrededor de P_1 y de P_2 ; y luego hallar la intersección de dichos polígonos. Sean $P_{1\text{ext}}$ y $P_{2\text{ext}}$ estos polígonos respectivamente. Para deslizar P_3 alrededor de P_1 , se comienza a partir de una posición en la cual coincida un vértice de P_3 con uno de P_1 , sin que los polígonos P_1 y P_3 se intersepen. A esta posición se le denominará posición factible. En la Figura 2 se muestra una posición factible y otra no factible.

1 Se considerará que el centro de un polígono es la media aritmética de sus vértices.

Para hallar una posición factible inicial se procede de la siguiente manera: se considera que el par (u_i, v_j) es factible, donde u_i es el i -ésimo vértice P_1 de y v_j el j -ésimo vértice de P_3 , si se cumplen las 4 condiciones siguientes:

1. El punto $(v_{j+1} - v_j)$ está fuera de la región formada por los vectores $(u_{i-1} - u_i)$ y $(u_{i+1} - u_i)$.
2. El punto $(v_{j-1} - v_j)$ está fuera de la región formada por los vectores $(u_{i-1} - u_i)$ y $(u_{i+1} - u_i)$.
3. El punto $(u_{i-1} - u_i)$ está fuera de la región formada por los vectores $(v_{j-1} - v_j)$ y $(v_{j+1} - v_j)$.
4. El punto $(u_{i+1} - u_i)$ está fuera de la región formada por los vectores $(v_{j-1} - v_j)$ y $(v_{j+1} - v_j)$, teniéndose que

un punto $p = (p_1; p_2)$ está fuera de la región R (Figura 3) formada por los vectores $a = (a_1; a_2)$ y $b = (b_1; b_2)$, si y solo si:

$$sg(a_2b_1 - a_1b_2) sg(b_1p_2 - b_2p_1) \leq 0 \quad (4)$$

ó:

$$sg(a_2p_1 - a_1p_2) sg(a_2b_1 - a_1b_2) \leq 0 \quad (5)$$

donde $sg(x)$ se define en la ecuación 3.

Ya encontrada la posición factible inicial, a partir de esta se desliza P_3 alrededor de P_1 , para llegar a otra posición factible. Las únicas dos posibilidades para esto son:

1. El vértice v_j se desliza sobre el lado $\overline{u_i, u_{i+1}}$ (Figura 4 (a)).
2. El lado $\overline{v_j, v_{j+1}}$ se desliza sobre el vértice u_i (Figura 4 (b)).

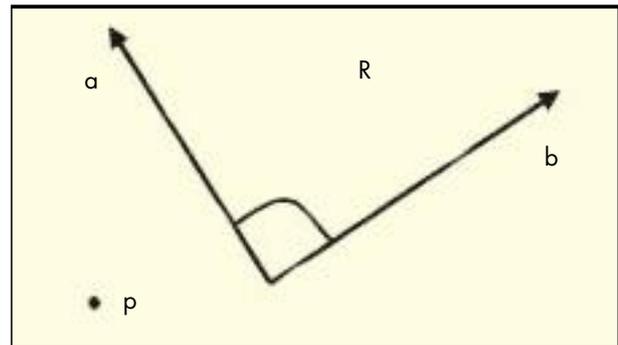


FIGURA 3. Región R formada por los vectores a y b .

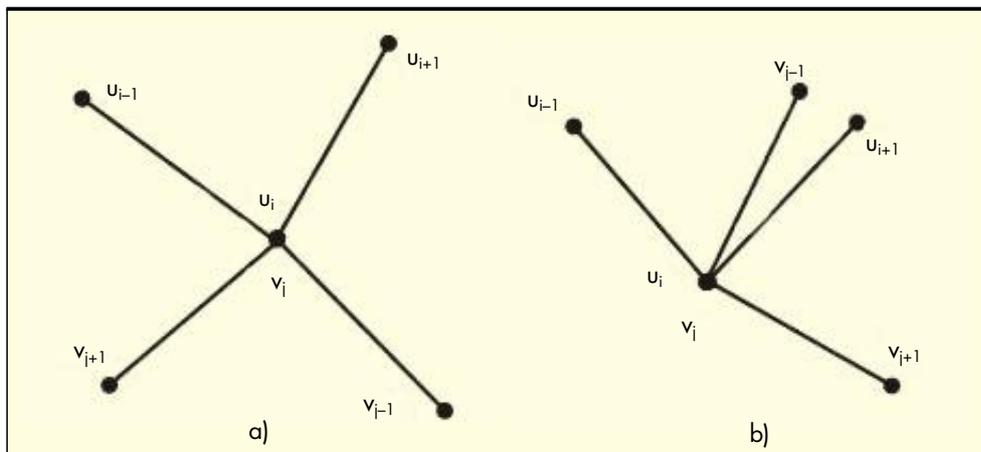


FIGURA 2. A) Posición factible (u_i, v_j) ; B) Posición no factible (u_i, v_j) .

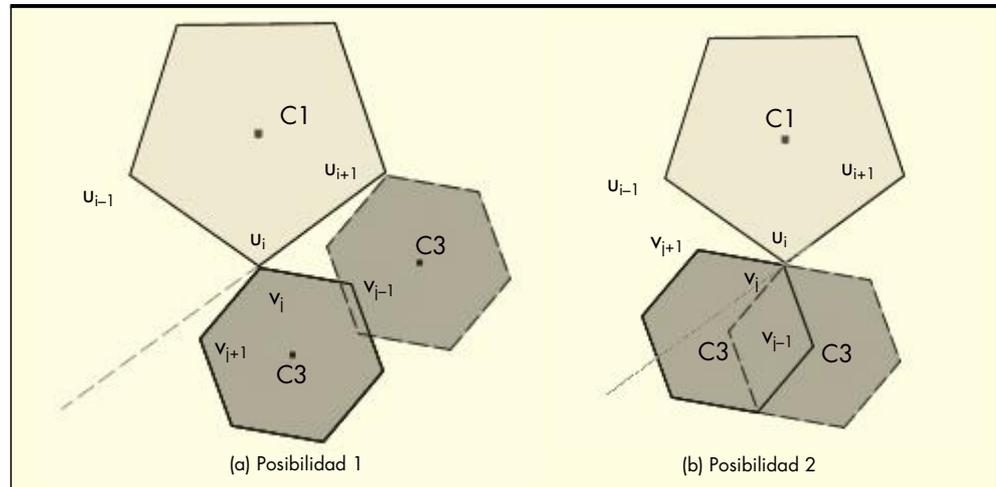


FIGURA 4. Posibilidades de desplazamiento de P_3 alrededor de P_1 .

Si se realiza el deslizamiento de P_3 alrededor de P_1 a través de la posibilidad 1, se considera que el segmento $C_3 + (u_i - v_j)$; $C_3 + (u_{i+1} - v_j)$ es un lado del polígono P_{1ext} e $i = (i \text{ mod } n_1)$, donde n_1 es el número de vértices de P_1 ; si se realiza el deslizamiento a través de la posibilidad 2, se considera que el segmento $C_3 + (u_i - v_j)$; $C_3 + (u_i - v_{j+1})$ es un lado del polígono P_{1ext} y $j = (j \text{ mod } n_3)$, donde n_3 es el número de vértices de P_3 , todo esto hasta llegar a una posición factible ya analizada anteriormente (Figura 5).

Las alternativas 1 y 2 se consideran mutuamente excluyentes, cumpliéndose la primera si y solo si los puntos $v_j + (u_i - v_j)$ y u_{i-1} están a ambos lados de la recta que define el segmento u_i, u_{i+1} . Se tiene que dos puntos p_3 y p_4 están a distintos lados de una recta si y solo si:

$$((p_3 - p_1) \bullet n) \cdot ((p_4 - p_1) \bullet n) \leq 0, n = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (p_2 - p_1) \quad (6)$$

donde n es un vector normal a la recta definida por el segmento p_1, p_2 y la operación \bullet define el producto escalar de vectores.

Para obtener el polígono P_{2ext} se procede de forma análoga. Después de esto se hallan los puntos c_i ; $i = 1; 2$ de intersección

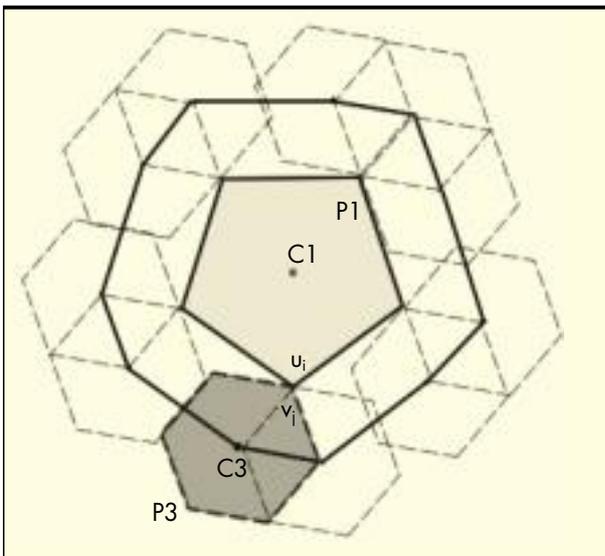


FIGURA 5. Polígono P_{1ext} obtenido al deslizar P_3 alrededor de P_1 .

entre P_{1ext} y P_{2ext} . El procedimiento a partir de aquí es muy simple: a cada punto de P_3 se le suma el vector $c_1 C_3$ y se comprueba que el polígono obtenido como resultado de esta traslación no esté en contacto con ningún otro polígono del empaquetamiento; en caso de haber contacto, se realiza la misma operación con el punto c_2 . Por lo general, con uno de estos dos puntos se encuentra una posición en la cual el nuevo polígono puede ser colocado; sin embargo, en ocasiones esto no sucede así. En caso de ocurrir esto último, no es posible colocar el polígono y se pasa entonces a un nuevo paso del Algoritmo 1.

En todos los empaquetamientos de partículas poligonales convexas obtenidos en el presente trabajo, la cantidad de lados de los polígonos varía entre 3 y 7 lados, sin embargo, el algoritmo permite la facilidad de obtener empaquetamientos con polígonos de n lados sin alterar la formulación propuesta.

4. EVALUACIÓN DE LOS EMPAQUETAMIENTOS Y DESEMPEÑO COMPUTACIONAL DEL ALGORITMO

Con la combinación de estos criterios se obtienen variantes del algoritmo, las cuales permiten la obtención de varias configuraciones en los empaquetamientos dando la posibilidad de utilizar uno u otro indistintamente dependiendo del problema a resolver.

4.1. CRITERIOS DE SELECCIÓN DE LA PARTÍCULA PIVOTE Y SUS VECINAS

Los criterios de selección de la partícula pivote son:

- Selección a lo ancho (Ancho): Las partículas pivotes se toman en el mismo orden en que fueron adicionadas a la lista de partículas pivotes.
- Selección a lo ancho con información adicional (Ancho-Heurística): Este criterio sigue el mismo principio que el anterior, solo que este utiliza un procedimiento heurístico para decidir la factibilidad del pivote seleccionado.
- Selección aleatoria con información adicional (Aleatorio-Heurística): Este criterio se basa en seleccionar la partícula pivote a partir de una posición aleatoria en la lista de partículas pivote, además de utilizar el mismo procedimiento heurístico mencionado en el criterio anterior.

A este procedimiento heurístico se le ha llamado "heurística de disponibilidad", el cual calcula la dirección en la que se encuentra un espacio vacío adyacente a la partícula pivote y comprueba si la nueva partícula a generar, no corta a ninguno de los vecinos de esta (Figura 6).

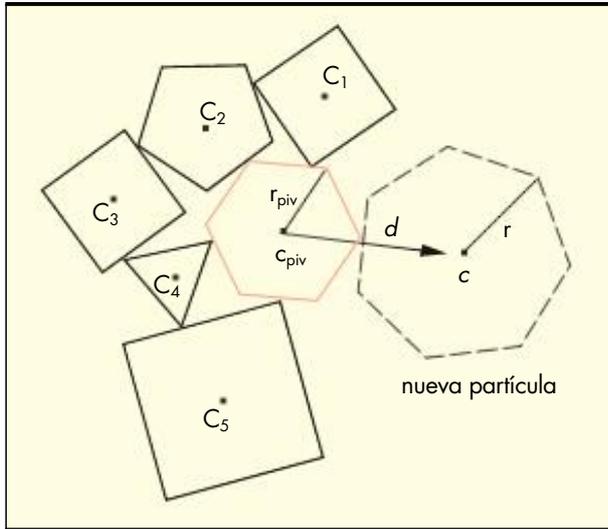


FIGURA 6. Heurística de disponibilidad.

El centro c de la nueva partícula está dado por la ecuación:

$$c = c_{piv} + (r_{piv} + r) d \quad (7)$$

donde la dirección d se calcula mediante la fórmula:

$$d = \frac{\sum_{i=1}^n (c_{piv} - c_i)}{\left\| \sum_{i=1}^n (c_{piv} - c_i) \right\|} \quad (8)$$

El criterio de selección de partículas vecinas a la partícula pivote utilizado el mismo principio que la selección a lo ancho en la elección de la partícula pivote, solo que en este caso se toman las partículas de la lista de vecinas a la partícula pivote. Dicha lista se obtiene realizando una consulta espacial utilizando el algoritmo NBS [25]. Las variantes utilizadas en el presente trabajo se muestran en el Tabla 1.

	Selección partícula pivote	Selección partículas vecinas
Variante 1	Ancho	Ancho
Variante 2	Ancho-Heurística	Ancho
Variante 3	Aleatorio-Heurística	Ancho

TABLA 1. Variantes del algoritmo.

4.2. VELOCIDAD MEDIA DE GENERACIÓN, FRACCIÓN DE VOLUMEN Y DESEMPEÑO COMPUTACIONAL

Se obtienen 30 generaciones para cada variante por cada distribución estadística en un dominio de forma cuadrada de 600 unidades de arista. Para cada una de estas, se obtienen los valores de las medias aritméticas de la velocidad media y fracción de volumen, obteniéndose los resultados presentados en la Figura 7. También son calculados los valores de la desviación estándar como medida de dispersión, teniéndose que todos los valores de fracción de volumen se encuentran a una distancia de $\pm 3 \cdot 10^{-3}$ de la media aritmética.

Se puede observar que los valores de velocidad media y fracción de volumen varían de una variante a otra y de una distribución a otra. Las variantes de mejores rendimientos en cuanto a la fracción de volumen fueron Ancho/Ancho y Ancho-Heurística/Ancho, ambas utilizando la distribución Normal para generar los valores del parámetro de distancia entre el centro y los vértices del polígono. El mejor rendimiento en cuanto a velocidad media de generación fue obtenido con el uso de la variante Ancho-Heurística/Ancho, utilizando la distribución Uniforme. Como se puede ver, no existe coincidencia entre las mejores variantes para cada criterio; esto permite escoger entre ellas la que mejor se adecue a las necesidades del problema a resolver.

Para comprobar el desempeño computacional del algoritmo propuesto, se obtienen nuevas generaciones para cada variante por distribución estadística, esta vez utilizando un dominio de forma cuadrada de 3000 unidades de arista. Las pruebas fueron realizadas en una PC Antec con un procesa-

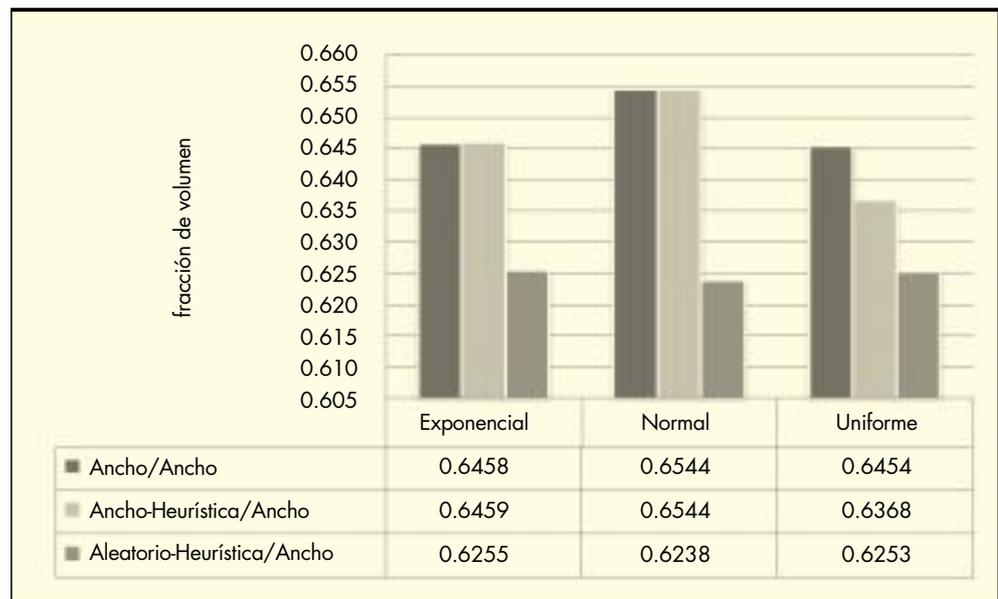


FIGURA 7A. Fracción del volumen.

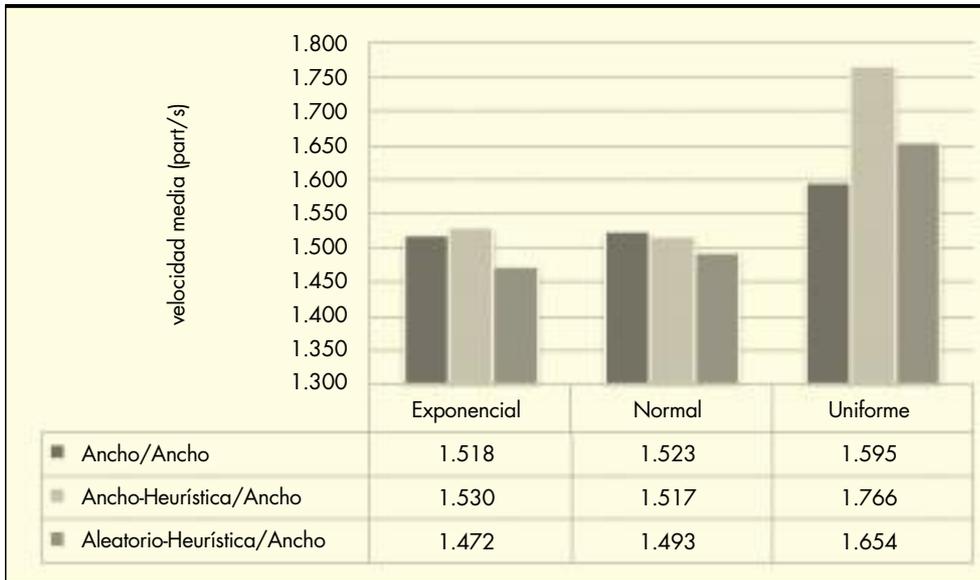


FIGURA 7B. Velocidad media.

TABLA 2. Tiempo computacional de las variantes.

	Variante 1		Variante 2		Variante 3	
Distribución	cant. part.	tiempo (s)	cant. part.	tiempo (s)	cant. part.	tiempo (s)
Exponencial	1.310.784	763	1.213.009	1.068	1.190.690	806
Normal	1.289.241	1.134	1.207.271	694	1.184.822	813
Uniforme	1.285.255	1.462	1.189.032	1.386	1.167.290	784

dor Intel(R) Core(TM)2 Quad a 2.83GHz. La Tabla 2 muestra el tiempo computacional necesitado para obtener los empaquetamientos, donde el tamaño de los polígonos varía, estando sus radios en el intervalo [1,2].”

5. CARACTERIZACIÓN ESTADÍSTICA DE LOS EMPAQUETAMIENTOS

Con el fin de caracterizar estadísticamente los empaquetamientos de polígonos convexos obtenidos, se pueden utilizar varios estadísticos. En las ciencias de los materiales, una característica muy importante de los empaquetamientos de partículas son los contactos entre estas. Estos determinan la conectividad topológica del sistema de partículas o la transferencia de fuerzas en los sistemas mecánicos compuestos por partículas. Otras características importantes de la estructura de empaquetamientos son la aleatoriedad, la homogeneidad y la isotropía tanto en un nivel micro como macro.

5.1. NÚMERO DE COORDINACIÓN

La distribución del número de contactos o número de coordinación, representa el número promedio de contactos por partícula. Este puede escribirse como:

$$\bar{c} = \frac{\sum N_i}{N_p} \quad (9)$$

donde N_i es el número de contactos por cada partícula, en el presente caso polígonos convexos, y N_p es el número total de

polígonos en el empaquetamiento. El valor del número de coordinación para todos los empaquetamientos obtenidos está alrededor de $\bar{c} = 4$.

5.2. EVALUACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE LOS EMPAQUETAMIENTOS

En la literatura prácticamente no se reportan técnicas para el análisis de la estructura de empaquetamientos de partículas poligonales convexas. En el trabajo [27] se presentan técnicas estadísticas que permiten evaluar la estructura de empaquetamientos de partículas. Sin embargo, a pesar de que estas técnicas están dirigidas a evaluar empaquetamientos de esferas, los conceptos de aleatoriedad, homogeneidad, isotropía micro e isotropía macro, son independientes del tipo de partícula, permitiendo extender estos conceptos. Para ello solo es necesario definir la densidad de área (longitud) de un plano (línea) cortante.

En el caso de polígonos convexos, es necesario definir la densidad de línea. En la Figura 8 se muestra una vista de un empaquetamiento de partículas poligonales convexas dentro de una geometría cuadrada y una línea cortante. La densidad del empaquetamiento ϕ se define como:

$$\phi = \frac{1}{2L^2} \sum_{i=1}^N n_i r_i \operatorname{sen} \frac{2\pi}{n_i} \quad (10)$$

donde N es el número total de polígonos, n_i es la cantidad de lados del polígono, r_i es la distancia entre el centro geométrico

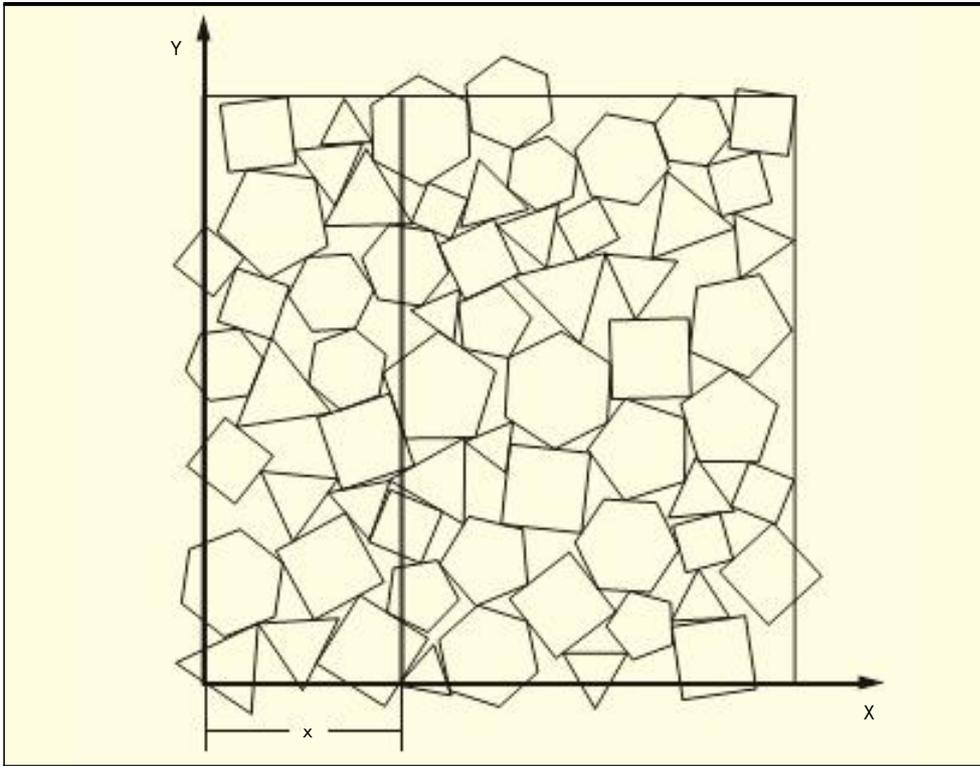


FIGURA 8. Empaquetamiento de polígonos en un dominio cuadrado.

polígono y cada uno de sus vértices y L es el lado del cuadrado que define la geometría. Si el empaquetamiento es cortado por m líneas paralelas igualmente separadas, la densidad de línea de la j -ésima recta se define como:

$$\phi_{a,j} = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{n_j} l_k \quad (11)$$

donde n_j es la cantidad de polígonos que intercepta la j -ésima recta y l_k es la longitud del segmento determinado por los puntos de intersección entre la j -ésima recta y el k -ésimo polígono. La media de las densidades de línea se define como:

$$\langle \phi_a \rangle = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \phi_{a,j}$$

Si la cantidad de líneas m tiende a infinito, el valor $\langle \phi_a \rangle$ tiende al valor de la densidad global del empaquetamiento [27].

El concepto de aleatoriedad utilizado se basa en la verificación de la correlación entre observaciones de una serie de

tiempo. En esta última, el coeficiente de autocorrelación C_k definido como [28]:

$$C_k = \frac{\sum_{j=1}^{m-k} (\theta_j - \langle \theta \rangle)(\theta_{j+k} - \langle \theta \rangle)}{\sum_{j=1}^m (\theta_j - \langle \theta \rangle)^2} \quad (12)$$

donde $\langle \theta \rangle$ es la media de las observaciones. Si el muestreo temporal es completamente aleatorio y el número de observaciones m es suficientemente grande, entonces para todos los valores distintos de cero de k , C_k se aproxima a cero. Por consiguiente, los valores de C_k , deben estar en el intervalo $\pm \frac{2}{\sqrt{m}}$.

para todo $1 \leq k \leq m/4$. En el presente caso del análisis de aleatoriedad de un empaquetamiento, se tiene que en la Ecuación 12 reemplaza $\langle \theta \rangle$ por $\langle \phi_{a,i} \rangle$ y $\langle \theta_j \rangle$ por $\langle \phi_{a,j} \rangle$. Si las partículas fueron empaquetadas aleatoriamente, C_k debe pertenecer al intervalo $\pm \frac{2}{\sqrt{m}}$.

El concepto de homogeneidad plantea que un empaquetamiento es homogéneo si las posiciones de las partículas en la

TABLA 3. Resultados al aplicar las técnicas estadísticas.

	Aleatoriedad	Homogeneidad	Isotropía	
			Nivel micro	Nivel macro
Ancho/Ancho	Si	Si	No	Si
Ancho-Heurística/Ancho	Si	Si	No	Si
Aleatorio-Heurística/Ancho	Si	Si	No	Si

geometría obedecen una distribución uniforme. Se plantea que si las proyecciones en cualquiera de los ejes, de las líneas centro-centro entre las partículas en contacto obedece una distribución uniforme, entonces el empaquetamiento se considera isótropo a nivel micro. Por otra parte, se considera que el empaquetamiento es isótropo a nivel macro si las varianzas de las densidades de línea en cualquiera de los ejes son iguales. Los resultados obtenidos al aplicar las técnicas estadísticas se muestran en la Tabla 3. Estos vienen dados por los valores (Sí/No) que indican solamente si el empaquetamiento cumple con el test o no. Como se puede ver, todas las variantes cumplen con los tests de aleatoriedad, homogeneidad e isotropía a nivel macro y no con el test de isotropía a nivel micro.

6. CONCLUSIONES

Se han propuesto formulaciones matemáticas y algoritmos computacionales que permiten empaquetar polígonos convexos dentro de un dominio bidimensional. Se han obtenido empaquetamientos aleatorios de polígonos convexos utilizando los criterios propuestos de selección de la partícula pivote y de las partículas vecinas a la pivote. Los empaquetamientos presentan buenos valores tanto de densidad como de velocidad de generación y cumplen con los tests de aleatoriedad, homogeneidad e isotropía a nivel macro, no así con el test de isotropía a nivel micro.

7. REFERENCIAS

- [1] P. Cundall, "A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems," in *Proc. Int. Symp. Rock Fracture*, ISRM, pp. 2–8, 1971.
- [2] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Geotechnique*, vol. 29, no. 1, pp. 47–65, 1979.
- [3] S. Mohammadi, *Discontinuum mechanics using finite and discrete elements*. Wit Press, 2003.
- [4] K. Han, D. Peric, A. Crook, and D. Owen, "A combined finite/discrete element simulation of shot peening processes. part i: studies on 2d interaction laws," *Geotechnique*, pp. 593–619, 2000.
- [5] K. Han, D. Peric, A. Crook, and D. Owen, "A combined finite/discrete element simulation of shot peening processes. part ii: 3d interaction laws," *Geotechnique*.
- [6] T. Bangash and A. Munjiza, "A computationally efficient bea element for fem/dem simulations of structural failure and collapse," *Discrete Element Methods*, 2002.
- [7] E. Oñate and J. Rojek, "Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2004.
- [8] S. Idelsohn, E. Oñate, and D. F. Pin, "The particle finite element method: a powerful tool to solve incompressible flows with free-surfaces and breaking waves.," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 61, pp. 964–989, 2004.
- [9] E. Oñate, S. Idelsohn, D. F. Pin, and R. Aubry, "The particle finite element method. an overview.," *International Journal of Computational Methods*, vol. 1(2), pp. 267–307, 2004.
- [10] R. Aubry, S. Idelsohn, and E. Oñate, "Particle finite element methods in fluid mechanics including thermal convection-diffusion," *Computers & Structures*, vol. 83, pp. 1459–1475, 2005.
- [11] H. Sakaguchi and A. Muramaki, "Initial packing in discrete element modelling, discrete element methods, 3rd international conference," (New Mexico), pp. 104–106, ASCE, 23-25 September 2002.
- [12] M. Jiang, J. Konrad, and S. Leroueil, "An efficient technique for generating homogeneous specimens for dem studies," *Computers and Geotechnics*, vol. 30, no. 7, pp. 579–597, 2003.
- [13] K. Han, Y. T. Feng, and D. R. J. Owen, "Sphere packing with a geometric based compression algorithm," *Powder Technology*, vol. 155, pp. 33–41, 2005.
- [14] K. Han and D. Owen, "Filling domains with disks: an advancing front approach," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 53, pp. 699–713, 2003.
- [15] A. Benabbou, H. Borouchaki, P. Laug, and J. Lu, "Numerical modeling of nanostructured materials," *Finite Elements in Analysis and Design*, August 2009.
- [16] Y. T. Feng, K. Han, and D. Owen, "An advancing front packing of polygons, ellipses and spheres," *Discrete Element Methods*, 2002.
- [17] E. Oñate and R. LÖHNER, "A general advancing front technique for filling space with arbitrary objects," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 61, pp. 1977–1991, 2004.
- [18] C. Hogue, "Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries," *Engineering Computations*, vol. 15, pp. 374–390, 1998.
- [19] P. A. Cundall, "Formulation of a three-dimensional distinct element model. part i. a scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks," *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics*, vol. 25, pp. 107–116, 1988.
- [20] G. Shi, *Discontinuous deformation analysis. A new model for the statics and dynamics of block systems*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1988.
- [21] G. DAddetta, F. Kun, and E. Ramm, "On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials," *Granular Matter*, vol. 4, pp. 107–116, 2002.
- [22] K. Han, Y. T. Feng, and D. R. J. Owen, "Polygon-based contact resolution for superquadrics," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 66, pp. 485–501, 2006.
- [23] R. Roselló, "Biblioteca de clases para la fase de empaquetamiento en el método de elementos discretos," 2007.
- [24] Y. Pérez, "Implementación del empaquetamiento en el método de elementos distintos para diferentes tipos de partícula," 2007.
- [25] A. Munjiza and K. Andrews, "Nbs contact detection algorithm for bodies of similar size," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 43, pp. 131–149, 1998.
- [26] R. Saucier, "Computer generation of statistical distributions," vol. ARL-TR-2168, 2000.
- [27] D. He, N. Ekere, and L. Cai, "New statistic techniques for structures evaluation of particle packing," *Materials Science and Engineering*, vol. 298, pp. 209–215, 2001.
- [28] C. Chatfield, *The analysis of time series. An introduction*. Chapman & Hall, 1989.