

Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas
Facultad de Matemática-Física-Computación



**Disminución de los tiempos de cálculo en la fase de
inicialización del Método de Elementos Discretos
(MED)**

Autor: Andy Raúl Palmero López

Tutor: Irvin Pablo Pérez Morales

Santa Clara, 2017

Resumen

La presente tesis está dedicada a la fase de inicialización del Método de Elementos Discretos (MED). En ella se aborda el problema de la partícula en contacto para el caso de conglomerados de círculos y esferas.

En el análisis del estado del arte de la temática, se incluye la mayor parte de los aspectos relevantes del MED. Se muestran los principales algoritmos de empaquetamiento existentes para los diferentes tipos de partícula, así como los métodos para evaluar la calidad de dichos empaquetamientos. También se describen las principales formulaciones de la parte de simulación con el MED, se menciona una gran cantidad de aplicaciones, y se enumeran los principales códigos computacionales existentes.

Se formula un algoritmo de empaquetamiento de avance frontal y luego se describe el problema de la partícula en contacto, donde, para conglomerados de círculos o esferas, se manifiesta la necesidad de mejorar la eficiencia al resolver el problema anterior. Se introducen brevemente el aprendizaje de máquina, así como la regresión logística, los árboles de decisión y las redes neuronales.

Se realizó una comparación de los tiempos de generación de la partícula móvil, para los casos en que se conoce y los que no se conoce entre cuáles círculos ocurre la tangencia. Se plantea un problema de clasificación y para solucionar el mismo son utilizados: árboles de decisión, regresión logística, máquinas de soporte vectorial y redes neuronales.

Abstract

The present thesis is devoted to the Discrete Element Method (DEM) initialization phase. It approaches the problem of the particle in contact for clusters of disks and spheres.

Most of the relevant DEM aspects are included in the analysis of the state of the art in Chapter 1, which includes the main packing algorithms for the different kinds of particles, as well as the methods to evaluate the quality of the obtained packings. There are also described the main formulations of DEM simulations, a large number of applications, and the existing computational codes.

Advancing front packing algorithms are proposed and the problem of the particle in contact is described later, where its shown the need of improving the efficiency solving it. Machine Learning, Logistic Regression, Decision Trees and Neural Networks are briefly introduced.

A comparison between the generation time of the mobile particle for the cases when the tangency disks are known and those when they aren't, was made. A classification problem was presented, and Decision Trees, Logistic Regression, Vector Support Machine and Neural networks were used to solve it.

Índice

Resumen.....	2
Abstract	2
Índice.....	3
Introducción.....	5
Problema científico	5
Hipótesis	5
Objetivo.....	6
Justificación de la investigación.....	6
Capítulo 1. Estado del arte de los métodos de empaquetamiento de partículas	7
1.1 Estado del arte del Método de Elementos Discretos (MED)	7
1.1.1 Generalidades	7
1.1.2 - Enfoque global del método de los elementos discretos o distintos (MED).....	10
1.1.3 – Formulaciones del método de elementos discretos	11
1.1.3.1 - Estudios e investigaciones preliminares de la formulación del MED	11
1.1.3.2 – Aplicaciones de las formulaciones macro del MED.....	12
1.1.3.3 - Aplicaciones de las formulaciones micro del MED.....	14
1.1.3.4- El MED en estudios a nivel nano	16
1.1.3.5 - Combinación del MED con otros métodos	17
1.2 - Estado del arte de algoritmos de empaquetamiento para el MED.....	18
1.2.1 - Enfoques generales:	18
1.2.2 - Técnicas de empaquetamiento de partículas.....	20
1.2.3 - Análisis global de los métodos de empaquetamiento	22
1.3 - Técnicas de caracterización de los empaquetamientos	23
1.3.1 - Enfoque global de las técnicas de caracterización o evaluación de los empaquetamientos	23
1.3.2 - Técnicas de caracterización o evaluación de empaquetamientos .	23
1.3.3 - Análisis global de las técnicas de caracterización o evaluación de los empaquetamientos	24
1.4- Estado del arte de la solución del problema de la partícula en contacto.	25
1.4.1 - Tipos de partícula.....	25
1.4.2 - Estabilidad del Método.....	25
1.4.3 - Técnicas auxiliares.....	26

1.4.4 - Detección de contactos.....	26
1.4.4.1 - Búsqueda de vecinos (búsqueda global)	26
1.4.4.2 - Detección de intersecciones (búsqueda local) y descripción geométrica del contacto	27
1.4.5 - Descripción física del contacto. Modelo constitutivo	28
1.4.6 - Herramientas auxiliares para el empaquetamiento de sistemas de partículas. Construcción de la partícula en contacto.....	29
1.4.7 – Representación, forma y características de las partículas	29
1.4.8 - Códigos de empaquetamiento de partículas.....	30
1.5 Conclusiones del capítulo	31
Capítulo 2. Fundamentos teóricos.....	34
2.1 - Formulación de un algoritmo de empaquetamiento de avance frontal .	34
<i>Algoritmo 1: empaquetamiento de avance frontal en 3D</i>	34
<i>Algoritmo 2: empaquetamiento de avance frontal en 3D</i>	36
2.2 - Descripción del problema de la partícula en contacto.	37
2.3 - Explicación de la necesidad de mejorar la eficiencia al resolver el problema anterior, para conglomerados de círculos o esferas.	38
2.4 - Breve introducción al aprendizaje de máquina.....	39
2.5 - Formulación del Método de Regresión Logística.....	40
2.6 - Árboles de decisión	41
2.8 - Redes Neuronales	42
2.9 - Conclusiones y recomendaciones del capítulo	43
Capítulo 3. Resultados	44
3.1 - Aprendizaje supervisado	44
3.2 - Descripción del problema	45
3.3 - Preparación y exploración de los datos	47
3.4 - Tiempos de solución del problema de la partícula en contacto	51
3.5 - Clasificación	52
3.5.1 - Árboles de decisión para clasificación	52
3.5.2 - Regresión logística para la clasificación	52
3.5.3 - Clasificación con máquinas de soporte vectorial.....	52
3.5.4 - Clasificación con redes neuronales.....	53
3.6 - Conclusiones del capítulo.....	54
Conclusiones generales	55
Recomendaciones.....	56
Referencias bibliográficas	57

Introducción

Los métodos numéricos tradicionales como el Método de Elementos Finitos no son capaces de modelar discontinuidades y heterogeneidades en los materiales, por lo que el futuro de la modelación virtual de materiales está en los métodos numéricos que modelan su microestructura, lo cual cada día está más al alcance debido al constante desarrollo de los medios de cómputo.

La presente investigación realiza aportes a la fase de inicialización del Método de Elementos Discretos (MED), un método numérico que consiste en una simulación de un número finito de cuerpos que interactúan entre sí bajo las leyes de Newton, las leyes que definen las interacciones entre los cuerpos (leyes constitutivas), y la aplicación de fuerzas externas. Debido a que las simulaciones con el MED requieren un alto costo computacional, es necesario aumentar la eficiencia en la generación de los conjuntos iniciales de partículas con las cuales se llevan a cabo dichas simulaciones.

Una alternativa conveniente para generar los conjuntos iniciales previamente mencionados, llamados empaquetamientos, son los algoritmos de empaquetamiento de avance frontal. Estos algoritmos tienen las tres grandes ventajas de respetar cualquier distribución de forma y tamaño predeterminados de las partículas, tener una complejidad algorítmica lineal, y generar conjuntos con una alta fracción de volumen, siendo este un requerimiento importante en gran parte de las simulaciones con el MED.

Una de las mayores dificultades para la aplicación de los algoritmos de empaquetamiento de avance frontal es la solución del problema de construcción de la partícula en contacto, el cual consiste en dadas dos (tres) partículas fijas en 2D (3D), y una partícula móvil, trasladar la partícula móvil de manera que esté en contacto con todas las partículas fijas simultáneamente. La presente tesis presenta aportes en la solución del problema anterior, para el caso de partículas formadas por conglomerados de círculos o conglomerados de esferas.

Problema científico

¿Cómo disminuir los tiempos de cálculo de la posición de la partícula en contacto, para partículas que son conglomerados de círculos o de esferas?

El problema científico anterior, hasta donde sabemos, no ha sido abordado por nadie previamente. Para resolverlo, en la presente tesis se utilizarán técnicas de aprendizaje de máquina (conocida en inglés como Machine Learning), además de heurísticas creadas por el autor.

Hipótesis

Cualquier estimación mejor que el *modelo nulo* (el concepto de *modelo nulo* será explicado más adelante), para predecir entre cuáles círculos de las partículas en contacto ocurrirá la tangencia, producirá una disminución en el tiempo de cálculo de la posición de la partícula en contacto.

Objetivo

Construir modelos de aprendizaje de máquina para estimar entre cuáles círculos o esferas ocurrirá la tangencia en el problema de la partícula en contacto.

Justificación de la investigación

La implementación de los modelos de aprendizaje de máquina mencionados en el objetivo puede ser costosa, pero solo se tienen que construir una sola vez para cada tipo o forma de conglomerados.

Capítulo 1. Estado del arte de los métodos de empaquetamiento de partículas

1.1 Estado del arte del Método de Elementos Discretos (MED)

1.1.1 Generalidades

El Método de Elementos Distintos (MED), o de Elementos Discretos, como también se le conoce, es un método numérico que se emplea para resolver problemas de Mecánica Computacional en la solución de diversos modelos de la física matemática. Se fundamenta en el comportamiento de un sistema de partículas o cuerpos (los cuales pueden ser rígidos, semirrígidos o deformables) que interactúan entre sí bajo las leyes de Newton y las leyes constitutivas que caracterizan el contacto, pudiendo además estar presentes fuerzas externas como el amortiguamiento o la gravedad.

La modelación y simulación numérica de medios continuos o no, empleando el MED o una combinación de este con el Método de Elementos Finitos (MEF) u otro método numérico, es uno de los temas que está de boga en el campo de la ingeniería. Originalmente, este enfoque de modelación estuvo dirigido a resolver problemas de ingeniería a una escala macroestructural. En la actualidad, ha surgido una tendencia de estudiar las leyes del micromundo, por lo cual la modelación y la simulación numérica se han extendido a una escala microestructural. Estas dos tendencias de trabajo posibilitan clasificar los métodos empleados para la modelación y simulación numérica en dos grandes grupos que toman en cuenta la escala o nivel de estudio.

En los procesos de modelación de los diversos problemas de la física matemática siempre existen diferentes etapas como: preproceso, cálculo y postproceso. En la etapa de preproceso se realiza toda la concepción del modelo geométrico, modelos de vínculos o apoyos, modelo del material (en este caso modelo constitutivo de contacto) y los modelos de acciones exteriores o cargas. Unido a estos modelos, que en su conjunto definen el modelo físico, en el caso específico del MED es necesario disponer de un conjunto inicial de elementos distintos que definen la geometría, para formar el cual se toman como base la superficie que delimita el dominio.

En otros métodos numéricos como el MEF, el modelo geométrico está constituido por una malla de elementos. El caso del MED es similar en este sentido, y en él es necesario disponer de la discretización del medio (casi siempre discontinuo). En este último, el modelo geométrico queda caracterizado por un sistema de partículas, razón por la cual el MED se clasifica como un método de partículas. Los aspectos restantes que constituyen el modelo físico, se definen sobre el conjunto inicial de elementos discretos (a este conjunto inicial también se le conoce como empaquetamiento). Además de esto, se pueden emplear paredes o superficies a las que se les puede predeterminar su comportamiento.

El MED está compuesto por una serie de herramientas auxiliares de cuya eficiencia depende. Dichas herramientas se dividen en dos grandes grupos[1]: aspectos matemáticos y aspectos computacionales, los cuales se detallan a continuación.

Aspectos matemáticos:

- Métodos de generación o empaquetamiento de sistemas de partículas.
 - ✓ Consulta espacial o búsqueda de vecindad.
 - ✓ Detección de intersecciones entre partículas.
- A las anteriores se unen en el caso de formulaciones basadas en técnicas de avance frontal las siguientes:
 - ✓ Establecimiento del conjunto inicial de partículas o frente inicial de avance.
 - ✓ Técnicas de selección del frente de avance.
 - ✓ Construcción de la partícula en contacto exterior con otras.
- Métodos de caracterización y evaluación de la calidad de los empaquetamientos.
- Simulación física: formulación del MED.
 - ✓ Esquema de integración numérica.
 - ✓ Estabilidad del método y estimación del paso de tiempo de integración.
 - ✓ Modelos constitutivos de contacto y estimación de parámetros constitutivos a nivel de contacto.
 - ✓ Métodos de búsqueda de vecindad y contacto.

Aspectos computacionales:

- Manejo masivo de información y trabajo con grandes volúmenes de datos.
- Paralelización de la implementación de las etapas de empaquetamiento y de simulación física.
- Eficiencia computacional.
- Visualización suficientemente detallada con multiescala.

Antes de comenzar la simulación, es necesario tener un conjunto inicial de partículas (empaquetamiento, como ya se dijo), de las cuales se necesita, en la mayoría de los casos, que ocupen el mayor volumen posible o que respondan a la microestructura real de un material determinado en caso que se deseen realizar estudios al nivel del micromundo. En este segundo caso es necesario lograr obtener conjuntos iniciales de partículas donde exista control de la fracción de volumen (se define como la razón entre el volumen ocupado por las partículas y el volumen de la geometría contenedora), y el tipo, forma, posición y distribución estadística que pueden seguir las diferentes partículas que conforman el medio o material que se modele. Para lograr esto se han desarrollado los denominados *algoritmos de empaquetamiento*, los cuales tienen para el MED tanta importancia como los métodos de mallado la tienen para el MEF.

Abordar problemas del micromundo o estudiar problemas a nivel de la macro escala delimita dos clasificaciones del MED en cuanto a su utilización: formulaciones macro y formulaciones micro. La tendencia actual en los centros de élite mundial que se dedican al desarrollo de la Mecánica Computacional y

los métodos numéricos en la ingeniería, es el desarrollo de investigaciones enfocadas al estudio del micromundo.

Una vez que se ha obtenido el empaquetamiento, es conveniente tener conocimiento sobre los parámetros estocásticos que lo caracterizan. Por ejemplo, si se simula el comportamiento de un material isótropo, es deseable que el empaquetamiento sea lo más homogéneo posible, respetando el resto de los parámetros tales como la densidad micro y la forma y distribución estadística que sigue la geometría de las partículas en caso que se estén desarrollando estudios al nivel del micromundo. Por eso es necesario desarrollar y disponer de técnicas de evaluación de la calidad de los empaquetamientos, para conocer los parámetros que permitan lograr una similitud con el medio físico real que se modela a nivel de la microescala en este caso. Si se está aplicando el MED a nivel de la macro escala no es imprescindible utilizar estas técnicas y es suficiente con lograr empaquetamientos lo más densos posible.

Después de disponer del modelo geométrico ya discretizado (empaquetamiento), con las correspondientes definiciones del modelo de cargas, vínculos o apoyos, el modelo del material (modelo constitutivo de contacto), ya se dispone de una correcta concepción del modelo físico. Después de esto se pasa a la definición del modelo matemático, el cual se compone de la región, la ecuación de gobierno del problema de la física-matemática que se desee resolver y por las condiciones iniciales o de frontera. Después de lo anterior se está en condiciones de aplicar el método de solución, que en este caso es por una vía numérica empleando el MED, previamente calibrado y validado con respecto a ensayos físicos realizados para garantizar la fiabilidad matemática y física de la modelación.

En este proceso de implementación del MED en la resolución de diversos problemas de ingeniería, se parte de la aplicación de las leyes de Newton a un sistema de partículas, conjugando estas leyes con la aplicación de modelos constitutivos de contacto para determinar las fuerzas de interacción entre partículas, apoyándose en métodos de búsqueda de vecindad y contacto para determinar las interacciones entre partículas. En problemas acoplados o donde se manifiestan problemas de multifísica (Este tipo de problemas se caracteriza por combinar modelos físicos esencialmente diferentes. Un problema de multifísica puede ser, por ejemplo, la interacción de un medio granular con un medio continuo.), el modelo incluye distintas leyes de comportamiento correspondientes a fenómenos físicos en diferentes escalas.

Con la aplicación del MED se generan grandes volúmenes de datos (tales como desplazamiento, velocidad, y aceleración de cada partícula en los diferentes pasos de tiempo, entre otras variables de respuesta de interés), por lo cual es necesario disponer de técnicas de visualización o postproceso, que permitan interpretar de modo factible los resultados. En el caso de la aplicación del MED a nivel del micromundo, es necesario disponer de técnicas de manejo masivo de información y de visualización multiescala o a nivel de detalle, para poder interpretar los fenómenos a nivel de las diferentes escalas de la Mecánica Computacional, teniendo como escalón inferior la escala micro.

1.1.2 - Enfoque global del método de los elementos discretos o distintos (MED)

Existe una gran cantidad de formulaciones del MED, las cuales son tratadas de modo puntual para cada tipo de partícula para el cual es formulado. Se ha observado la no existencia de un enfoque sistémico de la formulación del MED que propicie una arquitectura abierta en cuanto a las técnicas que se emplean en su formulación. En este sentido las formulaciones del MED se caracterizan por:

- Esquema de integración empleado.
- Estabilidad del método y estimación del paso de tiempo de integración.
- Tipo de partícula para el que está formulado el método.
- Búsqueda de vecindad y contacto entre partículas.
- Modelo constitutivo o modelo de contacto y estimación de parámetros constitutivos de contacto.

En un estudio global de las diferentes formulaciones del MED consultadas, no se ha observado la existencia de estudios serios en cuanto al empleo o selección del esquema de integración en función de las peculiaridades y naturaleza (estática, cuasi-estática o dinámica) de los fenómenos físicos que se estén simulando. También se han realizado pocos estudios científicamente fundamentados en cuanto al paso de integración y la estabilidad del método.

Con respecto a los métodos de búsqueda de vecindad y contacto se ha encontrado en la literatura consultada una amplia gama de formulaciones que presentan sus ventajas y desventajas. Solo existen estudios muy puntuales de comparación entre estos métodos en cuanto a su efectividad y costo computacional [2]. Este aspecto permite afirmar la necesidad de realizar investigaciones dirigidas a estudiar la versatilidad de los métodos de búsqueda de vecindad y contacto y su eficiencia computacional. Además de la necesidad de hacer una investigación que demuestre la efectividad del empleo de una u otra tecnología de métodos de búsqueda de vecindad y contacto tomando en consideración las peculiaridades y naturaleza (estática, cuasi-estática o dinámica) de los fenómenos físicos que se estén modelando y tomando en consideración el tipo de partícula y la razón entre el tamaño mínimo y máximo de las partículas que constituyen el medio.

En cuanto a la modelación constitutiva, se constata la existencia de una amplia gama de modelos constitutivos de contacto. En este sentido la mayor dificultad de aplicación del MED es conocer qué parámetros constitutivos a nivel de contacto le corresponde a cada material en particular, siendo este aspecto uno de los impedimentos principales en la aplicación de esta técnica de modelación (se han encontrado pocas y muy breves formulaciones sobre este aspecto [3-6]). Por eso existe la necesidad de hacer estudios de estimación de parámetros constitutivos de contacto que establezcan las relaciones adimensionales entre los parámetros constitutivos de contacto con las variables constitutivas convencionales a nivel macro que se emplean en la mecánica de medio continuo.

Un análisis global de todos los aspectos que integran la formulación del MED indica que es un método que está en una fase inicial de investigación y que queda un campo muy amplio de estudio para su uso como técnica de

resolución de problemas reales en el mundo de la ingeniería. Este aspecto está propiciado por la necesidad de conocer sobre bases científicamente fundamentadas la selección de las técnicas que constituyen el método como tal, entre otros aspectos ya mencionados.

En cuanto a la formulación del método en función del tipo de partícula, existen muchas formulaciones puntuales para cada tipo de partícula y no existe una formulación sistémica y única para todos los tipos de elementos discretos con su correspondiente formulación e implementación computacional, disponiendo además de una arquitectura abierta que propicie el empleo de las diferentes alternativas en cuanto a: esquema de integración, métodos de búsqueda de vecindad y contacto y modelo constitutivo.

1.1.3 – Formulaciones del método de elementos discretos

El MED como técnica de simulación basada en la mecánica del medio discontinuo es una alternativa de simulación muy potente, la cual supera en varios aspectos a los métodos numéricos convencionales que resuelven problemas de mecánica del medio continuo. Por ejemplo, en problemas de sólidos, con esta técnica se resuelven con gran facilidad los problemas de fractura y propagación de grietas, mientras que, para estos mismos problemas, con otras técnicas es necesario realizar artificios y suposiciones, ya que están concebidas para problemas de la mecánica de un sólido continuo. En el caso de fluidos, los problemas de turbulencia y otros que se enfrentan en la Dinámica Computacional de Fluidos, se pueden formular mediante el MED con más flexibilidad que con los métodos convencionales. La principal desventaja del MED con respecto a los métodos convencionales es el costo computacional que hasta cierto punto se amortigua con el actual desarrollo de la tecnología.

El MED tiene una gran cantidad de aplicaciones actualmente. Una lista bastante abarcadora de estas puede ser consultada en [7]. En su aplicación existen dos enfoques muy bien concebidos: modelación de problemas macro y modelación de problemas micro. En este último campo es donde el MED supera con creces a los métodos convencionales. Otro aspecto que aprovecha las potencialidades del MED es su combinación con los métodos convencionales [8]. Este enfoque aprovecha las ventajas de ambas tecnologías y hace más potente su explotación.

1.1.3.1 - Estudios e investigaciones preliminares de la formulación del MED

En [9] se estudia la validez de los conglomerados de esferas para reproducir la realidad física. Para esto, se realizó una simulación con esferas rígidas que reprodujo con bastante exactitud los resultados de un experimento físico. Sin embargo, al emplear conglomerados de forma casi esférica, se obtuvieron grandes errores, lo cual sugiere que deben ser estudiadas las condiciones en las cuales se debe usar este tipo de partículas.

La investigación [10] propone un método para reducir el tiempo de cálculo en simulaciones de partículas, basado en no mover aquellas cuyo desplazamiento relativo es menor que el 0.1% del radio de la partícula para ciertos pasos de cálculo. Se reportan resultados de reducción a $\frac{1}{4}$ del tiempo original de simulación.

En [11] se realiza una verificación de postulados relativos a medios continuos, demostrando que es posible establecer a nivel local y de manera aproximada, una conexión entre teorías del continuo y simulaciones basadas en partículas para flujos granulares densos. Otras investigaciones relativas a flujos granulares también pueden ser consultadas [12-16].

La relación cuantitativa entre los parámetros microestructurales que definen los contactos entre las partículas y el amortiguamiento del sistema; y los parámetros macro del conjunto de partículas en el MED, es un tema de gran importancia que todavía no ha sido completamente resuelto. Los estudios necesarios para avanzar en esta dirección son computacionalmente costosos, porque requieren de cierta cantidad de simulaciones con el MED. Algunos de estos estudios pueden ser consultados en [17-26].

En cuanto a los métodos de búsqueda de vecinos, se han realizado algunas comparaciones o estudios en este sentido [2]. De acuerdo a la literatura consultada, el mejor método en cuanto a independencia respecto al tipo de partícula, eficiencia y buen desempeño para partículas de tamaños muy diferentes, parece ser el algoritmo CGrid [27, 28]. Se han encontrado formulaciones de métodos de búsqueda de contactos para algoritmos de empaquetamiento basados en un reacomodamiento colectivo [29]. Debido a que en estas formulaciones las partículas pueden formar un conjunto disperso, puede ser más conveniente emplear una estructura de *octree* adaptada para dichos casos, en vez de la división en celdas iguales o el *octree* usual.

De un estudio minucioso de las investigaciones realizadas alrededor del establecimiento del MED, se puede afirmar que es un método que está en fase de investigación, debido a que es necesario realizar investigaciones profundas en cuanto a:

- Selección del esquema de integración a emplear en función de las peculiaridades y naturaleza (estática, cuasi-estática o dinámica) de los fenómenos físicos.
- Necesidad de realizar estudios de estabilidad del método y estimación del paso de tiempo de integración respecto a las diferentes condicionantes de la aplicación de este método.
- Peculiaridades de la formulación en cuanto a tipo de partícula o combinaciones de estas para las que está formulado el método.
- Selección del método de búsqueda de vecindad y contacto a emplear en función de las peculiaridades y naturaleza (estática, cuasi-estática o dinámica) de los fenómenos físicos.
- Selección del modelo constitutivo o modelo de contacto y establecimiento de métodos de estimación de los parámetros constitutivos de contacto.

1.1.3.2 – Aplicaciones de las formulaciones macro del MED

En el año 1971 Peter Cundall [30] presentó un método novedoso para modelar los medios rocosos discontinuos. Tenía la particularidad de poder simular grandes desplazamientos y rotaciones de los bloques de roca, así como separaciones entre los mismos, válido para problemas en dos dimensiones y en el cual los bloques de roca se consideraban rígidos. En 1978 extendió este modelo a bloques de deformación constante y a bloques deformables [31]. El

modelo de bloques deformables se basaba en un trabajo de Wilkins [32] que consistía en utilizar un código en diferencias finitas explícito en el tiempo para determinar la deformación interna de los bloques. Actualmente el MED también se sigue desarrollando en esta dirección [33-36]. Otro de los primeros trabajos con el MED [37] fue la representación de paneles formados por módulos de reticulados espaciales, lo cual posibilitó una discretización con un número menor de grados de libertad, reduciendo así el costo computacional.

Actualmente, una de las principales aplicaciones del MED es el estudio del flujo de medios granulares en silos [38-42], el cual es un fenómeno muy difícil de modelar con los métodos tradicionales como el MEF. Esta aplicación, esencialmente igual al flujo dentro de un reloj de arena, la describe Mohammadi en el mismo comienzo de su libro [7]: “Un reloj de arena, ha sido durante siglos una simple y común herramienta para medir el tiempo, así como también una medida relativamente precisa y confiable para experimentos científicos. Sin embargo, hasta muy recientemente, incluso en la época de las supercomputadoras y métodos numéricos eficientes tales como el Método de Elementos Finitos, no ha sido posible modelar este fenómeno. Una geometría altamente variable y objetos que interactúan entre sí (granos de arena), han sido los principales obstáculos para cualquier formulación eficiente.”

Pasando a otro tipo de aplicación, en el estudio de las vías férreas se ha simulado el comportamiento del balasto de ferrocarril [43], concluyendo que los conglomerados de esferas describen mejor que las esferas el comportamiento de este medio granular, debido a que reflejan la respuesta a la deformación ocasionada por la carga aplicada. En el caso de la ingeniería vial existen estudios de la fractura del asfalto [3, 44, 45] o del comportamiento de su módulo dinámico [46].

El desgaste de herramientas o el efecto de estas sobre el material también ha sido abordado con el MED. En este caso se emplea un modelo de multifísica. Primeramente, se acopla el método con la ecuación de Archard para incluir el efecto del desgaste y posteriormente se incluyen los fenómenos térmicos para resolver problemas termomecánicos acoplados. En [47] se presentan resultados sobre la interacción entre una herramienta de corte y un terreno. Las simulaciones se contrastan con experimentos reales, y se demuestra la capacidad del MED para modelar estos fenómenos y cuantificar las fuerzas entre el terreno y la herramienta.

Por otra parte, en [48] se ha modelado el daño y fractura en el proceso de maquinado de SiC policristalino, empleándose círculos de tamaños diferentes. En este caso se emplea como soporte de cálculo el software PFC2D. Se ha realizado una calibración de los parámetros del MED y ha habido una buena correspondencia entre los resultados de las simulaciones y los datos experimentales.

Una aplicación del MED a la ingeniería civil se halla en [49], en la cual se ha estudiado el comportamiento de un arco de un puente construido con piedras. Se determinó que la rigidez, el ángulo de fricción y la cohesión del relleno influyen enormemente en la capacidad portante de la estructura.

El campo de aplicación del MED trasciende los límites de nuestro planeta. Por ejemplo, existen estudios numéricos y experimentales del efecto de la gravedad en el mecanismo de excavaciones lunares [50] (acerca de

excavaciones en la Tierra también existen modelaciones con el MED [51]), o del comportamiento de material suelto en la superficie de asteroides [52], o del ángulo de reposo de la arena en condiciones de baja gravedad [53].

Otra aplicación novedosa del MED es una modelación de contraflujo en dinámica de multitudes [54]. Dicha modelación es una herramienta muy útil para diseñar grandes lugares de eventos tales como salas de concierto y estadios. En este caso se trata del uso del MED para estudiar la dinámica de circulación de grandes volúmenes de personas.

A pesar de que la predicción del comportamiento de una espiral transportadora parece relativamente simple, la mecánica de estos dispositivos es muy compleja, y los investigadores han tendido a confiar mucho en datos de desempeño empíricos. En este sentido, la modelación con el MED permite hacer predicciones en cuanto a la velocidad de las partículas, razón de flujo de masa, disipación de energía y consumo de electricidad debido a cambios en las condiciones de operación [55].

El MED en problemas de dinámica de partículas sueltas como silos, transporte de materiales, transporte de medicamentos, etc., es una herramienta muy potente. De igual modo la resolución de problemas macro de mecánica del medio discontinuo como el caso de macizos rocosos es muy efectivo realizarlo con el MED. En otros problemas de ingeniería, sobre todo de mecánica del medio continuo o problemas de Dinámica Computacional de Fluidos, es mejor emplear las técnicas más convencionales.

1.1.3.3 - Aplicaciones de las formulaciones micro del MED

Una formulación que tiene varias aplicaciones industriales es la eliminación de capas de incrustaciones mediante partículas incidentes [56]. Otra aplicación industrial muy común es el proceso de mezclado de partículas en tambores giratorios o dispositivos mezcladores, y sobre esta temática existen múltiples investigaciones con el MED [57-64]. En el caso específico de la minería, también es frecuente la necesidad de separar elementos por tamaño [65, 66]; y en el caso de la fundición de metales, puede ser necesario estudiar los límites de fuerzas tolerables en paredes dañadas en hornos [67], o el comportamiento de flujos granulares en hornos de inyección de aire [12].

Con partículas de diferentes tamaños y densidades, interactuando con objetos de formas complejas y moviéndose según diferentes patrones, se ha simulado el molido de materiales [68]. En este caso también se ha examinado la sensibilidad de los resultados frente a las propiedades del material y a la distribución en tamaño de las partículas.

Otro grupo de aplicaciones constituye la simulación del comportamiento de suelos. Dentro de este, se ha estudiado la arena de Labenne [19], los suelos quebradizos empleando conglomerados de esferas [69], y las bandas de compactación en roca arenisca [70], las cuales tienen una gran aplicación en la explotación de hidrocarburos.

También se han estudiado los suelos granulares mojados con baja saturación [71], la generación espontánea de fracturas asociadas a procesos de penetración de magma [72], y la dependencia de la elasticidad, fuerza y ángulo de fricción con respecto a la porosidad y la densidad de rotura en medios

rocosos [73]. Otra aplicación geomecánica de interés es el estudio analítico y numérico de la evolución de pendientes a lo largo del tiempo, incluyendo factores del clima [74], o el comportamiento de la arcilla (la cual reduce la permeabilidad al fallo) a lo largo de fallas [75].

Se han realizado simulaciones para estudiar la transferencia de calor, como por ejemplo en el modelo tubería-red [76], en el flujo granular durante la descarga de silos [77], y en el proceso de impresión de papeles cubiertos [78].

La simulación de transporte neumático ha sido analizada [79], así como la circulación de partículas en un plano vibratorio con un tubo interior [80], concluyéndose que la dirección y velocidad de circulación de las partículas depende del diámetro del tubo interior, y que la velocidad de circulación también puede ser controlada por las condiciones de vibración.

El flujo de medios granulares también ha sido simulado [81], y el caso específico de flujos en sentido contrario a la gravedad también ha sido abordado [82, 83]. Otras investigaciones han tratado el tema de la carga electrostática durante el flujo de granos desde un cilindro [84], el flujo de partículas en la centrífuga de un dispositivo fertilizador [85]; y los flujos de aerosol de partículas adhesivas sólidas [86]. Estos últimos se encuentran en muchos problemas de contaminación.

A veces es necesario realizar predicciones y mediciones en la escala de colisiones, y en este sentido existen resultados [87]. También se reportan estudios acerca de la influencia de la forma en la fragmentación de mezclas de partículas [88] y respecto a la sinterización de mezclas de polvos para la producción de materiales compuestos [89]. La influencia de la forma de las partículas en procesos de aplastamiento también ha sido estudiada [90]. Los resultados obtenidos ayudan a comprender mejor el fenómeno de acomodamiento de estructuras, durante el proceso de prensado.

El caso del fenómeno de convexión y difusión de las partículas sometidas a vibración vertical ha sido analizado [91], en experimentos donde ha sido observada la formación de celdas de convexión y la influencia de la modificación de la geometría contenedora.

En [92] se propone una metodología para calibrar los parámetros del MED, de manera que se pueda obtener un estado cuasi-estático. Para lograr esto, se proponen dos criterios que permiten evaluar el equilibrio estático, estando uno basado en el balance de fuerzas y el otro en el balance de momentos.

Se han realizado simulaciones de compactación de polvos metálicos utilizando elementos deformables, modelándose la mezcla de polvos dúctiles y frágiles [93]. Las simulaciones de compactación de polvos metálicos con el MED han estado en general restringidas a densidades de alrededor de 0.8, debido a limitaciones de las leyes de contacto. Esto ha sido resuelto mediante un proceso de validación del MED con el MDEM (Meshed Distinct Element Method) [94, 95]. Otras formulaciones para modelar la compactación de polvos metálicos pueden ser consultadas [96], en las cuales se emplea el MEF para modelar la deformación de los granos.

El tema de la densificación de medios discontinuos ha sido abordado en otras investigaciones. Por ejemplo, para el caso de la biomasa, se ha empleado una modelación [97] para estudiar su comportamiento, debido a que no existen

modelos al respecto. Otro aporte en este tema es el estudio de la compactación de esferas de igual tamaño [98], en el cual se ha examinado la relación constitutiva entre la densidad y la presión, validándose los resultados empíricos con datos reales.

El flujo de medios húmedos ha sido modelado con el MED mediante la modificación del modelo de contacto para reflejar el grado de humedad. Se han realizado simulaciones de medios húmedos en canales inclinados [99] y a simulaciones de medios húmedos en canales con flujo de aire a presión [100].

Es factible modelar los materiales porosos con el MED, debido a su naturaleza discontinua y granular. En este sentido el MED se puede aplicar para modelar, por ejemplo, el concreto poroso [101] o la estructura de materiales compuestos del cual están hechos algunos electrodos [102]. También ha sido aplicado para estudiar la evolución de los poros en suelos [103].

La animación gráfica es uno de los campos de aplicación del MED. En este caso se puede emplear para modelar el flujo de medios granulares como arena, utilizando para ello conglomerados de esferas [104, 105].

Como regla general, en el MED las partículas nunca cambian de forma. Sin embargo, esto ha sido modificado en una aplicación [106] para modelar fenómenos de difusión que ocurren durante la disolución de polímeros en expansión. La robustez y exactitud del algoritmo fue comprobada al realizar una comparación una modelación diez veces más fina que la malla correspondiente al MED.

Como conclusión del desarrollo y empleo del MED a escala micro de la Mecánica Computacional se puede expresar que es una técnica muy potente para el estudio de problemas de mecánica computacional de sólidos y fluidos. A este nivel el método supera con creces los métodos convencionales y en este momento el mismo se encuentra en constante desarrollo por parte de los centros de élite mundial en la temática.

1.1.3.4- El MED en estudios a nivel nano

El MED no escapa a su utilización a escala nano, a través de modelaciones con nano partículas. En esencial la formulación no cambia, solo hay que formular nuevos tipos de modelos y leyes constitutivas y emplear nuevos tipos de partícula (en este caso nano partículas). Las simulaciones al nivel de la nanoescala son muy costosas computacionalmente, pero ya existen algunos intentos preliminares en este sentido, y se han modelado los granos de nanomateriales a partir de las celdas de un diagrama de Voronoi ponderado con respecto a los radios de las esferas, en un empaquetamiento de estas partículas [107], planteándose que los granos así obtenidos son similares a los observados en algunos nanomateriales.

Otras aplicaciones a la nanotecnología son la modelación de la cristalización de esferas lisas y duras bajo vibración mecánica, en las cuales se ha demostrado que para esferas iguales, el empaquetamiento ordenado se puede obtener escogiendo apropiadamente los parámetros de vibración [108]; o el estudio del comportamiento de diversas sustancias para conocer el comportamiento de sus fuerzas adhesivas en capas fluidizadas [109, 110].

La nanociencia y la nanotecnología son nuevas herramientas para la investigación, la innovación y el desarrollo a partir del control de la estructura fundamental y el comportamiento de la materia a nivel atómico. Se utiliza para generar nuevas propiedades y usos, tales como: la inclusión de nanopartículas para reforzar materiales, la mejora de propiedades de materiales diseñados para trabajar en condiciones extremas, y la investigación para detectar y neutralizar la presencia de microorganismos o compuestos químicos adversos. El empleo del MED va encaminando en este caso al estudio del comportamiento de las nanopartículas incorporadas a nanomateriales.

Los nanomateriales tienen características estructurales que hacen que al menos una de sus dimensiones esté en el intervalo de 1 a 100 nm (nanómetros). Esto significa que puede haber nanomateriales 1D, 2D y 3D. La tecnología que más se emplea para obtenerlos es conocida como “de abajo hacia arriba” (*bottom-up* en inglés), construyendo nanoentidades por combinación de elementos más pequeños (átomos y moléculas), guiando el autoensamblaje o bajo estrategias controladas.

El desarrollo del MED y su aplicación a escala nano está en fases muy preliminares de investigación y para su empleo a esta escala se tienen que desarrollar investigaciones que posibiliten obtener medios formados por sistemas de nanopartículas y a su vez reformular el MED para esta escala de modelación de la Mecánica Computacional.

1.1.3.5 - Combinación del MED con otros métodos

Aunque el MED permite resolver una gran cantidad de problemas por sí solo, también existen otros problemas en los cuales es conveniente combinarlo con otros métodos. Esto puede ocurrir, por ejemplo, para simular la interacción entre un medio granular y un medio continuo.

Una de las combinaciones más comunes es el MED-MEF, siendo quizás [8] el texto más completo al respecto. En él se describen los aspectos matemáticos y computacionales más relevantes en cuanto a la fusión de estos dos importantes métodos numéricos. El citado libro incluye un código (programa Y), al cual recientemente se le ha incorporado una interfaz gráfica [111].

Algunas aplicaciones del MED-MEF son a la geociencia [112-119], como parte del proyecto VGeST, así como [94, 120, 121]. También puede verse un ejemplo de aplicación del acople MED-MEF para modelar estructuras de tierra reforzadas con geosintético [18, 122]. Otras investigaciones se han reportado y existe una lista de ellas [123] en la cual se referencian varios artículos clave del MED-MEF.

Otra combinación común es MED-CFD (“Computer Fluid Dynamics”, por sus siglas en inglés). Se pueden ver, por ejemplo, aplicaciones al flujo multifase en centrífugas [124, 125], hornos de fundición [126], llenado de cavidades [127], o a la interacción entre flujos laminares y pequeños conglomerados de esferas durante la exploración de arena en la búsqueda de petróleo [128]. También puede aplicarse en modelos de transferencia de calor en capas fluidizadas con un sensor insertado [129], o en la modelación de las fases gas-sólido en quemadores de combustible [130].

Sobre el método SPH ("Smoothed Particle Hydrodynamics", por sus siglas en inglés) combinado con el MED ha sido encontrada poca bibliografía. Existen aplicaciones para modelar la separación de objetos en la industria, donde el MED se usa para modelar los objetos más grandes, y el SPH se emplea para representar el flujo de agua y de material fino [131].

A la combinación MED-CFD, también se le puede acoplar el DSMC (*Direct Simulation Monte Carlo*, por sus siglas en inglés). En este caso, es factible aplicar el MED para flujos dominados por los contactos, mientras que el DSMC es más apropiado para los flujos dominados por las colisiones [132]. En la investigación citada anteriormente se muestran ejemplos de estas formulaciones aplicadas a problemas de transporte neumático y de material fluidizado en rápida circulación, entre otros. Otra combinación de tres métodos es MED-CFD-MEF, aplicada al caso de ingeniería de protección contra el agua [133].

Por último, un caso de acople del MED con el método LES (*Large Eddy Simulation*, por sus siglas en inglés) puede ser consultado [134]. En este caso se empleó el MED para modelar sustancias en forma de capas fluidizadas, mientras que el LES se empleó para modelar la fase gaseosa. Este estudio permitió llegar a la conclusión de que el movimiento del fluido en forma de pulso de alta frecuencia conduce a la supresión del movimiento fluctuante de las partículas.

Sobre la combinación del MED con el Método de Lattice Boltzman ha sido encontrada relativamente poca bibliografía. Se reportan estudios sobre la modelación de interacciones fluido-partículas[135] y sobre el transporte de partículas en flujos no turbulentos [136].

De modo conclusivo se puede expresar que la combinación del MED con las técnicas convencionales aporta una nueva técnica muy potente para el estudio de problemas de Mecánica Computacional de sólidos y fluidos. Con esta combinación se pueden resolver problemas continuos y discretos aprovechando las potencialidades de cada técnica, realizando una adecuada descomposición del dominio. También ocurre lo mismo para problemas de multifísica y multiescala (modelaciones macro y micro delimitadas por subdominios). La combinación de ambos tipos de métodos (MED con métodos convencionales tales como el MEF) permite aprovechar las ventajas y potencialidades de cada uno y enfrentar problemas muy complejos en el mundo de la ingeniería.

1.2 - Estado del arte de algoritmos de empaquetamiento para el MED

1.2.1 - Enfoques generales:

En la mayoría de las simulaciones con el MED, es necesario que el empaquetamiento sea lo más compacto posible (modelación a nivel de la macroescala) o también que responda a la microestructura del material que se está modelando (modelación a nivel de la microescala). La gran variedad de técnicas de generación de empaquetamientos puede dividirse en dos grandes grupos: las técnicas dinámicas [137-140] y las técnicas constructivas [141-143]. A continuación, se describen brevemente algunas de ellas.

Técnicas dinámicas: en ellas se siguen los movimientos de las partículas a través de varios pasos de tiempo. Algunas de estas son:

- Compresión isotrópica [142]: consiste en comprimir la frontera para acercar las partículas.
- Expansión de partículas [144, 145]: consiste en dilatar las partículas hasta que cada una entre en contacto con alguna vecina. Esta técnica no presenta control de la distribución estadística de las geometrías de las partículas, ni de la fracción de volumen.
- Deposición gravitacional [137-140]: como su nombre lo indica, las partículas son movidas por una fuerza directamente proporcional a su masa, de dirección y sentido constantes, hasta que llegan a una posición de equilibrio. En el proceso de generación se propicia una anisotropía geométrica y mecánica del medio y no se dispone de control de la fracción de volumen.
- Método de subcompactación multicapa [28, 146]: es similar a la anterior, pero la compactación se realiza por capas y no de una sola vez.
- Técnicas de acomodamiento colectivo [147, 148]: las partículas se dilatan y mueven simultáneamente, respetando sus dimensiones relativas y empleando condiciones periódicas de frontera[149]. No presenta control de la fracción de volumen.

Técnicas constructivas: en ellas se prepara el empaquetamiento con puros cálculos geométricos. Algunas de ellas son:

- Disposiciones regulares [143]: no son recomendables por su anisotropía a pesar de tener muy poco costo computacional. Tienen como desventaja que preconditionan las líneas de falla de los materiales.
- Modelo de inhibición secuencial [142]: genera cada partícula en una posición aleatoria hasta que no se interseque con ninguna. Es un enfoque que posibilita conservar la distribución estadística de las dimensiones geométricas de las partículas en el proceso de generación. No se tiene control de la fracción de volumen y el número de coordinación (se define como la media de la cantidad de contactos por partícula) es cero, por lo cual no se logra contacto entre las partículas, siendo conveniente el uso de esta técnica más bien como punto de partida de las técnicas de generación dinámicas. Se vuelve cada vez más ineficiente a medida que aumenta la fracción de volumen.
- Técnicas de sedimentación (frente abierto) [142]: se colocan las partículas por capas hasta llenar la geometría. Es una técnica de generación muy eficiente y de poco costo computacional. En el proceso de generación se predetermina una anisotropía geométrica y mecánica del medio y no se dispone de control de la fracción de volumen. En algunos casos se logran empaquetamientos que presentan inestabilidades.
- Técnica del frente cerrado [142]: el sistema de partículas se extiende de adentro hacia afuera, y crece a partir de un frente de avance que se actualiza cada vez que se agrega una nueva partícula. Es una técnica

de generación muy eficiente y de poco costo computacional, la cual permite lograr altos números de coordinación (cerca de 4 en 2D). Con ella no se tiene control de la fracción de volumen, y en el proceso de generación se dejan muchos espacios vacíos cerca de las paredes, lo que hace aumentar la porosidad en esta zona.

- Algoritmo de empaquetamiento hacia el interior [107, 150]: es similar al anterior, pero el frente crece de afuera hacia adentro. Es una técnica de generación muy eficiente y de poco costo computacional, y con ella se logran altos números de coordinación (cerca de 4 en 2D), lo que equivale a una gran cantidad de contactos entre partículas. En zonas cercanas a las paredes se supera la deficiencia de la técnica anterior, aunque tampoco se tiene control de la fracción de volumen.

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 las constructivas son ligeramente inferiores. Las tendencias de desarrollo de estas técnicas actualmente en los centros de élite mundial en la temática, 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, para finalmente aplicarle al sistema de partículas resultante una técnica dinámica de mejoramiento [142, 143].

1.2.2 - Técnicas de empaquetamiento de partículas

El desarrollo de técnicas de empaquetamiento es un tema esencial en la aplicación del MED. Aunque existen diferentes formulaciones para diferentes tipos de partícula, la más trabajada es el caso de esferas, debido a su simplicidad.

Los casos en que se tengan esferas de radio no constante, o en que se tengan otras partículas, son más útiles en muchos problemas de ingeniería.

Para el caso de partículas circulares, en [142] se presenta un algoritmo eficiente y sencillo, el cual puede extenderse fácilmente a otras partículas planas. Dicho artículo comienza exponiendo una revisión de los principales métodos de generación reportados hasta el momento y fundamenta la necesidad de la existencia de estos métodos. La idea general del algoritmo que se propone en [142] consiste en actualizar dinámicamente un frente de discos que están rodeando por fuera a todos los demás. El mantenimiento de este frente hace posible que la cantidad de discos que tienen que ser tenidos en cuenta para agregar uno nuevo, sea muy pequeña.

El algoritmo permite obtener una densidad óptima localmente, y permite generar los empaquetamientos a una gran velocidad. Se menciona un ejemplo en el que se obtuvieron 10^6 discos en 3.77s en una PC con un procesador de 1GHz. Se plantea también que se pueden realizar aumentos posteriores de la fracción de área (se define como la razón entre el área ocupada por las partículas y el área de la geometría contenedora) mediante la compresión de la

frontera y la compactación gravitacional, sirviendo esta última también para eliminar posibles inestabilidades en la posición de algunos discos.

Unida a las desventajas anteriores (falta de control sobre la fracción de volumen, espacios vacíos cerca de las paredes y cierta anisotropía geométrica y mecánica) se puede expresar que la principal desventaja son las dificultades para hacer la extensión a 3D. La extensión 2D a otras partículas está expuesta en [141], para lo cual 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. Estas extensiones se han realizado para polígonos y elipses [141].

Para lograr empaquetamientos de elipses también puede ser útil lo formulado en [151]. Aquí se presenta un algoritmo constructivo de avance frontal mediante el cual cada nueva elipse que se agrega está en tangencia con otras dos, lográndose la tangencia de una manera casi exacta a través de la representación de cada elipse mediante cuatro arcos de circunferencia. Esta representación es extendida a 3D [152], 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).

Otro método bastante general aparece en [144]. Ahí se exponen técnicas para colocar objetos arbitrarios en el espacio cercanos entre sí empleando técnicas de avance frontal. Para obtener empaquetamientos densos se discuten dos procedimientos: colocación de objeto más cercano (durante la generación) y mover o agrandar (después de la generación). Esta alternativa presenta las desventajas ya mencionadas en el epígrafe anterior (la desventaja principal consiste en que se pierde el control de la distribución del tamaño de las partículas). Se muestran ejemplos de la formulación con partículas tales como elipses, colisiones de esferas o partículas aproximadas por estas últimas. Estas técnicas de generación posibilitan obtener mallas de puntos y sistemas de partículas indistintamente. Por lo demás, en los ejemplos presentados se aprecia una alta eficiencia desde el punto de vista computacional y una gran generalidad, ya que los procedimientos expuestos son aplicables a distintos métodos numéricos, como por ejemplo el MEF o el MED. En la misma investigación también se recomienda que cuando la detección de intersección entre dos cuerpos es muy complicada, esta se puede llevar a cabo mediante la aproximación de las partículas con esferas, reduciéndose el problema a la detección de la intersección entre esferas. Esta tendencia es muy aconsejable en los casos en que se desee trabajar con partículas de forma arbitraria o de geometrías complejas.

Otra investigación de gran generalidad en cuanto al tipo de partícula es [153], donde se presenta un código para generar empaquetamientos de varias formas de partícula, aunque los resultados solo se muestran para esferas. El diseño computacional de clases implementado permite agregar cualquier nuevo tipo de partícula para ser empaquetada, para lo cual basta solamente conocer un procedimiento para colocar una en contacto con otras dos (caso 2D) o con otras tres (caso 3D) y un procedimiento de detección de intersección. Este diseño computacional y su efectividad de presentar una arquitectura abierta en cuanto a tipo de partícula y técnicas de detección de contacto, es un aspecto

de mucho valor a tener en cuenta en el desarrollo de software para esta finalidad.

En algunas aplicaciones prácticas, se necesita obtener una densidad máxima (macro modelaciones), lo cual se puede lograr formulando matemáticamente el problema del empaquetamiento como uno de optimización. En [154] el problema del empaquetamiento de esferas en 3D que ocupen el mayor volumen posible, se plantea a través de un problema de optimización cuadrática no convexa con restricciones cuadráticas y función objetivo lineal, siendo algunas variables reales y otras binarias.

Se demuestra computacionalmente que el algoritmo propuesto puede obtener la optimización satisfactoriamente hasta un tamaño límite. Se tiene la desventaja del alto costo computacional (la cantidad de esferas en cada instancia no sobrepasa las 10), por lo cual este modelo matemático no es apropiado para grandes cantidades de partículas. Lo anterior hace que no se aplique esta formulación al caso de modelaciones micro, que es actualmente la tendencia de aplicación del MED.

Una formulación que también permite obtener empaquetamientos de densidad máxima con mucho menos costo computacional se expone en [155]. Su ventaja respecto a [154] consiste en que plantea un problema de optimización no convexa con restricciones cuadráticas y función objetivo lineal, en el cual todas las variables son reales, de ahí que se reporte haber resuelto instancias de hasta 30 discos en 2D. Esta formulación presenta las mismas desventajas que la anteriormente mencionada.

1.2.3 - Análisis global de los métodos de empaquetamiento

La tendencia de desarrollo de la ciencia es perfeccionar dinámica y progresivamente los resultados científicos. Las técnicas de empaquetamiento no han quedado ajenas al desarrollo cíclico y ascendente de este tópico de la Mecánica Computacional y los métodos numéricos en la ingeniería. En este sentido, el análisis crítico del estado del arte permite vislumbrar la necesidad de desarrollar métodos de empaquetamiento de partículas que presenten las siguientes flexibilidades:

- Empleo combinado de técnicas constructivas con las dinámicas para aprovechar las ventajas de ambas tecnologías de generación y empaquetamiento de sistemas de partículas.
- Posibilidad de controlar la distribución estadística que siguen las dimensiones de las partículas (para lo cual se pueden aplicar técnicas de Monte Carlo).
- Posibilidad de controlar la fracción de volumen.
- Posibilidad de controlar la isotropía, logrando indistintamente medios isotrópicos y anisotrópicos.
- Poseer una alta eficiencia y un bajo costo computacional.
- Poseer arquitectura abierta (tanto en la formulación como en la implementación computacional) en cuanto a: alternativas de frente de avance, tipo de partícula y técnicas de detección de contacto.
- Posibilidad de disponer de técnicas que posibiliten tener un control sobre el número de coordinación, y que a su vez permitan indistintamente obtener altos o bajos números de coordinación en las generaciones.

- Posibilidad de generar empaquetamientos para modelaciones micro y macro.

Los aspectos anteriormente mencionados justifican la necesidad de desarrollar un enfoque sistémico que posibilite disponer de una técnica de empaquetamiento con arquitectura abierta y con las potencialidades y flexibilidad anteriormente mencionadas.

1.3 - Técnicas de caracterización de los empaquetamientos

1.3.1 - Enfoque global de las técnicas de caracterización o evaluación de los empaquetamientos

Los conjuntos de partículas dan lugar a complicados patrones geométricos que usualmente requieren modelos matemáticos adecuados y apropiados análisis estadísticos. Existen en la literatura de modo aislado varias técnicas para caracterizar los empaquetamientos de los sistemas de partículas. Englobando las mismas en una clasificación general[1] se pueden agrupar en:

- Técnicas que dependen (directa o indirectamente) de las características geométricas de los tipos de partículas:
 - ✓ Fracción de volumen global
 - ✓ Porosidad global
 - ✓ Isotropía macro
 - ✓ Aleatoriedad de las áreas de las partículas en los planos cortantes
 - ✓ Covarianza
 - ✓ Distribución de contacto esférica
 - ✓ Coeficientes de caracterización del tamaño de las partículas
 - ✓ Distribución de contacto esférica
 - ✓ Función de covarianza
 - ✓ Coeficiente de autocorrelación
- Técnicas que no dependen de las características geométricas de las partículas:
 - ✓ Tensor de tejido
 - ✓ Número de coordinación
 - ✓ Homogeneidad de los centros de las partículas
 - ✓ Aleatoriedad de las líneas centro-centro entre partículas en contacto

1.3.2 - Técnicas de caracterización o evaluación de empaquetamientos

Las técnicas de simulación numérica como el MED, están estrechamente vinculadas con técnicas de caracterización y evaluación de la calidad de los empaquetamientos, debido a que garantizan parte del éxito y la fiabilidad de los resultados. En muchos trabajos científicos se han desarrollado o aplicado

individualmente técnicas de caracterización, lo cual apunta a la necesidad de enfocar el problema de modo sistémico e integrador.

A veces es conveniente poder cuantificar la aleatoriedad de un sistema de cuerpos. Por ejemplo, si se desea simular un material isótropo, es conveniente que el empaquetamiento a partir del cual comienza la simulación con el MED sea lo más regular y homogéneo posible. En [156] se presentan nuevas técnicas para evaluar la aleatoriedad de empaquetamientos de partículas (esferas) obtenidos mediante simulaciones computacionales. La homogeneidad del empaquetamiento se estudia mediante la hipótesis de que las partículas están uniformemente distribuidas dentro de la geometría a llenar, y la isotropía es evaluada tanto local (a través de las proyecciones de los segmentos que unen los centros de esferas en contacto) como globalmente (con la varianza de las densidades de área formadas por planos cortantes perpendiculares a diferentes direcciones). Este enfoque está aplicado solamente al caso de partículas esféricas y no con carácter sistémico.

1.3.3 - Análisis global de las técnicas de caracterización o evaluación de los empaquetamientos

Las técnicas de caracterización de los sistemas de partículas son una medida de la calidad de los empaquetamientos virtuales y a su vez son responsables en parte de la calidad de los resultados que se logren con la aplicación del método de partículas. Como el MED tiene dos tendencias (macromodelación y micromodelación) de aplicación, las técnicas de caracterización y evaluación de la calidad de los empaquetamientos tienen dos objetivos diferentes. Cuando el MED se emplea como herramienta de simulación numérica a escala macro de la Mecánica Computacional, en algunos casos se desprecian las dimensiones reales de las partículas que constituyen el medio y el objetivo esencial a caracterizar y evaluar es lograr medios lo más homogéneos y compactos posible. En otros casos, como puede ser el transporte de materiales sueltos, simulación de silos, etc., a pesar de estar modelando el problema a escala macro sí se observa una correspondencia entre el empaquetamiento y el medio discreto real. En el caso de emplear el MED en la modelación de problemas a escala del micromundo, debe existir una correspondencia entre el medio real y el empaquetamiento virtual de partículas. En estas situaciones las técnicas de caracterización y evaluación de la calidad de los empaquetamientos virtuales tratan de evaluar la similitud entre el medio físico real y el empaquetamiento virtual tomando en consideración variables como: isotropía, fracción de volumen, homogeneidad y aleatoriedad.

Después de un análisis crítico de las diferentes técnicas de caracterización o evaluación de los sistemas de partículas, se ha visto la necesidad de superar las desventajas individuales señaladas en cada caso, vislumbrándose la alternativa del empleo sistémico e integrador de las técnicas de caracterización o evaluación de los sistemas de partículas.

Además de abordar el tema de caracterización de los empaquetamientos, en función de la finalidad de la simulación que se desea realizar y de la escala de la Mecánica Computacional donde que se esté trabajando, se llega a la conclusión de que es necesario formular nuevas técnicas y mejorar algunas de las existentes. En este sentido existe la necesidad de reformular las pruebas de

uniformidad de los ángulos de inclinación de las líneas centro-centro y aleatoriedad de los centros de las partículas. Del mismo modo se pueden formular nuevas técnicas

1.4- Estado del arte de la solución del problema de la partícula en contacto.

1.4.1 - Tipos de partícula

En cuanto al tipo de partícula, las formulaciones más comunes, tanto en algoritmos de empaquetamiento como en el MED como tal, corresponden a las esferas o círculos [19, 28, 39, 48, 50, 56, 57, 60, 62, 63, 70, 78, 81, 85, 86, 90, 91, 141, 142, 145, 154, 157-169]. Esta abundancia se debe a la simplicidad de la forma geométrica, aunque a veces es necesario recurrir a otras geometrías más complejas para poder reproducir exitosamente los complejos problemas físicos que se enfrentan con este método numérico. Es por eso que en la práctica de aplicación del MED también se emplean elipses o elipsoides [7, 94, 140, 141, 152, 170-172], polígonos o poliedros [7, 141, 173-177], supercuádricas [7, 173, 178], esferosímplices (Son formas geométricas que se definen como el conjunto de todos los puntos equidistantes de un conjunto denominado “primitiva”. Por ejemplo, cuando la primitiva es un punto, se obtiene una esfera, y cuando es un segmento, se obtiene un cilindro acotado con semiesferas en sus extremos) [166, 179-182], conglomerados de círculos o esferas [6, 23, 43, 81, 117, 119, 128], y polielipsoides (son sólidos formados por la unión de octantes de elipsoides) [183]. Debido a que existen varias formulaciones del MED en función del tipo de partícula, es necesario unificarlas en una formulación general.

Los conglomerados de esferas son útiles para representar granos totalmente irregulares, mediante un procedimiento denominado *Conglomerado Solapado como Elemento Discreto* (ODEC, por sus siglas en inglés) [184]. Este procedimiento parte de una imagen 3D de un grano, al cual se le realiza un proceso de esqueletonización, para luego sobre el esqueleto hallado colocar centros de esferas hasta cubrir un porcentaje aceptable del volumen del grano. Existen sobre este tema enfoques similares, pero con la ventaja de que las propiedades de inercia de la partícula virtual son iguales a las de la partícula real [185]. Un enfoque alternativo puede emplearse en el caso de que se disponga de una malla de superficie de los granos, para también obtener una aproximación con esferas [186]. Esta formulación ha sido empleada y hay evidencia de que esta forma de representación no implica necesariamente una simulación fiable, a menos que las partículas que interactúan tengan una distribución irregular de su masa.

En otros trabajos científicos [187] se deducen las fórmulas para el movimiento rotacional de partículas genéricas y se comprueban las formulaciones con la aplicación de un campo gravitatorio a un conjunto de esferocilindros.

1.4.2 - Estabilidad del Método

La estabilidad en el MED es un tema de gran importancia, y el hallar un paso de tiempo óptimo es un problema bastante complejo que no puede ser obviado. Si el paso de tiempo es demasiado corto, los resultados serán más confiables,

pero el costo computacional puede ser impagable. En cambio, si es demasiado grande, se puede afectar la confiabilidad de los resultados. En [188] se trata el tema de la estabilidad del MED, con relación al paso de tiempo que se toma para realizar la integración explícita. Se propone una expresión conveniente para estimar un paso de tiempo fijo durante toda la simulación.

1.4.3 - Técnicas auxiliares

En la mayoría de las simulaciones del MED, las partículas están definidas por parámetros aleatorios, por lo que es fundamental poder generar valores de variables aleatorias que sigan una distribución estadística cualquiera. Para lograr este objetivo se deben aplicar técnicas de Monte Carlo [189, 190].

En la fase de obtención del empaquetamiento, es necesario poder conocer cuándo una partícula está dentro o fuera de la geometría contenedora. Este problema, conocido como Problema de Localización de Puntos, está resuelto en 2D [191] y también en 3D [192], aunque de una manera menos eficiente.

Otro elemento clave del MED es la paralelización, debido a su alto costo computacional. En este sentido se han hecho significativos avances [193-201], pero no son resultados muy generalizados.

1.4.4 - Detección de contactos

La detección de contactos o intersecciones entre las partículas es la parte que más tiempo consume, tanto en la fase de generación como en la simulación en el MED. No es extraño, pues, que se haya tratado de optimizar dicha detección lo más posible.

La búsqueda de contactos puede llegar a consumir hasta el 80% del tiempo de una simulación, de ahí la importancia que se le ha otorgado a este aspecto. En algunas investigaciones [155] se propone un método basado en triangulaciones para detectar los contactos entre partículas en simulaciones con esferas, con una complejidad lineal y un bajo costo de mantenimiento o actualización de la estructura de datos.

Por lo general, la búsqueda de contactos o intersecciones se divide en dos fases: la primera, llamada búsqueda de vecinos o búsqueda global, en la cual se detectan los pares de partículas cuya intersección es posible; y una segunda fase de refinamiento, en la cual, de los pares mencionados, se seleccionan las partículas que realmente están en contacto o se intersecan.

1.4.4.1 - Búsqueda de vecinos (búsqueda global)

Un método eficiente para la búsqueda de vecinos es el algoritmo de Búsqueda no Binaria [202] (NBS, por sus siglas en inglés), basado en la división del espacio en celdas. Este algoritmo tiene tiempo de consulta constante y un aprovechamiento de la memoria mediante listas enlazadas que evita tener que utilizar las celdas vacías. Su única limitación consiste en que solo es eficiente para cuerpos de tamaño similar.

Un algoritmo que no es sensible a grandes diferencias entre los tamaños de las partículas es el DESS (Double-Ended Spatial Sorting) [2], aunque para una cantidad suficientemente grande de partículas, siempre será inferior a la Búsqueda no Binaria [202]. Sin embargo, el algoritmo C-Grid es una

generalización del NBS y permite utilizar partículas de tamaños significativamente diferentes sin perder mucho en eficiencia [27, 28].

Otros métodos de búsqueda global pueden ser vistos en [7], donde se incluyen procedimientos basados en lo que definen como zona de contacto, métodos basados en árboles binarios y en la división del espacio en celdas, entre otros.

El mantenimiento de la estructura de búsqueda de vecindad en las simulaciones es un proceso costoso. En [155] se formula, para el caso de esferas, un método basado en triangulaciones de Delaunay, que tiene la ventaja de que la estructura de datos solo se tiene que actualizar cada cierta cantidad de pasos de tiempo, y además de manera local. Una continuación de esta investigación es [180], la cual es una extensión al caso de partículas formadas por la suma de Minkowski de una esfera con una unión finita de símlices en $\mathbb{R}^3$.

Desde un punto de vista más general y computacional, también existen resultados en la búsqueda de vecinos, tales como [192, 203].

1.4.4.2 - Detección de intersecciones (búsqueda local) y descripción geométrica del contacto

Una vez que ha sido realizada la búsqueda global, se procede a hacer un refinamiento mediante una búsqueda local, tal como fue mencionado anteriormente. Adicionalmente, en la mayoría de los casos es necesario describir geoméricamente el contacto cuando existe, lo cual puede ser realizado usando un vector o un plano normal a la zona de contacto.

El uso de volúmenes acotadores es una etapa intermedia entre la búsqueda global y la local. Consiste en inscribir los elementos discretos dentro de formas cuyo chequeo de intersección es fácil y rápido, tales como esferas o cubos. Este tema se trata detalladamente en [204].

Un método eficiente para detectar la intersección entre polígonos se propone en [178], donde además se aplica dicha formulación al caso de ciertas supercuádricas convexas.

El caso de poliedros convexos ha sido tratado en [177], donde se propone el V-Clip, un algoritmo que supera a algunos de los más conocidos existentes hasta el momento de su aparición (específicamente Lin-Canny y Gilbert-Johnson-Keerthi mejorado).

Posteriormente fue publicada la investigación [205], dedicada al método de *penetración de aristas*. Este método de detección de intersección entre poliedros, a diferencia del V-Clip, es robusto, requiere poca cantidad de cálculos, y es fácil de programar. Sin embargo, no parece existir ninguna comparación entre ambos algoritmos.

Otras dos variantes de detección de intersección entre poliedros convexos han sido reportadas [173]. Una de ellas está basada en la detección de contactos vértice-cara y arista-arista, junto con optimizaciones incluidas en el método de Barbosa [206]. La otra consiste en el cálculo iterativo de un plano común que biseca el espacio entre los dos poliedros. Este método fue propuesto por Cundall [176] y tiene la ventaja adicional de que permite determinar fácilmente la normal del contacto.

En [207, 208] se aumenta la eficiencia del método de Cundall mediante la reducción del espacio de búsqueda, pero se mantiene el inconveniente de requerir un proceso iterativo. Las desventajas que implica dicho proceso son superadas en [174], al proponer un procedimiento no iterativo para calcular un plano común que maximiza la separación entre dos poliedros. Su superioridad ha sido demostrada mediante ejemplos numéricos.

La detección de intersección de elipses ha sido formulada en [7, 140] usando su ecuación cartesiana. Enfoques alternativos para elipses y elipsoides son [151] y [152] respectivamente, los cuales han empleado arcos de circunferencia para representar estas curvas o superficies.

El caso de elipsoides se formula en [7, 170] mediante métodos numéricos. Sin embargo, existe una condición algebraica que conduce a algoritmos simples, eficientes y exactos para resolver el mismo problema [172].

1.4.5 - Descripción física del contacto. Modelo constitutivo

El cálculo de las fuerzas y momentos resultantes de los contactos entre pares de partículas esféricas ha sido formulado en varias investigaciones [155, 209, 210]. Estas formulaciones pueden ser extendidas al caso de conglomerados de esferas, en los cuales las fuerzas y momentos resultantes se calculan a partir de las fuerzas y momentos originados en contactos entre esferas componentes de los conglomerados.

En el caso particular de conglomerados simétricos respecto a un eje, las expresiones a calcular se simplifican y pueden ser consultadas en [211], mientras que el caso general puede ser consultado en [6, 23].

Sin embargo, el método que aparece en las tres publicaciones citadas anteriormente para el cálculo de la fuerza resultante sobre la partícula pudiera no ser exacto, ya que en [212] se plantea que cuando el contacto en un conglomerado se produce en más de una de sus esferas componentes, un modelo modificado de fuerza debe ser usado para contrarrestar de manera exacta la desviación de esta; y se propone un modelo que satisface las condiciones requeridas.

Un método de cálculo de la fuerza resultante del contacto entre dos polígonos se propone en [178], y está basado en el uso del área de intersección para calcular el módulo de la fuerza, mientras que la dirección que se toma es la que produce una disminución más rápida en el área de la intersección. Este procedimiento ha sido extendido a supercuádricas mediante una representación eficiente de estas a través de polígonos. A pesar de la eficiencia en 2D, la extensión a 3D sería muy ineficiente debido al costo computacional asociado a construir la intersección entre dos poliedros.

Algunos métodos para calcular las fuerzas de contacto entre poliedros aparecen en [213, 214], y el caso de esferosímplices se trata de una manera bastante completa en [180].

1.4.6 - Herramientas auxiliares para el empaquetamiento de sistemas de partículas. Construcción de la partícula en contacto.

En los algoritmos de empaquetamiento constructivos de avance frontal, es conveniente que cada elemento discreto que se agrega al empaquetamiento esté en contacto con otros dos (en el caso 2D), porque de esta manera se logra una densidad local máxima [142], en caso que se desee (por ejemplo, en modelaciones macro). Por la misma razón, en 3D es conveniente que el contacto sea con otros tres elementos.

Algunos resultados en el problema de la construcción de un elemento en contacto con otros dos aparecen en [141] para polígonos, y elipses, en [215] para conglomerados; y en [216, 217] para supercuádricas.

Las formulaciones para tres dimensiones no son abundantes. En el caso de esferas existe [218]. Para cuerpos más complejos como conglomerados y poliedros, se cuenta con [215, 219]. Sin embargo, estos resultados todavía no tienen la eficiencia o el grado de terminación requeridos; y lo mismo ocurre para el caso de supercuádricas [217].

1.4.7 – Representación, forma y características de las partículas

Cada tipo de partícula tiene ventajas o desventajas para la aplicación que se realice del MED. Las partículas más simples son los discos circulares, los cuales tienen una gran aplicación, aunque con limitaciones. Se sabe que cuando un disco se libera desde un plano inclinado, siempre rodará, mientras que por ejemplo, un conglomerado de esferas, dependiendo de su forma, coeficiente de rozamiento y ángulo de la pendiente, puede deslizarse, rodar o mantenerse inmóvil [7].

También de acuerdo con [7], la forma de la partícula tiene el mayor efecto en el comportamiento mecánico, y visto que las formas basadas en discos presentan serias deficiencias para modelar materiales granulares reales, se ha hecho popular el uso de la elipse.

Por otra parte, el modelo de elementos discretos de Cundall y sus variantes ha mostrado resultados exitosos en aplicaciones de mecánica de suelos y rocas, empleando elementos poligonales o poliédricos.

Existe otra forma general de representación de partículas denominada *función de representación discreta* [173], aunque en la literatura consultada no se han encontrado muchas aplicaciones de dicha función.

Una forma de partícula bastante general es la que se obtiene a partir de un proceso de dilatación, ubicando una esfera en cada punto de una forma básica, la cual frecuentemente es un segmento o un triángulo. Aunque en [181] se plantea que en algunos casos el cálculo de la normal de contacto puede ser inestable, el propio autor ha obtenido buenos resultados en la práctica. También se ha aplicado con éxito por Pournin [180].

Una vía de obtener gran variedad de formas a partir de otras más sencillas puede ser vista en [179], donde a partir de una primitiva toroidal y casquetes esféricos se obtiene una gran cantidad de formas geométricas incluyendo la elipse, con rápidos tiempos de consulta de contacto.

En el caso específico de las elipses en 2D o 3D, estas también pueden representarse mediante conglomerados [144], mediante arcos de circunferencia [151, 152] o mediante una ecuación cuadrática. Análogamente, en [220] se ha utilizado una representación de tres casquetes esféricos para modelar partículas en forma de tableta. Estas formulaciones tienen menor complejidad matemática y computacional que abordar geometrías elípticas e irregulares.

En cuanto a la descripción de la forma de las partículas, existen expresiones útiles para cuantificarlas, tales como la esfericidad, planiformidad, alargamiento y angulosidad [221]. Con respecto a un conjunto de elementos discretos, también existen cuantificadores de sus tamaños, como por ejemplo los coeficientes de uniformidad y de curvatura [222].

1.4.8 - Códigos de empaquetamiento de partículas

En el ámbito científico existen muchos códigos que tienen implementado el MED, algunos de los cuales son productos comerciales de gran calidad. Los enfoques y aplicaciones son diversos: van desde problemas de transporte de materiales, minería, mecánica de suelos, ingeniería mecánica, civil u otra ingeniería afín, hasta problemas de la industria farmacéutica y de micro y nanomodelación. A pesar de esta diversidad es justo destacar que el MED y los códigos existentes son tecnologías que están en constante investigación, debido al estado actual en que se encuentran.

MacroPac [223] es un software que simula el proceso de empaquetamiento mediante caída vertical, sacudimiento y vibración, cuyas partículas son conglomerados de esferas. Recientemente ha sido empleado en algunas investigaciones [224, 225].

El algoritmo *Pack any shape* presenta una implementación [226] que permite obtener conjuntos de partículas planas de casi cualquier forma, empleando para ello el método de Lubachevski [227], cuya idea general ha sido explicada en la sección 1.1.2 de este capítulo.

La investigación [153] es un código para la generación de empaquetamientos de esferas, que permite programar cualquier nuevo tipo de partícula, con varias variantes algorítmicas que permiten obtener diferentes configuraciones geométricas con distintas velocidades.

Una extensión del código anterior es [219], la cual permite generar principalmente polígonos y conglomerados de círculos o esferas, siendo la velocidad de generación de conglomerados en 3D muy baja.

Los empaquetamientos de partículas también se pueden obtener a través de un reacomodamiento colectivo aplicándole un campo gravitatorio a un conjunto de partículas, empleando para ello cualquier código de simulación, sin embargo, esto tiene la desventaja del alto costo computacional y de que los empaquetamientos obtenidos no serán isótropos.

En el caso específico de DigiPack [228, 229], la forma de representar las partículas mediante píxeles lo hace intrínsecamente lento, comparado con otros métodos de generación que emplean otras formas de representación.

El código DEMPack [145, 230], para empaquetar partículas esféricas, está basado en una formulación de reacomodamiento colectivo de esferas cuyas posiciones iniciales se obtienen a partir de una malla de tetraedros. Para lograr las posiciones finales se emplea la técnica de expansión de las partículas, con lo cual se aumenta la compactación y conectividad del medio, pero a costa de perder el control sobre la distribución de los radios de las esferas.

Los códigos de generación y empaquetamiento de partículas en su gran mayoría son productos no comercializables que forman parte de trabajos y proyectos de algunos investigadores[145, 153, 219, 226, 230]. No se ha encontrado un código de arquitectura abierta en cuanto a técnicas de empaquetamiento, tipo de partícula, técnicas de búsqueda de vecinos, empleo de técnicas de Monte Carlo y técnicas de caracterización de los empaquetamientos.

En [1] se formula un algoritmo de avance frontal para el empaquetamiento de partículas, el cual como paso alternativo se combina con técnicas de reacomodamiento colectivo o dinámicas. Aunque existen varias formulaciones similares de avance frontal [141, 142, 150, 231], la que aquí se presenta supera a sus predecesoras en varios aspectos. Esta formulación incorpora algunas mejoras en cuanto a formulación, diseño computacional y caracterización o evaluación de la calidad de los empaquetamientos; y también en cuanto a que permite disponer de un enfoque sistémico e integrador para obtener empaquetamientos de partículas, el cual que posibilita describir geométricamente la esencia del micromundo de diversos materiales. Los algoritmos presentados en [1] son una extensión o mejora de otro ya existente [141], el cual tiene algunos resultados para círculos, elipses y polígonos.

1.5 Conclusiones del capítulo

Después de haber realizado un análisis crítico de la temática de desarrollo y aplicación del MED, se ha llegado a una serie de conclusiones parciales que ilustran la necesidad y validez científica de la investigación que se pretende realizar. Estas conclusiones demuestran, de forma directa, las deficiencias de los temas tratados e indican un camino que permite mejorar las limitaciones e inconvenientes existentes, logrando, de este modo, realizar una contribución al campo de la simulación y modelación con el empleo de las técnicas numéricas del MED.

Sobre las técnicas de generación y empaquetamiento de sistemas de partículas y sus técnicas de caracterización y evaluación de los empaquetamientos se puede concluir lo siguiente:

En cuanto a técnicas de empaquetamiento:

- Las técnicas dinámicas presentan un alto costo computacional cuando se comparan con las constructivas, mientras que con respecto a la fracción de volumen las constructivas son ligeramente superiores. La alternativa de combinar ambas variantes, aplicando primeramente técnicas constructivas teniendo control estadístico de la geometría de las partículas y a la vez de la fracción de volumen, y aplicando finalmente una técnica de mejoramiento dinámico, es lo más eficiente.

- El desarrollo y avance de las técnicas de empaquetamiento va encaminado al empleo combinado de técnicas constructivas y dinámicas para aprovechar las ventajas de ambas estrategias.
- En cuanto a la implementación computacional, no existe un diseño abierto en cuanto a todos los siguientes aspectos: método de llenado, tipo de partícula, geometría contenedora, método de búsqueda de vecinos, método de construcción de la partícula en contacto, y postprocesamiento.

En cuanto a técnicas de caracterización y evaluación de empaquetamientos:

- Las técnicas de caracterización de los empaquetamientos, que dependen de la forma de las partículas, están formuladas para el caso más simple, es decir, para esferas, y existe la necesidad de generalizar este aspecto para propiciar simulaciones más realistas con el MED. El empleo del MED con otros tipos de partícula (no esféricas), las cuales se existen en los problemas físicos reales, justifican la necesidad de hacer desarrollos teóricos en esta dirección, lo cual no está reportado en la literatura.

En cuanto a las técnicas de empaquetamiento y de caracterización de sistemas de partículas, se puede identificar la necesidad de:

- Estudiar la versatilidad de los métodos de empaquetamiento y su eficiencia computacional, teniendo en cuenta las diferentes variantes que pueden tener los algoritmos.
- Realizar aplicaciones de las técnicas de empaquetamiento al campo de la ingeniería, para ilustrar la efectividad de estas formulaciones en el desarrollo de simulaciones y modelaciones a nivel del micromundo.

Los aspectos anteriormente expresados no se han reportado en la literatura o no se han abordado sistemáticamente a pesar de que es una necesidad imperiosa para enfrentar problemas complejos de ingeniería con el uso del MED.

En cuanto a las formulaciones del MED se puede concluir lo siguiente:

- En un estudio global de las diferentes formulaciones del MED se observa que no se han hecho estudios serios en cuanto al empleo o selección del esquema de integración en función del tipo de fenómenos físicos que se estén simulando (estáticos, cuasiestáticos o dinámicos). De igual modo, no se han efectuado estudios científicamente fundamentados en cuanto al paso de integración ni en cuanto a la estabilidad del método de integración.
- Con respecto a los métodos de consulta espacial (métodos de búsqueda de vecindad y contacto), en la literatura consultada existe una amplia gama de formulaciones, pero solo estudios muy puntuales de comparación entre estos métodos en cuanto a su efectividad y costo computacional. Paralelamente es necesario hacer investigaciones que demuestren la efectividad del empleo de una u otra técnica tomando en consideración: 1) las peculiaridades y naturaleza (estática, cuasi-estática o dinámica) de los fenómenos físicos que se estén modelando; 2) el tipo de partícula y 3) la razón entre el tamaño mínimo y máximo de las partículas que contiene la simulación.

- En cuanto a la modelación constitutiva, se constata la existencia de una amplia gama de modelos constitutivos de contacto. En este sentido, la mayor dificultad de aplicación del MED es conocer qué parámetros constitutivos a nivel de contacto le corresponde a cada material en particular, siendo este aspecto uno de los impedimentos principales en la aplicación de este método numérico.
- Un análisis global de todos los aspectos que integran la formulación del MED, muestra que es un método que está en una fase inicial de investigación y que queda un campo muy amplio de estudio para su uso como una técnica confiable de resolución de problemas reales en el mundo de la ingeniería. Una de las causas es la necesidad de poder seleccionar, sobre bases científicamente fundamentadas, las técnicas o parámetros que constituyen el método como tal, entre otros aspectos ya mencionados.
- El MED empleado en la resolución de problemas de ingeniería a escala micro de la Mecánica Computacional es una técnica muy potente para el estudio de problemas de Mecánica Computacional de sólidos y fluidos. A este nivel el MED supera con creces los métodos convencionales y en este momento se encuentra en constante desarrollo por parte de los centros de élite mundial en la temática.

En la temática de formulación física del MED se puede comentar la necesidad de realizar aplicaciones del MED al campo de la ingeniería para ilustrar la efectividad de la formulación, sus potencialidades y aplicabilidad ingenieril.

En cuanto a la solución del problema de la partícula en contacto, aquí es importante destacar que, hasta donde sabemos, nadie ha trabajado en mejorar la eficiencia de obtención de la solución, para el caso de conglomerados de círculos o esferas.

Capítulo 2. Fundamentos teóricos

2.1 - Formulación de un algoritmo de empaquetamiento de avance frontal

En el caso de la formulación del algoritmo de generación el problema principal consiste en obtener de una manera eficiente conjuntos de partículas con la mayor fracción de volumen (FV) posible o disponiendo un control de esta variable en el proceso de generación. Para lograr esto, es de especial importancia poder trasladar (sin rotar) una partícula de modo que esté en contacto con otras dos, en el caso 2D, o con otras tres, en el caso 3D, debido a que así se puede obtener una densidad local óptima [142]. Establecer este enfoque de empaquetamiento implica estar desarrollando técnicas de avance frontal, las cuales se combinarán con las técnicas dinámicas para disponer de mayor eficiencia y flexibilidad.

Otra ventaja de poder generar con una alta FV es que, mediante la eliminación de partículas, se puede obtener cualquier FV deseada que sea inferior a la inicialmente obtenida. Si se desea simular a nivel micro, es muy deseable que el conjunto inicial con el que comienza la simulación en el MED tenga la misma FV que el conjunto físico que se está reproduciendo en la computadora.

En [1] se proponen dos algoritmos de empaquetamiento de avance frontal basados en [141], los cuales tienen el mismo basamento y se diferencian solo en algunos aspectos puntuales.

Algoritmo 1: empaquetamiento de avance frontal en 3D

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.
- Selección de la forma de construir las partículas $e_i, i = \overline{1, n}$.

Paso 2)

Mientras $C_{ext} \neq \phi$

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,

$$- C_{ext} := C_{ext} \cup \{e_{new}\}; E := E \cup \{e_{new}\}$$

En caso contrario

$$- C_{ext} := C_{ext} - \{e_{piv}\}.$$

Aspectos esenciales del paso:

- Generación de los números aleatorios que definen 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 de reacomodamiento al sistema de partículas (Este paso se realiza para eliminar inestabilidades físicas, aumentar la FV, etc.).

Paso 4)(Opcional) Eliminación de partículas para disminuir la FV o el número de coordinación (se define como la cantidad media de contactos por partícula) a valores deseados.

Paso 5) (Opcional) Aplicación de técnicas de caracterización o evaluación del empaquetamiento obtenido.

Paso 6) (Opcional) Generación de una estructura de celdas de Laguerre a partir del empaquetamiento.

Salida: E

Asumiendo que (i) el tamaño de todas las partículas esté acotado inferiormente, y (ii) que la geometría contenedora G esté acotada, se puede demostrar que la ejecución del algoritmo anterior siempre finaliza en un número finito de pasos. En efecto, las dos condiciones anteriores implican que dentro de G solo se puede colocar un número finito de partículas, debido a que el paso 2.3 no permite que haya dos partículas que se solapen. Cuando se llegue al número máximo de partículas que pueden estar contenidas dentro de G , la instrucción $C_{ext} := C_{ext} - \{e_{piv}\}$ del paso 2.3 eliminará partículas de C_{ext} hasta que $C_{ext} = \phi$, lo cual provoca la terminación del paso 2. Los pasos 3 al 6 también terminan en un número finito de pasos. Por lo tanto, bajo la hipótesis de que se cumple (i) y (ii), se puede asegurar que el algoritmo 1 se ejecuta en un número finito de pasos. En cuanto a la complejidad algorítmica, se ha llegado a la conclusión de que es un $O(N)$, basándose en que el tiempo necesario para colocar cada nueva partícula es el mismo, independientemente de la cantidad que se haya colocado previamente.

El *algoritmo 2* es una variante del *algoritmo 1*, la cual en muchos casos es más rápida a costa de perder un poco de FV. Consiste en considerar cada partícula e una sola vez como pivote (representada por e_{piv} en C_{ext}), rodearla completamente y luego eliminarla definitivamente de la lista C_{ext} . Cada vez que

se coloca una nueva partícula e_{new} en contacto con e_{piv} , se agrega e_{new} al final de la lista vec (*variante de selección de vecinas a lo ancho* (VSVA)), o al principio (*variante de selección de vecinas a lo profundo* (VSVP)). Además, en la lista C_{ext} , el elemento e_{piv} se puede seleccionar tomando el primer elemento (*variante de selección del pivote a lo ancho* (VSPA)), el último (*variante de selección del pivote a lo profundo* (VSPP)), o de forma aleatoria (*variante de selección del pivote aleatorio* (VSPAI)). Las ideas anteriores se pueden resumir en el siguiente pseudocódigo, el cual excluye los pasos diferentes al 2 por ser idénticos a los del *algoritmo1*.

Algoritmo 2: empaquetamiento de avance frontal en 3D

...

Paso 2)

Mientras $C_{ext} \neq \phi$

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)

Mientras *True*

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,

- $C_{ext} := C_{ext} \cup \{e_{new}\}$, $E := E \cup \{e_{new}\}$

- $vec := vec \cup \{e_{new}\}$

- Generar los parámetros aleatorios de la nueva partícula que será agregada al conjunto.

En caso contrario

- $C_{ext} := C_{ext} - \{e_{piv}\}$

- Ir al paso 2.2

...

En este paso 2 modificado, cada partícula es pivote exactamente una sola vez. En ese momento es rodeada completamente por los nuevos elementos que se le agregan al empaquetamiento (aprovechando para cada nuevo elemento la lista de vecinos que se halló inicialmente), y después es eliminada de la lista de pivotes (capa exterior). Esta variante tiene la ventaja de que disminuye la cantidad de búsquedas de vecinos de la partícula pivote, con lo cual se reduce el tiempo de ejecución. Presenta el inconveniente de perder generalidad en

cuanto a posibles contactos entre partículas, con lo cual disminuye la FV y el número de coordinación.

2.2 - Descripción del problema de la partícula en contacto.

Sean $p_1, \dots, p_n$, n partículas fijas de $\mathbb{R}^n$ ($n \in \{2,3\}$), y sea p_{mov} otra que se desea centrar en un punto $x \in \mathbb{R}^n$, sin realizarle rotaciones, de manera que $p_{mov}[x]$ esté en contacto exterior con las p_i simultáneamente, $i = \overline{1, n}$, sin intersectarse con ninguna.

En todas las instancias del problema anterior en las que $p_1, \dots, p_n$, y p_{mov} son partículas convexas, se ha comprobado que en el caso general el problema tiene dos soluciones, (Figura 1, caso de $\mathbb{R}^2$), en el caso degenerado tiene una solución (Figura 2, caso de $\mathbb{R}^2$), y en el caso de no solución no tiene ninguna (Figura 3, caso de $\mathbb{R}^2$).

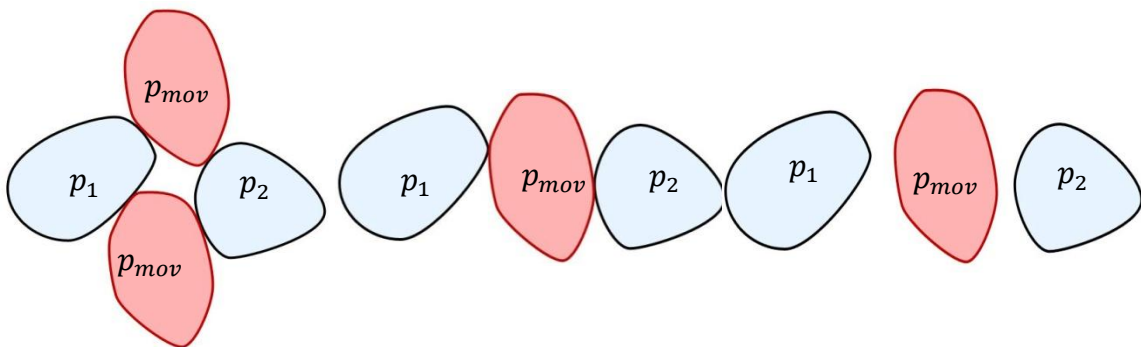


Figura 1. Caso general.

Figura 2. Caso degenerado.

Figura 3. Caso de no solución.

Figura 3. Caso de no solución.

Se han formulado un grupo de técnicas (Diagrama) para lograr la construcción de la partícula en contacto $p_{mov}[x]$ mencionada anteriormente. Los métodos desarrollados se han subdividido en dos grupos: 1) Construcción con representación exacta de la partícula y 2) Construcción con representación aproximada de la partícula.

En ambos casos la solución se puede hallar por técnicas exactas y por técnicas aproximadas, independientemente de la clasificación anterior. Se considera que una partícula está representada de forma aproximada cuando se pierde información respecto a su representación original, y se considera que está representada de forma exacta cuando esto no ocurre.

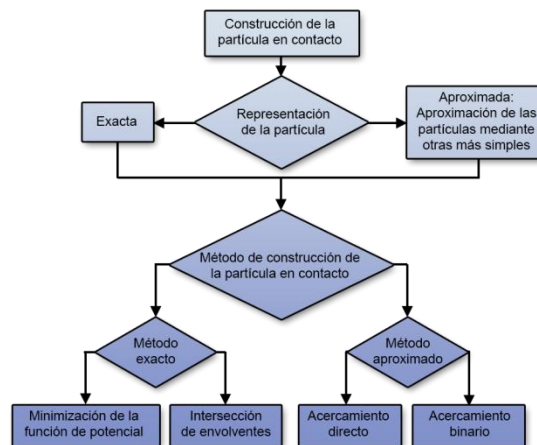


Diagrama 1. Métodos para la construcción de la partícula en contacto.

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 FV y el número de coordinación 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*.

El método de *intersección de envolventes* es tratado en [1] para el caso de algunas partículas tales como: círculos, esferas, elipses, polígonos, conglomerados de círculos y de esferas, y poliedros. En cuanto al método de *minimización de la función de potencial* fue formulado y aplicado en [1] 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. También son tratados en ese documento los métodos aproximados de *acercamiento directo* y *acercamiento binario*. 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.

2.3 - Explicación de la necesidad de mejorar la eficiencia al resolver el problema anterior, para conglomerados de círculos o esferas.

Como se mencionaba anteriormente, en [1] el método de *intersección de envolventes* es tratado para el caso de círculos, elipses, polígonos y mezclas de círculos y polígonos; aunque también es empleado para el caso de conglomerados de círculos y de esferas, en estos casos es muy difícil representar explícitamente las envolventes que se forman, por lo que el método empleado fue distinto, con el inconveniente principal de que no es posible determinar de antemano cuáles son los pares de círculos que estarán en contacto.

Un ejemplo del método utilizado en [1] para el caso de conglomerados de círculos lo podemos apreciar en la Figura , donde se puede observar la partícula p_3 , obtenida como una traslación de p_{mov} , en tangencia exterior con p_1 y p_2 simultáneamente; siendo c_{ij} (r_{ij}) el centro (radio) del círculo j-ésimo de la partícula i-ésima.

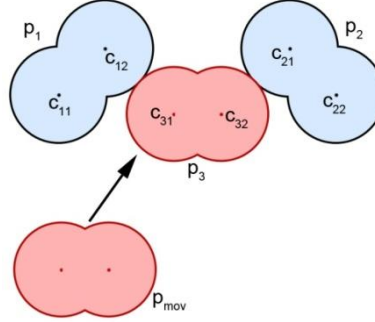


Figura 4. Partícula p_{mov} trasladada para estar en contacto con p_1 y p_2 simultáneamente.

Se observa además que la tangencia entre p_1 y p_3 ocurre entre el círculo 2 de p_1 y el círculo 1 de p_3 , y que la tangencia entre p_2 y p_3 ocurre entre el círculo 1 de p_2 y el círculo 2 de p_3 . Conociendo esto, si se denota por (x, y) la traslación que coloca a p_{mov} en contacto con p_1 y p_2 simultáneamente, se puede plantear el siguiente sistema de ecuaciones para hallar el punto (x, y) :

$$\begin{aligned} \|(x, y) + c_{31} - c_{12}\|^2 &= (r_{12} + r_{31})^2 \\ \|(x, y) + c_{32} - c_{21}\|^2 &= (r_{21} + r_{32})^2 \end{aligned} \quad (1)$$

cuya solución coincide con la intersección de dos círculos de radios $r_{11} + r_{31}$ y $r_{21} + r_{32}$ centrados en los puntos $c_{11} - c_{31}$ y $c_{21} - c_{32}$ respectivamente, y puede resolverse de forma exacta mediante las fórmulas para hallar los puntos de intersección entre dos circunferencias que se puede encontrar en [151, 218]. La notación $\|\cdot\|$ siempre corresponderá a la norma euclidiana salvo que se indique lo contrario.

2.4 - Breve introducción al aprendizaje de máquina

El aprendizaje de máquina es una rama de la inteligencia artificial (AI) basada en dos cosas: algoritmos matemáticos y automatización. La idea es automatizar la construcción de modelos analíticos que utilizan algoritmos para “aprender” de datos de manera repetitiva. La “máquina” es en realidad un algoritmo, aprende de sus errores en pasos anteriores para producir los mejores resultados sin intervención humana. Estos modelos se pueden utilizar entonces para producir decisiones confiables y repetibles.

El aspecto iterativo del aprendizaje basado en máquina es importante porque sus modelos no se vuelven más inteligentes por sí solos. Necesitan aprender de cálculos previos para producir los mejores resultados.

Para la mayoría de las organizaciones, la carrera ha comenzado para extraer información valiosa de volúmenes y variedades de datos en aumento. Los datos electrónicos van en aumento a velocidades nunca antes vistas, y el poder de procesamiento de las computadoras nunca ha sido más barato o poderoso.

Eso significa que, con los datos indicados, las tecnologías correctas y la analítica indicada, es posible producir de forma rápida y automática modelos que puedan analizar datos más grandes y complejos. Y producir resultados en menos tiempo y más precisos sin intervención humana. Incluso en una escala muy grande. El resultado: predicciones de alto valor que pueden orientar mejores decisiones y acciones en tiempo real.

Una clave para esto es la construcción automatizada de modelos. El líder de pensamiento analítico Thomas H. Davenport escribió recientemente en The Wall Street Journal que con los volúmenes de datos rápidamente cambiantes y en crecimiento se necesitaban "flujos de modelado en rápido movimiento para sostener el ritmo". Y mientras que los "seres humanos pueden crear uno o dos modelos por semana en general, el aprendizaje basado en máquina puede crear miles".

Muchas actividades cotidianas son potenciadas por algoritmos de aprendizaje basado en máquina.

- Detección de fraude.
- Recomendaciones en línea.
- Colocaciones de anuncios en tiempo real en páginas Web y dispositivos móviles.
- Análisis de sentimiento basado en texto.
- Evaluación de crédito y próximas mejores ofertas.
- Predicción de fallas de equipo.
- Nuevos modelos de precios.
- Detección de intrusiones en redes.
- Análisis de escritura manuscrita.
- Filtrado de correo no solicitado (spam).

Hoy día, el aprendizaje basado en máquina no es como el de antaño. Aunque muchos de los algoritmos matemáticos han estado entre nosotros por largo tiempo, la capacidad de aplicar cálculos matemáticos complejos a cantidades enormes de datos, una y otra vez, cada vez a mayor velocidad, es un adelanto reciente. Almacenaje de datos más barato, procesamiento distribuido, computadoras más poderosas y las oportunidades analíticas que ellos proporcionan son todos responsables de que esté resurgiendo el interés en estos sistemas.

2.5 - Formulación del Método de Regresión Logística

La regresión lineal se usa para aproximar la relación entre una variable de respuesta continua (dependiente) y un conjunto de variables predictoras (independientes). Sin embargo, a menudo la variable de respuesta es categórica en lugar de continua. En esos casos, no es apropiado usar regresión lineal, pero el analista puede utilizar un método análogo, regresión logística, la cual se asemeja a la regresión lineal en varios elementos. La regresión logística se refiere a métodos que describen la relación entre variables de respuesta categóricas y un conjunto de variables predictoras.

En [232] se explora el uso de la regresión logística para el caso de variables binarias.

Considerar la media condicional de Y dado $X = x$, denotada como $E(Y|x)$, este es el valor esperado de la variable de respuesta para un valor dado de la predictora. En regresión lineal, la variable de respuesta se considera una variable aleatoria definida como $Y = \beta_0 + \beta_1 x + \xi$. Como el error ξ tiene media cero, para la regresión lineal obtenemos $E(Y|x) = \beta_0 + \beta_1 x$, con posibles valores sobre la recta real.

Para simplificar, denotemos a la media condicional $E(Y|x)$ como $\pi(x)$. Luego, la media condicional, en el caso de la regresión logística, difiere de la de la regresión lineal, específicamente:

$$\pi(x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x}}$$

Los estadísticos han escogido la distribución logística para modelar datos dicotómicos debido a su flexibilidad y facilidad de interpretación. El valor mínimo para $\pi(x)$ se obtiene para $\lim_{a \rightarrow -\infty} \frac{e^a}{1+e^a} = 0$, y el máximo se obtiene para $\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{e^a}{1+e^a} = 1$. En consecuencia, $\pi(x)$ puede ser interpretada como una probabilidad, con $0 \leq \pi(x) \leq 1$.

Los modelos de regresión lineal asumen que $Y = \beta_0 + \beta_1 x + \xi$, donde el error ξ está distribuido normalmente con media cero y varianza constante. La interpretación para un modelo de regresión logística es diferente. Como la respuesta es dicotómica, los errores sólo pueden tomar una de dos formas posibles: si $Y = 1$, lo que ocurre con probabilidad $\pi(x)$, $\xi = 1 - \pi(x)$, la distancia vertical entre el punto $Y = 1$ y la curva

$$\pi(x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x}}$$

directamente debajo de él, para $X = x$. Por otro lado, si $Y = 0$, lo que ocurre con probabilidad $1 - \pi(x)$, $\xi = 0 - \pi(x) = -\pi(x)$, la distancia vertical entre el punto $Y = 0$ y la curva $\pi(x)$ directamente encima de él, para $X = x$. Por lo tanto, la varianza de ξ es $\pi(x)$, la cual es la varianza de una distribución binomial, y de la variable de respuesta $Y = \pi(x) + \xi$ se asume que tiene distribución binomial con probabilidad de éxito $\pi(x)$.

Una transformación útil para la regresión logística es la *transformación logit*, de la siguiente forma:

$$g(x) = \ln \frac{\pi(x)}{1 - \pi(x)} = \beta_0 + \beta_1 x$$

Esta transformación exhibe varias propiedades atractivas de la regresión lineal, tales como linealidad, continuidad y rango del infinito negativo al positivo.

2.6 - Árboles de decisión

Entre todos los posibles mecanismos para obtener predicciones de manera fiable, una de las que más destaca es la creación de *árboles de decisión*, que proporcionan un conjunto de reglas que se van aplicando sobre los ejemplos nuevos para decidir qué clasificación es la más adecuada a sus atributos.

Un árbol de decisión está formado por un conjunto de nodos de decisión (interiores) y de nodos-respuesta (hojas):

Un nodo de decisión está asociado a uno de los atributos y tiene 2 o más ramas que salen de él, cada una de ellas representando los posibles valores que puede tomar el atributo asociado. De alguna forma, un nodo de decisión es como una pregunta que se le hace al ejemplo analizado, y dependiendo de la respuesta que dé, el flujo tomará una de las ramas salientes.

Un nodo-respuesta está asociado a la clasificación que se quiere proporcionar, y nos devuelve la decisión del árbol con respecto al ejemplo de entrada.

Es evidente que no siempre podremos conseguir un árbol de decisión que sea capaz de predecir los ejemplos con una fiabilidad del 100%, pero cuanto mejor sea la batería de ejemplos de los que disponemos (por ejemplo, que no haya contradicciones entre clasificaciones), mejor se comportará el árbol que podemos construir a partir de ellos.

2.8 - Redes Neuronales

Las Redes Neuronales (RN) reciben este nombre por su representación artificial de la forma de trabajar del sistema nervioso del ser humano.

Primero veamos cómo funciona nuestro sistema nervioso. Éste está compuesto por millones de células nerviosas o neuronas. Una neurona tiene como componentes principales:

1. Dendritas. Éstas reciben información de otras neuronas en forma de impulsos eléctricos.
2. Cuerpo celular. Genera deducciones a partir de esa información y decide qué acción tomar.
3. Terminal del axón. Ésta transmite la salida en forma de impulsos eléctricos.

Cada neurona recibe información de muchas otras neuronas a través de las dendritas. Luego éstas llevan a cabo el procesamiento requerido de esta información y por último es transmitida una respuesta a muchas otras neuronas.

Las RN trabajan de forma muy similar. La entrada de cada neurona es como las dendritas. Similar al sistema nervioso humano, una neurona organiza todas las entradas y realiza operaciones en ellas. Por último, transmite la salida a todas las otras neuronas (de la siguiente *capa*) a las cuales está conectada.

Las RN se dividen en capas de 3 tipos:

1. Capas de entrada: Las observaciones de entrenamiento son realizadas a través de estas neuronas.
2. Capas ocultas: Son las capas intermedias entre la entrada y la salida que ayudan a las RN a comprender las complicadas relaciones entre los datos.
3. Capa de salida: La salida final se extrae de las 2 capas anteriores. Por ejemplo, en un problema de clasificación con 5 clases, la capa de salida tendrá 5 neuronas.

2.9 - Conclusiones y recomendaciones del capítulo

- Como en la práctica no es posible saber de antemano entre cuáles círculos ocurrirá la tangencia, es necesario verificar, en el peor de los casos, todas las combinaciones posibles, descartando las soluciones en las cuales la partícula trasladada se interseca con alguna de las fijas. Esto obliga a considerar todas las posibilidades y hace que el tiempo de solución sea un $O(N^4)$, donde N es la cantidad de círculos que compone cada partícula. En la práctica se obtienen resultados correctos interrumpiendo los cálculos cuando se tienen dos soluciones.
- Se debe continuar investigando en mejorar la predicción de las coordenadas del centro de la partícula en contacto, ya que dichas predicciones se pueden usar como puntos iniciales en métodos iterativos.

Capítulo 3. Resultados

3.1 - Aprendizaje supervisado

Una de las ramas más importantes del aprendizaje de máquina es el *aprendizaje supervisado*, en el cual los algoritmos se entrenan en un conjunto de datos para el que se conoce el valor de una variable respuesta, para luego poder predecir el valor de dicha variable en datos en los cuales no se conoce su valor. Usualmente, el conjunto en el cual se conoce el valor de la variable respuesta, se divide en un conjunto de entrenamiento, usado para entrenar los algoritmos, y un conjunto de prueba, usado para evaluarlos. Es común que el tamaño del conjunto de prueba sea un 25% del tamaño del conjunto de entrenamiento. Cuando la variable respuesta es continua, estamos en presencia de un problema de regresión, y cuando solo toma valores en un conjunto finito, estamos en presencia de un problema de clasificación.

Una de las principales medidas de error de los algoritmos de regresión son la raíz del error cuadrático medio (RMSE, por sus siglas en inglés), dada por

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}} \quad (2),$$

donde y_i son los valores reales, $\hat{y}_i$ las predicciones, y n la cantidad de datos. Y otra de las más usadas es R^2 , la cual indica la parte de la varianza que es explicada por el modelo, y se define por

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (3),$$

donde $\bar{y}_i$ es la media aritmética de los valores reales. Los valores de R^2 siempre están en el intervalo $[0,1]$, y mientras mayores sean mayor es el poder predictivo del modelo. Un modelo con un valor de R^2 inferior a 0.8 tiene poca utilidad.

Dentro de los problemas de clasificación, la clasificación binaria (en la que solo existen dos categorías, usualmente denominadas *Verdadero (V)* y *Falso (F)*) es una de las más comunes, además de que cualquier problema de clasificación se puede reducir a resolver uno o más problemas de clasificación binaria. Para los problemas de clasificación binaria, la mayoría de los indicadores de desempeño de algoritmos se definen a partir de la llamada *matriz de confusión*, dada por la expresión

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} \text{Predicción} \\ V & F \end{matrix} \\ \begin{matrix} \text{Real} \\ V \\ F \end{matrix} & \begin{pmatrix} TP & FN \\ FP & TN \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4),$$

en la cual TP , FN , FP y TN indican el número de pronósticos verdaderos positivos, falsos negativos, falsos positivos y verdaderos negativos respectivamente que el algoritmo produce.

La elección de la métrica a adoptar para medir el desempeño de un algoritmo de clasificación depende en gran medida del tipo de problema que se esté resolviendo, pero tres de las más usadas son la *exactitud*, la *precisión* y la *exhaustividad*. La exactitud es la razón de instancias que el algoritmo consigue clasificar correctamente, con respecto al total de instancias, y está definida por la expresión $\frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$. Para problemas de clases muy desbalanceadas es totalmente inútil. La precisión es la fracción de la cantidad de instancias positivas clasificadas correctamente, con respecto al número total de instancias clasificadas como positivas. Está definida por la fracción $\frac{TP}{TP+FP}$. Por otra parte, la exhaustividad es la fracción de la cantidad de instancias positivas que el algoritmo logra detectar, con respecto al número total de instancias positivas, es decir, está definida por la fracción $\frac{TP}{TP+FN}$. Otro indicador de interés puede ser el *F1*, definido como la media armónica entre la precisión y la exhaustividad. En términos de las componentes de la matriz de confusión se define como

$$F1 = \frac{2TP}{2TP + FP + FN} \quad (5).$$

Todos los indicadores definidos en el párrafo anterior están entre 0 y 1, y mientras más cercanos sean a 1 mejor es el algoritmo. Un punto de referencia ineludible a la hora de medir el desempeño de un algoritmo, es el *modelo nulo*, el cual consiste en clasificar todas las instancias como positivas o todas como negativas. Cualquier algoritmo que no sea mejor que el modelo nulo, no tiene absolutamente ninguna utilidad. Para ver más detalles de cómo evaluar algoritmos de aprendizaje supervisado, se puede consultar [234].

3.2 - Descripción del problema

Cuando se está generando un empaquetamiento en 2D, cada nueva partícula es colocada en tangencia con otras dos. En el caso de los conglomerados de n círculos, como no se conoce de antemano entre cuáles círculos ocurrirá la tangencia, es necesario probar n^4 posibilidades, como se describe en [233]. De aquí se deduce que si se conociera de antemano entre cuáles círculos ocurrirá la tangencia en la solución de la colocación de un conglomerado móvil en contacto con otros dos conglomerados fijos, se disminuirían los tiempos de cálculo.

Para generar los datos necesarios para probar algoritmos de predicción de los índices de los círculos entre los cuales ocurre la tangencia, inicialmente se generaron 1000 empaquetamientos de conglomerados de dos círculos, el primero de los cuales se muestra en la Figura 5.

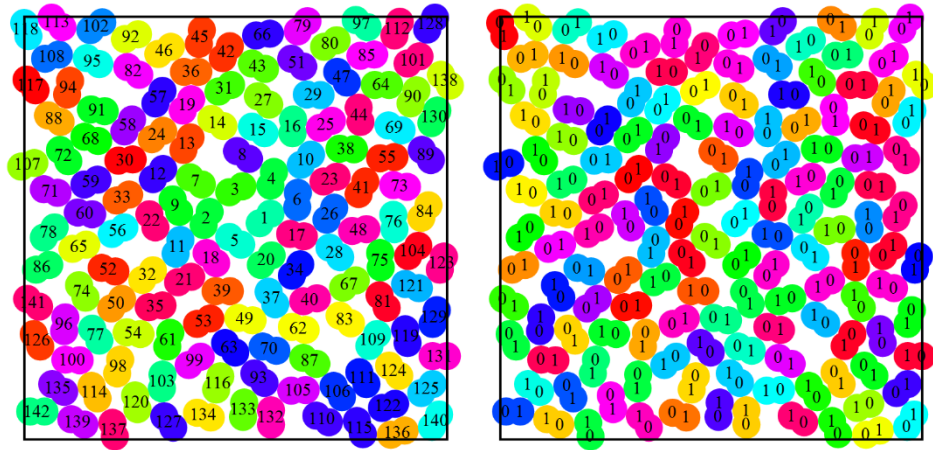


Figura 5. Empaquetamiento de conglomerados de dos círculos. Izquierda: partículas con el número que corresponde al orden en el cual fueron generadas. Derecha: orden de los círculos dentro de cada partícula.

Para predecir entre cuáles círculos ocurre la tangencia entre la partícula móvil y las fijas, las variables que se usaron fueron la distancia entre los centros de las partículas fijas, y el ángulo de inclinación de cada una de las partículas (este ángulo nunca se modifica). Para cada empaquetamiento se generó una tabla con los datos de cada instancia de partícula en contacto. Las primeras filas de la tabla correspondiente al empaquetamiento de la Figura 5 se muestran en las siguientes tablas:

Índice part. fija 1	Índice part. fija 2	Índice part. móvil	Distancia entre centros	Ángulo p.f. 1	Ángulo p.f. 2	Ángulo part. móvil	xMóv	yMóv
3	1	4	3.895	0.413	0.700	1.331	23.435	24.662
1	2	5	5.508	0.700	1.180	-0.574	19.967	18.810
4	1	6	3.805	1.331	0.700	1.564	25.852	22.675
2	3	7	3.895	1.180	0.413	-0.550	16.250	24.461
3	4	8	3.574	0.413	1.331	-0.614	20.680	26.919
2	7	9	3.680	1.180	-0.550	2.039	14.325	22.125

Tabla 1. Datos de índices, distancia entre centros y ángulos de inclinación de instancias de partícula en contacto, para los primeros 6 casos del empaquetamiento de la Figura 5.

Fija 1(0) móvil(0)	Fija 1(0) móvil(1)	Fija 1(1) móvil(0)	Fija 1(1) móvil(1)	Fija 2(0) móvil(0)	Fija 2(0) móvil(1)	Fija 2(1) móvil(0)	Fija 2(1) móvil(1)
0	0	1	0	0	0	1	0

0	1	0	0	1	0	0	0
0	1	0	0	0	0	1	0
0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	1	0	0	0	1
1	0	0	0	0	1	0	0

Tabla 2. Variables indicadoras de contacto entre círculos.

En la Tabla 1, las dos primeras columnas corresponden a los índices de las partículas fijas, la tercera columna corresponde al índice de la partícula móvil, la cuarta es la distancia entre los centros de las partículas fijas, las columnas 5 a la 7 contienen el ángulo de inclinación de la partícula correspondiente, y las dos últimas columnas indican las coordenadas del centro de la partícula móvil cuando está en contacto con las dos fijas simultáneamente. Los índices de las tres primeras columnas están ordenados de manera que los centros de las partículas correspondientes estén orientados en sentido antihorario (Figura 5 izquierda). Esto se hizo para que la partícula móvil siempre estuviera en el mismo semiplano relativo a las partículas fijas, y así no introducir ruido en los algoritmos de clasificación, debido a que aquí solo estamos considerando una de las dos soluciones del problema de la partícula en contacto.

Por ejemplo, la primera fila de la Tabla 1 indica que la partícula móvil 4 fue puesta en contacto con las partículas fijas 3 y 1 (esto se puede comprobar en la Figura 5 izquierda), que la distancia entre los centros de las partículas 3 y 1 es igual a 3.894612, y que los ángulos de inclinación de las tres partículas son iguales a 0.413049, 0.70007 y 1.330942 radianes respectivamente. Además, el centro de la partícula móvil es en este caso (23.435, 24.662).

En la Tabla 2, los datos de cada fila corresponden a la fila que está en la misma posición en la Tabla 1. Las entradas de dicha tabla son variables indicadoras de ocurrencia de la tangencia en los círculos indicados entre paréntesis en el nombre de la columna, donde el valor 1 indica la ocurrencia. Por ejemplo, la tercera fila indica que el contacto entre las partículas 4 y 6 ocurre entre el círculo 0 de la partícula 4 y el círculo 1 de la partícula 6, y que el contacto entre las partículas 1 y 6 ocurre entre el círculo 1 de la partícula 1 y el círculo 0 de la partícula 6. Todo lo anterior se puede comprobar observando la Figura 5.

3.3 - Preparación y exploración de los datos

A partir de los 1000 empaquetamientos mencionados anteriormente, se construyó una tabla *partData* cuyas columnas tienen el mismo significado que las de las tablas 1 y 2. La tabla tiene 140600 filas, o sea contiene información sobre 140600 instancias de construcción de partículas en contacto. *partData* se dividió en las tablas *partDataTrain* y *partDataTest*, para ser usadas como conjuntos de entrenamiento y de evaluación respectivamente de algoritmos de

aprendizaje de máquina. Dichas tablas representan un 80% y un 20% respectivamente de *partData*. En estas tablas, el valor medio en las columnas de nombres iguales a los de la Tabla 2, es aproximadamente igual a 0.25, lo cual es consecuencia de la uniformidad de los ángulos de inclinación de las partículas (Figura), y de que entre dos conglomerados de dos círculos cada uno, el contacto puede ocurrir de cuatro formas diferentes.

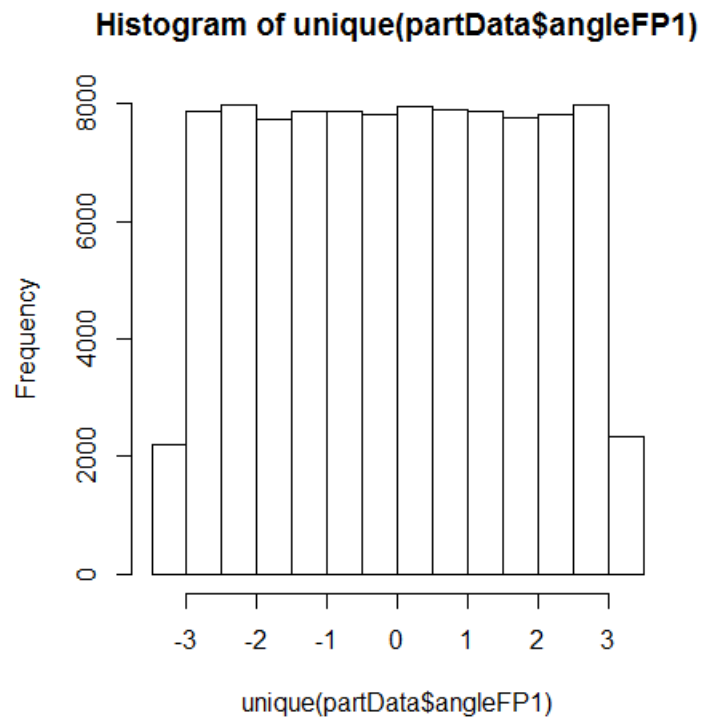


Figura 6. Ángulo de inclinación de las partículas.

La otra variable usada para la predicción, que es la distancia entre los centros de las partículas fijas, tiene una distribución interesante, como se muestra en el histograma de la Figura (a). Los valores extremos de aproximadamente 2.6 y 8 en dicho histograma, así como la caída brusca en frecuencia a partir de 4, se pueden entender observando la Figura (b). En efecto, como todas las partículas tienen radio circunscrito 2, la menor distancia que puede haber entre los centros de las partículas fijas es 2.66 (Figura (b) superior), y para que haya tangencia entre la partícula móvil y las dos fijas, la mayor separación que puede haber entre estas últimas es 8 (Figura (b) inferior). Por otra parte, la disminución brusca a partir de 4 ocurre cuando los círculos circunscritos a las partículas fijas están una distancia mayor que aquella en la que son tangentes (Figura (b) media).

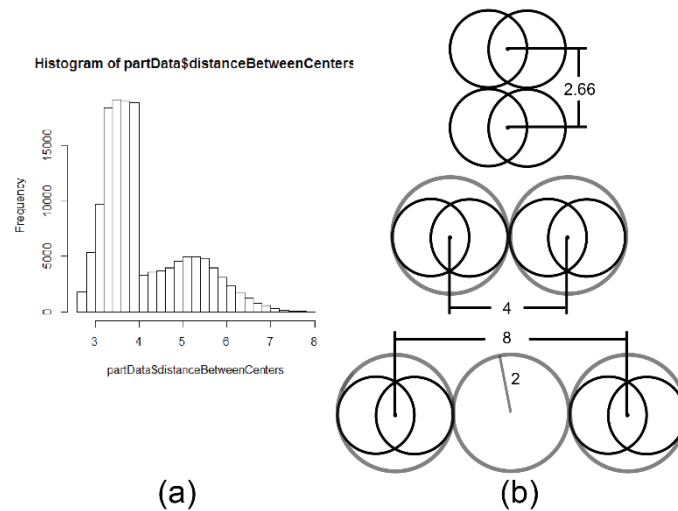


Figura 7. Histograma de las distancias entre los centros de las partículas fijas (a) y casos límite (b).

Aparentemente, no hay una relación evidente entre la distancia entre las partículas fijas y los índices de los círculos en contacto, ya que la categoría *Verdadero* no predomina en ninguna de las barras del histograma de la Figura , el cual es prácticamente igual para todas las variables indicadoras de contacto entre círculos.

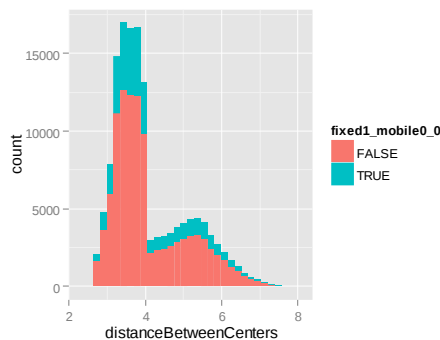


Figura 8. Variable indicadora de contacto *fixed1_mobile0_0* vs. distancia entre centros de partículas fijas.

Antes de construir modelos para predecir los índices de los círculos en contacto, se probó aplicar regresión lineal para predecir directamente las coordenadas del centro de la partícula en contacto. Sin embargo, los resultados no fueron buenos (Figura), ya que se obtuvieron valores de R^2 de 6.205666×10^{-5} y 0.0002856555 para las predicciones de x e y respectivamente. Una predicción mejor serviría para usar los valores obtenidos como valores iniciales en métodos iterativos para hallar la posición de la partícula en contacto [235].

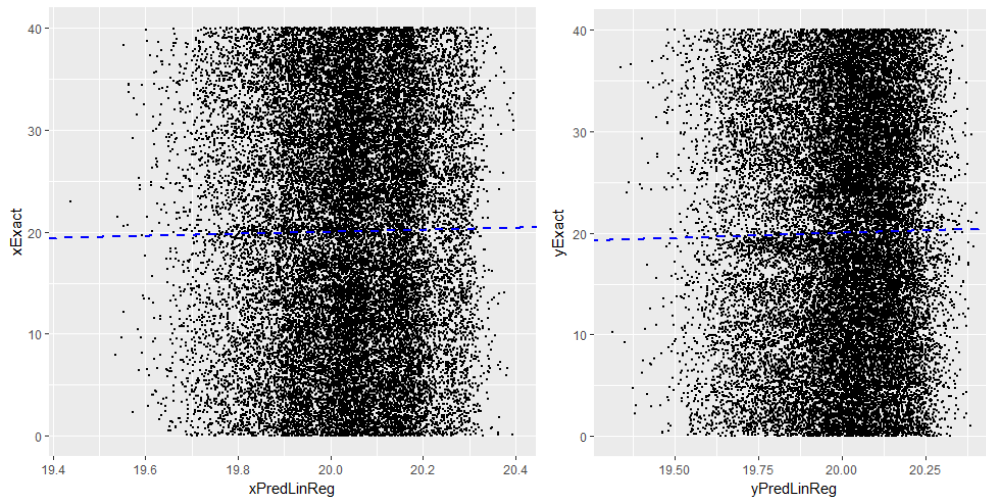


Figura 9. Regresión lineal aplicada para predecir las coordenadas x (izquierda) y y (derecha) del centro de la partícula en contacto.

Aplicando algoritmos de clasificación se obtuvieron mejores resultados que con regresión. En el caso de la regresión logística, para predecir si hay contacto entre el círculo 0 de la partícula fija y el 0 de la móvil, se obtuvo el siguiente modelo en R:

```
Call: glm(formula = fixed1_mobile0_0 ~ distanceBetweenCenters +
angleFP1 +
      angleFP2 + angleMobileParticle, family = binomial(link = "logit"),
      data = partDataTrain)
```

Coefficients:

(Intercept)	distanceBetweenCenters
-1.0722222	-0.0035407
angleFP1	angleFP2
0.0147502	-0.0002301
angleMobileParticle	
-0.0235739	

Degrees of Freedom: 112430 Total (i.e. Null); 112426 Residual

Null Deviance: 127000

Residual Deviance: 127000 AIC: 127000

A pesar de que la desviación residual es igual a la nula, con lo que el modelo tiene poca significación [234], aún tiene utilidad, pues para un umbral de 0.755 se obtuvieron, en el conjunto de prueba, valores de precisión, exhaustividad y exactitud iguales a 0.3156658, 0.2983625 y 0.6550463 respectivamente (Figura 10), los cuales son mejores en conjunto que los obtenidos en el modelo nulo que se define por devolver todas las predicciones como positivas. En dicho modelo, los valores de precisión, exhaustividad y exactitud son aproximadamente iguales a 0.25, 1 (evidentemente, ningún modelo será mejor que el nulo en cuanto a exhaustividad) y 0.25 respectivamente.

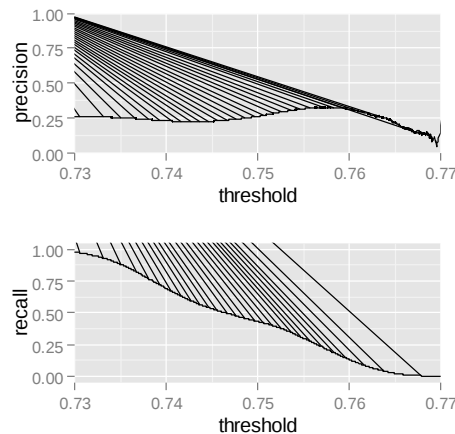


Figura 10. Curvas de precisión y exhaustividad en función del umbral, para el modelo de regresión logística.

3.4 - Tiempos de solución del problema de la partícula en contacto

Se realizó una comparación de los tiempos de generación de la partícula móvil, para los casos en que se conoce y los que no se conoce entre cuáles círculos ocurre la tangencia.

En la Figura 11, se puede ver que el tiempo mínimo medio es de 0.00054710071942446 s, y el tiempo bruto medio es de 0.0036861 s, 6 veces mayor. Por lo tanto, cualquier disminución en los tiempos de solución del problema de la partícula en contacto para el caso de conglomerados disminuirá los tiempos de generación del empaquetamiento.

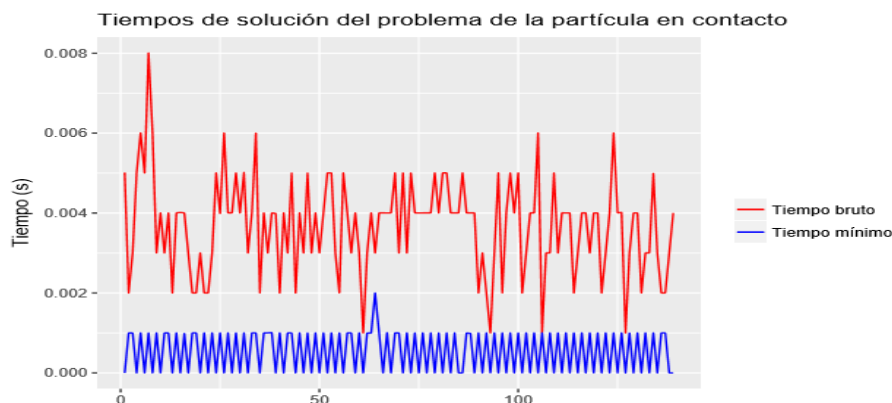


Figura 11. Tiempos de solución para el problema de la partícula en contacto.

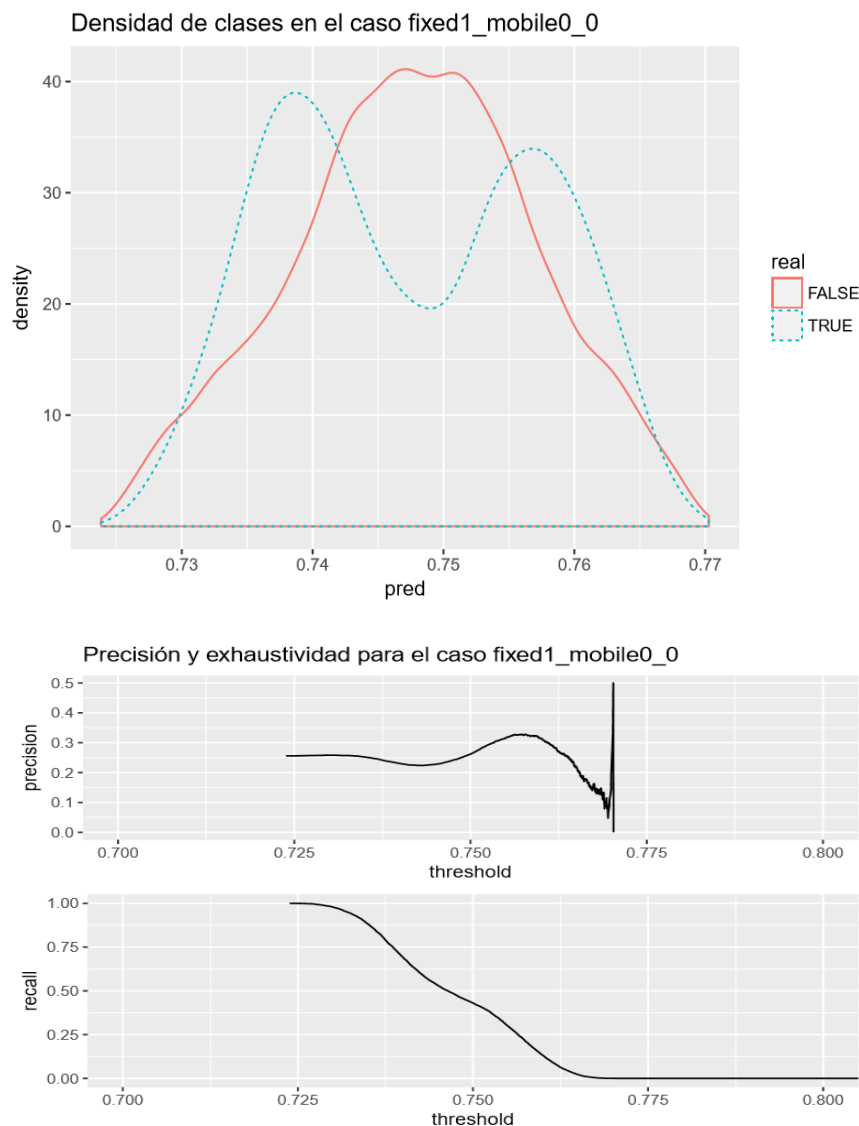
3.5 - Clasificación

3.5.1 - Árboles de decisión para clasificación

Aquí no se obtuvieron buenos resultados. En este caso no están graficados.

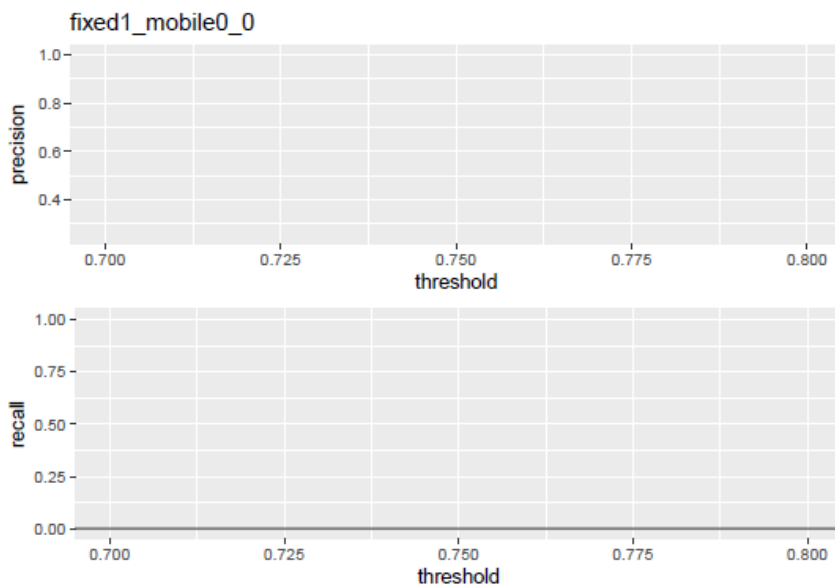
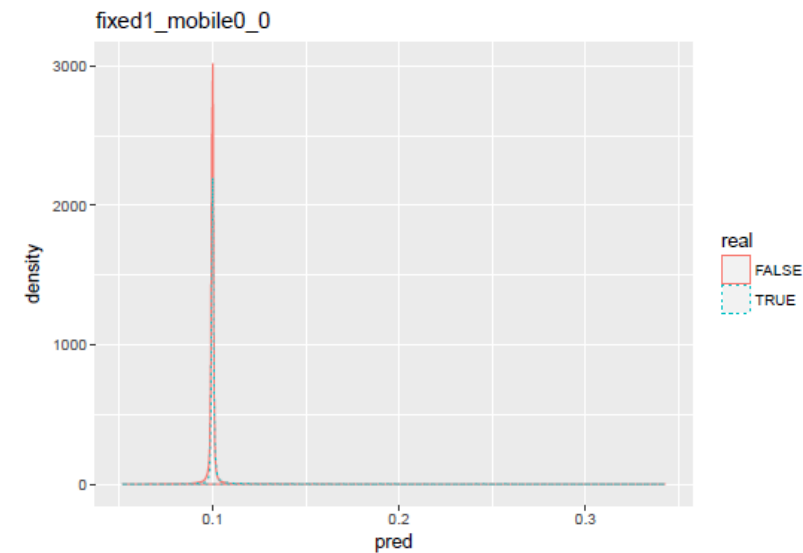
3.5.2 - Regresión logística para la clasificación

Las curvas pred vs. density muestran cierta separación entre las clases, lo cual indica que la regresión logística puede ser un método aplicable en este caso. Los valores de precisión por encima de 0.25 indican que el algoritmo tiene una precisión mayor que la del modelo nulo. Para todos los casos, se tomó un umbral de 0.75 para convertir el valor de salida de la regresión logística, que es una probabilidad, en un valor binario que en este caso es 0 o 1.



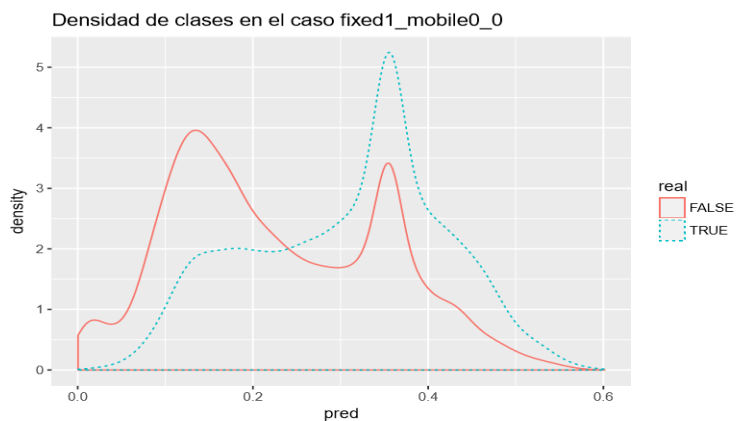
3.5.3 - Clasificación con máquinas de soporte vectorial

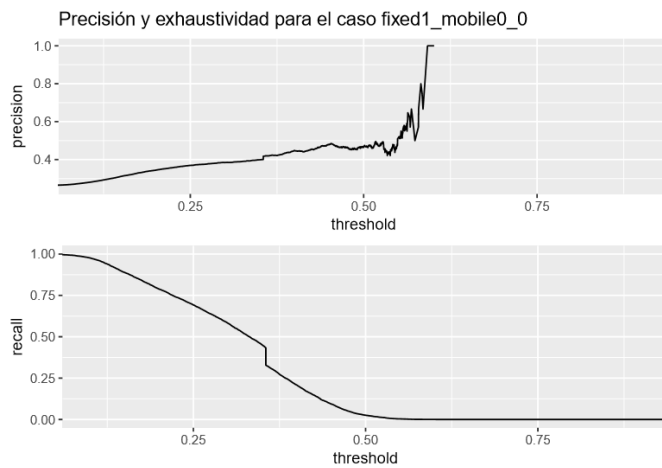
Con las máquinas de soporte vectorial se obtuvieron resultados mejores que con árboles de decisión, pero peores que con regresión logística.



3.5.4 - Clasificación con redes neuronales

Con redes neuronales se obtiene alrededor de un 40% de precisión con un 50% de exhaustividad, lo cual es un buen resultado. Se puede apreciar también en las curvas de densidad de clases una mayor separación entre estas que en los otros métodos, incluso más que en el caso de regresión logística.





3.6 - Conclusiones del capítulo

- Para la predicción de los centros de la partícula móvil, con regresión lineal no se obtuvieron buenos resultados.
- En cuanto al problema de conocer de antemano entre cuáles círculos ocurrirá la tangencia en la solución de la colocación de un conglomerado móvil en contacto con otros dos conglomerados fijos, los resultados con máquinas de soporte vectorial fueron un poco mejores que con árboles, pero peores que con regresión logística.

Conclusiones generales

- Se intentó predecir los círculos entre los cuales ocurre la tangencia entre la partícula móvil y las fijas, y se obtuvieron algunos resultados con regresión logística en cuanto a separación de las clases. Se probó que este método tiene una precisión mayor que la del algoritmo nulo.
- Cualquier disminución en los tiempos de solución del problema de la partícula en contacto para el caso de conglomerados, disminuirá los tiempos de generación del empaquetamiento.
- Con redes neuronales se obtuvo el mejor resultado. Todavía está por ver si en la práctica es factible aplicar y extender este modelo, pero por lo menos se demostró que se puede predecir con bastante precisión y exhaustividad entre cuáles círculos ocurrirá el contacto

Recomendaciones

- Se debe continuar investigando en mejorar la predicción de las coordenadas del centro de la partícula en contacto, ya que dichas predicciones se pueden usar como puntos iniciales en métodos iterativos.

Referencias bibliográficas

1. MORALES, I. P. 2012. *Método de Elementos Discretos: desarrollo de técnicas novedosas para la modelación con métodos de partículas*. Universidad Central Marta Abreu de Las Villas.
2. PERKINS, E. & WILLIAMS, J. R. 2001. A fast contact detection algorithm insensitive to object sizes. *Engineering Computations*, Vol No. 18, pp. 48-61.
3. KIM, H., WAGONER, M. P. & BUTTLAR, W. G. 2009. Numerical fracture analysis on the specimen size dependency of asphalt concrete using a cohesive softening model. *Construction and Building Materials*, 23, 2112-2120.
4. KIM, H. & BUTTLAR, W. G. 2009. Discrete fracture modeling of asphalt concrete. *International Journal of Solids and Structures*, 46, 2593–2604.
5. LIM, E. W. C. 2008. Master Curve for the Discrete-Element Method. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 47, 481-485.
6. GROUP, I. C. 1999. *PFC2D. Theory and Background*.
7. MOHAMMADI, S. 2003. *Discontinuum Mechanics using finite and discrete elements*, Wit Press.
8. MUNJIZA, A. 2004. *The combined Finite-Discrete Element Method*, John Wiley & Sons.
9. KRUGGEL-EMDEN, H., RICKELT, S., WIRTZ, S. & SCHERER, V. 2008. A study on the validity of the multi-sphere Discrete Element Method. *Powder Technology*, 188, 153-165.
10. MIO, H., AKASHIC, M., SHIMOSAKA, A., SHIRAKAWA, Y., HIDAKA, J. & MATSUZAKI, S. 2009. Speed-up of computing time for numerical analysis of particle charging process by using discrete element method. *Chemical Engineering Science*, 64, 1019--1026.
11. RYCROFT, C. H., KAMRIN, K. & BAZANT, M. Z. 2009. Assessing continuum postulates in simulations of granular flow. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57, 828-839.
12. MIO, H., YAMAMOTO, K., SHIMOSAKA, A., SHIRAKAWA, Y. & HIDAKA, J. 2007. Modeling of Solid Particle Flow in Blast Furnace Considering Actual Operation by Large-scale Discrete Element Method. *ISIJ International*, 47, 1745-1752.
13. LOUREL, I., WU, W. & MORRISON, D. J. 2006. Experimental validation on the computational modelling of granular flow using the discrete element method (DEM) *Asia-Pacific Bulk Materials Handling Conference*. Melbourne, Australia.
14. VU-QUOC, L., ZHANG, X. & WALTON, O. R. 2000. A 3-D discrete-element method for dry granular flows of ellipsoidal particles. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 187, 483-528.
15. AKASHI, M., MIO, H., SHIMOSAKA, A., SHIRAKAWA, Y., HIDAKA, J. & NOMURA, S. 2008. Estimation of Bulk Density Distribution in Particle Charging Process Using Discrete Element Method Considering Particle Shape. *ISIJ International*, 48, 1500–1506.
16. CLEARY, P. W. & SAWLEY, M. L. 1999. Three-dimensional modelling of industrial granular flows. *Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*. Melbourne, Australia.

17. MORENO-ATANASIO, R., ANTONY, S. J. & WILLIAMS, R. A. 2009. Influence of interparticle interactions on the kinetics of self-assembly and mechanical strength of nanoparticulate aggregates. *Particuology*, 7, 106–113.
18. DONZÉ, F. V. 2006. Discrete Element Group for Hazard Mitigation. Grenoble: Université Joseph Fourier, France.
19. BELHEINE, N., PLASSIARD, J. P., DONZE, F. V., DARVE, F. & SERIDI, A. 2009. Numerical simulation of drained triaxial test using 3D discrete element modeling. *Computers and Geotechnics*, 36, 320–331.
20. COETZEE, C. J. & ELS, D. N. J. 2009. Calibration of granular material parameters for DEM modelling and numerical verification by blade–granular material interaction. *Journal of Terramechanics*, In press.
21. COETZEE, C. J. & ELS, D. N. J. 2009. Calibration of discrete element parameters and the modelling of silo discharge and bucket filling. *Computers and Electronics in Agriculture*, 65, 198-212.
22. COETZEE, C. J., ELS, D. N. J. & DYMOND, G. F. 2009. Discrete element parameter calibration and the modelling of dragline bucket filling. *Journal of Terramechanics*, In press.
23. GROUP, I. C. 2004. *PFC2D User's Manuals*.
24. NAEINI, S. E. & SPELT, J. K. 2009. Two-dimensional discrete element modeling of a spherical steel media in a vibrating bed. *Powder Technology*, 195 83-90.
25. NOUGUIER-LEHONN, C., CAMBOU, B. & VINCENS, E. 2003. Influence of particle shape and angularity on the behaviour of granular materials: a numerical analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 27, 1207-1226.
26. HE, H., GUO, Z., STROEVEN, P., STROEVEN, M. & SLUYS, L. J. 2009. Characterization of the packing of aggregate in concrete by a discrete element approach. *Materials Characterization*, In press.
27. PERKINS, E. & WILLIAMS, J. R. 2001. CGrid: neighbor searching for many body simulation. *4th Int. Conf. on Analysis of Discontinuous Deformation*. Glasgow, UK.
28. HAN, K., FENG, Y. T. & OWEN, D. R. J. 2005. Sphere packing with a geometric based compression algorithm. *Powder Technology*, 155, 33-41.
29. RASCHDORF, S. & KOLONKO, M. 2009. Loose octree: a datastructure for the simulation of polydisperse particle packings. Clausthal University of Technology.
30. CUNDALL, P. A. 1971. A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. *Symposium Soc. Internat Mécanique des Roches* Nancy.
31. CUNDALL, P. A. 1978. Computer modelling of jointed rock masses. Vickburg, Mississippi: U.S. Army Engineer Waterways Experiment Station.
32. WILKINS, M. L. 1969. Calculation of elastic plastic flow. *Report UCRL 7322*. Livermore: Lawrence Radiation Laboratory.
33. ERGENZINGER, C., SEIFRIED, R. & EBERHARD, P. 2011. A discrete element model to describe failure of strong rock in uniaxial compression. *Granular Matter*, 13, 341-364.

34. DURIEZ, J., DARVE, F. & DONZÉ, F. V. 2011. A discrete modeling-based constitutive relation for infilled rock joints. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 48, 458-468.
35. WANG, Y. & TONON, F. 2010. Calibration of a discrete element model for intact rock up to its peak strength. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 34, 447-469.
36. KAZERANI, T., YANG, Z. & ZHAO, J. 2011. A Discrete Element Model for Predicting Shear Strength and Degradation of Rock Joint by Using Compressive and Tensile Test Data. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 1-15.
37. NAYFEH, A. H. & HEFZY, M. S. 1978. Continuum modeling of three dimensional truss-like space structures. *AIAA Journal*, 16, 779-787.
38. KETTERHAGEN, W. R., CURTIS, J. S., WASSGREN, C. R. & HANCOCK, B. C. 2009. Predicting the flow mode from hoppers using the discrete element method. *Powder Technology*, In press.
39. LI, Y., XU, Y. & JIANG, S. 2009. DEM simulations and experiments of pebble flow with monosized spheres. *Powder Technology*, 193, 312–318.
40. ANANDA, A., CURTIS, J. S., WASSGREN, C. R., HANCOCK, B. C. & KETTERHAGEN, W. R. 2008. Predicting discharge dynamics from a rectangular hopper using the discrete element method (DEM). *Chemical Engineering Science*, 63, 5821--5830.
41. SYKUT, J., MOLEND, M. & HORABIK, J. 2008. DEM simulation of the packing structure and wall load in a 2-dimensional silo. *Granular Matter*, 10, 273-278.
42. WUA, J., BINBO, J., CHEN, J. & YANG, Y. 2009. Multi-scale study of particle flow in silos. *Advanced Powder Technology*, 20 62-73.
43. LU, M. & MCDOWELL, G. R. 2007. The importance of modelling ballast particle shape in the discrete element method. *Granular Matter*, 9, 69–80.
44. YOU, Z., LIU, Y. & DAI, Q. 2011. Three-Dimensional Microstructural-Based Discrete Element Viscoelastic Modeling of Creep Compliance Tests for Asphalt Mixtures. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 23
45. DAI, Q. & YOU, Z. 2007. Prediction of Creep Stiffness of Asphalt Mixture with Micromechanical Finite-Element and Discrete-Element Models. *JOURNAL OF ENGINEERING MECHANICS*.
46. YU, H. & SHEN, S. Impact of Aggregate Packing on Dynamic Modulus of Hot-Mix Asphalt Mixtures Using Discrete Element Method. 2011.
47. NEZAMI, E. G., HASHASH, Y. M. A., ZHAO, D. & GHABOUSSI, J. 2007. Simulation of front end loader bucket–soil interaction using discrete element method. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 31, 1147 - 1162.
48. TAN, Y., YANG, D. & SHENG, Y. 2009. Discrete element method (DEM) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline SiC. *Journal of the European Ceramic Society*, 29 1029-1037.
49. TÓTH, A. R., ORBÁN, Z. & BAGI, K. 2009. Discrete element analysis of a stone masonry arch. *Mechanics Research Communications*, 36 469-480.

50. BUI, H. H., KOBAYASHI, T., FUKAGAWA, R. & WELLS, J. C. 2009. Numerical and experimental studies of gravity effect on the mechanism of lunar excavations. *Journal of Terramechanics*, 46, 115-124.
51. LABRA, C., ROJEK, J., OÑATE, E. & ZÁRATE, F. 2008. Advances in discrete element modelling of underground excavations. *Acta Geotechnica*, 3, 317-322.
52. SÁNCHEZ, P. & SCHEERES, D. J. 2011. Simulating asteroid rubble piles with a self-gravitating soft-sphere distinct element method model. *The Astrophysical Journal*, 727.
53. NAKASHIMA, H., SHIOJI, Y., KOBAYASHI, T., AOKI, S., SHIMIZU, H., MIYASAKA, J. & OHDOI, K. 2011. Determining the angle of repose of sand under low-gravity conditions using discrete element method. *Journal of Terramechanics*, 48, 17-26.
54. SMITH, A., JAMES, C., JONES, R., LANGSTON, P., LESTER, E. & DRURY, J. 2009. Modelling contra-flow in crowd dynamics DEM simulation. *Safety Science*, 47 395-404.
55. OWEN, P. J. & CLEARY, P. W. 2009. Prediction of screw conveyor performance using the Discrete Element Method (DEM). *Powder Technology*, 193 274-288.
56. ABD-ELHADY, M. S., RINDT, C. C. M. & STEENHOVEN, A. A. V. 2009. Contact time of an incident particle hitting a 2D bed of particles. *Powder Technology*, 191, 315–326.
57. ARNTZ, M. M. H. D., OTTER, W. K. D., BRIELS, W. J., BUSSMANN, P. J. T., BEEFTINK, H. H. & BOOM, R. M. 2008. Granular mixing and segregation in a horizontal rotating drum: A simulation study on the impact of rotational speed and fill level. *Particle Technology and Fluidization*, 54, 3133 - 3146.
58. YANG, R. Y., YU, A. B., MCELROY, L. & BAO, J. 2008. Numerical simulation of particle dynamics in different flowregimes in a rotating drum. *Powder Technology*, 188 170-177.
59. SARKARA, A. & WASSGREN, C. R. 2009. Simulation of a continuous granular mixer: Effect of operating conditions on flow and mixing. *Chemical Engineering Science*, 64, 2672--2682.
60. GUI, N. & FAN, J. 2009. Numerical simulation of motion of rigid spherical particles in a rotating tumbler with an inner wavelike surface. *Powder Technology*, 192, 234-241.
61. BERTRAND, F., LECLAIRE, L. A. & LEVECQUE, G. 2005. DEM-based models for the mixing of granular materials. *Chemical Engineering Science*, 60, 2517 – 2531.
62. GENG, F., YUAN, Z., YAN, Y., LUO, D., WANG, H., LI, B. & XU, D. 2009. Numerical simulation on mixing kinetics of slender particles in a rotary dryer. *Powder Technology*, 193, 50-58.
63. MCELROY, L., BAO, J., YANG, R. Y. & YU, A. B. 2009. A soft-sensor approach to flow regime detection for milling processes. *Powder Technology*, 188, 234-241.
64. HASSANPOUR, A., TAN, H., BAYLY, A., GOPALKRISHNAN, P., NG, B. & GHADIRI, M. 2011. Analysis of particle motion in a paddle mixer using Discrete Element Method (DEM). *Powder Technology*, 206, 189-194.
65. DONG, K. J., YU, A. B. & BRAKE, I. 2009. DEM simulation of particle flow on a multi-deck banana screen. *Minerals Engineering*, In press.

66. JIAYUAN ZHANG, HU, Z., GE, W., ZHANG, Y., LI, T. & LI, J. 2004. Application of the Discrete Approach to the Simulation of Size Segregation in Granular Chute Flow. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43, 5521-5528.
67. SHIMOYAMA, I., YAMAMOTO, T. & FUKADA, K. 2010. Tolerable Limit of Localized Force on Damaged Coke Oven Wall Analyzed by Discrete Element Method. *ISIJ International*, 50, 1048-1053.
68. CLEARY, P. 2001. Modelling comminution devices using DEM.
69. CHENG, Y. P., NAKATA, Y. & BOLTON, M. D. 2003. Discrete element simulation of crushable soil. *Géotechnique*, 53, 633-641.
70. MARKETOS, G. & BOLTON, M. D. 2009. Compaction bands simulated in Discrete Element Models. *Journal of Structural Geology* 31, 479-490.
71. SHAMY, U. E. & GRÖGER, T. 2008. Micromechanical aspects of the shear strength of wet granular soils. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32, 1763 - 1790.
72. ZHAO, C., HOBBS, B. E., ORD, A. & PENG, S. 2008. Particle simulation of spontaneous crack generation associated with the laccolithic type of magma intrusion processes *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75 1172 - 1193.
73. SCHÖPFER, M. P. J., ABE, S., CHILDS, C. & WALSH, J. J. 2009. The impact of porosity and crack density on the elasticity, strength and friction of cohesive granular materials: Insights from DEM modelling. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 46, 250-261.
74. UTILI, S. 2004. *EVOLUTION OF NATURAL SLOPES SUBJECT TO WEATHERING: AN ANALYTICAL AND NUMERICAL STUDY* Politecnico di Milano
75. EGHOLM, D. L., CLAUSEN, O. R., SANDIFORD, M., KRISTENSEN, M. B. & KORSTGARD, J. A. 2008. The mechanics of clay smearing along faults. *GEOLOGY*, 36, 787-790.
76. FENG, Y. T., HAN, K. & OWEN, D. R. J. 2009. Discrete thermal element modelling of heat conduction in particle systems: Pipe-network model and transient analysis. 193, 248-256.
77. NGUYEN, V. D., COGNÉ, C., GUESSASMA, M., BELLENGER, E. & FORTIN, J. 2009. Discrete modeling of granular flow with thermal transfer: Application to the discharge of silos. *Applied Thermal Engineering*, 29, 1846-1853.
78. AZADI, P., YAN, N. & FARNOOD, R. 2008. Discrete element modeling of the transient heat transfer and toner fusing process in the Xerographic printing of coated papers. *Computers and Chemical Engineering*, 32, 3238-3245.
79. SAKAI, M. & KOSHIZUKA, S. 2009. Large-scale discrete element modeling in pneumatic conveying. *Chemical Engineering Science*, 64, 533--539.
80. TATEMOTO, Y., NIWA, Y. & TAKESHITA, T. 2009. Circulation of particles in a vibrated bed with an inner tube. *Powder Technology*, 192 279-286.
81. BIERWISCH, C., KRAFT, T., RIEDEL, H. & MOSELER, M. 2009. Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57, 10-31.

82. TAKEUCHI, S., WANG, S. & RHODES, M. 2008. Discrete element method simulation of three-dimensional conical-base spouted beds. *Powder Technology*, 184 141-150.
83. ZHAO, X.-L., LI, S.-Q., LIU, G.-Q., YAO, Q. & MARSHALL, J.-S. 2008. DEM simulation of the particle dynamics in two-dimensional spouted beds. *Powder Technology*, 184 205-213.
84. LAMARCHE, K. R., LIU, X., SHAH, S. K., SHINBROT, T. & GLASSER, B. J. 2009. Electrostatic charging during the flow of grains from a cylinder. *Powder Technology*, 195, 158-165.
85. LIEDEKERKE, P. V., TIJSKENS, E., DINTWA, E., RIOUAL, F., VANGEYTE, J. & RAMON, H. 2009. DEM simulations of the particle flow on a centrifugal fertilizer spreader. *Powder Technology*, 190, 348–360.
86. MARSHALL, J. S. 2009. Discrete-element modeling of particulate aerosol flows. *Journal of Computational Physics*, 228, 1541-1561.
87. FREIREICH, B., LITSTER, J. & WASSGREN, C. 2009. Using the discrete element method to predict collision-scale behavior: a sensitivity analysis. *Chemical Engineering Science*, In press.
88. KHANAL, M., RAGHURAMAKRISHNAN, R. & TOMAS, J. 2008. Discrete Element Method Simulation of Effect of Aggregate Shape on Fragmentation of Particle Composite. *Chemical Engineering & Technology*, 31, 1526-1531.
89. OLMOS, L., MARTIN, C. L. & BOUVARD, D. 2009. Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling. *Powder Technology* 190 134-140.
90. AZADI, P., FARNOOD, R. & YAN, N. 2008. Modeling the effect of pigment morphology on the dynamic compression of coating layers using DEM. *Computers and Chemical Engineering*, 32, 3084–3089.
91. MAJID, M. & WALZEL, P. 2009. Convection and segregation in vertically vibrated granular beds. *Powder Technology*, 192, 311–317.
92. TU, X. & ANDRADE, J. E. 2008. Criteria for static equilibrium in particulate mechanics computations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75, 1581-1606.
93. DAVIDTGETHIN, R. 2003. A discrete deformable element approach for the compaction of powder systems. *MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING*, 11, 101–114.
94. HARTHONG, B., JÉRIER, J.-F., DORÉMUS, P., IMBAULT, D. & DONZÉ, F.-V. 2009. Modeling of high-density compaction of granular materials by the Discrete Element Method. *International Journal of Solids and Structures*, In press.
95. JERIER, J. F., HATHONG, B., RICHEFEU, V., CHAREYRE, B., IMBAULT, D., DONZE, F. V. & DOREMUS, P. 2011. Study of cold powder compaction by using the discrete element method. *Powder Technology*, 208, 537-541.
96. CHEN, P.-Q., XIA, W., ZHOU, Z.-Y., ZHU, Q.-L. & LI, Y.-Y. 2004. Three-dimensional combined finite-discrete element approach for simulation of single layer powder compaction process. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 14.
97. MANI, S., ROBERGE, M., TABIL, L. G. & SOKHANSANJ, S. 2003. Modeling of Densification of Biomass Grinds using Discrete Element

Method by PFC3D Montréal: The Canadian society for engineering in agricultural, food and biological systems.

98. LIU, L. 2003. Simulation of microstructural evolution during isostatic compaction of monosized spheres. *J. Phys. D:Appl.Phys.*, 36, 1881-1889.
99. CHANG, W.-T., HSIEH, S.-H., YANG, F.-L. & CHEN, C.-S. 2008. Discrete Element Simulation of Collision-Rich Dynamics of Wet Granular Flows Down an Inclined Channel. *TSINGHUA SCIENCE AND TECHNOLOGY*, 13, 90-95.
100. BUIJTENEN, M. S. V., DEEN, N. G., HEINRICH, S., ANTONYUK, S. & KUIPERS, J. A. M. 2009. A Discrete Element Study of Wet Particle–Particle Interaction During Granulation in a Spout Fluidized Bed. *THE CANADIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING*, 87.
101. LIAN, C. Q., YAN, Z. G. & BEECHAM, S. 2010. Modelling Pervious Concrete under Compression Loading – a Discrete Element Approach. *Advanced Materials Research*, 168 - 170, 1590-1600.
102. LIU, X., MARTIN, C. L., DELETTE, G., LAURENCIN, J., BOUVARD, D. & DELAHAYE, T. 2011. Microstructure of porous composite electrodes generated by the discrete element method. *Journal of Power Sources*, 196, 2046-2054.
103. KANG, D. H., YUN, T. S., LAU, Y. M. & WANG, Y. H. 2012. DEM simulation on soil creep and associated evolution of pore characteristics. *Computers and Geotechnics*, 39, 98-106.
104. ALDUÁN, I., TENA, A. & OTADUY, M. A. 2009. Simulation of High-Resolution Granular Media. In: ANDÚJAR, C. & LLUCH, J. (eds.) *CEIG'09*. San Sebastián.
105. N.BELL, YU, Y. & MUCHA, P. J. 2005. Particle-Based Simulation of Granular Materials. In: ANJYO, K. & FALOUTSOS, P. (eds.) *Eurographics/ ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation*.
106. KIMBER, J. A., KAZARIAN, S. G. & ŠTĚPÁNEK, F. 2011. A fast algorithm for mass transfer on an unstructured grid formed by DEM particles. *Powder Technology*, 214, 415-422.
107. BENABBOU, A., BOROUCAKI, H., LAUG, P. & LU, J. 2009. Geometrical modeling of granular structures in two and three dimensions. Application to nanostructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 80, 425-454.
108. AN, X.-Z. 2007. Discrete Element Method Numerical Modelling on Crystalization of Smooth Hard Spheres Under Mechanical Vibration. *CHIN. PHYS. LETT.*, 24, 2032-2035.
109. LIN, C.-J., WEI, W.-C. J., IWAI, T., HONG, C.-W. & GREIL, P. 2000. Discrete Element Method (DEM) Simulation and Processing of Mo/Al₂O₃ Granules in a Fluidizing Bed. *Proc. Natl. Sci. Counc. ROC(A)*, 24, 394-404.
110. WANG, X. S., RAHMAN, F. & RHODES, M. J. 2008. Application of Discrete Element Method Simulation for Studying Fluidization of Nanoparticle Agglomerates. *THE CANADIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING*, 86, 514-522.
111. MAHABADI, O. K., GRASSELLI, G. & MUNJIZA, A. 2010. Y-GUI: A graphical user interface and pre-processor for the combined finite-

- discrete element code, Y2D, incorporating material heterogeneity. *Computers & Geosciences*, 36, 241-252.
112. XIANG, J., MUNJIZA, A. & LATHAM, J.-P. 2009. Finite strain, finite rotation quadratic tetrahedral element for the combined finite–discrete element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79, 946–978.
 113. LATHAM, J.-P., MINDEL, J., XIANG, J., GUISES, R., GARCIA, X., PAIN, C., GORMAN, G., PIGGOTT, M. & MUNJIZA, A. 2009. Coupled FEMDEM/Fluids for coastal engineers with special reference to armour stability and breakage. *Geomechanics and Geoengineering*, 4, 39 - 53.
 114. MUNJIZA, A., XIANG, J., GARCIA, X., LATHAM, J. P., D'ALBANO, G. G. S. & JOHN, N. W. M. 2010. The Virtual Geoscience Workbench, VGW: Open Source tools for discontinuous systems. *Particuology*, 8, 100-105.
 115. GARCÍA, X., PAVLIDIS, D., GORMAN, G. J., GOMES, J. L. M. A., PIGGOTT, M. D., ARISTODEMOU, E., MINDEL, J., LATHAM, J.-P., PAIN, C. C. & APSIMON, H. 2010. A two-phase adaptive finite element method for solid–fluid coupling in complex geometries. *Numerical Methods in fluids*.
 116. LATHAM, J.-P., MUNJIZA, A., GARCIA, X., XIANG, J. & GUISES, R. 2008. Three-dimensional particle shape acquisition and use of shape library for DEM and FEM/DEM simulation *Minerals Engineering*, 21, 797-805.
 117. GARCIA, X., LATHAM, J.-P., XIANG, J. & HARRISON, J. P. 2009. A clustered overlapping sphere algorithm to represent real particles in discrete element modelling. *Géotechnique*, 59, 779 –784.
 118. GUISES, R., XIANG, J., LATHAM, J.-P. & MUNJIZA, A. 2009. Granular packing: numerical simulation and the characterisation of the effect of particle shape. *Granular Matter*, 11, 281-292.
 119. GARCIA, X., AKANJI, L. T., BLUNT, M. J., MATTHAI, S. K. & LATHAM, J. P. 2009. Numerical study of the effects of particle shape and polydispersity on permeability. *Phys. Rev. E*, 80.
 120. VYAZMENSKY, A., STEAD, D., ELMO, D. & MOSS, A. 2010. Numerical Analysis of Block Caving-Induced Instability in Large Open Pit Slopes: A Finite Element/Discrete Element Approach. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 43, 21-39.
 121. MUNJIZA, A., XIANG, J., GARCIA, X., LATHAM, J. P., D'ALBANO, G. G. S. & JOHN, N. W. M. 2010. The Virtual Geoscience Workbench, VGW: Open Source tools for discontinuous systems. *Particuology*, 8, 100–105.
 122. VILLARD, P., CHEVALIER, B., HELLO, B. L. & COMBE, G. 2009. Coupling between finite and discrete element methods for the modelling of earth structures reinforced by geosynthetic. *Computers and Geotechnics*, 36 709-717.
 123. 2010. Key FEM-DEM papers [Online]. Available: <http://vgest.net/publications/key-femdem-papers/>.
 124. CHU, K. W., WANG, B., YU, A. B. & VINCE, A. 2009. CFD-DEM modelling of multiphase flow in dense medium cyclones. *Powder Technology*, 193, 235-247.
 125. CHU, K. W., WANG, B., YU, A. B., VINCE, A., BARNETT, G. D. & BARNETT, P. J. 2009. CFD–DEM study of the effect of particle density

- distribution on the multiphase flow and performance of dense medium cyclone. *Minerals Engineering*.
126. SHUNGO, N., HIROSHI, N., SHIGERU, U., JUNYA, K., RYO, I. & TATSURO, A. 2011. Simultaneous Three-dimensional Analysis of Gas–Solid Flow in Blast Furnace by Combining Discrete Element Method and Computational Fluid Dynamics. *ISIJ International*, 51, 41-50.
 127. GUO, Y., WU, C. Y., KAFUI, K. D. & THORNTON, C. 2011. 3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling. *Powder Technology*, 206, 177-188.
 128. GROF, Z., COOK, J., LAWRENCE, C. J. & ŠTĚPÁNEK, F. 2009. The interaction between small clusters of cohesive particles and laminar flow: Coupled DEM/CFD approach. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 66, 24-32.
 129. MAIO, F. P. D., RENZO, A. D. & TREVISAN, D. 2009. Comparison of heat transfer models in DEM-CFD simulations of fluidized beds with an immersed probe. *Powder Technology*, 193 257-265.
 130. ZHOU, H., MO, G., ZHAO, J. & CEN, K. 2011. DEM–CFD simulation of the particle dispersion in a gas–solid two-phase flow for a fuel-rich/lean burner. *Fuel*, 90, 1584-1590.
 131. FERNANDEZ, J. W., CLEARY, P. W., SINNOTT, M. D. & MORRISON, R. D. 2011. Using SPH one-way coupled to DEM to model wet industrial banana screens. *Minerals Engineering*, 24, 741-753.
 132. TSUJI, Y. 2007. Multi-scale modeling of dense phase gas-particle flow. *Chemical Engineering Science*, 62, 3410 - 3418.
 133. LATHAM, J.-P., MUNJIZA, A., MINDEL, J., XIANG, J., GUISES, R., GARCIA, X., PAIN, C., GORMAN, G. & PIGGOTT, M. 2008. Modelling of massive particulates for breakwater engineering using coupled FEM DEM and CFD. *Particuology*, 6, 572–583.
 134. GUI, N. & FAN, J. R. 2009. Numerical simulation of pulsed fluidized bed with immersed tubes using DEM–LES coupling method. *Chemical Engineering Science*, 64, 2590-2598.
 135. FENG, Y. T., HAN, K. & OWEN, D. R. J. 2010. Combined three-dimensional lattice Boltzmann method and discrete element method for modelling fluid–particle interactions with experimental assessment. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81, 229-245.
 136. FENG, Y. T., HAN, K. & OWEN, D. R. J. 2007. Coupled lattice Boltzmann method and discrete element modelling of particle transport inturbulent fluid flows: Computational issues. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 72, 1111-1134.
 137. CUNDALL, P. A. & L–STRACK, O. D. 1979. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29, 47-65.
 138. CUNDALL, P. A. 1988. Computer simulation of dense sphere assemblies. In: SATAKE, M. & JENKINS, J. T. (eds.) *Micro-mechanics of Granular Materials*. Elsevier.
 139. KUHN, M. R. 2003. A smooth convex three-dimensional particle for the Discrete Element Method. *J. Eng. Mech.*, 129, 539-547.
 140. TING, J. M., KHWAJA, M., MEACHUM, L. R. & ROWELL, J. D. 1993. An ellipse-based discrete element model for granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 17, 603-623.

141. FENG, Y. T., HAN, K. & OWEN, D. R. J. An advancing front packing of polygons, ellipses and spheres. *In*: COOK, B. K. & JENSEN, R. P., eds. Discrete Element Methods. Numerical Modeling of Discontinua, September 23-25 2002 Santa Fe, New Mexico, USA. American Society of Civil Engineers, 93-98.
142. FENG, Y. T., HAN, K. & OWEN, D. R. J. 2003. Filling domains with disks: an advancing front approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56, 699-713.
143. BAGI, K. 2005. Methods to generate random dense arrangements of particles. *Thematic meeting on numerical simulations*. Paris.
144. LÖHNER, R. & OÑATE, E. 2004. A general advancing front technique for filling space with arbitrary objects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61, 1977-1991.
145. LABRA, C. & OÑATE, E. 2008. High-density sphere packing for discrete element method simulations. *COMMUNICATIONS IN NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*.
146. JIANG, M. J., KONRAD, J. M. & LEROUEIL, S. 2003. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies. *Computers and Geotechnics*, 30, 579-597.
147. LUBACHEVSKY, B. D. 1991. How to Simulate Billiards and Similar Systems. *Journal of Computational Physics*, 94, 255 - 283.
148. LUBACHEVSKY, B. D. & STILLINGER, F. H. 1990. Geometric Properties of Random Disk Packings. *Journal of Statistical Physics*, 60.
149. 2012. *Periodic boundary conditions* [Online]. Available: <http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/md/md/node17.html> [Accessed April 2012].
150. BAGI, K. 2005. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter*, 7, 31-43.
151. WANG, C.-Y. & LIANG, V.-C. 1997. A packing generation scheme for the granular assemblies with planar elliptical particles. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 21, 347-358.
152. WANG, C.-Y., WANG, C.-F. & SHENG, J. 1999. A packing generation scheme for the granular assemblies with 3d ellipsoidal particles. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 23, 815-828.
153. BRITO, Y. P. 2007. *Implementación del empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos*. Tesis de Grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba.
154. SUTOU, A. & DAI, Y. 2002. Global optimization approach to unequal sphere packing problems in 3D. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 114 671 - 694.
155. FERREZ, J.-A. 2001. *Dynamic triangulations for efficient 3d simulation of granular materials*. Docteur ès Sciences, École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
156. HE, D., EKERE, N. N. & CAI, L. 2001. New statistic techniques for structure evaluation of particle packing. *Materials Science and Engineering*, A298, 209-215.

157. AN, X. Z., YANG, R. Y., DONG, K. J., ZOU, R. P. & YU, A. B. 2005. Micromechanical Simulation and Analysis of One-Dimensional Vibratory Sphere Packing. *Physical Review Letters*, 1-4.
158. AN, X. Z., YANG, R. Y., ZOU, R. P. & YU, A. B. 2008. Effect of vibration condition and inter-particle frictions on the packing of uniform spheres. *Powder Technology*, 188, 102-109.
159. BENABBOU, A., BOROUCHAKI, H. & P. LAUG, J. L. 2008. Sphere Packing and Applications to Granular Structure Modeling. *Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable*. Springer Berlin Heidelberg.
160. BEZRUKOV, A., STOYAN, D. & BARGIEL, M. 2001. Spatial statistics for simulated packings of spheres. *Image Anal. Stereol.*, 20, 203-206.
161. LI, S. P. & NG, K.-L. 2003. Monte Carlo study of the sphere packing problem. *Physica A*, 321, 359 – 363.
162. NURMELA, K. J. 1997. *Stochastic Optimization Methods in Sphere Packing and Covering Problems in Discrete Geometry and Coding Theory*, Picaset Oy.
163. REBOUL, N., VINCENS, E. & CAMBOU, B. 2008. A statistical analysis of void size distribution in a simulated narrowly graded packing of spheres. *Granular Matter*, 10, 457-468.
164. TORQUATO, S., TRUSKETT, T. M. & DEBENEDETTI, P. G. 2000. Is Random Close Packing of Spheres Well Defined? *Physical Review Letters*, 84.
165. WEISSTEIN, E. W. 2010. *Sphere Packing* [Online]. Available: <http://mathworld.wolfram.com/SpherePacking.html>.
166. WILLIAMS, S. R. & PHILIPSE, A. P. 2003. Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction. *Physical Review E*, 67, 1-9.
167. WU, A. K. C. & LEE, S. H.-K. 2000 Sphere packing algorithm for heat transfer studies. *Numerical Heat Transfer Part A: Applications*, 37, 631-651.
168. DONZÉ, F. V., RICHEFEU, V. & MAGNIER, S.-A. 2009. Advances in Discrete Element Method applied to Soil, Rock and Concrete Mechanics, in: State of the art of geotechnical engineering. *Electronic Journal of Geotechnical Engineering* [Online].
169. GAO, G.-J., BLAWZDZIEWICZ, J. & O'HERN, C. S. 2007. Testing the equal-probability assumption for jammed particle packings. *Rep. Inst. Fluid Science*, 19.
170. LIN, X. & NG, T.-T. 1995. Contact detection algorithms for three-dimensional ellipsoids in discrete element modelling *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 19, 653-659.
171. OUADFEL, H. & ROTHENBURG, L. 2001. Stress-force-fabric relationship for assemblies of ellipsoids. *Mechanics of Materials*, 33, 201-221.
172. WANG, W., WANG, J. & KIM, M.-S. 2001. An algebraic condition for the separation of two ellipsoids. *Computer Aided Geometric Design*, 18 531-539.
173. HOGUE, C. 1998. Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries. *Engineering Computations*, 15, 374-390.

174. CHANG, S.-W. & CHEN, C.-S. 2008. A non-iterative derivation of the common plane for contact detection of polyhedral blocks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 74, 734–753.
175. CHOI, Y.-K., LI, X., RONG, F., WANG, W. & CAMERON, S. 2006. Computing the Minimum Directional Distance Between Two Convex Polyhedra. Hong Kong University.
176. CUNDALL, P. A. 1988. 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 Science and Geomechanics Abstract*, 25, 107-116.
177. MIRTICH, B. 1998. V-Clip: fast and robust polyhedral collision detection. *ACM Transactions on Graphics*, 17, 177 - 208.
178. HAN, K., FENG, Y. T. & OWEN, D. R. J. 2006. Polygon-based contact resolution for superquadrics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66, 485-501.
179. KUHN, M. R. A torus primitive for particle shapes with the Discrete Element Method. In: COOK, B. K. & JENSEN, R. P., eds. Discrete Element Methods. Numerical Modeling of Discontinua, September 23-25 2002 Santa Fe, New Mexico, USA. American Society of Civil Engineers, 42-46.
180. POURNIN, L. 2005. *On the behavior of spherical and non-spherical grain assemblies, its modeling and numerical simulation*. Docteur ès Sciences, École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
181. HOPKINS, M. A. Discrete Element Modeling based on mathematical morphology. In: COOK, B. K. & JENSEN, R. P., eds. Discrete Element Methods. Numerical Modeling of Discontinua, September 23-25 2002 Santa Fe, New Mexico, USA. American Society of Civil Engineers, 38-41.
182. ALONSO-MARROQUÍN, F. & WANG, Y. 2008. An efficient algorithm for granular dynamics simulations with complex-shaped objects. *Cond-mat. Mtrl-sci*.
183. JOHNF.PETERS, HOPKINS, M. A., KALA, R. & WAHL, R. E. 2009. Apoly-ellipsoid particle for non-spherical discrete element method. *Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software*, 26, 645-657.
184. DAS, N., THOMAS, S., KOPMANN, J., DONOVAN, C., HURT, C. & SUKUMARAN, B. 2011. Modeling Granular Particle Shape Using Discrete Element Method. In: HAN, J. & ALZAMORA, D. A. (eds.) *Geo-Frontiers 2011*. Dallas, Texas.
185. SALLAM, A. M. & ASHMAWY, A. K. 2009. The Modified Overlapping Rigid Clusters Method for Modelling Angular Particles Using DEM.
186. PRICE, M., MURARIU, V. & MORRISON, G. 2007. Sphere clump generation and trajectory comparison for real particles. *DEM 2007*. Brisbane.
187. MUNJIZA, A., LATHAM, J. P. & JOHN, N. W. M. 2003. 3D dynamics of discrete element systems comprising irregular discrete elements—integration solution for finite rotations in 3D. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56, 35-55.

188. TAVAREZ, F. A. & PLESHA, M. E. 2006. Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70 379 - 404.
189. SAUCIER, R. 2000. Computer Generation of Statistical Distributions. ARMY RESEARCH LABORATORY.
190. GALASSI, M., DAVIES, J., THEILER, J., GOUGH, B., JUNGMAN, G., BOOTH, M. & ROSSI, F. 2006. GNU Scientific Library. Reference Manual. 1.8 ed.
191. BERG, M., KREVELD, M., OVERMARS, M. & SCHWARZKOPF, O. 2000. *Computational Geometry. Algorithms and Applications*, Springer.
192. GOODMAN, J. E. & O'ROURKE, J. (eds.) 1997. *Discrete and Computational Geometry*, Boca Ratón: CRC Press.
193. MA, Z. S., FENG, C., LIU, T. P. & L, S. H. 2011. A GPU Accelerated Continuous-Based Discrete Element Method for Elastodynamics Analysis. *Advanced Materials Research*, 320, 329-334.
194. SCHWARTZ, S. R., RICHARDSON, D. C., MICHEL, P. & WALSH, K. W. 2011. Modeling the granular surface and interior of small bodies using the Soft-sphere Discrete Element Method: implementation in the N-body code pkdgrav and tests. *EPSC Abstracts*, 6.
195. FERREZ, J. A. & LIEBLING, T. 2001. Parallel DEM Simulations of Granular Materials High-Performance Computing and Networking. *In: HERTZBERGER, B., HOEKSTRA, A. & WILLIAMS, R. (eds.)*. Springer Berlin / Heidelberg.
196. KAČENIAUSKAS, A., KAČIANAUSKAS, R., MAKNICKAS, A. & MARKAUSKAS, D. 2011. Computation and visualization of discrete particle systems on gLite-based grid. *Advances in Engineering Software*, 42, 237-246.
197. KAČIANAUSKAS, R., MAKNICKAS, A., KAČENIAUSKAS, A., MARKAUSKAS, D. & BALEVIČIUS, R. 2010. Parallel discrete element simulation of poly-dispersed granular material. *Advances in Engineering Software*, 41, 52-63.
198. HUANG, Q. & YANG, C. 2011. Optimizing grid computing configuration and scheduling for geospatial analysis: An example with interpolating DEM. *Computers & Geosciences*, 37, 165-176.
199. WANG, F., FENG, Y. T. & OWEN, D. R. J. 2004. PARALLEL ANALYSIS OF COMBINED FINITE/DISCRETE ELEMENT SYSTEMS ON PC CLUSTER. *Chinese Journal of Mechanics Press*, 20.
200. WANG, F., FENG, Y. T. & OWEN, D. R. J. 2003. Interprocessor communication schemes in parallel finite-discrete element analysis on PC clusters. *Engineering Computations*, 20, 1065-1084.
201. MAKNICKAS, A., KACENIAUSKAS, A., KACIANAUSKAS, R., BALEVICIUS, R. & DŽIUGYS, A. 2006. ParallelDEMSoftwareforSimulationofGranular Media. *INFORMATICA*, 17, 207–224.
202. MUNJIZA, A. & ANDREWS, K. R. F. 1998. NBS contact detection algorithm for bodies of similar size. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43, 131-49.
203. SAMET, H. 1994. *The design and analysis of spatial data structures*, Addison-Wesley.

204. MÖLLER, T., HAINES, E. & PETERS, A. K. 1999. *Real-Time Rendering*, A. K. Peters.
205. YUNG-MING, C., WENSHENG, C. & XIURUN, G. Procedure to detect the contact of three-dimensional blocks using penetration edges method. *In*: COOK, B. K. & JENSEN, R. P., eds. *Discrete Element Methods. Numerical Modeling of Discontinua*, September 23-25 2002 Santa Fe, New Mexico, USA. American Society of Civil Engineers, 79-85.
206. BARBOSA, R. E. 1990. *Discrete element models for granular materials and rock masses*. Ph. D., University of Illinois.
207. G. NEZAMI, E., M. A. HASHASH, Y., ZHAO, D. & GHABOUSSI, J. 2006. Shortest link method for contact detection in discrete element method. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 30, 783-801.
208. NEZAMI, E. G., HASHASH, Y. M. A., ZHAO, D. & GHABOUSSI, J. 2004. A fast contact detection algorithm for 3-D discrete element method. *Computers and Geotechnics*, 31 575-587.
209. MÜLLER, D. 1996. *Techniques informatiques efficaces pour la simulation de milieux granulaires par des méthodes d'éléments distincts*. Docteur ès sciences, École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
210. ROJEK, J., ZARATE, F., SARACIBAR, C. A. D., GILBOURNE, C. & VERDOT, P. 2005. Discrete element modelling and simulation of sand mould manufacture for the lost foam process. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62, 1421-1441.
211. FAVIER, J. F., ABBASPOUR-FARD, M. H., KREMMER, M. & RAJI, A. O. 1999. Shape representation of axi-symmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles. *Engineering Computations*, 16, 467-480.
212. KODAM, M., BHARADWAJ, R., CURTIS, J., HANCOCK, B. & WASSGREN, C. 2009. Force model considerations for glued-sphere discrete element method simulations. *Chemical Engineering Science*, In press.
213. HUDSON, J. A. (ed.) 1993. *Comprehensive Rock Mechanics*.
214. YAO, M. & ANANDARAJAH, A. 2003 Three-Dimensional Discrete Element Method of Analysis of Clays. *Journal of Engineering Mechanics*, 585-596.
215. MORALES, I. P. 2006. *Método de Elementos Distintos*. Tesis de grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba.
216. MORALES, I. P., VALERA, R. R. & BRITO, Y. P. 2008. Generación o empaquetamiento de medios discretos para el Método de Elementos Distintos. *Ingeniería Civil CEDEX*, 152, 119-124.
217. MORALES, I. P., VALERA, R. R., BRITO, Y. P., CASAÑAS, H. D.-G. & MORFA, C. R. 2009. Procedimiento de empaquetamiento de partículas genéricas para el Método de Elementos Discretos. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 25, 95-110.
218. ORTEGA, J. A. H. 2003. *Simulación numérica de procesos de llenado mediante elementos discretos*. Universidad Politécnica de Cataluña.
219. VALERA, R. R. 2007. *Biblioteca de clases para su uso en la fase de empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos*. Licenciado Tesis de Grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba.

220. SONG, Y., TURTON, R. & KAYIHAN, F. 2006. Contact detection algorithms for DEM simulations of tablet-shaped particles. *Powder Technology*, 161 32 - 40.
221. SOWERS, G. B. & SOWERS, G. F. 1972. *Introducción a la Mecánica de Suelos y Cimentaciones*, Limusa - Wiley, S. A.
222. CRAIG, R. F. 2004. *Soil Mechanics*, Taylor & Francis.
223. 2008. MacroPac.
224. ALI, A. M., MATAS, M. D., YORK, P. & ROWE, R. C. 2009. Influence of pellet aggregate populations on the variability of pelletfilling into hard shell capsules: A comparison of experiment and computer simulation. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 38, 197-205.
225. CHOI, J. L. & GETHIN, D. R. 2009. A discrete finite element modelling and measurements for powder compaction. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17.
226. 2010. *Pack-Any-Shape* [Online]. Available: <http://www.pack-any-shape.com>.
227. LUBAEHEVSKY, B. D. & STILLINGER, F. H. 1990. Geometric Properties of Random Disk Packings. *Journal of Statistical Physics*, 60.
228. JIA, X., GAN, M., WILLIAMS, R. A. & RHODES, D. 2007. Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities. *Powder Technology*, 174, 10-13.
229. JIA, X. & WILLIAMS, R. A. 2001. A packing algorithm for particles of arbitrary shapes. *Powder Technology*, 120, 175-186.
230. 2011. DEMPack.
231. ZSAKI, A. M. 2009. An efficient method for packing polygonal domains with disks for 2D discrete element simulation. *Computers and Geotechnics*, 36, 568-576.
232. LAROSE, D. T. 2006. *Data mining methods & models*, John Wiley & Sons.
233. PÉREZ MORALES, I., DE FARIAS, M. M., VALERA, R. R., MORFA, C. R. & MARTÍNEZ CARVAJAL, H. E. 2016. Contributions to the generalization of advancing front particle packing algorithms. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, n/a-n/a.
234. ZUMEL, N. & MOUNT, J. 2014. *Practical Data Science with R*, Manning.
235. PÉREZ MORALES, I., ROSELLÓ VALERA, R., RECAREY MORFA, C. & MUNIZ DE FARIAS, M. 2016. Dense packing of general-shaped particles using a minimization technique. *Computational Particle Mechanics*, 1-15.