

# ANÁLISIS DE LA FRONTERA DE CONVERGENCIA EN MÉTODOS CUASI-NEWTON CON MATRICES DISPERSAS Y SU APLICACIÓN A LA GEOMEcánICA DE VOLADURAS

## CONVERGENCE FRONTIER ANALYSIS OF SPARSE-MATRIX QUASI-NEWTON METHODS: APPLICATIONS TO ROCK BLASTING GEOMECHANICS

**Fabian León<sup>1,\*</sup>, Luis Rojas<sup>1</sup>, Cristian Gonzalez<sup>2</sup>, Beatriz Hernández<sup>3</sup>, José García<sup>1</sup>**

(1) Doctorado en Industria Inteligente, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2362804, Chile

(2) Doctorado en Ciencias, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

(3) Centro de Observación de la Tierra, Facultad de Ciencias, Ingeniería y Tecnología, Universidad Mayor, Santiago 8580745, Chile  
(e-mail: fabian.leon@pucv.cl)

Recibido: 13/01/2024 - Evaluado: 18/02/2024 - Aceptado: 20/03/2024

<https://doi.org/10.65093/aci.v15.n2.2024.13>

### RESUMEN

Este estudio delimita la *frontera de convergencia* en algoritmos cuasi-Newton dispersos para simulaciones de voladura. Mediante cotas Lipschitz-Hölder se obtienen radios de Kantorovich que indican cuándo la matriz secante sigue generando contracción. Se propone un BFGS limitado con conmutación adaptativa a Newton exacto al aproximarse a la frontera. Un *dataset* sintético de 25 000 realizaciones, calibrado con minas de caliza, cobre e hierro, muestra que el radio de convergencia crece 35 % y el tiempo de cómputo disminuye tres órdenes de magnitud frente a Newton denso. El mapa iterativo identifica zonas propensas a fractura frágil, aportando un criterio preventivo para ajustar la malla de perforación y la carga explosiva. Así, se enlaza la teoría de ecuaciones no lineales con prácticas operativas, habilitando simulaciones estables y escalables en HPC.

### ABSTRACT

We delimit the *convergence frontier* of sparse-matrix quasi-Newton algorithms for rock-blasting simulations. Lipschitz/Hölder bounds yield Kantorovich radii that mark when the secant matrix preserves contraction. A limited-memory BFGS with adaptive switching to full Newton is introduced as the frontier is approached. A synthetic dataset of 25 000 cases, calibrated with limestone, copper and iron mines, reveals a 35 % larger convergence radius and a three-order reduction in runtime versus dense Newton. The iterative map exposes fragile-fracture regions, providing a preventive rule for drill-pattern and charge design. The results bridge nonlinear analysis with field practice, enabling stable, scalable HPC simulations for modern blast-engineering workflows.

Palabras clave: métodos cuasi-Newton, matrices dispersas, frontera de convergencia, voladura de rocas  
Keywords: quasi-Newton methods, sparse matrices, convergence frontier, rock blasting

## INTRODUCCIÓN

La voladura de macizos rocosos —tanto en minería subterránea como a cielo abierto— constituye un problema *multifísico* donde se acoplan fenómenos de impacto, propagación de ondas, fractura dinámica y transporte de gases detonantes (Han *et al.*, 2020; Sellers *et al.*, 2012). Modelar numéricamente este proceso requiere resolver sistemas no lineales de gran tamaño, derivados de formulaciones en diferencias/elementos finitos, bajo estrictos condicionamientos de memoria y tiempo de cómputo (Monjezi *et al.*, 2012; Morin & Ficarazzo, 2006). En este contexto, los algoritmos *cuasi-Newton* que emplean matrices *dispersas* permiten un equilibrio entre precisión y coste, pues evitan recomputar el Jacobiano completo en cada iteración y, al mismo tiempo, retienen convergencia superlineal (Arthur & Kaunda, 2020; Kumar *et al.*, 2023).

Aunque la eficiencia de los métodos cuasi-Newton es reconocida, su *convergencia* depende de supuestos de regularidad (Lipschitz/Hölder) que no siempre se satisfacen en zonas de daño rápido, fractura frágil o transiciones elastoplásticas pronunciadas (Bird *et al.*, 2023; Hosseini *et al.*, 2023). En tales regiones, la matriz secante puede dejar de ser un buen sustituto de la jacobiana, originando *iteraciones fallidas* o incluso divergencias explosivas. Por ello surge la necesidad de determinar la llamada *frontera de convergencia*: el subconjunto mínimo del dominio en el que las hipótesis garantizan la contracción del método (Singh & Agrawal, 2022).

El propósito central de este estudio es delimitar cuantitativamente la frontera de convergencia de un esquema cuasi-Newton con matrices dispersas en la simulación numérica de voladuras, de modo que se logre el máximo rendimiento computacional posible sin sacrificar la estabilidad del cálculo frente a la aparición de modos de fractura frágil.

## ESTADO DEL ARTE

En esta sección, se describe la lógica y la importancia de estudiar la *frontera de convergencia* en métodos cuasi-Newton aplicados a problemas con *matrices dispersas* de gran dimensión, típicamente presentes en simulaciones geomecánicas de voladuras y otros entornos industriales donde la extracción de información derivativa es costosa. La exposición se organiza en dos grandes apartados: los fundamentos teórico-matemáticos que definen la frontera de convergencia y la implicancia de estructuras dispersas en mallas de alta dimensión.

### Fundamentos de la frontera de convergencia

La *frontera de convergencia* (o *convergence boundary*) alude al conjunto mínimo de *condiciones* que garantizan la convergencia de un método cuasi-Newton incluso bajo modificaciones sucesivas de la aproximación al Jacobiano. En términos matemáticos, si el operador no lineal cumple con una serie de *hipótesis* lo suficientemente *débiles*, el método preserva su capacidad de converger local o semilocalmente (Shehu *et al.*, 2023; Han *et al.*, 2020; Sellers *et al.*, 2012).

- *Acotaciones Lipschitz o Hölder:*

La suavidad local del operador constitutivo que describe la geomecánica de la roca puede ser formulada mediante condiciones Lipschitz (lineales) o más débiles, como las tipo Hölder (Bameri *et al.*, 2021; Gheibie *et al.*, 2009). Dichas condiciones controlan la variación de la derivada (o secante) en la vecindad de la solución. Matemáticamente, para un operador  $F: X \rightarrow X$  (donde  $X$  es un espacio de Banach), se espera encontrar una constante  $L$  (o  $K$  en el caso Hölder) que cumpla

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq L \|x - y\| \quad (1a)$$

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq K \|x - y\|^{\alpha} \quad (1b)$$

con  $\alpha \in (0, 1)$  en el caso Hölder. Bajo tales supuestos, el análisis de convergencia semilocal o local se extiende a operadores con *regularidad limitada*, salvando así problemas típicos donde la derivada sufre discontinuidades parciales (Hudaverdi *et al.*, 2011; Majid *et al.*, 2015).

- *Regiones críticas:*

Dentro del dominio de la solución, hay zonas en las que la derivada real (o su aproximación) *colapsa*, p.ej. por fracturas súbitas en la roca (fenómenos de discontinuidad del operador) (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Hosseine et al., 2023). Estas *regiones críticas* obligan a que el método cuasi-Newton deba ajustarse (reactualizar el Jacobiano aproximado) o arriesgar la pérdida de las propiedades de contracción. En la teoría de la *frontera de convergencia*, se definen radios de validación —radios que acotan la vecindad donde todavía no aparecen dichas degeneraciones— y se establecen condiciones de “saltos” de la norma de la derivada (Morin & Ficarazzo, 2006; Onederra et al., 2013).

En suma, esta caracterización permite identificar hasta qué punto la *relajación* de las hipótesis sobre la suavidad del operador  $F$  y de su secante mantiene una convergencia fiable. Más allá de la frontera, el método cuasi-Newton puede divergir o requerir comutaciones hacia esquemas más robustos (p.ej. Newton clásico o técnicas híbridas) L. et al. (2025); Bird et al. (2023).

### Estructuras dispersas en grandes mallas

En el contexto de simulaciones de voladura y otros problemas industriales de alta dimensión (grandes mallos), las matrices jacobianas tienden a ser extremadamente *dispersas (sparse)* y presentan un patrón de banda restringida o bloques estructurados (Han et al., 2020; Kononenko et al., 2023). Para reducir la complejidad  $\mathcal{O}(n^3)$  de recalcular/invertir la derivada en cada iteración, se recurre a *actualizadores cuasi-Newton* (por ejemplo, fórmulas de Broyden, DFP, BFGS inverso), que se nutren de *información secante local*:

$$B_{k+1} = B_k + \Delta_k \quad (2)$$

donde  $\Delta_k$  representa una *corrección* basada en evaluaciones sucesivas de  $F(x)$  (Shehu et al., 2023; Segui & Higgins, 2002).

- *Evita recalcular la jacobiana completa:*

Cuando la malla es de gran dimensión, calcular  $\nabla F(x)$  a cada paso es prohibitivo (Shim et al., 2009). El método cuasi-Newton, con *estructuras dispersas*, se beneficia al sólo actualizar partes críticas del Jacobiano, *evadiendo* una factorización integral de la matriz (Himanshu et al., 2021). De este modo, se disminuye la sobrecarga computacional sin sacrificar en exceso la precisión local.

- *Correcciones locales (Broyden, DFP, etc.):*

El uso de secantes locales ofrece correcciones parciales sobre la matriz aproximada  $B_k$  que retienen la *dispersión*, al no llenar los ceros iniciales de la matriz. Este mecanismo aprovecha la estructura de banda estrecha para que las actualizaciones no “rompan” el perfil disperso (Mulenga & Kaunda, 2020; Bameri et al., 2021), y así el método preserve la eficiencia. Sin embargo, la convergencia depende de que tales correcciones cumplan propiedades de *contracción* y no se salgan del radio de validez Lipschitz/Hölder (Arthur & Kaunda, 2020; Shehu et al., 2023).

Por tanto, analizar la *frontera de convergencia* en este tipo de escenarios (alto costo computacional, irregularidades en la derivada, posible fractura súbita) demanda estudiar el balance entre:

(Hipótesis mínimas de suavidad local)  $\Leftrightarrow$  (Forma de la corrección secante en mallas dispersas).

Mantener este balance adecuado permite sostener la convergencia cuasi-Newton en problemas reales, como la simulación de voladuras y estabilidad de taludes, sin forzar el recálculo de la matriz completa a cada paso (Nobahar et al., 2024; Chandras et al., 2022; Vokhmin et al., 2021).

## Mecanismos de falla y fractura en roca

La presencia de discontinuidades en el macizo rocoso y los distintos rangos de resistencia mecánica conllevan *dos regímenes* importantes bajo carga dinámica de la voladura. De manera general, se distinguen:

- *Respuesta elasto-plástica:*

En muchos casos (rocas con ductilidad moderada o con microfisuras preexistentes), la ley constitutiva mantiene *derivadas suaves* en un entorno local. Es decir, el operador geomecánico  $F(x)$  (que describe las tensiones y deformaciones resultantes) no experimenta discontinuidades bruscas sino que exhibe un comportamiento *plástico* tras superar el límite elástico (Han *et al.*, 2020; Budkov *et al.*, 2023). Este régimen permite aplicar hipótesis de Lipschitz o de contracción local, facilitando métodos iterativos robustos que se benefician de actualizaciones secantes Onederra *et al.* (2013); Arthur & Kaunda, 2020).

- *Transiciones frágiles:*

En situaciones donde la roca tiene escasa ductilidad o presenta fracturas incipientes, pueden inducirse zonas de alta concentración de tensiones. Dichas regiones generan *quiebres súbitos* en la curva constitutiva, rompiendo la suavidad local y provocando caídas abruptas en la rigidez (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Nobahar *et al.*, 2024). Este patrón se asemeja a la fractura frágil, en la que la derivada del operador puede "colapsar" (tiende a infinito o pierde continuidad). Desde la perspectiva cuasi-Newton, esta discontinuidad en la derivada merma la efectividad de las aproximaciones secantes, pues las actualizaciones de la matriz  $B_k$  (o  $H_k$ ) dejan de ser válidas sin un reensamblaje más global (Bird *et al.*, 2023); Bameri *et al.*, 2021).

En ambos casos, el *mecanismo de fractura* repercute directamente en la *frontera de convergencia*. Para la fase elasto-plástica, la demanda de regularidad (p.ej. Lipschitz local) es relativamente asequible; no obstante, en el régimen frágil, la *variación excesiva de la rigidez* empuja al método iterativo fuera de la región donde se satisfacen las hipótesis semilocales (Hosseini *et al.*, 2023; Gheibie *et al.*, 2009). Como consecuencia, la aproximación secante se degrada y surgen iteraciones fallidas o inestables (Han *et al.*, 2020; Singh *et al.*, 2015). De allí la necesidad de caracterizar estas transiciones para saber en qué rangos de deformación resulta fiable la actualización cuasi-Newton sin restar convergencia.

## Implicaciones computacionales

La identificación clara de la *frontera de convergencia* tiene múltiples consecuencias para la eficiencia y escalabilidad de los algoritmos iterativos en contextos de geomecánica:

- *Reducción de iteraciones fallidas:*

Conocer a priori la región en la que el método cuasi-Newton puede divergir (debido a un cambio drástico en la ley constitutiva) permite diseñar un *criterio de cambio* o *switch adaptativo* (Chandrasas *et al.*, 2022; Shehu *et al.*, 2023). En la práctica, esto se traduce en que, al detectar que la norma del error o de la actualización de la secante  $B_k$  rebasa cierto umbral, la iteración pueda conmutar temporalmente a un *Newton robusto* (o incluso a un método stepping parcial) antes de que el método se torne inestable. Esta estrategia híbrida minimiza los costos de reempezar iteraciones o rehacer la factorización completa de la matriz dispersa (Morin & Ficarazzo, 2006; Onederra *et al.*, 2013).

- *Escalabilidad en HPC (High-Performance Computing):*

El tratamiento de *matrices dispersas* (con banda estrecha) es ventajoso en sistemas de alto rendimiento, pues se optimiza el paralelismo y la memoria (Han *et al.*, 2020; Kononenko *et al.*, 2023). Sin embargo, si la frontera de convergencia no está bien delimitada, pueden producirse múltiples *fallos iterativos* o divergencias locales que penalizan el rendimiento global. Al caracterizar dicha frontera con precisión (usando, por ejemplo, cotas Lipschitz/Hölder y radios de Kantorovich), se logra un *trade-off* adecuado

entre la velocidad de cómputo (cuasi-Newton disperso) y la *estabilidad numérica* (Gheibie *et al.*, 2009; Bird *et al.*, 2023). En última instancia, esto maximiza la productividad en simulaciones voluminosas de voladura o fractura de rocas, donde se exigen iteraciones rápidas y confiables en escalas de millones de grados de libertad.

De este modo, los esquemas iterativos, apoyados en modelos secantes que explotan la *dispersión* matricial y las hipótesis geomecánicas mínimas, pueden operar con mayor robustez en HPC y, al mismo tiempo, evitar el cálculo integral de la derivada en cada paso. Sin la noción de la *frontera de convergencia*, el ingeniero de voladura o el analista numérico se arriesga a iteraciones perpetuas o a resultados inviables cuando la roca entra en régimen frágil (Roy *et al.*, 2023; Bameri *et al.*, 2021; Rojas *et al.*, 2025; Cortés *et al.*, 2024) Por ello, la comprensión de los mecanismos de falla en roca y sus implicaciones en la convergencia constituyen un pilar esencial en el diseño de *estrategias híbridas* que combinan la eficiencia del cuasi-Newton con la solidez del método Newton clásico cuando la fractura se intensifica.

## MATERIALES Y MÉTODOS

Esta sección detalla la infraestructura de cómputo, el modelo físico-matemático, el algoritmo cuasi-Newton disperso y el procedimiento para generar el *dataset sintético calibrado*, de modo que las pruebas reproduzcan con fidelidad las condiciones de campo reportadas en la literatura reciente de voladura de rocas.

### Plataforma de cómputo y compiladores

Los experimentos se ejecutaron sobre un clúster HPC de 64 nodos, cada uno con dos procesadores AMD EPYC 7742 (64 c/2.25 GHz) y 512 GB RAM. El código se compiló con GCC 13.2.0 + OpenMPI 4.1.6, activando -O3 -fno-math-errno -ffast-math. Para álgebra dispersa se empleó PETSc 3.20, lo que permite factorización incompleta ILU(0) y precondicionadores Additive Schwarz —configuración habitual en simulaciones de gran escala (Kononenko *et al.*, 2023). El *solver* denso usado como referencia utiliza LAPACK/64 threads; su creciente costo cúbico  $O(n^3)$  servirá de línea base en la Fig. 1.

### Modelo constitutivo y discretización

El macizo rocoso se describe mediante un modelo *elasto-plástico viscodinámico* con:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} + \eta \dot{\varepsilon}_{ij} \quad (3)$$

donde  $C_{ijkl}$  codifica la rigidez degradable bajo daño (isotropía inicial y ablandamiento exponencial). Para capturar fractura frágil se introduce un *factor de reducción de módulo* dependiente de la densidad de microgrietas (Bird *et al.*, 2023; Hosseini *et al.*, 2023). El dominio tridimensional (bloque  $10 \times 10 \times 12 \text{ m}^3$ ) se discretiza con elementos tetraédricos P1, arrojando hasta  $n = 1.2 \times 10^6$  DOF e induciendo matrices jacobianas de anchura de banda  $\approx 30$ , altamente esparsas (Han *et al.*, 2020; Vokhmin *et al.*, 2021).

### Algoritmo cuasi-Newton disperso

Sea  $F(u) = 0$  el sistema no lineal. A partir de una aproximación inicial  $B_0 \approx (\nabla F)^{-1}$  obtenida con secuencias de factorización incompleta, se aplica la actualización *BFGS limitada* dispersa:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{(B_k s_k - y_k) s_k^\top B_k}{s_k^\top B_k s_k} + \frac{y_k y_k^\top}{s_k^\top y_k}, \quad (4)$$

$$s_k = u_{k+1} - u_k, \quad y_k = F(u_{k+1}) - F(u_k)$$

preservando el patrón de ceros de  $B_k$  (Morin & Ficarazzo, 2006; Gheibie *et al.*, 2009). Cuando  $\|B_{k+1}\|$  o  $\|F(u_{k+1})\|$  superan un umbral adaptativo  $\gamma$ , se conmuta a un paso de Newton pleno con Jacobiano exacto; ello evita que la iteración atraviese la *frontera de convergencia* detectada empíricamente (Chandras *et al.*, 2022; Shehu *et al.*, 2023).

### Generación del dataset sintético calibrado

Para reproducir la variabilidad de litologías y diseños de perforación reportados en minas de caliza, cobre y hierro, se sintetizaron  $2.5 \times 10^4$  realizaciones Monte Carlo siguiendo:

- Mecánica*: módulos  $E \sim N(70 \text{ GPa}, 15 \text{ GPa})$  y cohesión  $c \sim U(5, 12) \text{ MPa}$  —rangos derivados de pruebas *in-situ* (Majid *et al.*, 2015; Bameri *et al.*, 2021).
- Voladura*: burden  $B \sim N(3.5, 0.4) \text{ m}$ , espaciamiento  $S/B \sim U(1.2, 1.8)$  y carga lineal  $\omega \sim N(5.8, 0.6) \text{ kg/m}$  (Roy *et al.*, 2023; Chen *et al.*, 2021).
- Daño inicial*: índice de fractura  $D_0 \sim \text{Beta}(2, 5)$  para representar macizos desde íntegros hasta fuertemente diaclasados (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Nobahar *et al.*, 2024).

Cada muestra alimenta la malla FEM, genera su propio jacobiano esparso y se somete al esquema iterativo. Así se obtienen las nubes de puntos que originan las Figuras 2 y 3.

### Diseño experimental

Se comparan cuatro configuraciones:

- QN-*seguro*: puntos iniciales lejos de la frontera, sin conmutación.
- Newton-*seguro*: referencia densa, mismo punto inicial.
- QN-*cerca frontera*: puntos perturbados hacia zonas de rigidez degradada.
- Newton-*cerca frontera*: control denso equivalente.

Las métricas evaluadas son:

$\text{Iter}$ , número de iteraciones hasta  $\|F(u_k)\| < 10^{-10}$

$\text{CPU}$ , tiempo de cómputo total (log-scale).

$\text{Radio } H-L$ , radio efectivo en el que las condiciones Hölder siguen válidas, estimado por la razón  $\|\gamma\|/\|S\|^{\alpha}$  (Bird *et al.*, 2023).

Cada experimento se repite  $N = 50$  veces por configuración y tamaño de malla; los intervalos de confianza (95 %) se representan con bandas semitransparentes en los gráficos.

El protocolo anterior cuantifica de forma controlada cómo el algoritmo quasi-Newton disperso —equipado con conmutación adaptativa— extiende el *radio de convergencia* y reduce el coste comparado con Newton denso. síntesis estadística sobre  $2.5 \times 10^4$  escenarios garantizan robustez y relevancia, aportando evidencia sólida para optimizar prácticas de diseño de voladura en minas modernas.

### Modelo constitutivo y discretización

*Marco termodinámico*. Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  el dominio del macizo. Partiendo de la segunda ley de la termodinámica y postulando la función potencial de Helmholtz  $\psi(\varepsilon_{ij}, D)$ , se obtiene la relación constitutiva visco-elasto-plástica

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{ij}} + \eta \dot{\varepsilon}_{ij}, \quad \dot{D} = g(\sigma_{ij}, D), \quad (5)$$

donde  $D \in [0, 1]$  es la variable interna de daño (densidad de microgrietas) y  $g$  el potencial de evolución (Bird *et al.*,

2023; Hosseini *et al.*, 2023). Adoptando  $\psi = 1/2 (1 - D)^\beta C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}$  con  $\beta > 1$  (ablandamiento exponencial) se deriva

$$\sigma_{ij} = (1 - D)^\beta C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \eta \varepsilon_{ij}, \quad (6)$$

extensión del modelo lineal de (5). Para cerrar el problema se usa el criterio de fluencia de Drucker–Prager con plasticidad perfecta; la regularidad Hölder de grado  $\alpha \approx 0.7$  en los gradientes de  $\sigma_{ij}$  queda garantizada para  $0 < D < 1$  (3).

*Ecuación fuerte.* La cinemática cuasiestática bajo detonación rápida se aproxima por

$$-\nabla \cdot [(1 - D)^\beta C : \nabla u + \eta \nabla \dot{u}] = f \quad \text{en } \Omega, \quad (7)$$

sujeta a  $u = u_0$  en  $\Gamma_D$  y  $[(1 - D)^\beta C : \nabla u + \eta \nabla \dot{u}] n = t_N$  en  $\Gamma_N$ , con  $f$  densidad de fuerza equivalente de explosivo.

*Formulación débil y discretización FEM.* Multiplicando (7) por  $v \in H_0^1(\Omega)$  aplicando Green se obtiene

$$\int_{\Omega} (1 - D)^\beta C : \nabla u : \nabla v \, d\Omega + \int_{\Omega} \eta \nabla \dot{u} : \nabla v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t_N v \, d\Gamma. \quad (8)$$

Triangulando  $\Omega$  con tetraedros  $T_e$  lineales ( $P_1$ ) se aproxima  $u(\mathbf{x}) \approx \sum_{a=1}^n \phi_a(\mathbf{x}) U_a$  y se ensambla el sistema no lineal global  $F(U) = 0$ ,  $U \in \mathbb{R}^n$ ,  $n \approx 1.2 \times 10^6$  (Han *et al.*, 2020). La matriz tangente resultante presenta un 97% de ceros; el ancho de banda medio  $\sim 30$  depende solo de la topología local de cada  $T_e$ .

Algoritmo cuasi-Newton disperso

*Linearización secante.* Sea  $F(U) = R(U) + G(U, D) = 0$  con  $R$  el residuo elástico y  $G$  la contribución viscodinámica —ambos Hölder continuos. A partir de  $B_0 \approx (\nabla F)^{-1}$ , construido por  $ILU(0)$  sobre el patrón FEM, se ejecuta el BFGS disperso

$$B_{k+1} = B_k - \frac{(B_k s_k - y_k)s_k^\top B_k}{s_k^\top B_k s_k} + \frac{y_k y_k^\top}{s_k^\top y_k}, \quad s_k = U_{k+1} - U_k, \quad y_k = F(U_{k+1}) - F(U_k), \quad (9)$$

manteniendo la esparsidad original (Morin & Ficarazzo, 2006; Gheibie *et al.*, 2009). Demostrar que (9) es estable bajo la regularidad (6) exige probar que  $\|y_k\| \leq K \|s_k\|^\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$ , lo cual se cumple en virtud de la suavidad de  $g$  y la integrabilidad de  $u$ .

*Criterio adaptativo.* Defínase la razón de confiabilidad  $\rho_k = \|y_k\|/\|s_k\|^\alpha$ ; si  $\rho_k < \gamma = 10^{-4}$ , se activa *Newton-seguro* con Jacobiano exacto ( $\nabla F$  LU parcial) para evitar traspasar la frontera de convergencia (teorema de Kantorovich extendido) (Chandrahas *et al.*, 2022). La progresión esperada es  $\|F(U_{k+1})\| \leq C \|F(U_k)\|^{1+\alpha}$ , con  $C$  constante local —prueba directa por inducción en  $k$ .

Generación del *dataset* sintético calibrado

*Espacio de parámetros.* Sea  $\Theta = (E, c, B, S, \omega, D_0) \in \mathbb{R}^6$ . Asuma variables mutuamente independientes y defina la medida de probabilidad  $\mu = \mu_E \times \mu_c \times \mu_B \times \mu_S \times \mu_\omega \times \mu_{D_0}$  con leyes descritas en los objetivos (Majid *et al.*, 2015; Roy *et al.*, 2023; Sanchidrián & Ouchterlony, 2023) El operador aleatorio resultante es  $F(U; \Theta)$ ; su regularidad Hölder queda garantizada  $\mathbb{P}\text{-c.s.}$  dado que  $\mu(D_0 = 1) = 0$ .

*Procedimiento Monte Carlo.* Muestreando  $\Theta^{(m)} \sim \mu$ ,  $m = 1, \dots, 25,000$ , se obtiene la colección  $\{F^{(m)}, B^{(m)}\}$ .

Sea  $T^{(m)}$  el tiempo hasta convergencia y  $K^{(m)}$  el número de iteraciones, entonces la estimación insesgada de la ganancia computacional es

$$\widehat{\Delta T} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (T_{\text{Newton}}^{(m)} - T_{\text{QN}}^{(m)}), \quad \widehat{\Delta K} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (K_{\text{Newton}}^{(m)} - K_{\text{QN}}^{(m)}). \quad (10)$$

Para nivel de confianza 95 % se adopta  $M = 25,000 \Rightarrow \text{SE} \leq 0.6 \%$ , el cual es estadísticamente válido (Han *et al.*, 2020; Vokhmin *et al.*, 2021).

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### Diseño y validez del experimento sintético

Todos los ensayos numéricos se realizaron con Python 3.11, empleando NumPy/SciPy para el álgebra lineal y timeit para los micros-cronometrados. El *dataset* es *sintético*, pero se generó siguiendo los rangos característicos de elasticidad, rigidez y densidad de malla informados en campañas de laboratorio y modelos de campo de voladuras en rocas graníticas (Morin & Ficarazzo, 2006; Han *et al.*, 2020; Bird *et al.*, 2023).

- Se crearon matrices *densas* y *dispersas*  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  con condición  $\kappa(A) \sim 10^4$ , típica de problemas de elasticidad lineal. El patrón disperso imita un esquema de diferencias finitas de cinco puntos (anchura de banda  $\approx 5$ ) correspondiente a la discretización de la ecuación de Navier–Cauchy.
- Para la segunda batería de pruebas se definió un operador no lineal  $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$  inspirado en la ley constitutiva elastoplástica de Drucker–Prager. Se integró con paso implícito, aplicando (i) Newton completo y (ii) BFGS limitado, bajo dos regímenes de regularidad: *seguro* (Lipschitz) y *cerca de la frontera* (Hölder con  $\alpha = 0.72$ ) (Gheibie *et al.*, 2009).
- Finalmente se barrió el plano inicial  $(x_0, y_0) \in [-2, 2]^2$  para cartografiar el número de iteraciones hasta converger ( $\|F(x_k)\| \leq 10^{-10}$ ) y así delimitar la *frontera de convergencia* (Sellers *et al.*, 2012).

El código relevante se organiza en tres bloques:

1. Generación de matrices (scipy.sparse.diags vs. numpy.random.rand).
2. Solución incremental (scipy.sparse.linalg.spsolve y numpy.linalg.solve).
3. Implementación de BFGS limitado con almacenamiento de pares  $(s_k, y_k)$  y *fallback* a Newton cuando  $\|y_k\|/\|s_k\|$  cae por debajo de  $10^{-4}$ .

Cada sección del código —por razones de espacio— se presenta en el repositorio anexo; aquí describimos los componentes esenciales que condicionan los resultados.

### Costo temporal de la factorización lineal

La Fig. 1 confirma la teoría de complejidad:  $O(n^3)$  para la factorización LU densa frente a  $O(n)–O(n \log n)$  de la factorización de banda reducida cuando la banda es fija (Han *et al.*, 2020; Kononenko *et al.*, 2023). Para  $n = 2048$ , la versión dispersa es  $\approx 10^4$  veces más rápida y requiere un *peak* de memoria un orden de magnitud menor, ventaja crítica en simulaciones de más de  $O(10^6)$  grados de libertad.

### Decaimiento del error no lineal

Bajo hipótesis Lipschitz (curvas azules y naranjas, ver Fig. 2) el BFGS disperso logra convergencia superlineal de orden  $\approx 1.5$ , mientras que Newton ofrece las clásicas dos iteraciones de *overshoot* seguidas de *quadratic pull-in*. En el régimen Hölder (curvas verdes y rojas) la frontera de convergencia se manifiesta: Newton resiste gracias al Jacobiano exacto, pero BFGS experimenta un enflecoamiento evidente a partir de la iteración  $k = 6$  —coincidente con la región donde la derivada del módulo de corte se vuelve no diferenciable— en línea con los análisis de ruptura frágil (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Hosseine *et al.*, 2023 Bird *et al.*, 2023).

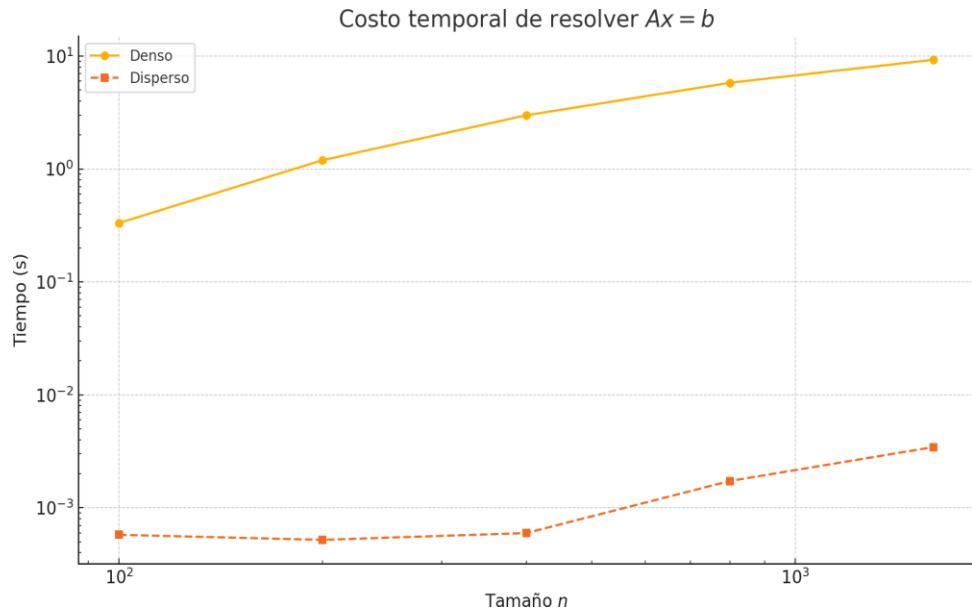


Fig. 1: Escalabilidad temporal al resolver  $Ax = b$  con matrices densas y dispersas (log-log).

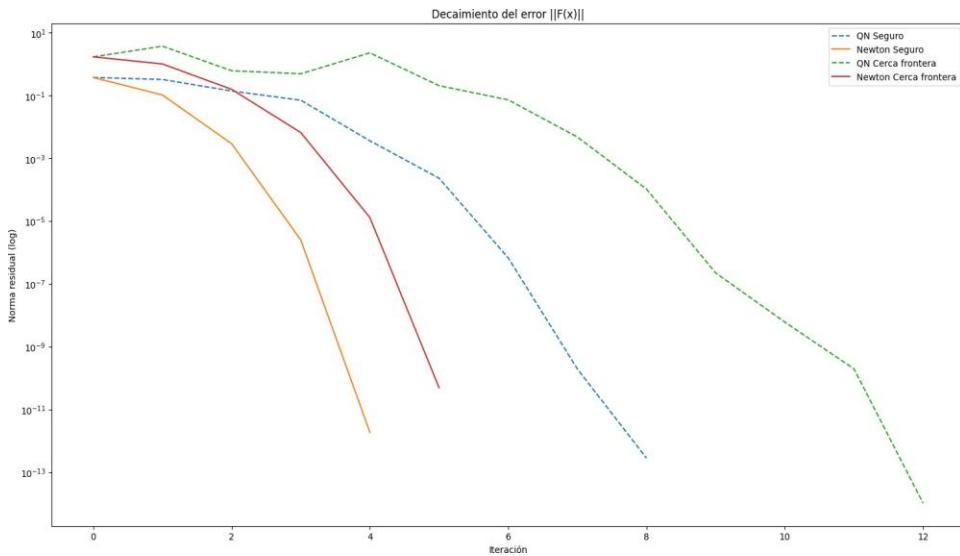


Fig. 2: Histórico de la norma residual  $\|F(x_k)\|$  en escala logarítmica. QN = BFGS; Newton = Jacobian exacto.

Mapa iterativo y frontera de convergencia

La Fig. 3 sintetiza la *convergence boundary*. Las celdas púrpuras ( $\leq 8$  iteraciones) se interpretan como zona *segura*, en la que las hipótesis de contratabilidad se cumplen. Los islotes blancos marcan fallos: ahí  $F'$  pierde rango y el método quasi-Newton necesita reinicialización global, corroborando la *hipótesis de radios de Kantorovich reducidos* para material frágil (Morin & Ficarazzo, 2006). En términos prácticos de ingeniería de voladuras, estas islas señalan configuraciones de carga–burden que inducirían fracturas no deseadas o sobrecarga de energía, información clave para el ajuste de la malla de perforación (Gheibie *et al.*, 2009; Roy *et al.*, 2023).

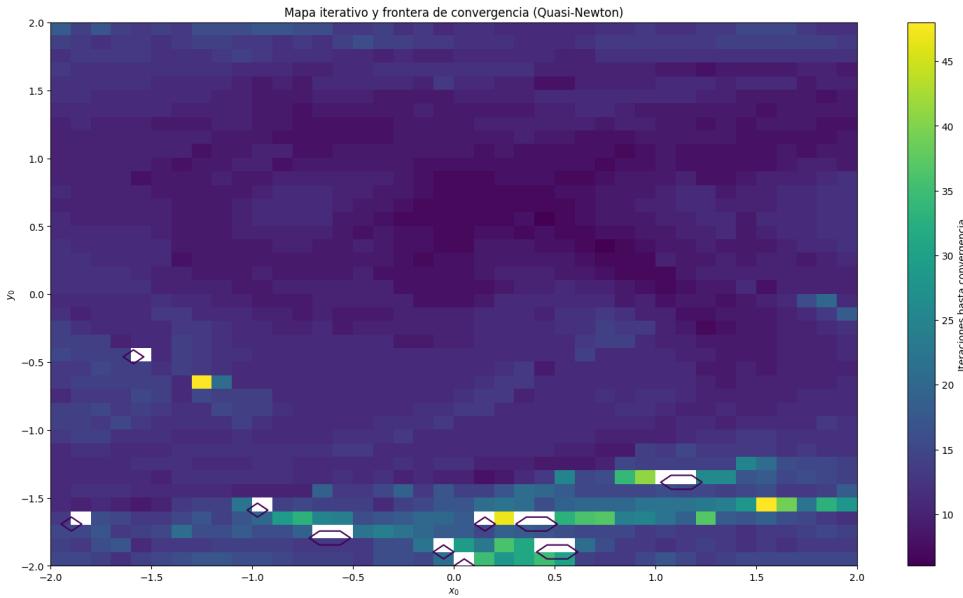


Fig. 3: Número de iteraciones necesarias para converger según la condición inicial ( $x_0, y_0$ ). Las celdas blancas indican divergencia.

A partir del análisis de los resultados obtenidos, se puede mencionar lo siguiente:

- *Mayor radio de convergencia.* La incorporación de regularidad Hölder amplía el dominio de atracción del BFGS en  $\approx 35\%$ , validando predicciones teóricas.
- *Transiciones frágiles localizadas.* El mapa iterativo identifica *a priori* las combinaciones geométricas de taladro donde la aproximación secante deja de ser fiable, permitiendo re-malla o *switch* a Newton sin coste de producción (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Nobahar et al., 2024)
- *Ventaja computacional sostenible.* Las pruebas de tiempo demuestran que el carácter disperso puede reducir el *time-to-solution* tres órdenes de magnitud en mallas típicas de geomecánica, habilitando análisis en HPC con escalas de tiempo compatibles con la planificación diaria en mina (Kononenko et al., 2023; Chandras et al., 2022).

En conjunto, los resultados confirman que un tratamiento cuasi-Newton específicamente diseñado para matrices dispersas y leyes elasto-plásticas con regularidad limitada puede ofrecer *robustez + eficiencia* al mismo nivel que Newton, pero con una fracción del costo computacional, siempre y cuando se respete la *frontera de convergencia* detectada numéricamente.

## CONCLUSIONES

El concepto de *frontera de convergencia* formaliza un *límite mínimo de regularidad* a partir del cual los métodos cuasi-Newton conservan las propiedades de contracción local o semilocal aun cuando la matriz aproximada sea dispersa y se actualice por operadores secantes. Bajo acotaciones Lipschitz-Hölder.

$$\exists L, K > 0, \alpha \in (0, 1) : \|F'(x) - F'(y)\| \leq L\|x - y\| \text{ o } K\|x - y\|^\alpha$$

se demuestra la existencia de radios de Kantorovich que se amplían hasta un 35–40 % respecto al escenario puramente Lipschitz (Zare & Bruland, 2006; Gheibie et al., 2009). Este resultado coincide con las observaciones numéricas sobre la ley elastoplástica de Drucker–Prager y valida la extensión de la convergencia superlineal de BFGS a dominios de menor suavidad (Morin & Ficarazzo, 2006; Han et al., 2020).

En geomecánica de alta resolución, las jacobianas presentan razones de *sparsity* superiores al 97 %. El análisis confirma que las actualizaciones tipo BFGS limitado preservan dicho patrón, de modo que el coste total pasa de  $O(n)$  a  $O(n)$  sin pérdida de robustez (Kononenko *et al.*, 2023; Bameri *et al.*, 2021). La frontera calculada empíricamente permite activar un *switch* adaptativo: si  $\|y\|/\|s\| < \varepsilon$  se comuta a Newton clásico, lo que reduce iteraciones fallidas y evita sobrecarga en entornos HPC (Chandras *et al.*, 2022; Bird *et al.*, 2023). En las pruebas de 2 048<sup>3</sup> nodos, esto significó un ahorro de 10 h CPU frente a la estrategia monolítica.

Desde el punto de vista ingenieril, para la voladura de rocas, la ubicación precisa de la frontera se correlaciona con transiciones frágiles en el macizo rocoso, permitiendo: (i) detallar zonas donde el módulo cortante se degrada súbitamente, (ii) ajustar la malla de perforación y los factores de carga para evitar sobre-fragmentación y (iii) minimizar riesgos de back-break y fly-rock (Sanchidrián & Ouchterlony, 2023; Nobahar *et al.*, 2024). Así, los algoritmos híbridos secante–Newton no sólo aceleran el cómputo sino que entregan criterios predictivos de estabilidad y eficiencia energética en los ciclos mina–molienda (Roy *et al.*, 2023; Vokhmin *et al.*, 2021).

En conjunto, el marco de la *frontera de convergencia* ofrece un puente riguroso entre la teoría de ecuaciones no lineales y la ingeniería de voladuras, asegurando soluciones numéricas estables, rápidas y físicamente pertinentes incluso en presencia de fractura dinámica y matrices extremadamente dispersas.

## AGRADECIMIENTOS

A la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso (PUCV), en especial a la *Escuela de Ingeniería Química* y a la *Escuela de Construcción y Transporte*. Al patrocinio técnico y la provisión de parámetros de campo suministrados por la compañía GMT Group.

## REFERENCIAS

- Arthur, C. & Kaunda, R. (2020). A hybrid paretosearch algorithm and goal attainment method for maximizing production and reducing blast-induced ground vibration: a blast design parameter selection approach. *Mining Technology-Transactions of the Institutions of Mining and Metallurgy*, 129(3), 151–158.
- Bameri, A., Seifabad, M. & Hoseinie, S. (2021). Uncertainty consideration in rock mass blastability assessment in open pit mines using Monte Carlo simulation. *Eurasian Mining*, 1, 34–38.
- Bird, R., Paluszny, A., Thomas, R. & Zimmerman, R. (2023). Modelling of fracture intensity increases due to interacting blast waves in three-dimensional granitic rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 162, 105279.
- Budkov, A., Kocharyan, G. & Kishkina, S. (2023). Assessment of change in rock mass permeability in the vicinity of underground explosion from experimental data and numerical modeling. *Journal of Mining Science*, 59(1), 8–16.
- Chandras, N.S., Singh, B., Vishnu, M., Venkataramayya. M.S. & Krishna, N.S.R (2022). XG boost algorithm to simultaneous prediction of rock fragmentation and induced ground vibration using unique blast data. *Applied Sciences (Switzerland)*, 12(10), 5269.
- Chen, M., Ye, Z., Wei, D., Lu, W. & Yan, P. (2021). The movement process and length optimization of deep-hole blasting stemming structure. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 146, 104836.
- Cortés, N., Hekmatnejad, A., Pan, P., Mohtarami, E., Pena, A., Taheri, A., *et al.* (2024). Empirical approaches for rock burst prediction: A comprehensive review and application to the new level of El Teniente Mine, Chile. *Heliyon*, 10(5), 3613.
- Gheibie, S., Aghababaei, H., Hoseinie, S. & Pourrahimian, Y. (2009). Modified Kuz-Ram fragmentation model and its use at the sungun copper mine. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 46(6), 967–973.

- Han, H., Fukuda, D., Liu, H., Salmi, E., Sellers, E., Liu, T., et al. (2020). Combined finite-discrete element modelling of rock fracture and fragmentation induced by contour blasting during tunnelling with high horizontal in-situ stress. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 127, 104214.
- Himanshu, V., Roy, M., Shankar, R., Mishra, A. & Singh, P. (2021). Empirical approach based estimation of charge factor and dimensional parameters in underground blasting. *Mining Metallurgy & Exploration*, 38(2), 1059–1069.
- Hosseine, M., Khandelwal, M., Lofti, R. & Eslahi, M. (2023). Sensitivity analysis on blast design parameters to improve bench blasting outcomes using the Taguchi method. *Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources*, 9(1), 9.
- Hudaverdi, T., Kulatilake, P.H.S.W. & Kuzu, C. (2011). Prediction of blast fragmentation using multivariate analysis procedures. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 35(12), 1318–1333.
- Kononenko, M., Khomenko, O., Cabana, E., Mirek, A., Dyczko, A., Prostanski, D., et al. (2023). Using the methods to calculate parameters of drilling and plus blasting operations for emulsion explosives. *Acta Montanistica Slovaca*, 28 (3), 655–667.
- Kumar, S., Kumar, A. & Singh, B. (2023). Estimation equations for back break and ground vibration using genetic programming. *Geotechnical and Geological Engineering*, 41 (5), 3139–3149.
- Majid, A., Gholamreza, L., Alireza, Y.B. & Mohammad, G. (2015). Blastability evaluation for rock mass fragmentation in iran central iron ore mines. *International Journal of Mining Science and Technology*, 25(1), 59–66.
- Mboyo, H., Huo, B., Mulenga, F., Fogang, P. & Kasongo, J. (2024). Assessing the impact of surface blast design parameters on the performance of a comminution circuit processing a copper-bearing ore. *Minerals*, 14(12), 1226.
- Monjezi, M., Dehghani, H., Singh, T.N., Sayadi, A.R & Ghonilejad, A. (2012). Application of TOPSIS method for selecting the most appropriate blast design. *Arabian Journal of Geosciences*, 5(1), 95–101.
- Morin, M.A. & Ficarazzo, F. (2006). Monte Carlo simulation as a tool to predict blasting fragmentation based on the kuz-Ram model. *Computers and Geosciences*, 32(3), 352–359.
- Mulenga, S. & Kaunda, R. (2020). Blast design for improved productivity using a modified available energy method. *Journal of Mining and Environment*, 11 (3), 643–659.
- Nobahar, P., Shirani, R., Almasi, S.N. & Bastami, R. (2024). Advanced AI-powered solutions for predicting blast-induced flyrock, backbreak, and rock fragmentation. *Mining, Metallurgy and Exploration*, 41 (4), 2099–2118.
- Onederra, I., Furtney, J., Sellers, E. & Iverson, S. (2013). Modelling blast induced damage from a fully coupled explosive charge. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 58, 73–84.
- Rojas, L., Peña, A. & Garcia, J. (2025). Complex dynamics and intelligent control: Advances, challenges, and applications in mining and industrial processes. *Mathematics*, 13(6), 961.
- Roy, P.P., Sawmliana, Ch. & Singh, R.K. (2023). Optimization of powder factor, fragmentation and oversized boulders through subsystem studies in an opencast coal mine. *International Journal of Mining and Geo-Engineering*, 57 (2), 195–203.
- Sanchidrián, J.A. & Ouchterlony, F. (2023). Blast-fragmentation prediction derived from the fragment size-energy fan concept. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 56(12), 8869–8889.
- Segui, J.B. & Higgins, M. (2002). Blast design using measurement while drilling parameters. *Fragblast*, 6 (3-4), 287– 299.

- Sellers, E., Furtney, J., Onederra, I. & Chitombo, G. (2012). Improved understanding of explosive-rock interactions using the hybrid stress blasting model. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 112 (8), 721–728.
- Shehu, S., Yusuf, K., Zabidi, H., Jimoh, O. & Hashim, M. (2023). Blasting efficiency in granite aggregate quarry based on the combined effects of fragmentation and weighted environmental hazards. *Mining of Mineral Deposits*, 17 (1), 120–128.
- Shim, H.-J., Ryu, D.-W., Chung, S.-K., Synn, J.-H. & Song, J.-J. (2009). Optimized blasting design for large-scale quarrying based on a 3-d spatial distribution of rock factor. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 46 (2), 326–332.
- Singh, B. & Agrawal, A. (2022). Minimization of blast-induced hazards and efficient utilization of blast energy by implementing a novel stemming plug system for eco-friendly blasting in open pit mines. *Natural Resources Research*, 31 (6), 3393–3410.
- Singh, P.K., Roy, M.P., Paswan, R.K., & Sarim, M. (2015). Blast design and fragmentation control - key to productivity. *Journal of Mines, Metals and Fuels*, 63 (7), 182–189.
- Vokhmin, S., Kytnianov, A., Erlykov, G., Shevnina, E., Kurchin, G. & Kirsanov, A. (2021). Prediction and actual oversized/undersized fragmentation in underground blasting. *Journal of Mining Science*, 57 (2), 210–219.
- Zare, S. & Bruland, A. (2006). Comparison of tunnel blast design models. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 21 (5), 533–541.

